

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 159, ВЫПУСК 5

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МАЙ 2021

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Скорость туннельной ионизации под влиянием поля с распределением $(0, 1)^*$ Лагерра–Гаусса 851
..... Миладинович Т. Б., Симич С., Данилович Н., Еремич М. З.
- Увеличение разброса по импульсам в потоке ультрарелятивистских электронов в ондуляторе 866
..... Огневенко В. В.
- Возбуждение квантового осциллятора заряженными частицами 877
..... Астапенко В. А., Кротов Ю. А., Сахно Е. В.

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Появление точки поворота в динамическом решении Рейснера–Нордстрема Шацкий А. А. 883

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Релаксационный вклад системы ян-теллеровских комплексов в модули упругости легированных флюоритов . . Сарычев М. Н., Бондаревская А. С., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Шакуров Г. С., Егранов А. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гудков В. В. 892

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

- Генерация и распространение дробных флаксонов в джозефсоновских средах 903
..... Ружицкий В. И.,
Максимовская А. А., Соловьев И. И., Бакурский С. В., Кленов Н. В.

© Российская академия наук, 2021

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2021

Спиновое стекло и изотропное отрицательное магнитосопротивление в квантовых ямах GaAs–AlGaAs с виртуальным переходом Андерсона	
Шумилин А. В., Козуб В. И. , Агринская Н. В., Михайлин Н. Ю., Шамшур Д. В.	915
Агломерация нанопроволок на подложке для гигантского комбинационного рассеяния	
.....Разумовская И. В., Ковалец Н. П., Бедин С. А., Григорьев Ю. В.	924

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Примесные состояния в нанопроводе на основе квантовой ямы в магнитном полупроводнике с анизотропным конфайнментом	
..... Калпана П., Джаякумар К.	930
Магнитотранспортные эффекты и электронное фазовое расслоение в сульфидах марганца с электронно-дырочным допированием	
.....Романова О. Б., Аплеснин С. С., Ситников М. Н., Удод Л. В.	938
Генерация высших гармоник когерентного субтерагерцевого излучения при переходе Лифшица в двухслойном графене со щелью	
..... Казарян А. Г.	952

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Резкое изменение обменного смещения и симметрии магнитной анизотропии при допороговом количестве межслойной меди в гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn	
.....Бахметьев М. В., Таланцев А. Д., Моргунов Р. Б.	963
Законы подобия для функции Грина нестационарного супердиффузионного переноса: прогулки Леви и полеты Леви	
..... Кукушкин А. Б., Куличенко А. А., Соколов А. В.	978

СКОРОСТЬ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ ПОД ВЛИЯНИЕМ ПОЛЯ С РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ $(0, 1)^*$ ЛАГЕРРА – ГАУССА

Т. Б. Миладинович^{a}, С. Симић^b, Н. Данилович^b, М. З. Еремич^c*

^a *Institute for Information Technologies, University of Kragujevac
34000, Kragujevac, Serbia*

^b *Faculty of Science, University of Kragujevac
34000, Kragujevac, Serbia*

^c *Clinical Center Kragujevac, Department of Nuclear Medicine
34000, Kragujevac, Serbia*

Поступила в редакцию 18 сентября 2020 г.,
после переработки 18 сентября 2020 г.
Принята к публикации 29 сентября 2020 г.

(Перевод с английского)

INFLUENCE OF $(0,1)^*$ LAGUERRE–GAUSSIAN FIELD DISTRIBUTION ON TUNNELING IONIZATION RATE

T. B. Miladinović, S. Simić, N. Danilović, M. Z. Jeremić

В рамках АДК-теории исследована туннельная ионизация атома аргона под влиянием излучения титан-сапфирового лазера. Рассмотрен случай поля лазерного излучения радиальной поляризации с распределением $(0, 1)^*$ Лагерра–Гаусса (ЛГ), имеющим форму бублика. Было проанализировано поведение скорости переходов, считая что $(0, 1)^*$ ЛГ-моды могут возникать со случайной или однородной поляризацией трех типов (линейной, круговой или эллиптической). Вычислена скорость переходов в простейшем случае, а также в случае, когда в уравнение включен начальный импульс покидающего атом электрона. Кроме того, проанализировано влияние модификации исходного потенциала ионизации электрона на скорость переходов. В простейшем случае полученные результаты соответствуют ожидаемым, но в случае включения в рассмотрение дополнительных эффектов скорость перехода характеризуется двумя пиками в некоторой точке выхода электрона из барьерной области.

DOI: 10.31857/S0044451021050011

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение последних пятидесяти лет взаимодействию лазерного излучения и вещества были посвящены многие работы [1–4]. Одним из наиболее существенных результатов этого взаимодействия является ионизация, относящаяся к квантовым процессам, которые важно понимать детально. В зависимости от интенсивности поля лазерного излу-

чения электрон может покинуть атом посредством туннельной, многофотонной, надпороговой ионизации (НПИ) или ионизации, сопровождающейся подавлением барьера (ПБИ). Когда лазерное излучение достаточно сильно, если напряженность электрического поля излучения сравнима с напряженностью атомного поля ($F \leq F_a$, $F_a = 5 \cdot 10^9$ В/см), оно деформирует кулоновский потенциал и формирует потенциальный барьер, через который электрон может туннелировать. Туннельная ионизация происходит очень быстро вблизи максимума интенсивности поля излучения в месте, где потенциальный барьер сильнее всего подавлен излучением. Тунне-

* E-mail: tanja.miladinovic@gmail.com

лирование электрона через потенциальный барьер можно описывать с использованием различных теоретических подходов. Подход Ландау – Лифшица к описанию туннелирования [5] является квазиклассическим. Теория Келдыша показывает, что многофотонная ионизация и туннельная ионизация являются по сути одним и тем же процессом, протекающим при разных частотах лазерного излучения [6]. В теории используется параметр Келдыша γ , который представляет собой отношение лазерной частоты ω и частоты туннелирования ω_t , $\gamma = \omega/\omega_t$. Этот параметр используется для того, чтобы различить области туннельной ионизации ($\gamma \ll 1$) и многофотонных процессов ($\gamma \gg 1$). Переломов, Попов и Терентьев (ППТ) получили точный вид множителя перед экспонентой в формуле для скорости переходов, который приводится в [7]. Основываясь на теории Келдыша, Аммосов, Делоне и Крайнов получили формулу для скорости ионизации сколь угодно сложно устроенных атомов и ионов (теория АДК) [8], которая используется наиболее часто.

Как видно, процесс туннельной ионизации очень сложный и зависит от ряда параметров, таких как частота излучения ω , напряженность электрического поля излучения F и энергия связи электрона I_p . Основными переменными, зависящими от этих параметров и дающими важную информацию о протекающих процессах, являются скорость переходов, энергия электрона и угловое распределение. Для того чтобы проанализировать процесс ионизации, следует рассмотреть влияние различных поляризаций и пространственно-временного распределения поля лазерного излучения на эти переменные. Случаи линейной, круговой и эллиптической поляризаций уже были рассмотрены [9–13], и значения некоторых переменных в каждом из них получились различными. Пространственные и временные параметры лазерного луча, гауссовы или лоренцевы, влияют на скорость переходов, энергию электронов и угловое распределение [14–17]. Развитие оптических технологий позволило исследовать эти процессы с помощью радиально или азимутально поляризованных оптических лучей. Особые свойства этих лучей обусловили повышенный интерес к их использованию во многих областях, например для улавливания частиц [18], ускорения электронов [19], микроскопии [20], обработки материалов [21]. Хорошо сфокусированный радиально-поляризованный луч имеет сильное продольное электрическое поле [22], но качество этого луча подвержено ухудшению, причиной чего может быть неконцентрическое выравнивание осей луча и стержневой накачки [23]. Для усиления луча

и корректировки его деградации можно использовать теплопроводящее волокно [24] или оптическое волокно со ступенчатым показателем преломления [25]. Также можно улучшить качество радиально-поляризованного луча посредством преобразования $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой и случайной либо однородной поляризацией и радиальной $(0, 1)^*$ ЛГ-моды в близкий к гауссовому луч [26], где ЛГ — это кольцевое распределение интенсивности Лагерра – Гаусса радиально-поляризованного света. В результате такого преобразования $(0, 1)^*$ ЛГ-мода со спиральной фазой и радиальная $(0, 1)^*$ ЛГ-мода имеют различные распределения поля и фазы [27]. Разделить эти две моды, имеющие распределения в форме бублика, можно на основании их различных поляризаций и фаз. Явное различие этих мод проявляется после прохождения через линейный поляризатор или элемент спиральной фазы (ЭСФ) [27].

Туннельная ионизация, которая происходит в радиально-поляризованном лазерном поле, до сих пор не обсуждалась в рамках теории АДК. Этому вопросу посвящено настоящее исследование. В нашей работе анализируется влияние распределений $(0, 1)^*$ ЛГ со спиральной фазой и распределений с радиальной $(0, 1)^*$ ЛГ-модой на скорость туннельных переходов. Обсуждается скорость переходов в случае, когда потенциал ионизации покидающего атом электрона не возмущен и когда его начальный импульс равен нулю. Дополнительно рассмотрен случай, когда начальный импульс не равен нулю, а также случай, в котором учитывается возмущение потенциала ионизации посредством пондеромоторного потенциала и сдвига Штарка. Для этого была исследована зависимость скорости перехода от прикладываемого электрического поля, азимутального угла ϕ и угла θ , который характеризует геометрию спирального пучка. Это позволило изучить влияние распределения поля $(0, 1)^*$ Лагерра – Гаусса на параметр Келдыша и на пондеромоторный потенциал покидающего атом электрона.

Структура статьи следующая. Раздел 2 посвящен используемой теоретической модели. В разд. 3 приводятся результаты и дано их обсуждение. Раздел 4 представляет собой заключение. На протяжении всей статьи используются атомные единицы ($\hbar = m_e = |e| = 1$).

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Начнем с краткого обзора, посвященного туннельной ионизации. Сильное поле лазерного излуче-

ния низкой частоты ($I > 10^{14}$ Вт/см²) вызывает возмущение кулоновского потенциала, что приводит к возможности туннелирования электрона. Скорость ионизации w показывает, как много актов ионизации происходит в единицу времени в постоянном поле на протяжении одного периода приложенного переменного поля. Наиболее важные атомные параметры и параметры лазерного излучения, которые нужны для расчета скоростей ионизации, приводятся ниже. Ионизация происходит только при условии получения электроном определенного количества энергии. Поскольку энергии всех фотонов одинаковы и определяются угловой частотой лазерного излучения ω , требуемое число фотонов n равно

$$n = \frac{I_p}{\omega} + 1, \quad (1)$$

где I_p — это потенциал ионизации, ω — энергия фотона, n — целое число.

Аммосов, Делоне и Крайнов (АДК) использовали квазиклассический подход и получили выражение для скорости туннельной ионизации [8], которая экспоненциально растет с напряженностью электрического поля. Без учета и с учетом начального импульса электрона [28] это выражение имеет вид

$$w \propto \exp \left[-\frac{2(2I_p)^{3/2}}{3F} \right], \quad (2)$$

$$w_p \propto \exp \left[-\frac{2(2I_p)^{3/2}}{3F} - \frac{p^2\gamma^3}{3\omega} \right],$$

где p — это начальный импульс электрона, γ — параметр Келдыша, который имеет разные значения для разных поляризаций лазерного излучения, линейной, круговой и эллиптической. Они будут приведены ниже. Видно, что скорость туннельной ионизации АДК зависит от потенциала ионизации I_p , равного энергии вершины эффективного потенциального барьера, заряда ионизованного атома Z , а также от свойств лазерного излучения, в частности интенсивности I , напряженности электрического поля F , энергии фотона ω и лазерной поляризации. Соотношение между интенсивностью и напряженностью электрического поля дается равенством $I = F^2$.

При увеличении интенсивности лазерного излучения или уменьшении энергии фотона выполняется соотношение $U_p > |I_p| > \omega$, где U_p — это пондеромоторный потенциал, в этом случае электронный потенциал ионизации может увеличиться $|I_p| + U_p$. Пондеромоторная энергия характеризует интенсивность осциллирующего движения свободного электрона во внешнем переменном электрическом поле

и определяется следующими выражениями для случаев соответственно линейной, круговой и эллиптической поляризации:

$$U_{p,lin} = F^2/4\omega^2, \quad U_{p,cir} = F^2/2\omega^2,$$

$$U_{p,elip} = (F^2(1 - \epsilon^2))/(2\omega^2(1 + \epsilon^2)),$$

ϵ — это параметр эллиптичности, значение которого лежит в интервале (0,1). Для линейно-поляризованного света $\epsilon = 0$, а для случая круговой поляризации $\epsilon = \pm 1$ [29]. Рост потенциала означает, что для ионизации требуется больше фотонов, чем обычно [30]. Кроме того, сдвиг энергии, который происходит исключительно в течение лазерного импульса, т. е. сдвиг Штарка, меняет уровни энергии основного состояния атомов, что усложняет их ионизацию [31]. На основное состояние влияет только квадратичный сдвиг Штарка $\delta E = \alpha F^2/4$ [32], где α — статическая поляризуемость атома [33]. Учитывая все вышеперечисленные факторы, можно записать эффективный потенциал ионизации в следующем виде [32]:

$$I_p^{eff} = I_p + U_p + \delta E. \quad (3)$$

На основании уравнения(2) видно, что скорость перехода максимальна, когда p , т. е. начальный импульс испускаемого электрона, равен нулю, и эта скорость должна уменьшаться с ростом p . Для нашей работы важно проанализировать влияние начального импульса испускаемого электрона на скорость перехода непосредственно после покидания области кулоновского потенциального барьера. В этот момент электрон покидает атом и начинает двигаться по классической траектории под воздействием одновременно поля лазерного излучения и поля родительского иона. Для описания движения электрона подходящими являются параболические координаты (ξ, η, φ) [5]. Выражение для начального импульса электрона можно записать в следующем виде: [34]:

$$p(\eta) = \left(\sqrt{F\eta - 1} + \left(1/\eta \sqrt{F\eta - 1} \right) \right) / 2, \quad (4)$$

где η — параболическая координата. Электрон покидает атом в точке $\eta_{exit} \approx 1/F$, таким образом значение координаты η внутри барьера удовлетворяет условию $1 \ll \eta \ll \eta_{exit}$, а вне барьера $\eta > \eta_{exit}$ [34]. Важно подчеркнуть, что импульс сохраняется вдоль классической траектории, если полная энергия системы не зависит от координаты η [5]. В этом случае $p_\eta = p$.

На электронную ионизацию влияет поляризация поля лазерного излучения, и мы попытались выяс-

нить, имеет ли радиальная поляризация преимущества по сравнению с линейной и круговой поляризацией, если использовать ее для величин, описывающих этот квантовый процесс. Теоретический анализ показывает, что радиально-поляризованные пучки можно преобразовать в линейно-поляризованные гауссовы пучки и наоборот [35, 36]. Форма пучков является существенной характеристикой, позволяющей различить их. Радиально-поляризованные пучки имеют форму бублика (с нулевой интенсивностью в центре). В случае линейно-поляризованного гауссова пучка интенсивность максимальна в центре. Описанное выше преобразование можно осуществить с использованием двух мод радиально-поляризованного пучка, $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой и $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией. У этих мод одинаковое распределение интенсивности в форме бублика, но совершенно разные распределения поля. Пространственные распределения этих мод можно выразить с помощью когерентной суперпозиции двух ортогональных вырожденных ЛГ-мод [37, 38] с пространственной модуляцией поляризации.

Распределение поля $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой записывается в следующем виде [27]:

$$F_{sp}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} e^{\pm i\phi}, \quad (5)$$

где r и ϕ — цилиндрические координаты, $\rho = 2r^2/R^2$, R — размер гауссова пучка, $r(\phi) = ae^{k\phi}$ — уравнение в полярных координатах, посредством которого задается спираль; a, k являются параметрами, а знак « \pm » зависит от выбора спиральности. $(0, 1)^*$ ЛГ-моды могут возникать с произвольной или однородной поляризацией (линейной, круговой или эллиптической) [27, 35].

В частности, распределения электрического поля $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой для случаев линейной и круговой поляризации даются выражениями

$$\mathbf{F}_{sp}^{lin}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} e^{-i\phi} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_{sp}^{cir}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} e^{-i\phi} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y e^{i\pi/2}), \quad (7)$$

где \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y являются единичными векторами вдоль осей x и y . Электрическое поле для линейной поляризации переписывается в виде

$$F_{sp}^{lin}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} \cos \phi \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_y. \quad (8)$$

Электрические поля для круговых правой и левой поляризации записываются с противоположными индексами спиральности [37].

$$\mathbf{F}_{sp}^{cir}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} e^{i\phi} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad (9)$$

$$\mathbf{F}_{sp}^{cir}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} (e^{-i\phi} \mathbf{e}_x - e^{-i\phi} \mathbf{e}_y). \quad (10)$$

Из приведенных уравнений следует, что распределения поля, которые могут иметь линейную или круговую (в общем случае эллиптическую) поляризацию, зависят только от азимутального угла ϕ [39]. Распределение поля $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией дается выражением

$$\mathbf{F}_{rp}(r, \phi) = F_{rp,x}(r, \phi) \mathbf{e}_x + F_{rp,y}(r, \phi) \mathbf{e}_y, \quad (11)$$

где \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y являются единичными векторами вдоль направлений x и y , и эту моду можно выразить с помощью ортогональных линейных поляризаций или как суперпозицию мод с правой и левой круговыми поляризациями. В частности, суперпозиция $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой правой поляризации и $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой левой поляризации записывается в виде [35, 40, 41]:

$$\mathbf{F}_{rp}(r, \phi) = F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} [e^{-i\phi} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y e^{i\pi/2}) + e^{i\phi} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y e^{-i\pi/2})]. \quad (12)$$

Это уравнение можно переписать в виде

$$\mathbf{F}_{rp}(r, \phi) = 2F_0 \sqrt{\rho} e^{-\rho/2} (\mathbf{e}_x \cos \phi + \mathbf{e}_y \sin \phi). \quad (13)$$

Такая суперпозиция дает линейно-поляризованный луч [37]. Соответствующие распределения интенсивностей можно рассчитать по формуле [38]

$$I(r, \phi) = F^* F. \quad (14)$$

Для исследования процесса туннельной ионизации рассмотрим влияние эффективного потенциала ионизации, начального импульса испускаемого электрона, а также двух указанных распределений поля $(0, 1)^*$ ЛГ-мод на скорость туннельных переходов.

Скорости переходов для $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой с различными поляризациями даются следующими выражениями [30, 42, 43]:

$$w_{sp,lin} = \frac{F_{sp}^{lin}(r, \phi) D^2}{8\pi Z} \sqrt{\frac{3F_{sp}^{lin}(r, \phi) n^* 3}{\pi Z^3}} \times \exp \left[-\frac{2(2I_p^{eff})^{3/2}}{3F_{sp}^{lin}(r, \phi)} - \frac{p(\eta)^2 \gamma^3}{3\omega} \right], \quad (15)$$

$$w_{sp,cir} = \frac{F_{sp}^{cir}(r, \phi) D^2}{8\pi Z} \times \exp \left[-\frac{2(2I_p^{eff})^{3/2}}{3F_{sp}^{cir}(r, \phi)} - \frac{p(\eta)^2 \gamma^3}{3\omega} \right], \quad (16)$$

$$w_{sp,elip} = \sqrt{\frac{3}{\pi} \frac{1}{(1-\epsilon^2)} \frac{F_{sp}^{cir}(r,\phi)}{(2I_p^{eff})^{3/2}} \frac{F_{sp}^{cir}(r,\phi)D^2}{8\pi Z}} \times \exp\left[-\frac{2(2I_p^{eff})^{3/2}}{3F_{sp}^{cir}(r,\phi)} - \frac{p(\eta)^2\gamma^3}{3\omega}\right], \quad (17)$$

где $n^* = Z/\sqrt{2I_p}$ — это эффективное главное квантовое число ионизованного состояния, F^{lin} — напряженность электрического поля для линейной поляризации лазерного излучения, а F^{cir} — для круговой поляризации, I — интенсивность лазерного излучения и $D = ((4Z^3)/(Fn^{*4}))^{n^*}$. Переменные n^* и D выписаны для рассматриваемого случая.

Для изучения скорости переходов в случае $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией использованы модифицированные выражения скоростей переходов с линейной поляризацией и соответствующими этому случаю значениями переменных.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Покидание атома одного электрона в результате ионизации нарушает стабильную электронную конфигурацию. Нашей задачей является определение интенсивности поля лазерного излучения, при которой появится возможность туннелирования электрона. Потенциал ионизации первого электрона в валентной оболочке атома Ag равен $I_p = 0.5791$ в атомных единицах, а заряд иона равен $Z = 1$. Скорость туннельных переходов чувствительна к частоте лазерного излучения. Это обусловило выбор титан-сапфирового лазера, работающего на длине волны $\lambda = 800$ нм. В этом случае энергия фотона составляет $\omega = 0.5696$, а напряженности электрических полей линейной и круговой поляризации можно вычислить по формулам $F_{lin} = 5.4 \cdot 10^{-9}\sqrt{I}$, $F_{cir} = 3.7 \cdot 10^{-9}\sqrt{I}$ в атомных единицах.

Далее изучим скорость туннельных переходов, вызванных двумя радиально-поляризованными $(0, 1)^*$ ЛГ-модами, а именно $(0, 1)^*$ ЛГ-модой со спиральной фазой и $(0, 1)^*$ ЛГ-модой с радиальной поляризацией. Радиально-поляризованный луч можно использовать для получения сфокусированного пятна гораздо меньшего размера, чем в случае использования лучей со стандартной линейной или круговой поляризациями [44, 45]. Размер лазерного пятна может составлять по порядку величины несколько миллиметров (15–30 мм), но может иметь и меньшие размеры микронного порядка (3–60 мкм). Считаем, что диаметр луча фиксирован и составляет 3 мкм ($5.7 \cdot 10^4$ ат. ед.). Укажем параметры, которые определяют логарифмическую спираль $r(\phi) = ae^{k\phi}$. Для значения r , которое

измеряется в микронах, $a = 0.57$ ($1.08 \cdot 10^4$ ат. ед.). Константа $k = \text{tg } \theta$. Угол θ является параметром спиральной геометрии и принимает значения в диапазоне $[-90^\circ, 90^\circ]$. Константа $k = 0.414$ и $k = 1.0$ для $\theta = 22.5^\circ$ и $\theta = 45^\circ$, и может быть рассчитана по приведенной выше формуле для любого другого угла θ из указанного диапазона [38].

В этой работе мы хотим продемонстрировать, что поведение важных физических величин можно проанализировать с помощью разных мод в широком диапазоне интенсивностей лазерного поля.

На рис. 1–4 показано поведение скорости перехода, вызванного $(0, 1)^*$ ЛГ-модой со спиральной фазой, без учета дополнительных эффектов. На рис. 1 демонстрируется скорость перехода при разных азимутальных углах. Видно, что изменение азимутального угла оказывает лишь незначительное влияние на скорость перехода вплоть до углов порядка 40° . Используемая нами теория дает возможность расчета скоростей перехода при величинах азимутального угла менее 50° . При $\phi = 20^\circ$ скорость перехода достигает максимального значения при интенсивности лазерного излучения $I = 8 \cdot 10^{17}$ Вт/см². При дальнейшем росте угла она медленно уменьшается.

Считая, что азимутальный угол ϕ принимает значения из диапазона $[-180^\circ, 180^\circ]$ шириной 360° , вычислим скорость перехода при отрицательных значениях азимутального угла. В отличие от области положительных углов, при уменьшении азимутального угла в сторону более отрицательных значений скорость перехода быстро уменьшается. На рис. 2 показана скорость перехода для отрицательных значений углов, которая демонстрирует похожие зависимости от интенсивности, как и в случае положительных углов, но имеет несколько меньшие значения. Распределение поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой ограничивает величину угла, который можно использовать в вычислениях (в данном случае -35°).

На разных панелях рис. 3 показаны результаты вычислений для случая линейно-поляризованного лазерного излучения, имеющего распределение ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, в зависимости от величины азимутального угла, который меняется в диапазоне $[0, 45^\circ]$, при фиксированной интенсивности. Кривые на всех панелях рис. 3 имеют максимум при угле $\phi = 30^\circ$ за исключением кривой при интенсивности лазерного излучения 10^{18} Вт/см², на которой скорость перехода при этом значении угла равна нулю. На зависимости скорости перехода, соответствующей этой интенсивности, можно наблюдать два максимума при углах $\phi = 4.4^\circ$ и $\phi = 43^\circ$. Мак-

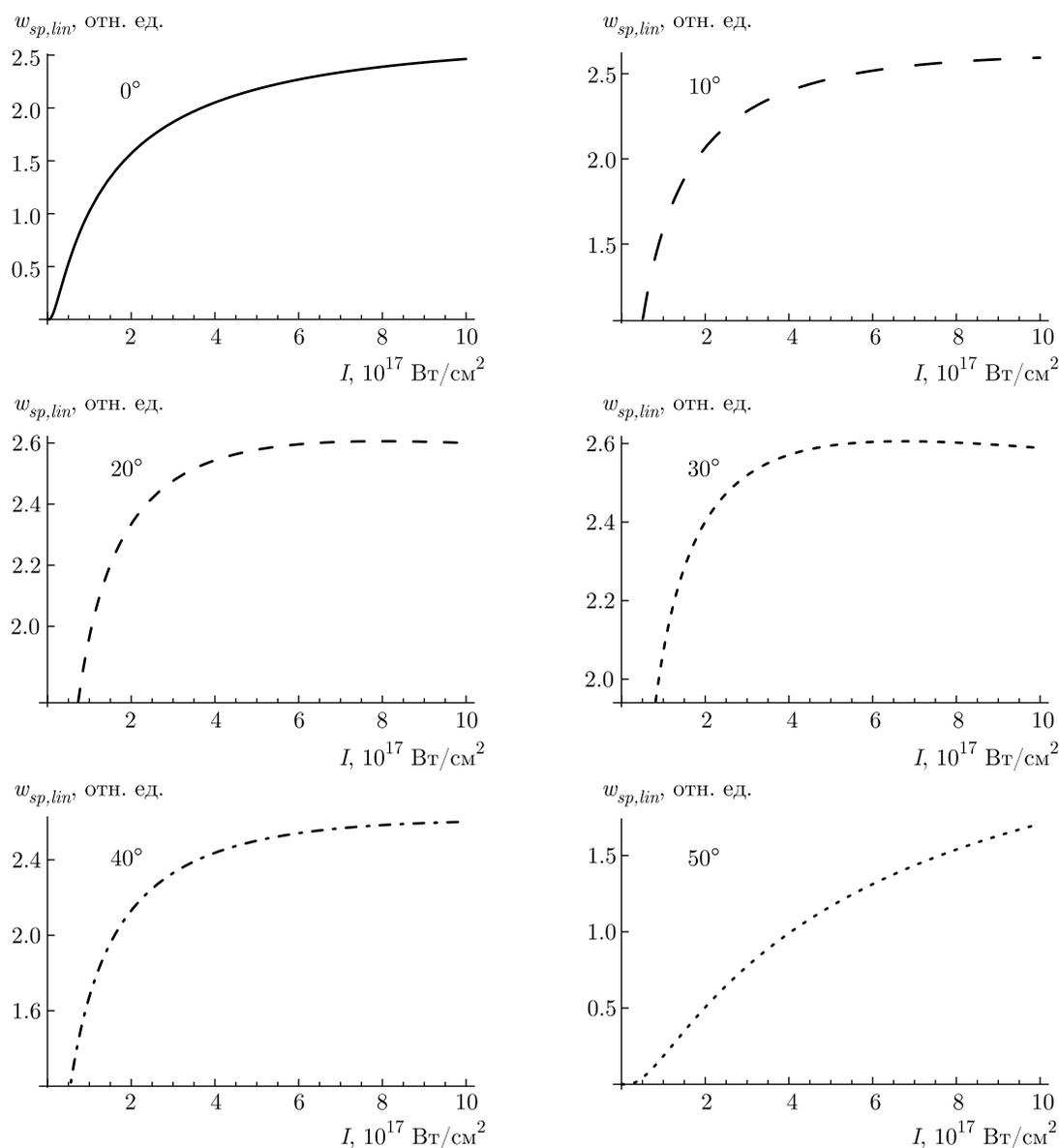


Рис. 1. Скорость перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, как функция интенсивности лазерного излучения для разных азимутальных углов

симальная скорость перехода уменьшается вместе с интенсивностью лазерного излучения. Диапазон углов, при которых происходит туннельная ионизация, сужается. Это вызвано малостью возмущений атомных уровней при низкой интенсивности лазерного излучения.

Чтобы дополнить наш анализ, исследуем зависимость скорости перехода (без учета дополнительных эффектов) от угла θ , который является параметром спиральной геометрии луча, для случая распределения поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой. Для уг-

лов $\theta = 0$ и $\theta = 90^\circ$ можно генерировать плоские волны, поляризованные соответственно в радиальном и азимутальном направлениях. В случае промежуточных значений угла можно генерировать ряд волн, имеющих геометрию очень интересных спиралей [38]. Ограничим наш анализ значениями углов от 0 до значений, приближающихся к 90° (рис. 4). Видно, что скорость перехода возрастает с углом θ . При угле $\theta = 90^\circ$ волна поляризована исключительно в азимутальном направлении, поэтому этот случай не включен в наш расчет.

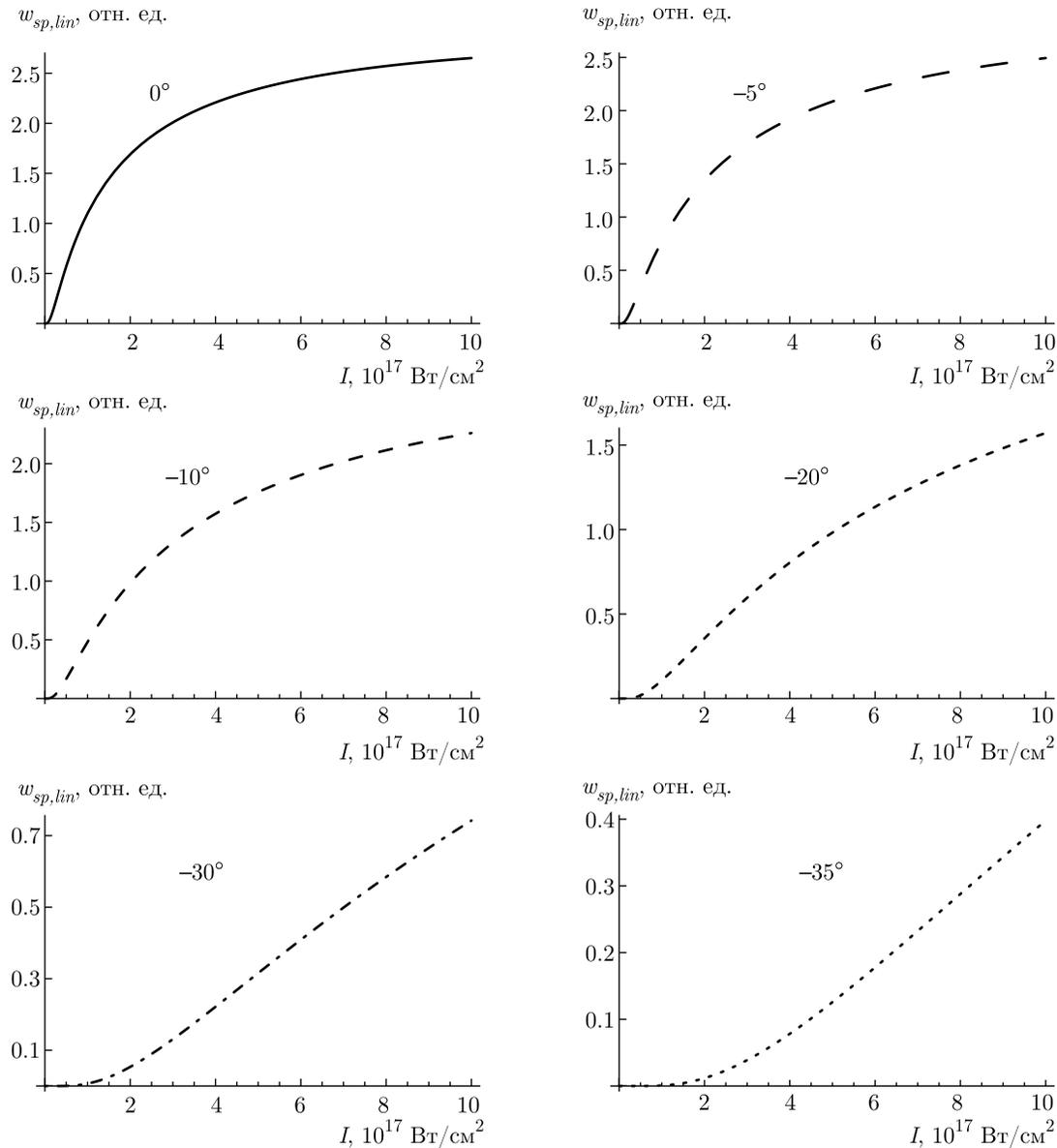


Рис. 2. Скорость перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, как функция интенсивности лазерного излучения при фиксированных отрицательных значениях азимутальных углов

Расширим наш анализ, включив в рассмотрение дополнительные эффекты, влияющие на скорость перехода. Мы рассчитали три зависимости скорости перехода при разных поляризациях поля с распределением ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, а именно при линейной, круговой и эллиптической поляризациях. Зависимости этих скоростей перехода от интенсивности в диапазоне $1 \cdot 10^{14} - 5 \cdot 10^{17} \text{ Вт/см}^2$ приведены на рис. 5, 8, 9. Помимо интенсивности лазерного излучения, скорость переходов зависит от

начального импульса испускаемого электрона, ponderomotorного потенциала и сдвига Штарка.

Согласно теории возмущений сдвиг уровня определяется колебательной энергией свободного электрона в поле. При большой напряженности поля F и маленькой частоте ω сдвиг может быть очень большим. Сдвиг Штарка уровня при сильном возбуждении может превышать невозмущенное значение энергии связи электрона. Вследствие указанных эффектов скорость ионизации уменьшается. В первую

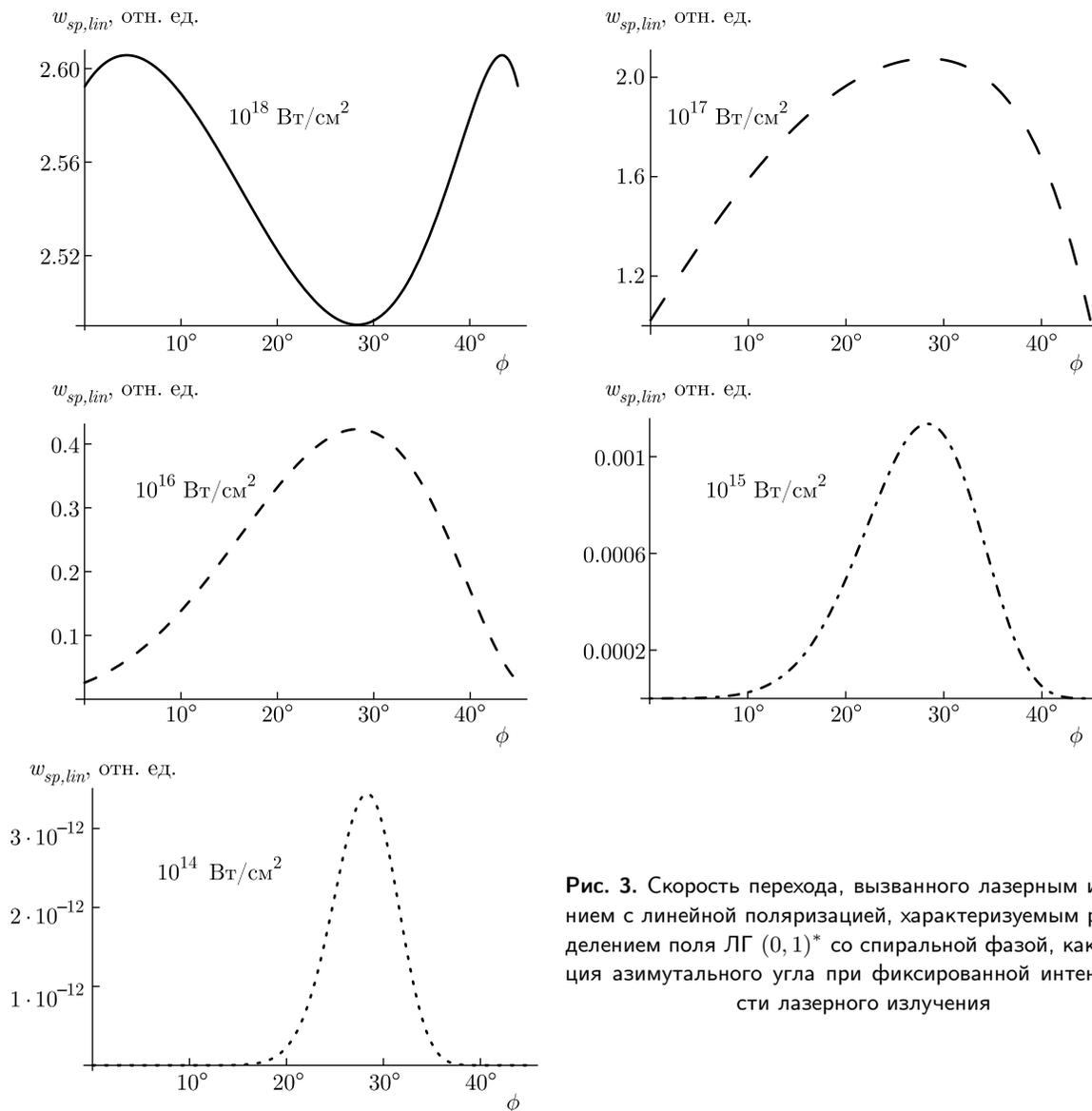


Рис. 3. Скорость перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, как функция азимутального угла при фиксированной интенсивности лазерного излучения

очередь это является результатом учета пондеромоторного потенциала, и в небольшой степени — включения в рассмотрение эффекта Штарка. Приводимые ниже графики подтверждают эти наши ожидания.

В случае луча радиальной поляризации, распределение поля которого характеризуется $(0, 1)^*$ ЛГ-модой со спиральной фазой, на зависимости скорости перехода появляются два пика, хотя в более ранних работах был получен только один пик. На зависимостях скорости перехода порядок максимумов для первого пика (левого, соответствующего меньшей интенсивности лазерного излучения) противоположен порядку максимумов для второго пика (правого, соответствующего большей интенсивности излучения). Эти пики располагаются при интенсив-

ностях $2.17 \cdot 10^{16}$ Вт/см² и $7.81 \cdot 10^{16}$ Вт/см². Мы предполагаем, что такое поведение максимумов обусловлено влиянием атомного ядра, поскольку точка выхода электрона из атома располагается ближе к его ядру, чем в случае больших значений η .

Анализ полученных результатов для $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой и линейной поляризацией показывает, что учет начального импульса покидающего атом электрона приводит к усложнению вида зависимости скорости перехода от интенсивности лазерного излучения. Для набора фиксированных параметров и значений координаты $\eta < 10$, которая определяет точку выхода электрона из атома, второй член уравнения (4) приводит к двум пикам на зависимости скорости перехода. Близость к атомному ядру и зависимость

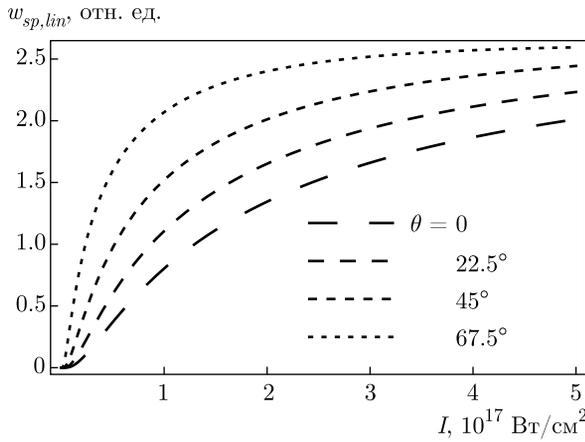


Рис. 4. Скорость перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ (0, 1)* со спиральной фазой, как функция интенсивности лазерного излучения для четырех разных значений угла θ

от огибающей электронной волны (в неоднородном электрическом поле) приводит к нарушению непрерывности электронных переходов. Наблюдаемый слева пик, соответствующий конечной скорости перехода, увеличивается при включении в рассмотрение описанных выше эффектов. Этот результат должен быть подвергнут экспериментальной проверке. С ростом координаты η второй член в уравнении для импульса уменьшается, что приводит к уменьшению левого пика. Положение пика определяется обратной зависимостью импульса от напряженности поля в этом же члене.

Более подробное исследование показывает, что два пика появляются при малых значениях координаты η , а при больших ее значениях эти пики перекрываются (виден единственный пик) (рис. 6).

Подчеркнем, что ионизирующий переход сдвигается в сторону меньшей интенсивности лазерного излучения с увеличением η (рис. 6, 7). Можно видеть, что для $\eta = 100$ максимум скорости перехода находится при интенсивности $I \sim 10^{14}$ Вт/см², что согласуется с результатами нашей предыдущей работы [28].

На рис. 8 и 9 показаны скорости переходов, вызванных лазерным излучением соответственно с эллиптической и круговой поляризациями, последняя может рассматриваться как частный случай эллиптической поляризации. Для каждой из поляризаций излучения на зависимостях видны два пика, причем максимумы находятся при одних и тех же значениях интенсивностей излучения $2.31 \cdot 10^{16}$ Вт/см² и $7.11 \cdot 10^{17}$ Вт/см².

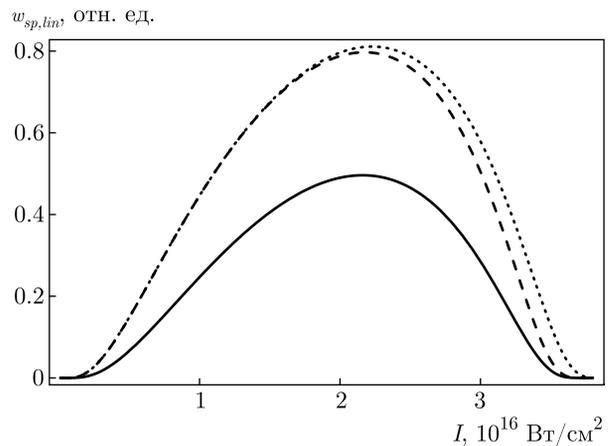
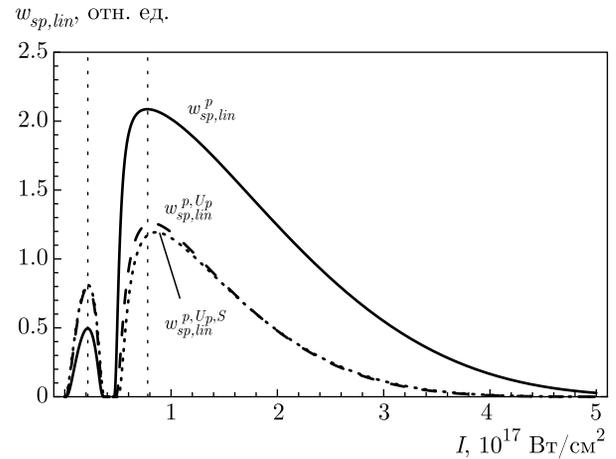


Рис. 5. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ (0, 1)* со спиральной фазой, с учетом описанных в тексте эффектов (верхняя панель). На нижней панели более подробно показан левый пик

При наличии общих черт, отмеченных выше, скорости перехода на этих двух рисунках имеют разные величины. Так, скорость перехода при интенсивности $I = 2.31 \cdot 10^{16}$ Вт/см² (левый пик) имеет большее значение, когда атом находится в поле излучения круговой поляризации.

Чтобы яснее представить поведение скорости перехода, на трехмерном графике (рис. 10) изображена ее зависимость от интенсивности лазерного излучения и от азимутального угла. Эта зависимость имеет сложный характер. Скорость перехода не является постоянно возрастающей функцией азимутального угла или интенсивности. Для некоторых значений интенсивности скорость перехода растет с азимутальным углом ϕ вплоть до 15° , в диапазоне от 15° до 35° ее значение приближается к нулю, за-

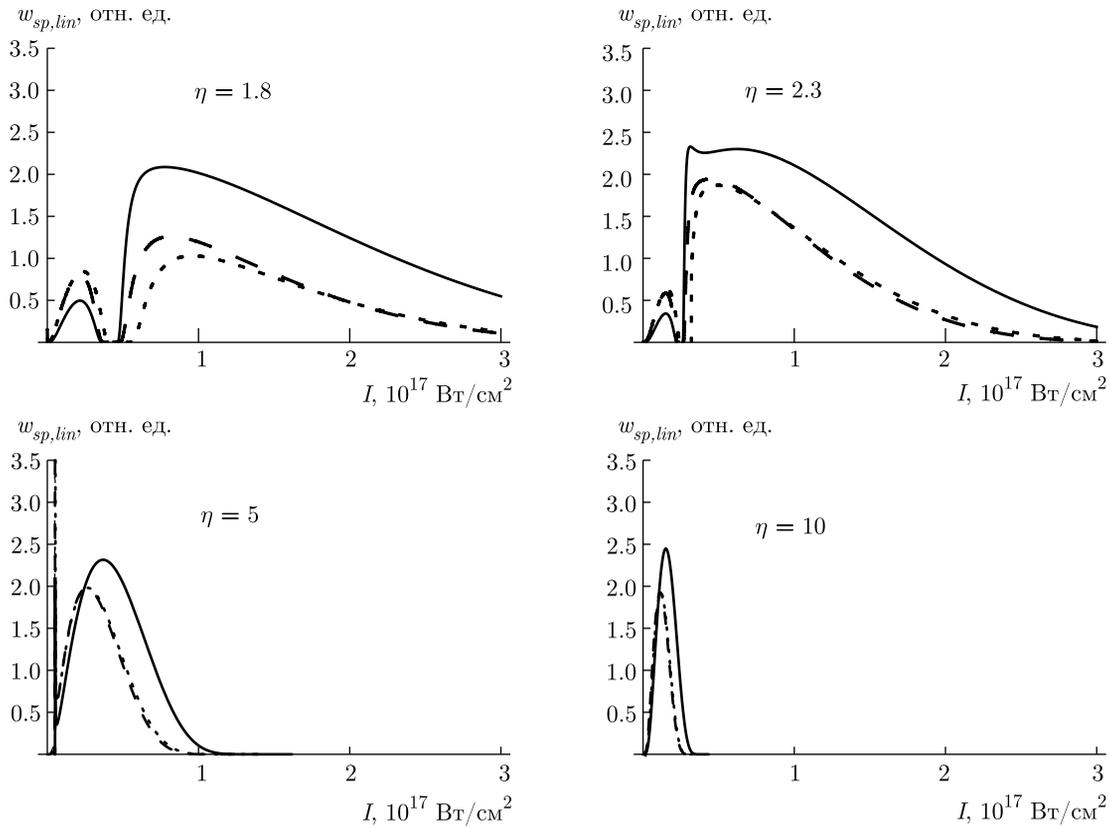


Рис. 6. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, для разных значений координаты η . Зависимость $w_{sp,lin}^p$ показана сплошной черной линией, $w_{sp,lin}^{p,U_p}$ — штриховой линией, $w_{sp,lin}^{p,U_p,S}$ — пунктирной линией

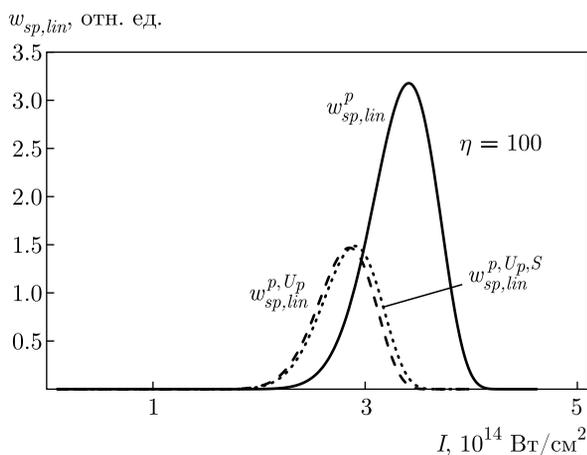


Рис. 7. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением с линейной поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой, для $\eta = 100$

В заключение, обсудим влияние $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой на параметры, от которых непосредственно зависит скорость перехода. Для этого проанализируем поведение параметра Келдыша и пондеромоторный потенциал (рис. 11, 12).

Чтобы исследовать параметр Келдыша, запишем его в виде $\gamma = \omega(\sqrt{2I_p}/F)$, из которого непосредственно видно влияние эффективного потенциала ионизации I_p^{eff} и распределения напряженности поля лазерного излучения F . Как можно видеть, зависимости, описывающие поведение параметра Келдыша при обычных линейной или круговой поляризациях, а также величина параметра Келдыша при этих поляризациях для распределения поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой экспоненциально убывают с интенсивностью лазерного излучения. Кроме того, из этих данных следует, что $(0, 1)^*$ ЛГ-мода со спиральной фазой оказывает большее влияние на параметр Келдыша в поле линейной поляризации (рис. 11).

тем рост скорости перехода с азимутальным углом снова возобновляется.

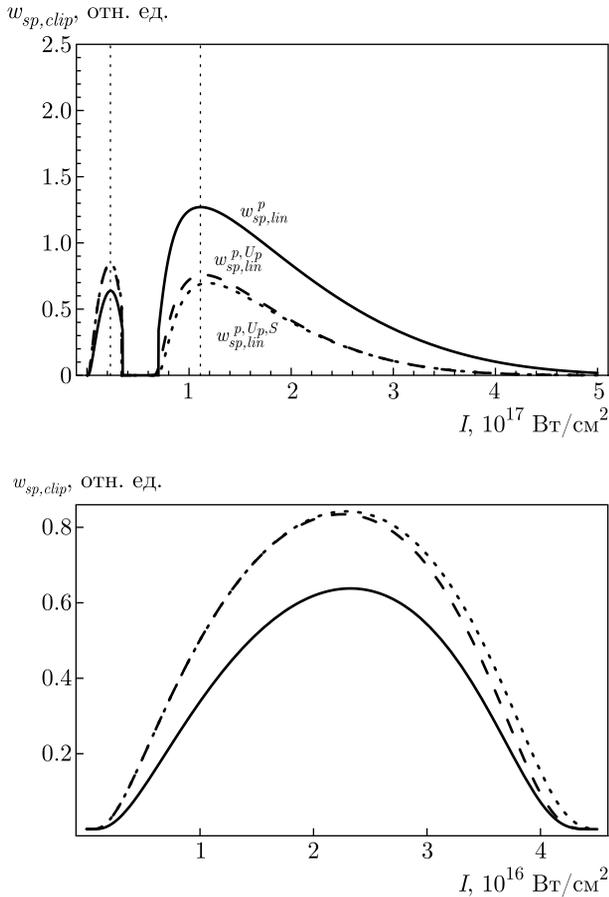


Рис. 8. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением с эллиптической поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ (0, 1)* со спиральной фазой, с учетом описанных в тексте эффектов (верхняя панель). На нижней панели более подробно показан левый пик

Результат влияния (0, 1)* ЛГ-моды со спиральной фазой на пондеромоторный потенциал показан на рис. 12. Проведено исследование пондеромоторного потенциала в поле лазерного излучения с линейной, круговой и эллиптической поляризациями как с учетом так и без учета распределения поля ЛГ (0, 1)* со спиральной фазой. Для одних и тех же значений параметров величины потенциала оказываются разными в зависимости от присутствия/отсутствия (0, 1)* ЛГ-моды со спиральной фазой. Пондеромоторный потенциал принимает более низкие значения при учете распределения поля ЛГ (0, 1)*, а самый большой эффект наблюдается для $U_{p,lin}$.

Дополнительно было проанализировано поведение скорости ионизирующего перехода и параметров, которые на него влияют, для атома в поле (0, 1)*

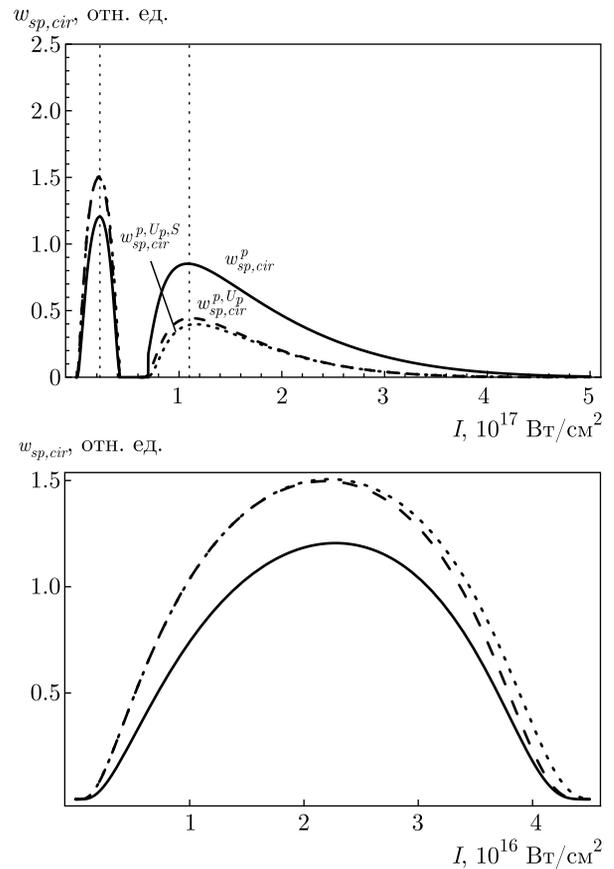


Рис. 9. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением с круговой поляризацией, характеризуемым распределением поля ЛГ (0, 1)* со спиральной фазой, с учетом описанных в тексте эффектов (верхняя панель). На нижней панели более подробно показан левый пик

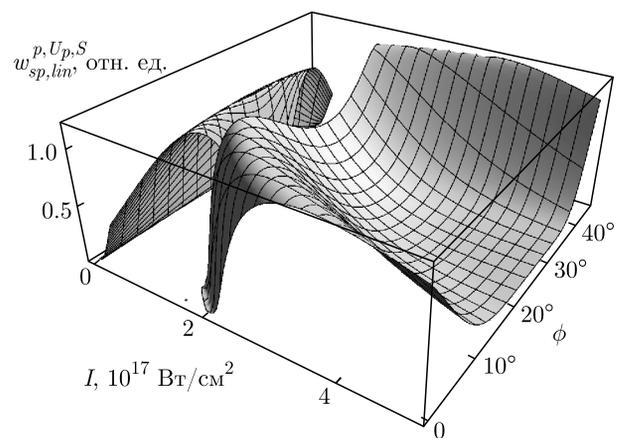


Рис. 10. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением с распределением поля ЛГ (0, 1)* со спиральной фазой как функция азимутального угла ϕ и интенсивности лазерного излучения I на трехмерном графике

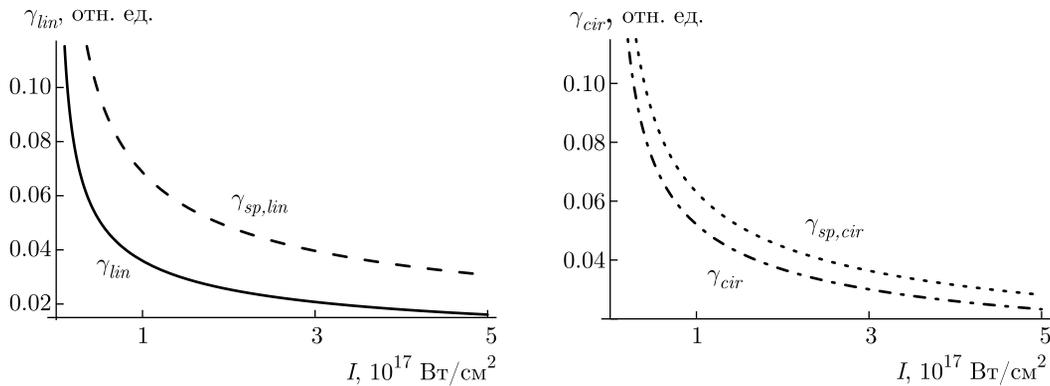


Рис. 11. Параметр Келдыша в линейно-поляризованном поле лазерного излучения (левая панель) и в поле с круговой поляризацией (правая панель) для распределения поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой как функция интенсивности излучения в диапазоне $I = (10^{14} - 5 \cdot 10^{17} \text{ Вт/см}^2)$ при фиксированном значении азимутального угла $\phi = \pi/6$

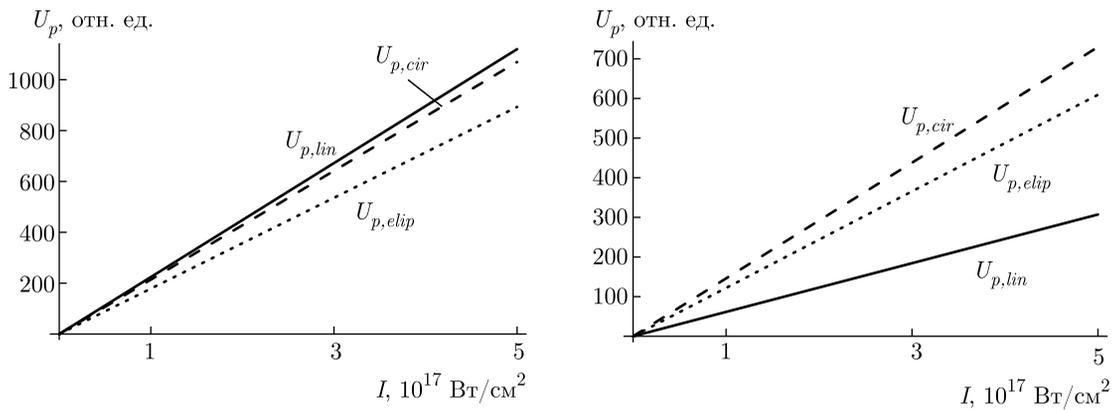


Рис. 12. Пондеромоторный потенциал в однородном поле (левая панель) и пондеромоторный потенциал в поле $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой (правая панель) как функция интенсивности лазерного излучения в диапазоне $I = (10^{14} - 5 \cdot 10^{17} \text{ Вт/см}^2)$ при фиксированном значении азимутального угла $\phi = \pi/6$ и эллиптичности $\epsilon = 0.3$

ЛГ-моды с радиальной поляризацией (рис. 13). Скорость перехода была рассчитана на основании уравнения (16) для лазерного излучения круговой поляризации с распределением поля в виде радиально-поляризованной $(0, 1)^*$ ЛГ-моды. Эта поляризация представляет собой частный случай эллиптической поляризации. Поведение скорости перехода при разных значениях эллиптичности ϵ тоже изучалось. Было показано, что значения эллиптичности в интервале от 0 до 1 не оказывают влияния на скорость перехода.

На рис. 14, 15 показаны зависимости параметра Келдыша и пондеромоторного потенциала от интенсивности лазерного излучения с распределением поля в виде $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией.

На рис. 14 видно, что при фиксированном значении азимутального угла $\phi = \pi/6$ параметр Келдыша имеет разные значения в случаях однородного распределения лазерного поля круговой поляризации и распределения поля в виде $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией. Величина параметра Келдыша уменьшается с ростом интенсивности лазерного излучения, а расстояние между кривыми γ_{cir} и $\gamma_{rp,cir}$ при данном значении интенсивности меняется. Величина пондеромоторного потенциала также меняется, когда распределения поля принимает вид $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией. Соответствующие зависимости построены на рис. 15. Подобно случаю $(0, 1)^*$ ЛГ-моды со спиральной фазой, учет распределения поля в виде $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией приводит к увеличению пондеромоторного потенциала.

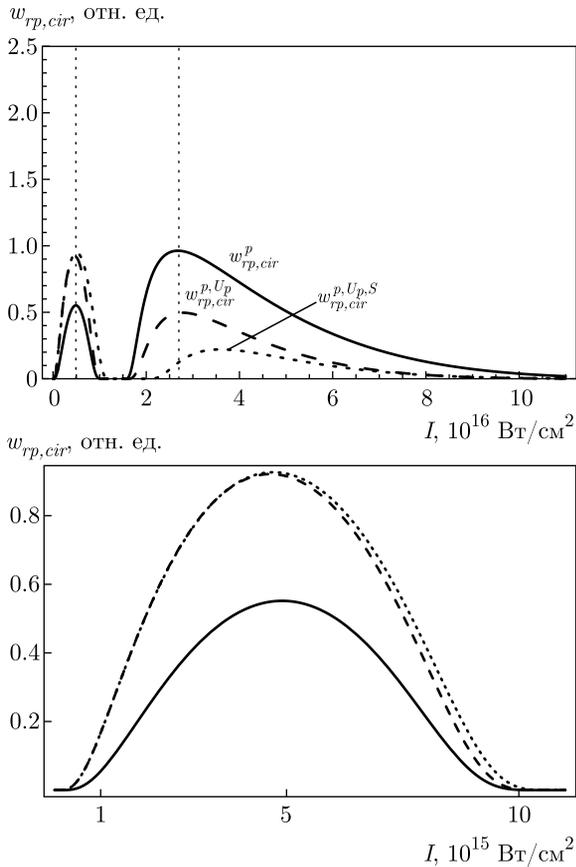


Рис. 13. Скорость ионизирующего перехода, вызванного лазерным излучением круговой поляризации с распределением поля в виде $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией, с учетом описанных в тексте эффектов (верхняя панель). На нижней панели более подробно показан левый пик

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучается туннельная ионизация атома аргона в сильном поле. Проанализированы зависимости скоростей туннельных переходов от начального импульса и эффективного потенциала ионизации (включающего сдвиг Штарка и пондеромоторный потенциал) в случае, когда распределение поля соответствует форме бублика, описываемой радиально-поляризованным лучом $(0, 1)^*$ Лагерра – Гаусса. Представлены зависимости скоростей перехода без учета дополнительных эффектов в поле линейно-поляризованного лазерного излучения с распределением ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой для фиксированных значений азимутального угла от интенсивности излучения и наоборот, от угла при фиксированной интенсивности, а также зависимости от спиральной геометрии луча (угла η). Да-

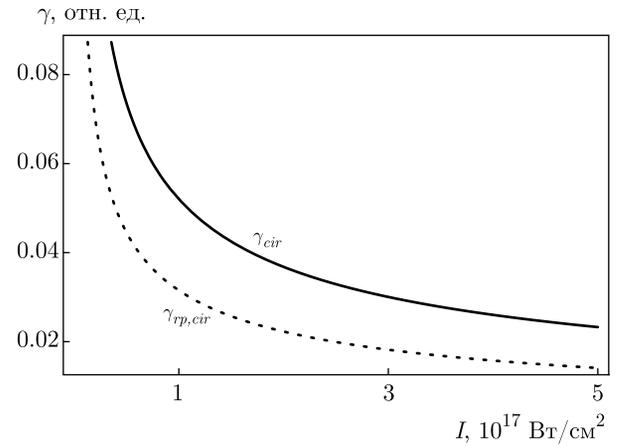


Рис. 14. Параметр Келдыша в присутствии лазерного излучения круговой поляризации с распределением поля в виде $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией как функция интенсивности излучения в диапазоне $I = (10^{14} - 5 \cdot 10^{17} \text{ Вт/см}^2)$ при фиксированном значении азимутального угла $\phi = \pi/6$

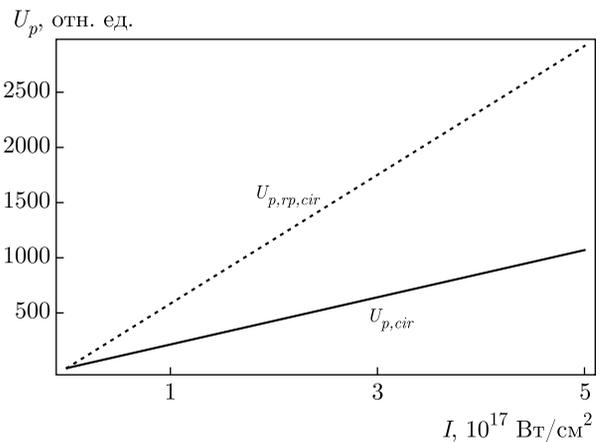


Рис. 15. Пондеромоторный потенциал в присутствии лазерного излучения круговой поляризации с распределением поля в виде $(0, 1)^*$ ЛГ-моды с радиальной поляризацией как функция интенсивности излучения в диапазоне $I = (10^{14} - 5 \cdot 10^{17} \text{ Вт/см}^2)$ при фиксированном значении азимутального угла $\phi = \pi/6$

лее продемонстрировано, как учет дополнительных эффектов влияет на скорость перехода, вызванного полем лазерного излучения с линейной, круговой или эллиптической поляризацией и распределением ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой. Также было проведено сравнение параметра Келдыша и пондеромоторного потенциала в поле лазерного излучения с линейной или круговой поляризацией без специального распределения поля и имеющего распределение ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой.

Основные выводы данной работы состоят в следующем:

Скорость перехода зависит от азимутального угла. Для углов в диапазоне от $\phi = 0$ до $\phi = 40^\circ$ скорость перехода увеличивается, а затем медленно уменьшается. Это уменьшение становится заметным при угле $\phi = 50^\circ$. Зависимость скорости перехода от азимутального угла более заметна при его отрицательных значениях. Скорость перехода непрерывно уменьшается соответственно при $\phi = -5^\circ, -10^\circ, -20^\circ, -30^\circ$ и при $\phi = -35^\circ$ ее значение в шесть раз меньше, чем при $\phi = 0$. На зависимости от угла ϕ при фиксированной интенсивности лазерного излучения 10^{18} Вт/см² существуют два пика, а с уменьшением интенсивности один из пиков исчезает и происходит сужение кривой скорости перехода.

Показано, что геометрия спирального луча влияет на скорость перехода. Как следует из полученных результатов, скорость перехода растет со значением угла.

В случае линейной поляризации поля излучения было найдено, что кривая скорости перехода расщепляется на два довольно близко расположенных пика. Возникновение и положения двух пиков обусловлены учетом начального импульса испускаемого электрона в уравнении для определения скорости перехода и зависимостью начального импульса от координаты η и напряженности поля. Показано, что с ростом η второй пик исчезает, а переходы сдвигаются в область меньшей интенсивности лазерного излучения.

Появление двух пиков происходит и в случаях эллиптической или круговой поляризации. Первый пик ниже в случаях линейной и эллиптической поляризации, но для круговой поляризации он выше.

Влияние распределения ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой на параметр Келдыша и на пондеромоторный потенциал противоположно. Учет распределения поля ЛГ $(0, 1)^*$ со спиральной фазой приводит к уменьшению пондеромоторного потенциала, что проявляется наиболее ярко в случае линейной поляризации излучения, в то время как параметр Келдыша увеличивается.

Также показано, что учет распределения поля ЛГ $(0, 1)^*$ с радиальной поляризацией приводит к изменениям скорости перехода, параметра Келдыша и пондеромоторного потенциала, аналогичным изменениям при учете спиральной моды.

В заключение отметим, что существует широкий диапазон значений интенсивностей лазерного излучения, его поляризации и распределения электрического поля, в котором можно исследовать иониза-

цию атома. Множество дополнительных параметров влияют на скорость перехода, и существует режим, в котором на ее зависимости появляются два пика, что дает важную информацию о процессе ионизации. Представляется интересным продолжить эти теоретические исследования, а также проверить уже полученные результаты экспериментально.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке министерства Образования, Науки и Технологического Развития республики Сербия, а также Университета города Крагуевац — Институт информационных технологий (грант № 451-03-68/2020-14/200378), Факультет естественных наук (грант № 451-03-68/2020-14/200122).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. I. Shvetsov-Shilovski, D. Dimitrovski, and L. B. Madsen, *Phys. Rev. A* **85**, 023428 (2012).
2. J. E. Calvert, Han Xu, A. J. Palmer et al., *Sci. Rep.* **6**, 34101 (2016).
3. Y. H. Lai, J. Xu, U. B. Szafruga et al., *Phys. Rev. A* **96**, 063417 (2017).
4. N. I. Shvetsov-Shilovski, M. Lein, and K. Tórkési, *Eur. Phys. J. D* **73**, 37 (2019).
5. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non Relativistic Theory*, Nauka, Moscow (1989).
6. L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **20**, 1307 (1965).
7. A. M. Perelomov, V. S. Popov, and M. V. Terent'ev, *Sov. Phys. JETP* **23**, 924 (1966).
8. V. M. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, *Sov. Phys. JETP* **64**, 1191 (1986).
9. V. S. Popov, *JETP* **91**, 48 (2000).
10. C. L. Wang, X. Y. Lai, Z. L. Hu et al., *Phys. Rev. A* **90**, 013422 (2014).
11. M. Yuan, P. P. Xin, T. S. Chu, and H. P. Liu, *Opt. Exp.* **25**, 23493 (2017).
12. J. Cai, Y. J. Chen, Q. Z. Xia et al., *Phys. Rev. A* **96**, 033413 (2017).
13. R. Wang, Q. Zhang, D. Li et al., *Opt. Exp.* **27**, 6471 (2019).
14. M. Lein, *J. Mod. Opt.* **58**, 1188 (2011).
15. D. G. Arbó, C. Lemell, and J. Burgdörfer, *J. Phys.: Conf. Ser.* **635**, 012003 (2015).

16. W. Quan, M. Yuan, S. Yu et al., *Opt. Exp.* **24**, 23248 (2016).
17. A. S. Stodolna, F. Lépine, T. Bergeman et al., *Phys. Rev. Lett.* **1133**, 103002 (2014).
18. H. Moradi, V. Shahabadi, E. Madadi et al., *Opt. Exp.* **27**, 7266 (2019).
19. M. Kaur and D. N. Gupta, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **45**, 2841 (2017).
20. Y. Kozawa, T. Hibi, A. Sato et al., *Opt. Exp.* **19**, 15947 (2011).
21. C. Hnatovsky, V. G. Shvedov, and W. Krolikowski, *Opt. Exp.* **21**, 12651 (2013).
22. S. Quabis, R. Dorn, M. Eberler et al., *Opt. Commun.* **179**, 1 (2000).
23. I. Moshe, S. Jackel, Y. Lumer et al., CLEO/Europe and EQEC 2011 Conference Digest, OSA Technical Digest (CD), Optical Society of America (2011).
24. T. L. Jefferson-Brain, C. R. Smith, M. D. Burns et al., *Appl. Phys. B* **125**, 167 (2019).
25. Y. Ma, *Opt. Rev.* **19**, 39 (2012).
26. R. Oron, N. Davidson, A. A. Friesem, and E. Hasman, *Opt. Lett.* **25**, 939 (2000).
27. G. Machavariani, Y. Lumer, I. Moshe, and S. Jackel, *Opt. Commun.* **271**, 190 (2007).
28. V. M. Ristić, T. B. Miladinović, and M. M. Radulović, *Laser Phys.* **18**, 1183 (2008).
29. H. R. Reiss, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 043002 (2008).
30. N. B. Delone and V. P. Krainov, *Phys. Usp.* **41**, 469 (1998).
31. N. B. Delone and V. P. Krainov, *Phys. Usp.* **42**, 669 (1999).
32. E. A. Volkova, A. M. Popov, and O. V. Tikhonova, *JETP* **113**, 394 (2011).
33. J. Mitroy, M. S. Safronova, and C. W. Clark, *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **43**, 20201 (2010).
34. D. Bauer, *Theory of Laser Matter Interaction*, Max-Planck Institute, Heidelberg (2002).
35. G. Machavariani, N. Davidson, Y. Lumer et al., 2007 European Conference on Lasers and Electro-Optics and the International Quantum Electronics Conference, Munich (2007).
36. D. J. Armstrong, M. C. Phillips, and A. V. Smith, *Appl. Opt.* **42**, 3550 (2003).
37. C. Maurer, A. Jesacher, S. Fürhapter et al., *New J. Phys.* **9**, 78 (2007).
38. J. Ouyang, W. Perrie, O. J. Allegre et al., *Opt. Exp.* **23**, 12562 (2015).
39. V. E. Lembessis and M. Babiker, *Phys. Rev. A* **81**, 033811 (2010).
40. J. Courtial, D. A. Robertson, K. Dholakia et al., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4828 (1998).
41. S. Vyas, Y. Kozawa, and Y. Miyamoto, *Opt. Exp.* **23**, 33970 (2015).
42. N. B. Delone and V. P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg (2000).
43. C. Z. Bisgaard and L. B. Madsen, *Amer. J. Phys.* **72**, 249 (2004).
44. R. Dorn, S. Quabis, and G. Leuchs, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 233901 (2003).
45. K. M. Tanvir Ahmmed, C. Grambow, and A. M. Kietzig, *Micromachines* **5**, 1219 (2014).

УВЕЛИЧЕНИЕ РАЗБРОСА ПО ИМПУЛЬСАМ В ПОТОКЕ УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ В ОНДУЛЯТОРЕ

*В. В. Огнивенко**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
61108, Харьков, Украина*

Поступила в редакцию 30 ноября 2020 г.,
после переработки 25 декабря 2020 г.
Принята к публикации 13 января 2021 г.

Рассмотрена диффузия по импульсу в потоке ультрарелятивистских электронов, движущихся в пространственно-периодическом магнитном поле ондулятора. Получено выражение для коэффициента диффузии по импульсу электронов с учетом их начального энергетического разброса. Исследованы зависимости коэффициента диффузии как от расстояния, пройденного электронами в ондуляторе, так и от величины начального энергетического разброса электронов. Показано, что разброс по продольному импульсу электронов увеличивается по мере движения пучка в ондуляторе. Установлено, что на кинетическом этапе коэффициент диффузии не зависит от расстояния, проходимого пучком в ондуляторе. Обсуждается возможность продвижения лазеров на свободных электронах в рентгеновскую область спектра.

DOI: 10.31857/S0044451021050023

1. ВВЕДЕНИЕ

Релятивистский электронный пучок, движущийся во внешнем периодическом поле (ондуляторе), как известно, является источником интенсивного коротковолнового электромагнитного излучения. В пространственно-однородном потоке электронов электромагнитные поля, создаваемые отдельными электронами, имеют различные фазы, в результате чего суммарное электромагнитное поле потока таких электронов-излучателей является некогерентным. При движении электронов в таком некогерентном электромагнитном поле и периодическом поле ондулятора возникают силы, действующие на электроны, которые приводят к случайным отклонениям импульса от равновесного значения. Изменение квадратичных отклонений импульса от средних в потоке электронов, взаимодействующих посредством создаваемых ими электромагнитных полей, исследовано в работе [1]. В этой работе рассмотрена радиационная релаксация электронов, которые имеют одинаковую начальную энергию. В таком потоке скорость изменения квадратичных отклонений импульса от среднего увеличивается по мере движе-

ния пучка или, что то же самое, растет во времени. Такая зависимость разброса по импульсам от времени в системе, состоящей из большого числа частиц, какой является электронный пучок, соответствует предброуновскому движению частиц на начальной стадии эволюции системы [2].

Поскольку в реальных потоках электроны движутся с различными скоростями, необходимо установить количественный критерий, определяющий возможность пренебрежения различием начальных скоростей электронов при описании радиационной релаксации пучка. С другой стороны, учет различия скоростей электронов представляет физический интерес, поскольку позволяет исследовать диффузию электронов в импульсном пространстве на кинетическом этапе эволюции системы [3], когда движение электронов в процессе радиационной релаксации становится полностью случайным. Кроме того, описание диффузии по импульсам электронов в таких потоках представляет значительный интерес в связи с работами по созданию рентгеновских лазеров на свободных электронах (ЛСЭ), основанных на самопроизвольном усилении спонтанного излучения моноэнергетическим ультрарелятивистским электронным пучком при движении в ондуляторе [4–7].

В данной работе исследована диффузия по продольному импульсу в потоке ультрарелятивистских

* E-mail: ognivenko@kipt.kharkov.ua

электронов, имеющих некоторое начальное распределение по импульсам. Рассмотрено взаимодействие электронов друг с другом посредством создаваемых ими электромагнитных полей, на стадии спонтанного излучения. В приближении малого значения параметра ондулятора получено выражение для силы парного взаимодействия релятивистских электронов, движущихся с различными скоростями (разд. 2). Это выражение использовано в формулах для коэффициента диффузии по продольному импульсу электронов (разд. 3), оно справедливо на произвольном расстоянии, пройденном электронами в ондуляторе. Из общих формул получены явные выражения как для среднего квадратичного продольного импульса на предброуновской стадии движения электронов (разд. 4), так и для коэффициентов диффузии по продольному импульсу на кинетическом этапе эволюции системы, когда движение электронов становится полностью случайным (разд. 5). С помощью численных методов определен среднеквадратичный разброс по продольному импульсу на произвольном расстоянии, пройденном первоначально моноэнергетическим пучком электронов в ондуляторе (разд. 6). Обсуждение полученных результатов и следующие из них выводы содержатся в заключительной части (разд. 7).

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ, ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим поток релятивистских электронов, который пересекает плоскость $z = 0$ и движется в положительном направлении оси z в пространственно-периодическом статическом магнитном поле с правой круговой поляризацией, которое при $z \geq 0$ имеет вид

$$\mathbf{H}_u = H_0[\mathbf{e}_x \cos(k_u z) + \mathbf{e}_y \sin(k_u z)], \quad (1)$$

где $k_u = 2\pi/\lambda_u$; H_0, λ_u — амплитуда и период магнитного поля ондулятора; $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ — единичные векторы декартовой системы координат x, y, z .

Вычислим коэффициент диффузии по продольному (вдоль оси z) импульсу электронов, который характеризует среднее изменение квадрата отклонения продольного импульса от среднего по мере движения пучка в ондуляторе. Исходное уравнение для коэффициента диффузии, полученное на основе динамики движения отдельных частиц, можно записать в виде [1, 2]

$$D_z(p_z, t) = \frac{d}{2dt} \langle (\Delta p_z)^2 \rangle = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{\Omega_q} F_z^{(s)} [x^{(0)}(t), t; x_s^{(0)}(t, q_{0s})] \times F_z^{(s)} [x^{(0)}(t_1), t_1; x_s^{(0)}(t_1, q_{0s})] \times f(q_{0s}) v_z(t_{0s}) dq_{0s}, \quad (2)$$

где $\Delta p_z = p_z - \langle p_z \rangle$; \mathbf{p} — импульс электрона; $\mathbf{F}_z^{(s)}(x, t; x_s)$ — сила, действующая на электрон (пробный), находящийся в точке \mathbf{r} в момент времени t , со стороны s -го электрона-излучателя; $x = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$, $x_s^{(0)} = (\mathbf{r}_s^{(0)}, \mathbf{p}_s^{(0)})$ — равновесные траектория и импульс s -го электрона в ондуляторе, $q_{0s} = (x_{0s}, y_{0s}, t_{0s}, \mathbf{p}_{0s})$ — начальные координаты и импульс электрона в момент времени t_{0s} , в который он пересекает плоскость $z = 0$; $dq_{0s} = dx_{0s} dy_{0s} dt_{0s} d\mathbf{p}_{0s}$; $f(q_{0s})$ — одночастичная функция распределения электронов пучка по импульсам, Ω_q — область интегрирования по начальным координатам и импульсам электронов-излучателей (s -х), в поле которых находится пробный электрон; угловые скобки означают усреднение по ансамблю.

Рассматривая взаимодействие электронов в ондуляторе посредством создаваемых ими электромагнитных полей, выражение для силы парного взаимодействия можно записать в виде

$$F_z^{(s)}(x, t; x_s) = \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \text{rot} \mathbf{A}^{(s)}]_z, \quad (3)$$

$$\mathbf{A}^{(s)}(x, t; x_s) = \frac{e\mathbf{v}'_s}{c(R'_s - \beta'_s \cdot \mathbf{R}_s)}, \quad (4)$$

где $\mathbf{R}_s = \mathbf{r} - \mathbf{r}_s(t, q_{0s})$, $\beta_s = \mathbf{v}_s/c$, $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m\gamma$, e, m — заряд ($e < 0$) и масса электрона, γ — релятивистский фактор, c — скорость света в вакууме, штрих означает, что величины взяты в предшествующий момент времени

$$t' = t - R'_s/c. \quad (5)$$

Будем пренебрегать разбросом поперечного (по отношению к \mathbf{e}_z) импульса электронов на входе в ондулятор при $z = 0$, рассматривая влияние разброса продольного импульса на радиационную релаксацию электронного пучка. Тогда, учитывая (1), функцию распределения электронов по импульсам при $z = 0$ можно записать в виде

$$f(\mathbf{p}_{0s}) = n_b \delta \left(p_{x0s} - \frac{eH_0}{k_u c} \right) \delta(p_{y0s}) w(p_{z0s}), \quad (6)$$

где n_b — средняя плотность электронов, $\delta(x)$ — дельта-функция от x , $w(p_z)$ — произвольная функция. В этих условиях уравнение равновесной траектории электрона (например, s -го) при $z \geq 0$ принимает вид (ср. [1])

$$\mathbf{r}_s^{(0)}(t, q_{0s}) = \mathbf{r}_{0s} + \mathbf{r}_{us}(t, q_{0s}) + \mathbf{e}_z z_s(t), \quad (7)$$

где

$$\mathbf{r}_{us}(t, q_{0s}) = -\mathbf{e}_x r_{\perp s} \sin[k_u z_s(t)] - \mathbf{e}_y r_{\perp s} \{1 - \cos[k_u z_s(t)]\},$$

$$z_s(t, q_{0s}) = v_{zs}(t - t_{0s}), \quad \mathbf{r}_{0s} = (x_{0s}, y_{0s}, 0),$$

$$r_{\perp s} = \frac{K}{\gamma_{0s} \beta_{zs} k_u}, \quad K = \frac{|e| H_0}{m c^2 k_u},$$

$$v_{zs} = v_{0s} \sqrt{1 - \left(\frac{K}{\gamma_{0s} \beta_{0s}} \right)^2}.$$

Заметим, что по такой траектории будут двигаться электроны, имеющие только продольную составляющую скорости на некотором расстоянии z_H ($z_H < -\lambda_u/2\pi$) до входа в ондулятор и движущиеся в магнитном поле ондулятора, амплитуда которого адиабатически увеличивается ($\lambda_u (\partial/\partial z) \ln H_u \ll 2\pi$) от нуля при $z = z_H$ до H_0 при $z = 0$.

Найдем выражение для векторного потенциала $\mathbf{A}^{(s)}$. Для нахождения явных выражений векторного потенциала и силы парного взаимодействия электронов рассмотрим малые значения параметра ондулятора $K \ll 1$. Используя уравнение (5), (7), можно получить выражение для R'_s . Подставляя это выражение в формулу (4), а затем разлагая возникающее выражение по степеням параметра K с точностью до линейных членов, получим следующее выражение для векторного потенциала поля, создаваемого s -м электроном:

$$\mathbf{A}^{(s)}(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{c R_*} \times \left[\mathbf{v}'_{us} + \mathbf{v}_{zs} \left(1 + \frac{\mathbf{R}_{0\perp} \cdot \mathbf{v}'_{us}}{c R_*} + \frac{\mathbf{R}_{0\perp} \cdot \mathbf{r}'_{us}}{\gamma_{zs}^2 R_*^2} \right) \right], \quad (8)$$

где

$$R_* = \sqrt{R_{0z}^2 + R_{0\perp}^2 \gamma_{zs}^{-2}}, \quad \mathbf{v}_{us} = \dot{\mathbf{r}}_{us},$$

$$\mathbf{R}_{0\perp} = \mathbf{e}_x (x - x_{0s}) + \mathbf{e}_y (y - y_{0s}),$$

$$R_{0z} = z - z_s(t, q_{0s}),$$

$$\gamma_{zs} = (1 - \beta_{zs}^2)^{-1/2} = \frac{\gamma_{0s}}{\sqrt{1 + K^2}}.$$

Поле в точке \mathbf{r} в момент времени t , создаваемое s -м электроном, определяется его координатами в

предшествующий момент времени t' , удовлетворяющий очевидному условию $t' \geq t_{0s}$. Из этого условия при учете уравнения (5) следует соотношение

$$c(t - t_{0s}) \geq |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0s}|, \quad (9)$$

определяющее координаты \mathbf{r} и момент времени t , в которых электромагнитное поле, создаваемое s -м электроном, отлично от нуля. Строго говоря, условием представления векторного потенциала в виде (8) является полное отсутствие поля s -го электрона при $t < t_{0s}$ во всех точках пространства $z \geq 0$.

Зная $\mathbf{A}^{(s)}$, можно найти силу парного взаимодействия электронов. Подставляя выражение (8) в формулу (3), пренебрегая квазистатическими полями и быстро осциллирующими по z членами при вычислении ротора вектора $\mathbf{A}^{(s)}$, получим

$$F_z^{(s)}(x, t; q_{0s}) = -\frac{e^2 K^2 \beta_{zs} \gamma_{zs}^2 k_u}{\gamma \gamma_{0s} R_*} G(\mathbf{r}, t; q_{0s}), \quad (10)$$

где

$$G(\mathbf{r}, t; q_{0s}) = \left(\beta_{zs} + \frac{R_{0z}}{R_*} - \frac{\beta_{zs}}{k_{0s}^2 R_*^2} - \frac{\beta_{zs} R_{0\perp}^2}{2 \gamma_{zs}^2 R_*^2} \right) \sin \psi + \left(\beta_{zs} + \frac{R_{0z}}{R_*} \right) \frac{\cos \psi}{k_{0s} R_*},$$

$$\psi = \gamma_{zs}^2 k_u (R_{0s} + \beta_{zs} R_*), \quad k_{0s} = \beta_{zs} \gamma_{zs}^2 k_u.$$

Формулы (10), (6) и (2) позволяют записать следующее выражение для коэффициента диффузии:

$$D_z = \frac{e^4 K^4 k_u^2}{\gamma^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dp_{z0s} \times \gamma_{0s}^2 w(p_{z0s}) \Phi(t_1, p_{z0s}), \quad (11)$$

где

$$\Phi = \iiint_{\Omega_q} \frac{G(\mathbf{r}, t; q_{0s}) G(\mathbf{r}_1, t_1; q_{0s})}{R_*(\mathbf{r}, t; q_{0s}) R_*(\mathbf{r}_1, t_1; q_{0s})} \times n_b v_{zs} dx_{0s} dy_{0s} dt_{0s}. \quad (12)$$

Зависимость коэффициента диффузии (11) от импульса можно выявить, заменив в подынтегральном выражении уравнения (12) координаты r и r_1 координатами пробного электрона r_t в моменты времени t и t_1 соответственно, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_t(t) \equiv \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_z(t - t_0)$, $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_t(t_1)$.

В уравнении (12) область интегрирования Ω_q охватывает начальные координаты электронов-излучателей (s -х), поле которых отлично от нуля в моменты времени t и t_1 . Поскольку $t_1 < t$, эта область

будет определяться соотношением (9), в котором \mathbf{r} и t следует заменить соответственно на $\mathbf{r}_t(t_1)$ и t_1 .

Для дальнейших вычислений удобно ввести вместо переменной t новую независимую переменную — координату z , по формуле $z = v_z(t - t_0)$, при этом в правой части (11) заменить переменную t_1 новой переменной z_1 , полагая $t_1 = t_0 + z_1/v_z$. Компоненты вектора \mathbf{R}_0 тогда примут вид

$$R_{0z}(z_1) = \left(1 - \frac{v_{zs}}{v_z}\right) z_1 + v_{zs}(t_{0s} - t_0) \equiv \Delta z_s(z_1),$$

$$R_{0z}(z) = \Delta z_s(z_1) + \left(1 - \frac{v_{zs}}{v_z}\right) (z - z_1),$$

$$R_{0\perp} = \sqrt{(x_0 - x_{0s})^2 + (y_0 - y_{0s})^2}.$$

Подынтегральное выражение в правой части уравнения (12) зависит от начальных координат q_{0s} через функции $\Delta z_s(z_1)$ и $R_{0\perp}$. Поэтому удобно записать условие (9), определяющее пределы интегрирования по q_{0s} , через эти функции (ср. [1]):

$$\gamma_{zs}^2 [\Delta z_s(z_1) + \beta_{zs} R_*(z_1)] \leq z_1, \quad (13)$$

где

$$R_*(z_1) = \sqrt{[\Delta z_s(z_1)]^2 + R_{0\perp}^2 \gamma_{zs}^{-2}}.$$

Для определения пределов интегрирования в (12) следует также учесть конечные поперечные размеры пучка. Полагая, что пучок является сплошным цилиндрическим радиуса r_b , имеем

$$\sqrt{x_{0s}^2 + y_{0s}^2} \leq r_b. \quad (14)$$

Будем считать, что средняя плотность пучка n_b не зависит от координат q_{0s} . Учитывая вид силы парного взаимодействия электронов, в правой части уравнения (12) целесообразно перейти от переменных интегрирования x_{0s}, y_{0s}, t_{0s} к новым переменным r', φ, θ ($0 \leq \varphi \leq 2\pi, 0 \leq \theta \leq \pi$), используя формулы

$$x_{0s} = x_0 - \gamma_{zs} r' \cos \varphi \sin \theta, \quad y_{0s} = y_0 - \gamma_{zs} r' \sin \varphi \sin \theta,$$

$$\Delta z_s(z_1) = r' \cos \varphi.$$

Уравнение (12) тогда примет вид

$$\Phi = \gamma_{zs}^2 n_b \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \times$$

$$\times \int_0^{r'_{max}} dr' r' \frac{G(\mathbf{r}', \xi)}{R_*(\mathbf{r}', \xi)} G(\mathbf{r}', 0), \quad (15)$$

где

$$G(\mathbf{r}, \xi) = \left(\beta_{zs} + \frac{r \cos \theta + \xi}{R_*(\mathbf{r}, \xi)} - \frac{\beta_{zs}}{k_{0s} R_*^2(\mathbf{r}, \xi)} - \frac{\beta_{zs} r^2 \sin^2 \theta}{2 R_*^2(\mathbf{r}, \xi)} \right) \sin \psi(\mathbf{r}, \xi) + \left(\beta_{zs} + \frac{r \cos \theta + \xi}{R_*(\mathbf{r}, \xi)} \right) \frac{\cos \psi(\mathbf{r}, \xi)}{k_{0s} R_*(\mathbf{r}, \xi)}, \quad (16)$$

$$R_*(\mathbf{r}, \xi) = \sqrt{r^2 + 2r\xi \cos \theta + \xi^2}, \quad \mathbf{r}' = (r', \varphi, \theta),$$

$$\psi(\mathbf{r}, \xi) = k_u \gamma_{zs}^2 [r \cos \theta + \xi + \beta_{zs} R_*(\mathbf{r}, \xi)],$$

$$\xi = \left(1 - \frac{v_{zs}}{v_z}\right) (z - z_1).$$

Легко убедиться, что подынтегральное выражение в правой части уравнения (15) при $\xi = 0$ переходит в соответствующее выражение работы [1].

3. КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ

Для нахождения явного выражения для коэффициента диффузии ограничимся следующими упрощающими допущениями.

1. Рассмотрим разброс по импульсам электронов, движущихся по оси пучка, полагая $x_0 = y_0 = 0$. Тогда согласно условиям (13), (14) предел интегрирования r'_{max} в формуле (15) является наименьшим значением из следующих двух величин:

$$\frac{z_1}{\gamma_{zs}^2 (\cos \theta + \beta_{zs})}, \quad \frac{r_b}{\gamma_{zs} \sin \theta}. \quad (17)$$

2. Будем учитывать электромагнитное поле электронов-излучателей, движущихся только за рассматриваемым (пробным) электроном. При этом θ может меняться от 0 до $\pi/2$.

3. Считаем, что расстояние между электронами, парное взаимодействие которых мы рассматриваем ($|z - z_s| < r'$), значительно больше теплового разлета этих электронов относительно друг друга за время рассматриваемого процесса ($(\Delta v_z) z / v_z > \xi$), т. е. $r' \gg \xi$. Это условие, однако, не исключает возможность теплового разлета электронов на расстояние, большее длины волны ондуляторного излучения

$$\lambda = \frac{\lambda_u}{2\gamma_{0s}^2} (1 + K^2).$$

4. Предполагаем, что радиус пучка больше длины волны ондуляторного излучения в поперечном направлении: $r_b \gg \lambda_\perp / 2\pi$, где $\lambda_\perp = \lambda_u / \beta_{zs} \gamma_{zs}$ — длина волны ондуляторного излучения в системе

отсчета, движущейся с поступательной скоростью пучка.

Принимая во внимание сделанные предположения, в подынтегральном выражении уравнения (15) разложим $R_*(\mathbf{r}', \xi)$ по малому параметру ξ/r' и всюду, за исключением фазы $\psi(\mathbf{r}', \xi)$, будем пренебрегать членами ξ/r' по сравнению с единицей. Поскольку среднеквадратичный импульс изменяется на расстоянии $z > \lambda_u$, из (17) следует, что $k_{0s}r'_{max} \gg \gg 1$. Далее, проинтегрируем по φ и r' в уравнении (15), пренебрегая быстро осциллирующими членами типа $\cos[\psi(\mathbf{r}', \xi) + \psi(\mathbf{r}', 0)]$. Подставляя полученное выражение в уравнение (11) и ограничиваясь лишь членами, пропорциональными r'_{max} , находим

$$D_z(p_z, z) = \frac{\pi e^4 K^4 k_u^2 n_b}{4\gamma^2 v_z} \times \int_0^z dz_1 \int_{-\infty}^{\infty} dp_{z0s} \gamma_{0s}^2 w(p_{z0s}) \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \times \chi^4(\theta) \cos[\gamma_{zs}^2 k_u \xi \chi(\theta)] r'_{max}(z_1, \theta), \quad (18)$$

где $\chi(\theta) = 1 + \beta_{zs} \cos \theta$.

Предположим, что функция $w(p_{z0s})$ имеет вид

$$w(p_{z0s}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} p_{th}} \exp\left[-\frac{(p_{z0s} - p_{zm})^2}{2p_{th}^2}\right], \quad (19)$$

где p_{zm} и p_{th} — соответственно среднее значение и начальный разброс продольного импульса электронов.

Будем считать, что начальный тепловой разброс в пучке удовлетворяет условию $p_{th} \ll p_{zm}$. Кроме того, нас будет интересовать увеличение энергетического разброса электронов, вследствие радиационного взаимодействия, до значений $\Delta\gamma \ll \gamma_m$. Принимая во внимание эти условия, в подынтегральном выражении уравнения (18) разность скоростей запишем в виде

$$v_z - v_{zs} = \frac{p_z - p_{z0s}}{m\gamma_{zm}^2 \gamma_m}$$

и всюду, кроме этой разности, положим $v_{zs} = v_{zm}$. Здесь $v_{zm} = p_{zm}/m\gamma_m$ — среднее значение продольной скорости.

Подставив (19) в (18) и проинтегрировав по продольному импульсу, используя значение интеграла [8], получим следующее выражение для коэффициента диффузии:

$$D_z(p_z, z) = \frac{\pi e^4 K^4 k_u^2 \gamma_m^4 n_b}{4\gamma^2 v_z} \int_0^z dz_1 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \times \chi^4(\theta) r'_{max}(z_1, \theta) \alpha[\chi(\theta)(z - z_1)], \quad (20)$$

где

$$\alpha(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{z_c^2}\right) \cos(\eta x), \quad z_c = \frac{\sqrt{2}p_z}{k_u p_{th}},$$

$$\eta = k_u \left(1 - \frac{p_{zm}}{p_z}\right).$$

Выражение для $r'_{max}(z_1, \theta)$ можно получить, используя условие (17). Так, при $0 \leq z_1 \leq z_r$ находим (ср. [1])

$$r'_{max}(z_1, \theta) = r_1(z_1, \theta) \equiv \frac{z_1}{\gamma_{zm}^2 (\beta_{zm} + \cos \theta)}. \quad (21)$$

При $z_1 > z_r$ получим

$$r'_{max}(z_1, \theta) = \begin{cases} r_1(z_1, \theta), & 0 \leq \theta \leq \theta_*(z_1), \\ r_b/\gamma_{zs} \sin \theta, & \theta_*(z_1) < \theta \leq \pi/2, \end{cases} \quad (22)$$

где $z_r = \beta_{zm} \gamma_{zm} r_b$, $\theta_*(z) = \arccos a(\gamma_{zm} r_b/z)$,

$$a(x) = \frac{\sqrt{1 + x^2 \gamma_{zm}^{-2}} - \beta_{zm} x^2}{1 + x^2}.$$

Заметим, что $\theta_*(z) = 2 \arctg(z_r/z)$ при $\gamma_{zm} \gg 1$.

Используя формулы (21) и (22), запишем уравнение (20) для расстояний z меньших и больших z_r . При этом в правой части уравнения (20) заменим переменную интегрирования z_1 на новую переменную $z' = z - z_1$, а вместо θ , при интегрировании в интервале $(0, \theta_*(z_1))$, введем новую переменную интегрирования y по формуле $\beta_{zm} \cos \theta = y/z' - 1$.

При $z < z_r$ полная сила, действующая на пробный электрон со стороны электронов-излучателей, не зависит от поперечных размеров пучка; иными словами, излучение от электронов, движущихся на периферии пучка $r_{\perp s} = r_b$, не достигает пробного электрона. Изменив порядок интегрирования в формуле (20) и проинтегрировав по z' , получим следующее выражение для коэффициента диффузии:

$$D_z(p_z, z) = \frac{\pi e^4 K^4 k_u^2 \gamma_m^2 n_b}{24\gamma^2 v_z z^2} \int_0^z dy (z - y)^2 \times (y + 2z) [16\alpha(2y) - \alpha(y)]. \quad (23)$$

При $z > z_r$, как следует из выражения (22), r'_{max} зависит от поперечных размеров пучка. Коэффициент диффузии (20) теперь удобно записать в виде двух членов:

$$D_z(p_z, z) = \frac{\pi e^4 K^4 k_u^2 \gamma_m^2 n_b}{4\gamma^2 v_z} \times [U_1(z, p_z) + U_2(z, p_z)], \quad (24)$$

где

$$U_1 = \int_0^z dz' (z - z') \int_{\chi_{max}(z-z')}^{1+\beta_{zm}} d\chi \chi^3 \alpha(\chi z'), \quad (25)$$

$$U_2 = z_r \int_0^{z-z_r} dz' \int_{\theta_*(z-z')}^{\pi/2} d\theta \chi^4(\theta) \alpha[\chi(\theta) z'], \quad (26)$$

$\chi_{max}(x) = 1$ при $0 \leq x \leq z_r$, $\chi_{max}(x) = \chi_*(x)$ при $z_r < x \leq z$, $\chi_*(x) = 1 + \beta_{zm} \cos \theta_*(x)$. Заметим, что $\chi_*(x) = 2/(1 + z_r^2/x^2)$ при $\gamma_m \gg 1$.

Значительное упрощение в аналитическом решении уравнений (23), (25) и (26) возникает в двух случаях: когда в течение рассматриваемого процесса смещение электронов относительно друг друга за счет теплового движения мало либо когда это смещение велико. Рассмотрим каждый из этих случаев отдельно.

4. ПРЕДБРОУНОВСКИЙ ЭТАП

Найдем разброс по импульсам при $z \ll z_c$. В этом случае наибольший вклад в подынтегральные выражения (23), (25) и (26) будут давать значения $|p_z - p_{zm}| \ll p_{th}$ и, следовательно, можно ограничиться основным членом разложения функции α по малому параметру z/z_c , положив $\alpha = 1$.

При $z < z_r$, интегрируя в правой части выражения (23), используя определение (2), получим

$$\frac{d}{dz} \langle (\Delta p_z)^2 \rangle = \frac{15\pi e^4 K^4 k_u^2 \gamma_m^2 n_b}{16\gamma^2 v_z^2} z^2. \quad (27)$$

При $z > z_r$, вычисляя двойные интегралы в (25), (26), учитывая (24) и (2), получаем

$$\frac{d}{dz} \langle (\Delta p_z)^2 \rangle = \frac{2\pi e^4 K^4 k_u^2 \gamma_m^2 n_b}{\gamma^2 v_z^2} z_r z B\left(\frac{z}{z_r}\right), \quad (28)$$

где

$$B(x) = \frac{5}{3} \left(1 - \frac{1}{x}\right) + \frac{35}{16} \left(\arctg x - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{2}{x} \ln\left(\frac{1+x^2}{2}\right) + \frac{15}{32x}.$$

Заметим, что выражение (28) при $z = z_r$ переходит в (27). Легко убедиться, что выражение (27), справедливое при $z < z_r$, и выражение (28) для значений $z \gg z_r$ совпадают с соответствующими формулами работы [1].

5. КИНЕТИЧЕСКИЙ ЭТАП

Найдем теперь коэффициент диффузии при $z \gg \gg z_c$. Получим сначала асимптотическое выражение коэффициента диффузии при $z < z_r$. Для этого в уравнении (23), устремляя верхний предел интегрирования к бесконечности и пренебрегая слагаемыми, пропорциональными $\exp(-z^2/z_c^2)$, при интегрировании с помощью [8] получим

$$D_z(p_z) = \frac{7\pi^{3/2} e^4 K^4 \gamma_m^2 n_b k_u^2 z_c}{24\gamma^2 v_z} \times \left\{ z \exp\left[-\frac{(p_z - p_{zm})^2}{2p_{th}^2}\right] - \frac{9z_c}{14\sqrt{\pi}} \phi\left(\frac{p_z - p_{zm}}{\sqrt{2}p_{th}}\right) \right\}, \quad (29)$$

где

$$\phi(x) = 1 - 2xe^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt.$$

Численные значения функции $\phi(x)$, а также представление в виде степенного ряда для малых x и асимптотическое разложение для $x \gg 1$ можно получить, например, с помощью [9].

Первый член в выражении (29) зависит линейно от z . Это связано с тем, что с ростом z увеличивается число электронов-излучателей, в области влияния которых находится пробный электрон.

Вычислим теперь коэффициент диффузии при $z > z_r$. Переходя к вычислению интегралов (25), (26), прежде всего, заметим, что при $z - z_r \gg z_c$ основной вклад в значение этих интегралов дает область $z' < z_c \ll z$, поскольку при больших z' подынтегральная функция в (25), (26) быстро убывает. Воспользовавшись этим неравенством, вычислим сначала U_1 . Разлагая внутренний интеграл в уравнении (25) по малому параметру z'/z до линейных членов включительно и затем меняя порядок интегрирования в двойных интегралах, получим

$$U_1 = \int_1^{1+\beta_{zm}} d\chi \chi \int_{(z-z_r)\chi}^{\chi z} dy (z\chi - y) \alpha(y) + \int_{\chi_*(z)}^{1+\beta_{zm}} d\chi \chi \int_0^{(z-z_r)\chi} dy (z\chi - y) \alpha(y) + \frac{4\beta_{zm} z_r^2 z}{(z_r^2 + z^2)^2} \int_0^{(z-z_r)\chi_*(z)} dy y [z\chi_*(z) - y] \alpha(y). \quad (30)$$

Здесь вместо переменной z' мы ввели новую переменную $y = \chi z'$ в первом и втором двойных интегралах и переменную $y = z' \chi_*(z)$ в третьем интеграле.

Найдем теперь асимптотическое выражение интегралов (30) в предельном случае $z - z_r \gg z_c$. Первый двойной интеграл в уравнении (30) по порядку величины равен

$$z_r z_c^4 (z - z_r)^{-3} e^{-z^2/z_c^2}.$$

Вычисляя второй двойной и третий интегралы в уравнении (30) с помощью [8] в том же приближении, что и (29), удерживая члены до z_r^2/z^2 , получим

$$U_1 = \frac{2z_r^2 z_c}{z} \left[2\sqrt{\pi} \exp\left(-\frac{(p_z - p_{zm})^2}{2p_{th}^2}\right) + \frac{z_c}{z} \phi\left(\frac{p_z - p_{zm}}{\sqrt{2}p_{th}}\right) \right]. \quad (31)$$

Перейдем теперь к вычислению U_2 . В правой части уравнения (26), разлагая внутренний интеграл в ряд по малому параметру z'/z до линейных членов включительно и меняя порядок интегрирования в двойном интеграле, получим

$$U_2 = z_r \int_{\theta_*(z)}^{\pi/2} d\theta \chi^3(\theta) \int_0^{(z-z_r)\chi(\theta)} dy \alpha(y) - \frac{2z_r^2}{z_r^2 + z^2} \chi_*^2(z) \int_0^{(z-z_r)\chi_*(z)} dy y \alpha(y). \quad (32)$$

Здесь вместо переменной z' мы ввели новую переменную интегрирования y по формуле $y = z' \chi(\theta)$ в первом слагаемом и $y = z' \chi_*(z)$ — во втором. Интегрируя в уравнении (32) так же, как в (31), получим следующее асимптотическое выражение:

$$U_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} z_r z_c B_1 \left(\frac{z}{z_c}\right) \exp\left(-\frac{(p_z - p_{zm})^2}{2p_{th}^2}\right) - \frac{4z_r^2 z_c^2}{z^2} \phi\left(\frac{p_z - p_{zm}}{\sqrt{2}p_{th}}\right), \quad (33)$$

где

$$B_1(x) = \int_{\theta_*(x)}^{\pi/2} d\theta (1 + \beta_{zm} \cos \theta)^3.$$

При $\gamma_{zm} \gg 1$ имеем

$$B_1(x) = 5 \left(\arctg x - \frac{\pi}{4} \right) + \frac{11}{3} - \frac{2}{x} (1 - \mu) \left(\frac{11}{2} - \frac{13}{3} \mu + \frac{4}{3} \mu^2 \right),$$

где $\mu = (1 + x^2)^{-1}$.

Подставляя выражения (31) и (33) в уравнение (24), окончательно получаем следующее выражение для коэффициента диффузии:

$$D_z(p_z, z) = \frac{5\pi^{5/2} e^4 K^4 \gamma_m^2 n_b k_u^2 z_r z_c}{16\gamma^2 v_z} \times \left[B_2\left(\frac{z}{z_r}\right) \exp\left(-\frac{(p_z - p_{zm})^2}{2p_{th}^2}\right) - \frac{8z_r z_c}{5\pi^{3/2} z^2} \phi\left(\frac{p_z - p_{zm}}{\sqrt{2}p_{th}}\right) \right], \quad (34)$$

где

$$B_2(x) = \frac{2}{\pi} \arctg x - \frac{1}{2} + \frac{22}{15\pi} - \frac{6}{5\pi x}.$$

При $z \gg z_r$ выражение (34) для малых отклонений импульса от среднего, $|p_z - p_{zm}| < p_{th}$, принимает вид

$$D_z(p_z) = \frac{5\pi^{5/2} e^4 K^4 \gamma_m^2 n_b k_u^2 z_r z_c}{16\gamma^2 v_z} \times \left(\frac{1}{2} + \frac{22}{15\pi} \right) \exp\left(-\frac{(p_z - p_{zm})^2}{2p_{th}^2}\right). \quad (35)$$

Для больших отклонений импульса от среднего, $|p_z - p_{zm}| \gg p_{th}$, при

$$z < \frac{\sqrt{2^{1/2}} \lambda_u z_r p_z p_{th} / \pi}{|p_z - p_{zm}|} \exp\left(\frac{(p_z - p_{zm})^2}{4p_{th}^2}\right) \equiv z_p$$

коэффициент диффузии (34) обратно пропорционален квадрату этого отклонения:

$$D_z(p_z, z) = \frac{\pi e^4 K^4 n_b \beta_z z_r^2 p_{zm}^2}{v_{zm} z^2 (p_z - p_{zm})^2}.$$

Для значений $z > z_p$ выражение (34) принимает вид (35). Таким образом, на больших расстояниях коэффициент диффузии не зависит от z . Такая зависимость коэффициента диффузии от координаты или же от времени соответствует кинетическому этапу эволюции системы, состоящей из большого числа частиц (см., например, [3, 10, 11]).

6. ПЕРВОНАЧАЛЬНО МОНОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ПОТОК ЭЛЕКТРОНОВ

Для получения ультракоротковолнового когерентного электромагнитного излучения в процессе самопроизвольного усиления спонтанного излучения релятивистские электроны должны иметь малый разброс по импульсу, удовлетворяющий условию $p_{th} \ll p_{zm} \lambda_u / L_u$ (см., например, [12–14]). Это

неравенство можно переписать в виде $L_u \ll 2z_c$, где $L_u = \lambda_u/\rho_{1D}$ — длина ондулятора, определяемая расстоянием, на котором интенсивность электромагнитного излучения достигает максимального значения,

$$\rho_{1D} = \left(\frac{K\lambda_u}{4\pi r_b}\right)^{2/3} \left(\frac{I_b}{I_A}\right)^{1/3} \gamma_0^{-1},$$

$$I_b = \pi|e|v_{z0}r_b^2n_b, \quad I_A = \frac{mc^3}{|e|} = 17 \text{ кА}.$$

Поэтому для определения энергетического разброса, обусловленного радиационным взаимодействием электронов на стадии спонтанного излучения ($z < L_u$), можно пренебречь начальным энергетическим разбросом электронов, считая, что электроны являются моноэнергетическими: $w(p_{zs}) = \delta(p_{zs} - p_{z0})$. В этом случае, используя уравнения (11), (12) и (21), (22), в которых переменную θ заменим на $y = \cos\theta$, а вместо r' введем новую переменную $x = \gamma_{z0}^2 k_u r' (y + \beta_{z0})$, выражение для среднего квадратичного разброса продольного импульса можно записать в виде

$$\langle(\Delta p_z)^2\rangle = \frac{\pi e^4 K^4 n_b}{c^2 k_u} V, \quad (36)$$

$$V = \int_0^\zeta d\zeta_1 (\zeta - \zeta_1) \int_0^1 dy (\beta_{z0} + y)^3 \times$$

$$\times \int_0^{x_{max}(\zeta_1, y)} dx g^2(x), \quad (37)$$

где

$$g(x) = \left(1 - \frac{2}{x^2}\right) \sin x + 2\frac{\cos x}{x},$$

$$x_{max} = \begin{cases} \psi_m(y), & 0 \leq y \leq y_*(\zeta_1), \\ \zeta_1, & y_*(\zeta_1) < y \leq 1, \end{cases}$$

$$\psi_m(y) = \frac{\zeta_r(\beta_{z0} + y)}{\beta_{z0}\sqrt{1-y^2}}, \quad y_*(\zeta_1) = \max\left(0, \frac{\zeta_1^2 - \zeta_r^2}{\zeta_1^2 + \zeta_r^2}\right),$$

$$\zeta = k_u z, \quad \zeta_1 = k_u z_1, \quad \zeta_r = \beta_{z0}\gamma_{z0}r_b k_u = \frac{2\pi r_b}{\lambda_\perp}.$$

Преобразуем формулу (37) к более простому виду. При $\zeta \leq \zeta_r$ верхний предел интегрирования по x не зависит от y . Поэтому в уравнении (37) сначала проинтегрируем по y , а затем, меняя порядок интегрирования по ζ_1 и x , проинтегрируем по ζ_1 . В результате получим

$$V = \frac{15}{8} \int_0^\zeta (\zeta - x)^2 g^2(x) dx. \quad (38)$$

При $\zeta > \zeta_r$, учитывая пределы интегрирования по x , тройной интеграл в формуле (37) запишем в виде

$$\int_0^{\zeta_r} d\zeta_1 \int_0^{\zeta_1} dx \int_0^1 dy + \int_{\zeta_r}^\zeta d\zeta_1 \int_0^{\zeta_1} dx \int_{y_*(\zeta_1)}^1 dy +$$

$$+ \int_{\zeta_r}^\zeta d\zeta_1 \int_0^{y_*(\zeta_1)} dy \int_0^{\psi_m(y)} dx.$$

В первом и втором слагаемых этого выражения можно непосредственно проинтегрировать по y , учитывая подынтегральные выражения в уравнении (37). В третьем слагаемом поменяем порядок интегрирования по y и x , проинтегрируем по y . Затем, меняя всюду порядок интегрирования по ζ_1 и x , проинтегрируем по ζ_1 в каждом слагаемом. В результате формула (37) примет вид

$$V = \frac{15}{8} \int_0^{\zeta_r} (\zeta - x)^2 g^2(x) dx +$$

$$+ 2 \int_{\zeta_r}^\zeta (\zeta - x)^2 \left[1 - \frac{x^8}{(\zeta_r^2 + x^2)^4}\right] g^2(x) dx. \quad (39)$$

Легко видеть, что при $\zeta = \zeta_r$ формулы (39) и (38) совпадают, как это и должно быть.

Асимптотические значения выражений (38) и (39) при $\zeta > 1$ и $\zeta_r > 1$ получим, интегрируя в этих формулах с точностью до слагаемых, обратно пропорциональных ζ и ζ_r :

$$V = \frac{5}{16}\zeta^3, \quad \zeta < \zeta_r;$$

$$V = \zeta_r^3 A\left(\frac{\zeta}{\zeta_r}\right), \quad \zeta > \zeta_r, \quad (40)$$

где

$$A(x) = (x^2 - 1) \left[\frac{5}{3} + \frac{35}{16} \left(\arctg x - \frac{\pi}{4} \right) \right] -$$

$$- 4x \ln \frac{1+x^2}{2} + 3(x-1) + \frac{5}{16}.$$

Можно показать, что поправка к решению (40) при $\zeta > \zeta_r > 1$ имеет вид

$$V - \zeta_r^3 A\left(\frac{\zeta}{\zeta_r}\right) = \frac{4}{\zeta_r} B_3\left(\frac{\zeta}{\zeta_r}\right),$$

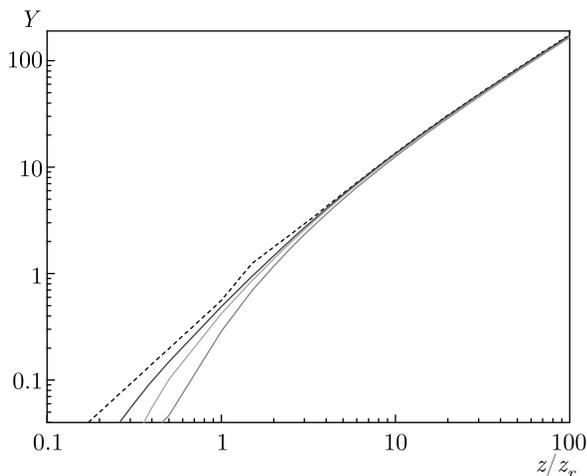


Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимости функции $Y = \sqrt{V/\zeta_r^3}$ от нормированной продольной координаты z/z_r , полученные численно (цветные кривые) для значений $r_b/\lambda_\perp = 1$ (красная), 2 (зеленая), 4 (синяя) и на основании формулы (40) (пунктирная кривая)

где

$$B_3(x) \approx (x^2 - 1)(4 \operatorname{arctg} x - \pi - 3) + 4x [\ln 2 - \ln(1 + x^{-2})] - x + 2.$$

Легко убедиться, что в предельном случае $\zeta \gg 1$, $\zeta_r \gg 1$ выражение (40) совпадает с выражением (28), а также с соответствующим выражением работы [1]. Заметим, что в этой работе зависимость разброса по импульсам от координаты z найдена в предположении, что $g^2 = 1/2$.

На рис. 1 приведены графики, полученные численным интегрированием уравнений (38) и (39) (цветные кривые) и полученные согласно формуле (40) (пунктирная кривая). Величина $\sqrt{V/\zeta_r^3}$ пропорциональна среднеквадратичному значению продольного импульса электронов:

$$\sqrt{V/\zeta_r^3} = \frac{\langle(\Delta p_z)^2\rangle^{1/2}}{mc\nu},$$

где

$$\nu = \beta_{z0} k_u \left(\frac{K\gamma_{z0}}{\gamma_0} \right)^2 \left(\frac{\gamma_{z0}^3 r_e r_b I_b}{I_A} \right)^{1/2}, \quad r_e = e^2/mc^2.$$

Заметим, что для ультрарелятивистских электронов $\langle(\Delta p_z)^2\rangle = m^2 c^2 \langle(\Delta \gamma)^2\rangle$.

Как видно из рис. 1, при $z \gg z_r \equiv \beta_{z0} \gamma_{z0} r_b$ (практически при $z > 3z_r$) приближенные формулы (40) достаточно хорошо передают зависимость V от z/z_r . Это связано с тем, что поправка к выражению (40)

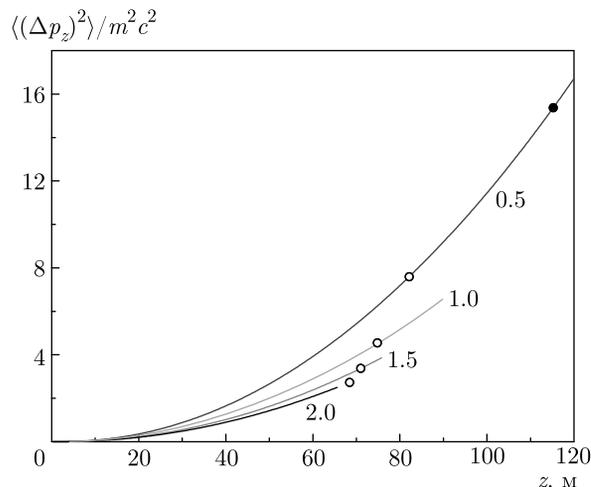


Рис. 2. Зависимости нормированного разброса продольного импульса $\langle(\Delta p_z)^2\rangle/m^2 c^2$ от координаты z . Числа у кривых обозначают длину волны излучения λ в ангстремах

пропорциональна обратной степени ζ_r , в то время как главный член V пропорционален ζ_r^3 .

Как известно, уменьшение длины электромагнитной волны, излучаемой электронами при движении в ондуляторе, достигается путем увеличения энергии электронов. Поэтому представляет интерес определить разброс по импульсам, обусловленный радиационными эффектами, для разных значений энергии электронов. На рис. 2 приведены зависимости $\langle(\Delta p_z)^2\rangle/m^2 c^2$ от z , вычисленные по формулам (36), (38) и (39), когда параметры ондулятора, радиус и ток пучка остаются постоянными, а энергия пучка увеличивается. Вычисления проведены для значений $H_0 = 1.4$ кГс, $\lambda_u = 4$ см, $I_b = 5$ кА, $r_b = 50$ мкм ($n_b = 1.32 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$), которые примерно соответствуют параметрам экспериментов [4–6]. Кривые соответствуют длине волны излучения λ : 2 Å (черная), 1.5 Å (красная), 1 Å (зеленая), 0.5 Å (синяя), при энергии электронов $E_b = mc^2 \gamma_0$: 5.76 ГэВ (черная), 6.65 ГэВ (красная), 8.15 ГэВ (зеленая), 11.53 ГэВ (синяя). Зависимости от координаты z рассчитаны до значений L_u . Кружками (белыми) на кривых обозначены значения разброса по импульсам в координатах z_{rel} , в которых смещение электронов относительно равновесной траектории, вследствие радиационного разброса по импульсам, достигает половины длины электромагнитной волны:

$$2z_{rel} \sqrt{\langle(\Delta p_z)^2\rangle} |_{z=z_{rel}} = \gamma_{z0}^2 p_{z0} \lambda.$$

При энергии электронов, соответствующей длине волны излучения 2 \AA (черная кривая), расстояние z_{rel} больше L_u . Черный кружок на синей кривой соответствует смещению электронов на длину электромагнитной волны λ .

Из рис. 2 видно, что разброс по импульсам увеличивается по мере движения электронов в ондуляторе, а также с ростом энергии электронов. Расстояние z_{rel} также увеличивается с ростом энергии электронов. Это связано с тем, что расстояние z_{rel} обратно пропорционально относительному разбросу по продольному импульсу, который, как следует из формул (36) и (40), при $z > z_r$ обратно пропорционален $\gamma_0^{1/2}$. Заметим, что длина ондулятора L_u зависит от энергии электронов линейно. Поэтому относительное расстояние z_{rel}/L_u , на котором смещение электронов в продольном направлении относительно равновесной траектории достигает половины длины электромагнитной волны, уменьшается с ростом энергии электронов.

7. ВЫВОДЫ

Таким образом, в данной работе исследована диффузия по импульсу в потоке ультрарелятивистских электронов, взаимодействующих между собой посредством создаваемых ими электромагнитных полей при движении в ондуляторе. С помощью метода нахождения коэффициентов диффузии в пространстве импульсов непосредственно из динамики движения отдельных частиц под действием суммарной силы со стороны каждой из них, в приближении малого значения параметра ондулятора получены явные выражения для скорости изменения среднего квадратичного продольного импульса электронов с учетом их начального разброса по импульсу.

Показано, что на начальном этапе движения пучка, когда пройденное им расстояние в ондуляторе мало по сравнению с расстоянием z_c , среднеквадратичный разброс $\langle(\Delta p_z)^2\rangle^{1/2}$ линейно зависит от координаты z при $z > z_r$. Это связано с тем, что при $z \ll z_c$ силы парного взаимодействия электронов друг с другом посредством электромагнитных волн практически не меняются по мере движения пучка. На расстояниях $z < z_r$, помимо постоянства сил парного взаимодействия, происходит увеличение числа электронов-излучателей, в области влияния которых находится пробный электрон. Поэтому при $z < z_r$ среднеквадратичный разброс увеличивается пропорционально $z^{3/2}$ (см. [1]). В целом эволюция электронов в пространстве импульсов при

$z \ll z_c$ соответствует предброуновскому движению электронов в электромагнитном поле.

Что же касается расстояния z_c , то оно равно по порядку величины расстоянию, за время прохождения которого τ_c ($\tau_c = z_c/v_z$) тепловой разлет двух электронов относительно друг друга достигает половины длины электромагнитной волны: $v_{th}\tau_c = \sqrt{2}\lambda/\pi \approx \lambda/2$. Здесь использовано соотношение $p_{th} = m\gamma_0\gamma_{z0}^2v_{th}$. Действительно, по порядку величины скорость v_{th} равна разности продольных скоростей двух электронов. Поэтому $v_{th}z/v_z$ дает то смещение, на которое изменяется расстояние между двумя электронами за время z/v_z . Само же время τ_c (время хаотизации) не зависит ни от плотности пучка, ни от силы парного взаимодействия электронов и представляет собой продолжительность «синхронного» взаимодействия двух электронов. За это время фаза силы, действующей на электрон (пробный) со стороны электрона-излучателя, меняется в пределах от 0 до π : $\psi(t+\tau) - \psi(t) \leq \pi$ при $\tau \leq \tau_c$.

На расстояниях, значительно больших z_c (или, другими словами, по прошествии отрезка времени, достаточно большого по сравнению с τ_c), сила парного взаимодействия претерпевает существенное изменение, она стремится к значению, не зависящему от первоначального значения этой силы. В результате этого на больших расстояниях ($z \gg z_r$) коэффициент диффузии не зависит от координаты, а среднеквадратичный разброс по продольному импульсу пропорционален $z^{1/2}$. В этом случае реализуется кинетический этап диффузии электронов в импульсном пространстве, их движение становится полностью случайным. Заметим, что при $z_c \ll z < z_r$ коэффициент диффузии зависит линейно от координаты z . Это связано с увеличением числа электронов-излучателей, в области влияния которых находится пробный электрон. При этом увеличение числа таких электронов-излучателей происходит благодаря увеличению линейных размеров области влияния с ростом z .

Как следует из приведенных выше расчетов, радиационное взаимодействие электронов может приводить к увеличению энергетического разброса в пучках, которые используются для получения когерентного электромагнитного излучения нанометрового и более коротковолнового диапазонов длин волн. Действительно, на входе в ондулятор такие пучки должны иметь малый энергетический разброс. На начальной стадии самопроизвольного усиления спонтанного излучения отдельные электроны движутся в некогерентном электромагнитном поле своих соседей под действием случайных сил. Это

приводит к случайным отклонениям импульса электронов от среднего значения и увеличению их энергетического разброса. Например, для электронного пучка и ондулятора с параметрами, приведенными выше (см. рис. 2), увеличение энергетического разброса в результате радиационной релаксации может препятствовать получению когерентного излучения с длиной волны меньшей одного ангстрема.

При движении релятивистских электронов по криволинейным траекториям их энергетический разброс может изменяться также из-за квантовых флуктуаций, обусловленных дискретностью случайных актов излучения фотонов отдельными электронами [15–17]. Увеличение энергетического разброса электронов при движении в ондуляторе, связанного с квантовыми флуктуациями излучения, рассмотрено в работе [18]. При $K^2 \ll 1$ выражение для энергетического разброса, обусловленного квантовыми эффектами, принимает вид

$$\langle (\Delta\gamma)^2 \rangle_{qf} = \lambda_c r_e \gamma_0^4 k_u^3 K^2 z,$$

где $\lambda_c = \hbar/mc = 3.86 \cdot 10^{-11}$ см. Отношение энергетического разброса, обусловленного классическим (неквантовым) эффектом, к разбросу, обусловленному квантовыми флуктуациями излучения, при $z > z_r$ можно записать в виде

$$\frac{\langle (\Delta\gamma)^2 \rangle}{\langle (\Delta\gamma)^2 \rangle_{qf}} = \frac{K^2 I_b \lambda_u z}{2\gamma_0^3 I_A r_b \lambda_c}.$$

Так, например, для параметров электронного пучка и ондулятора, представленных выше (см. рис. 2), на расстоянии z_{rel} превышение энергетического разброса, обусловленного классическим радиационным эффектом $\langle (\Delta\gamma)^2 \rangle$, по сравнению с разбросом из-за квантовых флуктуаций излучения $\langle (\Delta\gamma)^2 \rangle_{qf}$ достигает примерно $5.8 \cdot 10^2$ при $\lambda = 0.5 \text{ \AA}$ и $2.6 \cdot 10^3$ при $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$. Таким образом, увеличение энергетического разброса в электронных пучках, необходимых для реализации самопроизвольного усиления спонтанного излучения при движении в ондуляторе, будет определяться классическими радиационными эффектами, обусловленными влиянием некогерентных электромагнитных полей на движение электронов.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Огнивенко, ЖЭТФ **142**, 1067 (2012).
2. В. В. Огнивенко, ЖЭТФ **149**, 230 (2016).
3. Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике*, Гостехиздат, Москва (1946).
4. P. Emma, R. Akre, J. Arthur et al., *Nature Photon.* **4**, 641 (2010).
5. Hitoshi Tanaka, Makina Yabashi et al., *Nature Photon.* **6**, 540 (2012).
6. H. Weise and W. Decking, *Proc. 38th Free-Electron Laser Conf.*, USA, Santa Fe (2017), p. 9.
7. R. Ganter, G. Aeppli, J. Alex et al., *Proc. 39th Free-Electron Laser Conf.*, Germany, Hamburg (2019), p. 753.
8. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды*, т. 1, *Элементарные функции*, Наука, Москва (1981).
9. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами*, под ред. М. Абрамовица, И. Стиган, Наука, Москва (1979); Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш, *Специальные функции. Формулы, графики, таблицы*, Наука, Москва (1977).
10. Д. Уленбек, Д. Форд, *Лекции по статистической механике*, Мир, Москва (1965).
11. В. П. Силин, *Введение в кинетическую теорию газов*, Наука, Москва (1971).
12. P. Sprangle and R. A. Smith, *Phys. Rev. A* **21**, 293 (1980).
13. K. J. Kim, *Nucl. Instr. Meth. A* **250**, 396 (1986).
14. C. Pellegrini, *Particle Accelerators* **33**, 159 (1990).
15. А. А. Соколов, И. М. Тернов, *ДАН СССР* **97**, 823 (1954).
16. M. Sands, *Phys. Rev.* **97**, 470 (1955).
17. А. А. Коломенский, А. Н. Лебедев, ЖЭТФ **30**, 207 (1956).
18. E. L. Saldin, E. A. Schneidmiller, and M. V. Yurkov, *Nucl. Instr. Meth. A* **381**, 545 (1996).

ВОЗБУЖДЕНИЕ КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

В. А. Астапенко^{a}, Ю. А. Кротов^b, Е. В. Сазно^a*

*^a Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

*^b Научно-исследовательский институт «Полос» им. М. Ф. Стельмаха
117342, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2020 г.,
после переработки 25 декабря 2020 г.
Принята к публикации 28 декабря 2020 г.

Исследуется возбуждение линейного квантового осциллятора (ЛКО) при столкновении с заряженной частицей, движущейся по прямолинейной траектории. Расчет вероятности и сечения процесса проведен вне рамок теории возмущений для различных зарядов налетающей частицы, включая многозарядные ионы. Рассмотрено возбуждение между стационарными состояниями ЛКО, а также полное возбуждение из основного состояния. Проанализированы характеристические черты процесса в зависимости от параметров задачи.

DOI: 10.31857/S0044451021050035

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория возбуждения квантовых объектов в результате столкновения с заряженными частицами впервые рассматривалась Ферми в его классической работе [1] в рамках метода эквивалентных фотонов еще до создания квантовой механики с использованием экспериментальных данных для сечений фото-возбуждения.

В настоящее время для расчета сечения ударного возбуждения атомов используется последовательный квантовомеханический подход [2].

Кроме того, для быстрой оценки сечения возбуждения на дипольно-разрешенных переходах атомов и молекул применяются полуфеноменологические формулы, полученные методом функций подобия (см., например, [3, 4]). Данные формулы могут быть выведены с использованием спектроскопического принципа соответствия, в рамках которого атом при взаимодействии с электромагнитным полем представляется набором классических осцилляторов [5]. Такой подход соответствует первому порядку теории возмущений по взаимодействию мишени с налетающей частицей (НЧ) и становится

некорректным при описании ударного возбуждения медленными частицами и многозарядными ионами.

Возбуждение квантового осциллятора короткими лазерными импульсами исследовалось в работах [6, 7] с помощью точной формулы для вероятности процесса, полученной Швингером [8] в его теории квантованного поля.

Модель квантового осциллятора активно используется при расчете потерь энергии в ходе столкновения заряженных частиц с атомами [9]. Так, в работах [10, 11] формула Швингера, обобщенная на трехмерный случай, применялась для расчета потерь энергии при столкновении заряженных частиц с квантовым осциллятором, находящемся в основном состоянии. В работе [10] рассматривались флуктуации потерь энергии, в статье [11] — эффективное торможение.

Отметим, что в статьях [9–11] вычислялась сумма по всем возбужденным состояниям осциллятора. Сечения отдельных переходов не рассматривались.

Настоящая работа посвящена расчету и анализу вне рамок теории возмущений вероятности и сечений возбуждения квантового линейного осциллятора на переходах между стационарными состояниями при столкновении с заряженными частицами.

* E-mail: astval@mail.ru

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

В работе исследуется случай, когда заряженная частица, возбуждающая осциллятор, движется равномерно и прямолинейно со скоростью \mathbf{v} , образующей угол α с осью осциллятора [12]. На рис. 1 представлена диаграмма процесса, ρ — прицельный параметр.

Тогда для фурье-образа напряженности электрического поля, создаваемого нерелятивистским зарядом Ze в месте расположения осциллятора, можно получить

$$\mathbf{E}(\omega, \rho, v) = \frac{2Ze\omega}{v^2} \times \left\{ K_1\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_n + iK_0\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_\tau \right\}, \quad (1)$$

где $\mathbf{e}_{n,\tau}$ — нормальный и тангенциальный (по отношению к вектору скорости $\mathbf{v} = \text{const}$) единичные векторы, ρ — прицельный параметр, $K_{0,1}(z)$ — функции Макдональда нулевого и первого порядка.

Вероятность возбуждения квантового осциллятора на переходе между стационарными состояниями $n \rightarrow m$ определяется формулой [8]

$$W_{mn} = \frac{n!}{m!} \nu^{m-n} \exp(-\nu) |L_n^{m-n}(\nu)|^2. \quad (2)$$

Здесь $L_n^k(\nu)$ — обобщенный полином Лагерра, параметр ν определяется равенством [6, 13]

$$\nu = \frac{\varepsilon}{\hbar\omega_0}, \quad (3)$$

где ε — энергия возбуждения классического осциллятора с той же частотой ω_0 и массой M внешним электрическим полем. Предполагаем, что затуханием осциллятора можно пренебречь. Подробный вывод выражения (2) как функции параметра ν , определенного формулой (3), содержится в работе [14]. Вывод основывается на аналитическом решении уравнения Шредингера для заряженного гармонического осциллятора в поле электромагнитного

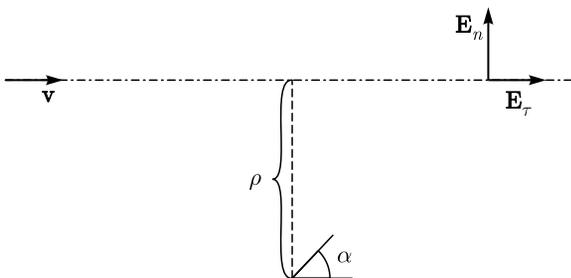


Рис. 1. Диаграмма процесса

импульса путем сдвига его координаты: $x \rightarrow x - \xi(t)$, где $\xi(t)$ — координата классического осциллятора, ассоциированного с квантовым аналогом (имеющим те же параметры).

Для полной вероятности возбуждения квантового осциллятора из основного состояния формула (2) дает

$$W_{tot}(\nu) = 1 - \exp(-\nu). \quad (4)$$

Отметим, что формула (4) совпадает с выражением для вероятности возбуждения квантового перехода при столкновении с заряженной частицей, полученным Ферми в работе [1], если под параметром ν понимать величину

$$\nu \rightarrow \int \frac{J(\omega)\sigma(\omega)}{\hbar\omega} d\omega,$$

где $\sigma(\omega)$ — сечение квантового перехода, $J(\omega)$ — спектральный поток энергии поля заряженной частицы.

Пусть линейный осциллятор направлен вдоль оси x , тогда энергия возбуждения классического осциллятора под действием поля заряженной частицы (1) равна

$$\varepsilon(\rho, v) = \frac{e^2}{2M} |E_x(\omega_0, \rho, v)|^2, \quad (5)$$

где E_x — проекция фурье-образа напряженности поля заряженной частицы на ось осциллятора. Для квадрата модуля этой величины имеем

$$|E_x(\omega_0, \rho, v)|^2 = \left(\frac{2Ze\omega}{v^2}\right)^2 \times \left\{ K_1^2\left(\frac{\omega_0\rho}{v}\right) \sin^2 \alpha \cos^2 \varphi + K_0^2\left(\frac{\omega_0\rho}{v}\right) \cos^2 \alpha \right\}, \quad (6)$$

где α — угол между вектором скорости \mathbf{v} и единичным вектором \mathbf{e}_x в направлении оси осциллятора. В формуле (6) введен азимутальный угол φ , равный углу между вектором \mathbf{e}_n и плоскостью $\mathbf{v} \times \mathbf{e}_x$. Он определяет плоскость траектории движения заряженной частицы. Таким образом, вероятность возбуждения определяется двумя траекторными параметрами ρ и φ , которые входят в выражение для сечения процесса:

$$\sigma_{mn} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_a^\infty W_{mn}(\rho, \varphi) \rho d\rho. \quad (7)$$

Здесь мы ввели параметр «обрезания» $a \approx 1$ ат. ед., который ограничивает область прицельных параметров снизу. Анализ показывает, что зависимостью

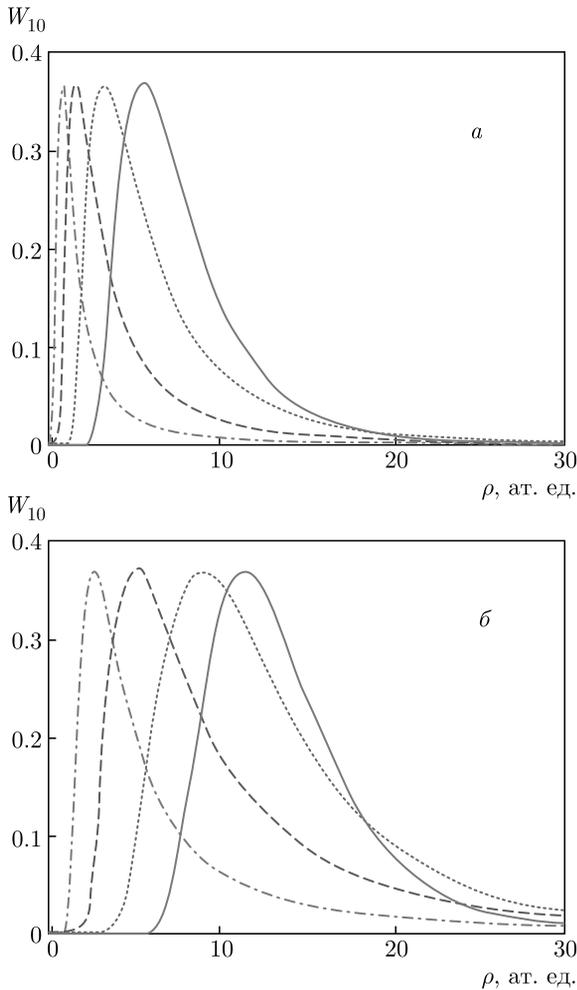


Рис. 2. Вероятность возбуждения перехода $0 \rightarrow 1$ в квантовом осцилляторе под действием НЧ с зарядом $Z = 10$ (а), 30 (б) как функции прицельного параметра, $\varphi = \pi/4$, $\alpha = \pi/2$, для разных скоростей НЧ: сплошная кривая — $v = 0.1$ ат. ед., пунктирная — $v = 0.2$ ат. ед., штриховая — $v = 0.4$ ат. ед., штрихпунктирная — $v = 0.8$ ат. ед.

сечения (7) от величины параметра a при $a \leq 1$ можно пренебречь.

Результаты расчета вероятности возбуждения ЛКО на переходе $0 \rightarrow 1$ представлены на рис. 2 как функции прицельного параметра для различных скоростей и зарядов НЧ. При этом были использованы параметры осциллятора, соответствующие колебаниям молекулы СО в основном электронном состоянии: $M = 12500$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.

Характерно, что рассчитанные с использованием формулы (2) зависимости, изображенные на рис. 2, представляют собой кривые с максимумом, причем $W_{10}^{max} = e^{-1} \approx 0.368$. Отметим, что вероятность возбуждения квантового осциллятора, рассчитанная в

рамках теории возмущений, дает монотонно убывающую функцию прицельного параметра ρ .

Как видно из приведенных графиков, максимум вероятности возбуждения линейного квантового осциллятора (ЛКО) с ростом скорости НЧ смещается в область меньших значений прицельного параметра, при этом ширина максимума уменьшается.

Сечения возбуждения ЛКО между соседними стационарными состояниями $n - 1 \rightarrow n$ как функции скорости налетающей частицы представлены на рис. 3 для зарядов НЧ $Z = 10, 30, 60$.

Анализ графиков показывает, что при возбуждении перехода $n - 1 \rightarrow n$ сечение процесса в максимуме зависит от скорости заряженной частицы пропорционально ее заряду Z , а также величине \sqrt{n} . Кроме того, значение скорости в максимуме определяется соотношением $v_{max} \propto \sqrt{Z}$.

Сечения возбуждения ЛКО из основного состояния в заданные возбужденные, а также полное сечение возбуждения как функции скорости НЧ представлены на рис. 4 для различных зарядов НЧ.

Из приведенных рисунков следует, что максимум сечения возбуждения перехода $0 \rightarrow n$ слабо смещается в область меньших значений скорости с ростом квантового числа n , а величина сечения в максимуме пропорциональна заряду НЧ.

Зависимости полного сечения возбуждения ЛКО из основного состояния от скорости НЧ для различных углов α между вектором скорости и осью ЛКО, вычисленные с помощью формул (4), (7), представлены на рис. 5.

Из рисунка видно, что зависимость сечения возбуждения ЛКО от скорости НЧ с ростом угла α уменьшается в максимуме и более медленно убывает в области больших скоростей.

Полные сечения возбуждения ЛКО с параметрами, отвечающими молекулам СО и NH, представлены на рис. 6.

Видно, что для более легкого ЛКО (NH) сечение возбуждения больше и максимум зависимости от скорости НЧ смещен в область больших скоростей. Численный анализ показывает, что при прочих равных параметрах сечение полного возбуждения ЛКО в максимуме зависимости от скорости зависит от массы осциллятора согласно соотношению $\sigma_{tot}(v_{max}) \propto 1/\sqrt{M}$.

Сравним теперь полученные выше сечения возбуждения квантового осциллятора на переходе $0 \rightarrow 1$ с результатами расчета по теории возмущений. Соответствующее выражение в последнем случае имеет вид [12]

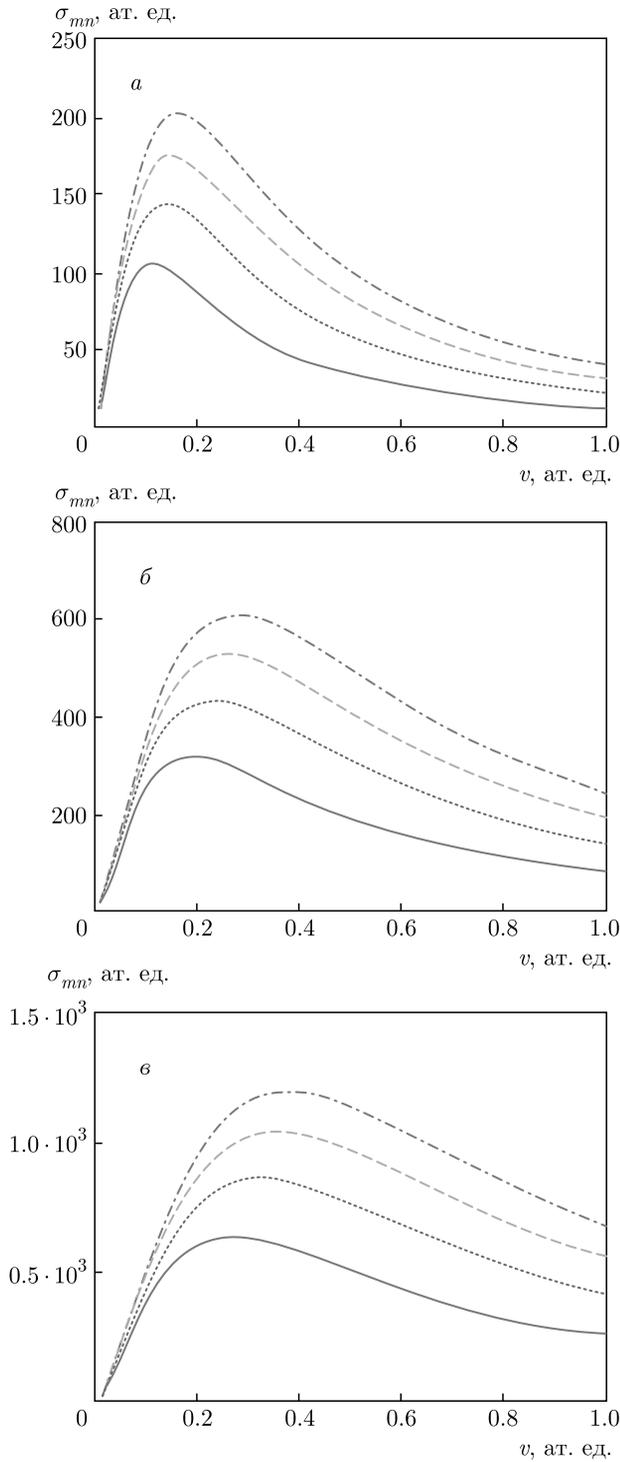


Рис. 3. Сечение столкновительного возбуждения различных переходов в квантовом осцилляторе НЧ с зарядом $Z = 10$ (а), 30 (б), 60 (в) как функция скорости НЧ, сплошные кривые — переход $0 \rightarrow 1$, пунктирные — переход $1 \rightarrow 2$, штриховые — переход $2 \rightarrow 3$, штрихпунктирные — переход $3 \rightarrow 4$, угол между осью осциллятора и вектором скорости НЧ $\alpha = \pi/2$

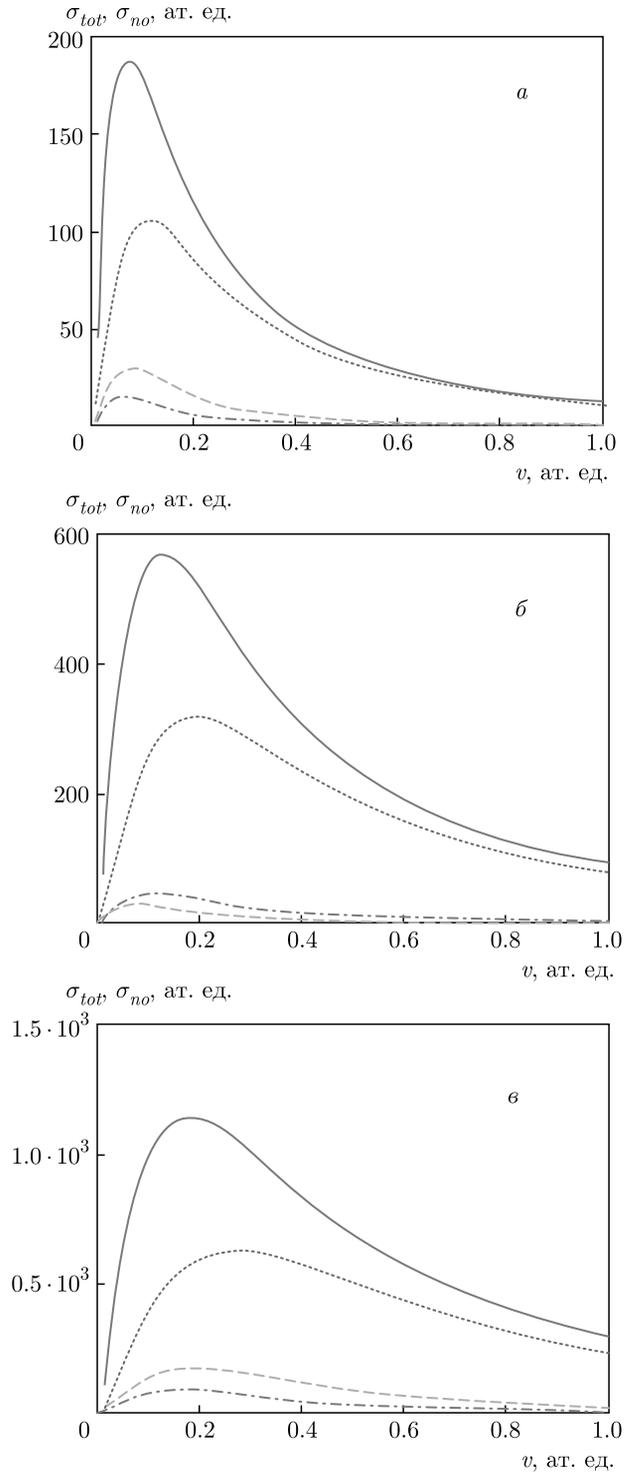


Рис. 4. Сечение возбуждения квантового осциллятора из основного состояния НЧ с зарядом $Z = 10$ (а), 30 (б), 60 (в) как функция скорости НЧ, пунктирные кривые — переход $0 \rightarrow 1$, штриховые — переход $0 \rightarrow 2$, штрихпунктирные — переход $0 \rightarrow 3$, сплошные — полное сечение возбуждения

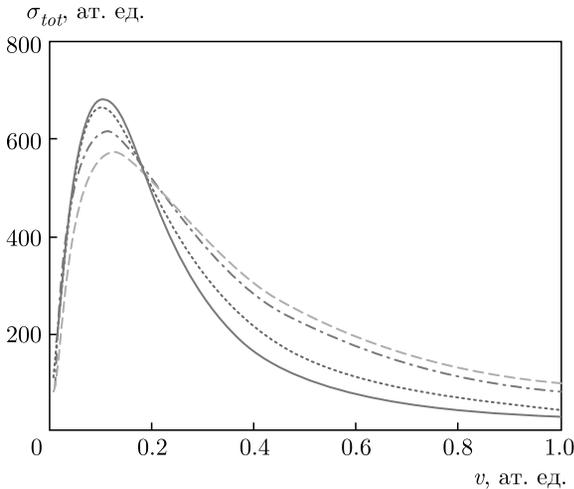


Рис. 5. Зависимости полного сечения возбуждения ЛКО из основного состояния от скорости НЧ для различных углов α : сплошная кривая — $\alpha = 0$, пунктирная — $\alpha = \pi/6$, штриховая — $\alpha = \pi/2$, штрихпунктирная — $\alpha = 2\pi/3$, $Z = 30$

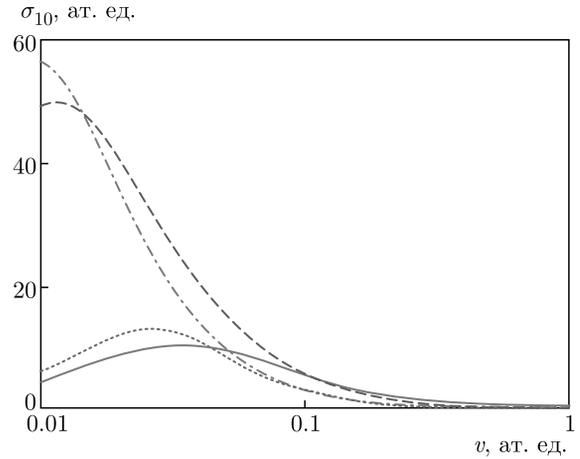


Рис. 7. Сечение возбуждения молекулы СО на колебательном переходе $0 \rightarrow 1$ при столкновении с однозарядным ионом: сплошная кривая ($\alpha = \pi/2$), пунктирная ($\alpha = 0$) — расчет с использованием (8); штриховая кривая ($\alpha = \pi/2$), штрихпунктирная ($\alpha = 0$) — расчет по теории возмущений

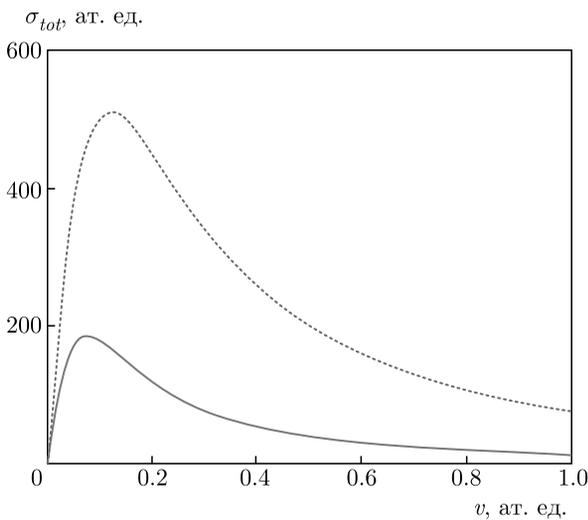


Рис. 6. Сечение полного возбуждения ЛКО с параметрами молекул СО (сплошная кривая, $M = 12500$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.) и NH (пунктирная кривая, $M = 1713$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.), $Z = 10$, $\alpha = \pi/2$

$$\sigma_{10} = \frac{q^2}{2M\omega_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_a^\infty |E_x(\omega_0, \rho, v)|^2 \rho d\rho. \quad (8)$$

Отметим, что при записи (8) было учтено, что сила осциллятора на рассматриваемом переходе равна 1.

Сечения, рассчитанные по формуле (8) и с использованием точного выражения для вероятности возбуждения (2), представлены на рис. 7 для двух значений угла $\alpha = \pi/2, 0$.

Из рис. 7 следует, что в рассматриваемом случае для малых скоростей НЧ ($v < 0.1$ ат. ед.) результат расчета по теории возмущений существенно превышает результат, полученный с помощью точной формулы (8). Для относительно быстрых НЧ ($v > 0.1$ ат. ед.) рассчитанные зависимости совпадают.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием точной формулы в работе рассчитаны и проанализированы вероятность и сечение возбуждения ЛКО в результате соударения с заряженной НЧ, двигающейся равномерно и прямолинейно.

Показано, что полученные зависимости для вероятности процесса представляют собой кривые с максимумом в отличие от результатов расчета в рамках теории возмущений.

Установлено, что величина максимума сечения перехода ЛКО между соседними стационарными уровнями $n - 1 \rightarrow n$ как функция скорости НЧ пропорциональна ее заряду Z , а также величине \sqrt{n} . Значение скорости в максимуме: $v_{max} \propto \sqrt{Z}$.

Максимум сечения возбуждения ЛКО из основного состояния $0 \rightarrow n$ слабо смещается в область меньших значений скорости с ростом квантового числа n , величина сечения пропорциональна заряду НЧ.

Показано, что полное сечение возбуждения ЛКО слабо зависит от угла между вектором скорости НЧ

и осью осциллятора и уменьшается с ростом массы осциллятора M в максимуме зависимости от скорости согласно соотношению $\sigma_{tot}(v_{max}) \propto 1/\sqrt{M}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Fermi, Z. Phys. **29**, 315 (1924).
2. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, Наука, Москва (1979).
3. V. A. Astapenko, A. V. Eletsii, V. P. Kudrya et al., Laser Phys. **10**, 1220 (2000).
4. S. Adamson, V. Astapenko, M. Deminskii et al., Chem. Phys. Lett. **436**, 308 (2007).
5. N. Bohr, H. A. Kramers, and J. C. Slater, Phil. Mag. **47**, 785 (1924).
6. V. A. Astapenko and E. V. Sakhno, Appl. Phys. B **126**, 23 (2020).
7. V. A. Astapenko and E. V. Sakhno, Symmetry **12**, 1293 (2020).
8. J. Schwinger, Phys. Rev. **91**, 728 (1953).
9. P. Sigmund and U. Haagerup, Phys. Rev. A **34**, 892 (1986).
10. Д.Н. Макаров, ЖЭТФ **146**, 711 (2014).
11. Д. Н. Макаров, ЖЭТФ **85**, 7 (2015).
12. В. А. Астапенко, *Взаимодействие излучения с атомами и наночастицами*, Интеллект, Долгопрудный (2010).
13. K. Husimi, Progr. Theor. Phys. **9**, 4 (1953).
14. V. A. Astapenko, F. B. Rosmej, and E. V. Sakhno, arXiv:2009.04233 [physics.atom-ph].

ПОЯВЛЕНИЕ ТОЧКИ ПОВОРОТА В ДИНАМИЧЕСКОМ РЕШЕНИИ РЕЙСНЕРА – НОРДСТРЕМА

*А. А. Шацкий**

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

Поступила в редакцию 10 декабря 2020 г.,
после переработки 10 декабря 2020 г.
Принята к публикации 30 декабря 2021 г.

Рассмотрено самосогласованное точное решение для образующейся в результате аккреции черно-белой дыры Рейснера – Нордстрема. До образования черно-белой дыры в центре системы находится массивный заряженный шар. Исследован вопрос появления точки поворота (отскока) в образующейся черно-белой дыре. Появление точки поворота исследовано на примере решения для аккреции незаряженной сферической пылевой оболочки. Уравнения модели записываются с учетом космологического Λ -члена. В рассмотренной модели и сама черно-белая дыра, и ее точка поворота образуются в уже существующей Вселенной, поэтому черно-белая дыра в модели не является «вечной».

DOI: 10.31857/S0044451021050047

1. ВВЕДЕНИЕ

Существование черных дыр (ЧД), а также механизмы их образования практически давно уже считаются исследованными. При этом математические решения для реальных (вращающихся) черных дыр Керра и заряженных черных дыр Рейснера – Нордстрема показывают наличие в решениях точки поворота. Точкой поворота (или точкой отскока) принято называть точку, в которой траектория свободного падения частицы меняет направление от уменьшения радиальной координаты на направление ее увеличения. При этом интересны именно те точки поворота, которые расположены под обоими горизонтами черной дыры, т. е. под горизонтом Коши — во внутренней R -области пространства.

Существование в стационарном решении для ЧД внутренней точки поворота (далее просто точки поворота) связывают с существованием черно-белой дыры, а не просто черной дыры. Однако механизм появления точки поворота в самосогласованном решении коллапсирующей материи до сих пор не изучен (см., например, [1], § 34.6). Поэтому в моделях возникновения черно-белых дыр по-прежнему остается больше вопросов, чем ответов. Принято считать, что черно-белыми дырами могут быть только

«вечные» черные дыры, т. е. те, которые образовались вместе с рождением Вселенной. Поэтому одной из задач данной работы является обоснование модели, в которой и сама черно-белая дыра, и ее точка поворота могут образоваться в уже существующей Вселенной. Причем белая дыра образуется в новой расширяющейся вселенной, т. е. не в той же самой Вселенной, в которой образуется черная дыра.

В работе будет рассмотрено самосогласованное точное решение для образующейся сферически-симметричной черно-белой дыры Рейснера – Нордстрема. До образования черно-белой дыры в центре системы находится массивный заряженный шар. Появление точки поворота исследовано на примере точного решения для аккреции тонкой незаряженной сферической пылевой оболочки. Уравнения модели будут записаны с учетом космологического Λ -члена.

Ранее исследованием динамики сферических пылевых оболочек в центрально-симметричном электрическом поле занимались многие авторы — см., например, [2–4]. В частности, в работах [4] была исследована топология ЧД Рейснера – Нордстрема с помощью построения диаграмм Картера – Пенроуза, поэтому в настоящей работе мы не рассматриваем диаграммы Картера – Пенроуза и по этому вопросу отсылаем читателя к данному источнику. Исследование же топологии для реальных вращающихся черных дыр было предпринято автором в работе [5].

* E-mail: shatskiyalex@gmail.com

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Пусть в начальный момент никакой черной дыры нет и горизонты отсутствуют. Распределение материи в начальный момент описывается следующей моделью.

В центре системы существует шар, который обладает электрическим зарядом q , радиусом r_q и массой m_q . При этом пусть масса m_q недостаточна для образования черной дыры и гравитационного коллапса шара.

Пусть также в начальный момент на некотором радиусе R_1 покоится сферическая пылевая оболочка с массой m_{dust} . В течение дальнейшей эволюции эта пылевая оболочка начинает свободно падать к центру системы. При этом массы m_{dust} оказывается достаточно для дальнейшего образования черной дыры Рейснера – Нордстрема, еще до достижения оболочкой радиуса r_q . Пусть полная масса системы есть M . Соответствующие заряду q и массе M радиус горизонта черной дыры r_h^+ и радиус горизонта Коши r_h^- в координатах Рейснера – Нордстрема равны¹⁾

$$r_h^\pm = M \pm \sqrt{M^2 - q^2}. \quad (1)$$

Для удобства введем соотношение заряда и массы так, чтобы выполнялись соотношения

$$r_h^- := \beta^2 r_h^+, \quad \beta = \text{const} \leq 1. \quad (2)$$

Согласно (1), для этого необходимо, чтобы

$$q = \kappa M, \quad \kappa := \frac{2\beta}{1 + \beta^2} \leq 1. \quad (3)$$

Также введем параметр γ для связи заряда и массы с радиусом r_q :

$$r_q = \gamma r_h^- = \gamma \beta^2 r_h^+, \quad \gamma = \text{const} < 1. \quad (4)$$

Очевидно, что коэффициент γ должен быть меньше единицы, поскольку появление обоих горизонтов ЧД должно произойти еще до возможного столкновения падающей пылевой оболочки с заряженной сферой, т. е. должны выполняться условия $r_q < r_h^- \leq r_h^+$.

Из приведенных выше выражений получаем

$$r_q = \beta \gamma q = \beta \gamma \kappa M, \quad r_h^- = \beta q, \quad r_h^+ = \frac{q}{\beta}. \quad (5)$$

Ниже будет доказана возможность существования появляющейся в решении точки поворота r_t в промежутке между радиусами r_q и r_h^- .

Для дальнейшего необходимо определиться с ограничением на размер шара r_q . В этом вопросе главным ограничением является напряженность электрического поля E . Максимальная величина напряженности $E = q/r^2$ должна быть меньше величины пробоя вакуума $\sim 10^4$ В/см. Поскольку максимальное значение напряженности достигается около поверхности шара r_q , величина $E_q = q/r_q^2$ должна быть меньше 10^4 В/см. Пусть эта величина равна

$$E_q = 10^3 \text{ В/см} = 3 \cdot (3) \text{ ед. СГСЭ}. \quad (6)$$

Из (5) получаем

$$E_q := \frac{q}{r_q^2} = \frac{\beta^{-2} \gamma^{-2}}{q}. \quad (7)$$

Отсюда можно выразить электрический заряд q как

$$q = \frac{\beta^{-2} \gamma^{-2}}{E_q}. \quad (8)$$

Допустим, величины $\beta^2 = 0.5$, $\gamma = 0.5$, тогда $\kappa = \sqrt{8}/3$ и, если выражение (8) переписать в единицах СГСЭ, то до конца раздела в этих единицах получаем

$$q = \frac{\beta^{-2} \gamma^{-2} c^4}{G E_q} \approx 2.915 \cdot 10^{49} \text{ ед. СГСЭ} \approx 6.073 \cdot 10^{58} e. \quad (9)$$

Соответственно для полной массы ЧД M получаем

$$M = \frac{q}{\kappa \sqrt{G}} \approx 1.197 \cdot 10^{53} \text{ г} \approx 6.02 \cdot 10^{20} M_\odot. \quad (10)$$

Из (5) и (9) для радиуса заряженного шара r_q имеем

$$r_q = \frac{q \beta \gamma \sqrt{G}}{c^2} = \frac{c^2}{\beta \gamma \sqrt{G} E_q} \approx 2.957 \cdot 10^{24} \text{ см} \approx 958\,000 \text{ пк} \sim 1 \text{ Мпк}. \quad (11)$$

Оценим плотность избытка (или недостатка) элементарных зарядов, составляющих заряд q шара радиусом r_q . Согласно (9) и (11), величина этой поверхностной плотности заряда будет всего-навсего $\sigma_q \approx 5.46 \cdot 10^8 e/\text{см}^2 \approx 8.74 \cdot 10^{-7} \text{ Кл/м}^2$.

Если предположить, что материя заряженной сферы имеет плотность порядка 1 г/см^3 , то при $q^2 = G m_q^2$ толщина d_q такой заряженной сферической оболочки, согласно (9) и (11), оказывается равной примерно 70 м. По сравнению с радиусом r_q из

¹⁾ В этой работе, там где не оговорено отдельно, мы используем теоретическую систему единиц, в которой скорость света и гравитационная постоянная равны соответственно $c = 1$ и $G = 1$.

(11) это просто тончайшая пленка, но по сравнению с толщиной слоя, в котором сосредоточен избыток (или недостаток) электронов заряда q (т. е. с размерами атома), это огромная величина.

Можно также вычислить поверхностное натяжение N , которое создает электрическая сила отталкивания для поверхностного заряда q на сфере радиуса r_q :

$$N = \frac{q^2}{4\pi r_q^3} = \frac{\beta^{-2}\gamma^{-2}c^4}{4\pi G r_q} \approx 2.616 \cdot 10^{24} \text{ дин/см.} \quad (12)$$

Если пренебречь гравитационной силой притяжения, то для вычисления минимальной толщины пленки d_{min} , удерживающей заряд своим поверхностным натяжением, необходимо натяжение N разделить на удельную прочность материала пленки. Пусть это будет сталь с удельной прочностью $P_s = 10^{10}$ дин/см². Тогда из (12) получаем

$$d_{min} = \frac{N}{P_s} = \frac{q^2}{4\pi P_s r_q^3} \approx 2.616 \cdot 10^{14} \text{ см.} \quad (13)$$

Однако тогда масса этой стали будет примерно на 13 порядков превышать полную массу M , что невозможно... Таким образом, установление равновесия с помощью компенсации электрической силы отталкивания силой упругости материала невозможно.

Отметим, что сила поверхностного натяжения является почти тангенциальной по отношению к малому элементу поверхности заряженной сферы, поэтому для компенсации радиальной электрической силы сила поверхностного натяжения должна быть гораздо больше электрической силы, причем тем больше, чем больше радиус r_q .

Если вычислить давление P , с которым сила электрического отталкивания давит на поверхность заряженной сферы, то оно оказывается равным

$$P = \frac{q^2}{4\pi r_q^4} \approx 0.88 \text{ дин/см}^2. \quad (14)$$

При столь больших радиусах это очень маленькая величина давления, которое способны выдержать практически любые материалы. Столь большая разница между величиной поверхностного натяжения N и давлением P связана с тем, что $N \propto 1/r_q^3$, а $P \propto 1/r_q^4$, отсюда $P/N \propto 1/r_q$. Поэтому если есть другая радиальная сила, действующая в противоположном направлении (сила гравитации), то этой силой оказывается теоретически возможно уравновесить электрическую силу, см. ниже.

3. ВОЗМОЖНОСТЬ РАВНОВЕСИЯ НА ЗАРЯЖЕННОМ ШАРЕ В НАЧАЛЬНЫЙ МОМЕНТ

Рассмотрим возможность установления равновесия заряженной сферы с массой m_q , радиусом r_q и зарядом q . Это равновесие будет поддерживаться компенсацией электростатического отталкивания зарядов на сфере самогравитацией сферы. Такое равновесие возможно только вне гравитационного радиуса сферы. Как будет видно из дальнейших вычислений, горизонт черной дыры при таких массах и зарядах вообще не сможет образоваться.

Как известно из курса общей физики, потенциал электрического поля A_t должен быть константой внутри заряженной сферы, а вне сферы — убывать обратно пропорционально радиусу. Поэтому электрическое поле внутри сферы должно быть равно нулю, а вне сферы — равно q/r^2 . Но нас будет интересовать электрическое поле на самой сфере. Очевидно, что оно равно среднему арифметическому от пределов поля внутри и вне сферы при стремлении радиусов к r_q , т. е. на самой сфере электрическое поле есть $q/(2r_q^2)$.

Все то же самое касается и гравитационного заряда (массы), но мы будем считать, что масса равномерно распределена внутри конечного слоя d — физической толщины пленки сферы, причем ниже будет показано, что толщина d должна быть много меньше радиуса сферы r_q , но все же d является макроскопическим размером. В то же время заряд q сосредоточен исключительно на поверхности сферы — в слое, толщина которого имеет атомные размеры. Будем считать, что заряд определяется недостатком электронов на сфере, т. е. положительный заряд ядер кристаллической решетки материи сферы не до конца скомпенсирован зарядом электронов. Размер электронов и ядер много меньше толщины сферы d , поэтому по разные стороны от внешней поверхности сферы гравитационное поле ведет себя одинаково, а электрическое поле под внешней поверхностью сферы принимает нулевое значение, в соответствии со сказанным выше.

Рассмотрим на сфере элемент заряда e и соответствующий ему элемент массы μ , причем

$$e := \xi q, \quad \mu := \xi m_q, \quad \xi = \text{const} \ll 1. \quad (15)$$

Запишем теперь уравнения движения заряженной частицы в гравитационном и электромагнитном полях (см. [6], § 90):

$$\begin{aligned} \mu \frac{du^i}{ds} &= eF^{ij}u_j - \mu \Gamma_{km}^i u^k u^m, \\ \Gamma_{km}^i &= \frac{1}{2}g^{in} \left(\frac{\partial g_{nk}}{\partial x^m} + \frac{\partial g_{nm}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{km}}{\partial x^n} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь F_{ik} — тензор электромагнитного поля, u^k — 4-вектор скорости частицы с массой μ и зарядом e , g_{in} — компоненты метрического тензора.

Выбираем для этого раздела статичную систему отсчета и метрику Рейснера – Нордстрема для нее:

$$\begin{aligned} ds^2 &= f dt^2 - f^{-1} dr^2 - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2), \\ f(r) &:= 1 - \frac{2m}{r} + \frac{q^2}{r^2}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для этой метрики имеем

$$\begin{aligned} u^k &= \delta_t^k u^t, \quad u^t = f^{-1/2}, \quad F_{ik} := \partial_i A_k - \partial_k A_i, \\ A_i &= \delta_t^i A_t. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь A_i — 4-вектор-потенциал электромагнитного поля, $A_t = q/r$ при $r \geq r_q$ и $A_t = q/r_q$ при $r \leq r_q$.

Все величины будут зависеть только от радиуса и уравнение (16) переписывается в виде

$$\mu \frac{du^r}{ds} = -e \sqrt{f} F_{rt} - \frac{\mu}{2} \frac{df}{dr}. \quad (19)$$

В соответствии со сказанным выше, на самой сфере получаем для единственной компоненты тензора F_{ik} :

$$F_{rt}|_{r_q} = -0.5q/r_q^2.$$

Кроме того, коэффициент 0.5 должен появиться и в члене с q^2 у производной $\partial_r f$ формулы (19), которая для точки равновесия переписывается в виде

$$\begin{aligned} \mu \frac{du^r}{ds} \Big|_{r=r_q} &= 0.5 \frac{eq \sqrt{f(r_q)}}{r_q^2} - \frac{\mu}{2} \times \\ &\times \left(\frac{2m_q}{r_q^2} - 0.5 \frac{2q^2}{r_q^3} \right) = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Отсюда видно, что эта точка равновесия является устойчивой, так как положительная сила отталкивания убывает как $1/r_q^3$, а отрицательная сила притяжения — как $1/r_q^2$.

С помощью выражений (15) заменяем в уравнении (20) величины (e, μ) на (q, m_q) и получаем

$$\begin{aligned} (4m_q^4 - q^4)r_q^2 - 2q^2 m_q (2m_q^2 - q^2)r_q + \\ + q^4 (m_q^2 - q^2) = 0, \end{aligned} \quad (21)$$

$$r_q(q, m_q) = \frac{m_q q^2 (2m_q^2 - q^2) + q^4 \sqrt{2m_q^2 - q^2}}{4m_q^4 - q^4}. \quad (22)$$

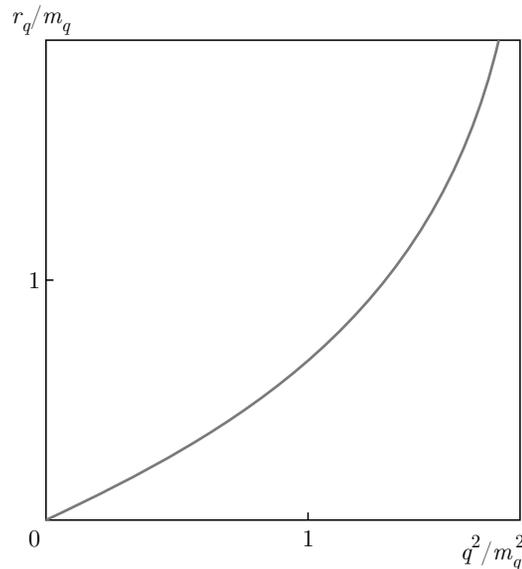


Рис. 1. Зависимость радиуса заряженной сферы r_q от q^2 в единицах массы m_q , см. (22)

Из выражения (22) видно, что функция $r_q(q)$ является возрастающей, см. рис. 1. При этом поскольку согласно (5) нас интересуют только $r_q < q$, ограничение на заряд q принимает вид

$$m_q^2 < q^2 < 2m_q^2. \quad (23)$$

Поэтому при нахождении корня r_q в уравнении (21) мы выбрали знак «+». Из формулы (23) следует, что шар с массой m_q и зарядом q не может образовать черную дыру, иначе выражения (1) для горизонтов стали бы комплексными величинами.

4. УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ

Более удобной для дальнейшего аналитического исследования оказывается синхронно-сопутствующая материи система отсчета²⁾, описываемая координатами τ и R :

$$\begin{aligned} ds^2 &= d\tau^2 - e^{\lambda(\tau,R)} dR^2 - r^2(\tau, R) \times \\ &\times (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \end{aligned} \quad (24)$$

Пусть аккрецирующая материя представляет собой гравитирующую пыль с плотностью энергии ε , распределение которой зависит только от радиуса r . Учтем также в уравнениях влияние космологического Λ -члена на динамику материи в нашей модели.

²⁾ Синхронно-сопутствующая материи система отсчета применима к пылевидной материи, благодаря отсутствию у пыли давления (временная компонента метрики равна 1).

Тогда полный тензор энергии-импульса вне сферы радиусом r_q представляется в следующем виде:

$$T_m^n = \begin{pmatrix} \frac{q^2}{8\pi r^4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{q^2}{8\pi r^4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{q^2}{8\pi r^4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{q^2}{8\pi r^4} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \delta_m^n \Lambda. \quad (25)$$

Первое слагаемое в правой части (25) соответствует тензору энергии-импульса электромагнитного поля точечного заряда q , второе слагаемое — тензору энергии-импульса пыли, а слагаемое $\delta_m^n \Lambda$ — это космологический Λ -член. При этом внутри сферы радиусом r_q тензор энергии-импульса электромагнитного поля должен быть нулевым, так как электрическое поле внутри заряженной сферы отсутствует. Что же касается тензора энергии-импульса электромагнитного поля на самой сфере радиусом r_q , то, в соответствии со сказанным в разд. 3, на этой сфере все компоненты тензора нужно разделить на 2, так как электрическое поле на самой сфере есть среднее между величиной поля внутри сферы и вне сферы.

Благодаря гидродинамической независимости слоев пыли друг относительно друга, можно проинтегрировать уравнения движения для пыли аналогично решению задачи Толмена (см. [7, 8]). По сути, это та же задача Толмена в центрально-симметричном электрическом поле для незаряженной пыли.

Уравнения Эйнштейна, соответствующие метрике (24), можно записать в виде³⁾

$$8\pi T_\tau^\tau = 8\pi\varepsilon + \frac{q^2}{r^4} + 8\pi\Lambda = \frac{1}{r^2} [1 + rr_{,\tau}\lambda_{,\tau} + r_{,\tau}^2 - e^{-\lambda}(2rr_{,RR} + r_{,R}^2 - rr_{,R}\lambda_{,R})], \quad (26)$$

$$8\pi T_R^R = \frac{q^2}{r^4} + 8\pi\Lambda = \frac{1}{r^2} (1 + 2rr_{,\tau\tau} + r_{,\tau}^2 - e^{-\lambda}r_{,R}^2), \quad (27)$$

³⁾ Вывод уравнений (26)–(29) можно посмотреть, например, в [6] (§ 100, задача 5).

$$8\pi T_\tau^R = 0 = (2r_{,R\tau} - r_{,R}\lambda_{,\tau}) \frac{e^{-\lambda}}{r}, \quad (28)$$

$$8\pi T_\theta^\theta = 8\pi T_\varphi^\varphi = -\frac{q^2}{r^4} + 8\pi\Lambda = \frac{r_{,\tau\tau}}{r} + \frac{\lambda_{,\tau\tau}}{2} + \frac{\lambda_{,\tau}^2}{4} + \frac{r_{,\tau}\lambda_{,\tau}}{2r} - \left(r_{,RR} - \frac{1}{2}r_{,R}\lambda_{,R}\right) \frac{e^{-\lambda}}{r}. \quad (29)$$

Интегрируя по времени уравнение (28), получаем

$$e^{-\lambda}r_{,R}^2 = F_1(R). \quad (30)$$

Функция $F_1(R)$, как будет видно ниже, определяет начальные условия для распределения скорости пыли.

Подставляя (30) в уравнение (27), находим, что

$$\frac{q^2}{r^2} + 8\pi\Lambda r^2 = \frac{(rr_{,\tau})_{,\tau}}{r_{,\tau}} - F_1 + 1. \quad (31)$$

Умножая это уравнение на $r_{,\tau}$ и интегрируя затем по времени, получаем

$$\frac{q^2}{r} - \frac{8\pi}{3}\Lambda r^3 + r(1 - F_1) + rr_{,\tau}^2 = F_2(R). \quad (32)$$

Функция $F_2(R)$, как будет видно ниже, определяет начальные условия для распределения плотности пыли.

5. НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Далее индексом « i » будем обозначать все величины в начальный момент времени $\tau = 0$.

Выберем в начальный момент масштаб координаты R в (24) так, что

$$r_i := R. \quad (33)$$

Это возможно сделать в случае монотонного изменения функции r по координате R в начальный момент.

Будем считать также, что в начальный момент вся материя покоится и все производные по τ равны нулю:

$$r_{,\tau}|_i = 0. \quad (34)$$

Тогда из (32) получаем

$$F_2(R) = \frac{q^2}{R} - \frac{8\pi}{3}\Lambda R^3 + R(1 - F_1) \quad (35)$$

или

$$F_1(R) = 1 - \frac{F_2}{R} + \frac{q^2}{R^2} - \frac{8\pi}{3}\Lambda R^2. \quad (36)$$

Умножая уравнение (26) на $r^2 r_{,R}$ и выражая $\lambda_{,\tau}$ из уравнения (28), получаем

$$8\pi\epsilon r^2 r_{,R} = \left[\frac{q^2}{r} - \frac{8\pi}{3} \Lambda r^3 + r(1-F_1) + r r_{,\tau}^2 \right]_{,R}. \quad (37)$$

Сопоставляя это выражение с (32), видим, что

$$8\pi\epsilon r^2 r_{,R} = \frac{dF_2}{dR}. \quad (38)$$

Из уравнения (38) заключаем, что величина $8\pi\epsilon r^2 r_{,R}$ не зависит от времени:

$$8\pi\epsilon r^2 r_{,R} = 8\pi\epsilon_i r_i^2. \quad (39)$$

Введем массовую функцию $m(R)$:

$$m(R) := \int_0^R 4\pi\epsilon_i R^2 dR = \int_0^{r_i} 4\pi\epsilon r^2 dr. \quad (40)$$

В нашей модели какая-либо материя и электрическое поле при радиусах, меньших r_q , отсутствуют (кроме Λ -члена), а на радиусе r_q находится заряженная тонкая пленка с массой m_q , поэтому⁴⁾ $m(r_q^-) \equiv 0$ и $m(r_q^+) \equiv m_q$ и выражение (40) можно интегрировать не от нуля, а от r_q^- , или от r_q^+ :

$$m(R > r_q^-) = \int_{r_q^-}^R 4\pi\epsilon_i R^2 dR, \quad (41)$$

$$m(R > r_q^+) = m_q + \int_{r_q^+}^R 4\pi\epsilon_i R^2 dR. \quad (42)$$

Интегрируя выражение (38) в пределах от r_q^- до R и от r_q^+ до R , из (41), (42) убеждаемся, что

$$2m(R > r_q^-) = F_2(R > r_q^-) - F_2(r_q^-), \quad (43)$$

$$2m(R > r_q^+) - 2m_q = F_2(R > r_q^+) - F_2(r_q^+). \quad (44)$$

Для получения значений F_1 и F_2 в точке r_q учтем, что заряженная сфера находится в равновесии, поэтому там должно быть $r_{,\tau} = 0$ и $r_{,\tau\tau} = 0$. Кроме того, под заряженной сферой (на r_q^-) электрическое поле отсутствует (т. е. там должны быть исключены члены с q^2), а сразу над заряженной сферой электрическое поле равно q/r_q^2 , поэтому на самой заряженной сфере члены с q^2 должны быть умножены

⁴⁾ Индексы «-» и «+» у радиуса r_q означают нижний и верхний пределы, т. е. под и над заряженной пленкой с массой m_q соответственно.

на 1/2. Тогда из уравнений (27), (30) и (35) получаем на самой заряженной сфере

$$F_1(r_q) = 1 - \frac{q^2}{2r_q^2} - 8\pi\Lambda r_q^2, \quad (45)$$

$$F_2(r_q) = \frac{q^2}{r_q} + \frac{16\pi\Lambda}{3} r_q^3. \quad (46)$$

При этом, как было сказано в разд. 2, на радиусе самого заряда масса материи m_q уже накопилась полностью, поэтому в вычислениях необходимо использовать выражения для r_q^+ . Тогда из выражений (42), (44) и (46) получаем для $F_2(R > r_q^+)$:

$$\begin{aligned} F_2(R > r_q^+) &= \frac{q^2}{r_q} + \int_{r_q^+}^R 8\pi\epsilon_i R^2 dR + \frac{16\pi\Lambda}{3} r_q^3 = \\ &= \frac{q^2}{r_q} + 2m_{dust}(R) + \frac{16\pi\Lambda}{3} r_q^3. \end{aligned} \quad (47)$$

Введем также массу $m^\Lambda(R)$, связанную с Λ -членом:

$$m^\Lambda(R) := \int_0^R 4\pi\Lambda R^2 dR = \frac{4\pi}{3} \Lambda R^3. \quad (48)$$

Из (40) видно, что учет космологического Λ -члена можно свести к вычитанию из массы $m(R)$ величины $4\pi\Lambda R^3/3$. Согласно космологическим наблюдениям $\Lambda \sim 10^{-29}$ г/см³, поэтому на масштабах порядка r_q , определяемых выражением (11), масса, связанная с Λ -членом, примерно на 8 порядков меньше полной массы M (см. (10)). Это значит, что при $R \sim r_q$ учет космологического Λ -члена необязателен.

6. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ

В сопутствующих координатах определением радиусов горизонтов r_h^\pm является равенство единице модуля инвариантной скорости V :

$$V^2|_{r_h^\pm} = 1, \quad V^2(\tau, R) := \frac{r_{,\tau}^2 e^\lambda}{r_{,R}^2}. \quad (49)$$

Здесь функция $V^2(\tau, R)$ является квадратом инвариантной скорости, см. [3,9]. С помощью выражения (30) уравнение (49) переписываем в виде

$$r_{,\tau}^2|_{r_h^\pm} = F_1(R). \quad (50)$$

Выражая с помощью (36) в уравнении (32) функцию F_1 через F_2 , переписываем (32) в виде, удобном для интегрирования и получения функции $r(\tau, R)$:

$$r_{,\tau} = \pm \sqrt{\left(\frac{F_2}{r} - \frac{q^2}{r^2} + \frac{8\pi\Lambda r^2}{3}\right) - \left(\frac{F_2}{R} - \frac{q^2}{R^2} + \frac{8\pi\Lambda R^2}{3}\right)}. \quad (51)$$

Из этого выражения, в частности, видно, что динамика частицы зависит только от распределения материи под радиусом нахождения самой частицы и не зависит от материи над этим радиусом.

Из (51) с учетом (36) и (50) получаем уравнение для вычисления радиусов горизонтов r_h^\pm :

$$1 - \frac{F_2}{r_h^\pm} + \frac{q^2}{r_h^{\pm 2}} - \frac{8\pi}{3}\Lambda r_h^{\pm 2} = 0. \quad (52)$$

Это выражение без учета Λ -члена практически эквивалентно равенству $f(r_h^\pm) = 0$ из определения (17), т. е. функция F_2 имеет смысл удвоенной массы m в сопутствующих материи координатах. Поэтому далее мы пренебрегаем Λ -членом и из (52) получаем аналог выражения (1) для радиусов горизонтов в сопутствующих материи координатах:

$$r_h^\pm = \frac{1}{2}F_2 \pm \sqrt{\frac{1}{4}F_2^2 - q^2}. \quad (53)$$

Отсюда в соответствии с выражением (3) имеем

$$q = \frac{\kappa F_2}{2}, \quad \kappa := \frac{2\beta}{1 + \beta^2}. \quad (54)$$

Из уравнения (51) можно получить две точки остановки пылевой оболочки — это точки поворота, при которых $r_{,\tau} = 0$. Из (51) сразу видно тривиальную точку остановки — это просто начальная точка $r_i := R$, с которой пылевая оболочка начинает движение. А для искомой второй точки остановки из (51) получаем

$$r_t = \frac{q^2}{F_2 - q^2/R} = \frac{\kappa q}{2 - \kappa q/R}. \quad (55)$$

Отсюда видно, что $r_t \geq 0.5\kappa q$, причем равенство достигается только при $q/R \rightarrow 0$.

Рассмотрим сначала движение пробных частиц под внешней пылевой оболочкой. Пробные частицы не могут образовать горизонта, согласно (47) и (55) для них

$$F_2^0 = \frac{q^2}{r_q}, \quad r_t^0 = \frac{r_q R}{R - r_q}. \quad (56)$$

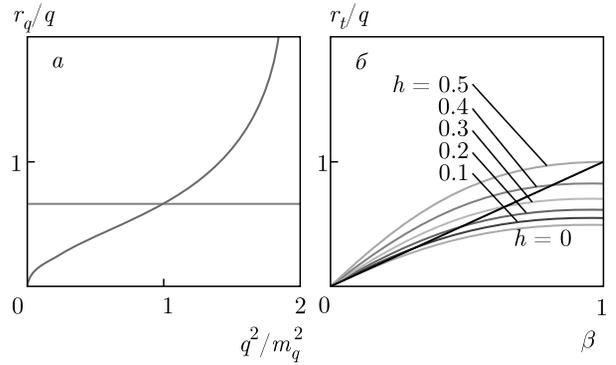


Рис. 2. а) Зависимость r_q/q от q^2/m_q^2 . б) Зависимости r_t/q от β при разных h для неравенства (59)

Поэтому в случае $r_q < R < 2r_q$ для пробных частиц радиус остановки r_t^0 даже больше первоначального радиуса r_i , что означает направление их движения — наружу. Соответственно в диапазоне $2r_q < R < \infty$ пробные частицы начнут двигаться внутрь. Для точки остановки пробной частицы $r_t^0 \rightarrow r_q$ из (56) получаем $R \rightarrow \infty$. Таким образом, сферические слои пробных частиц при движении будут постоянно пересекаться друг с другом.

Теперь перейдем к рассмотрению непробных частиц пылевой сферы с массой m_{dust} , радиус которой равен R_1 в начальный момент. В соответствии с (5), условие расположения радиуса точки поворота r_t для частиц пылевой сферы между радиусом сферы заряда r_q и радиусом горизонта Коши r_h^- принимает вид

$$r_q = \beta\gamma q < r_t < r_h^- = \beta q, \quad m_q < q. \quad (57)$$

Вводя обозначение

$$h := \frac{\kappa q}{2R_1} \quad (58)$$

и учитывая (22), (55), переписываем (57) в виде

$$\frac{r_q}{q} = \frac{m_q q(2m_q^2 - q^2) + q^3 \sqrt{2m_q^2 - q^2}}{4m_q^4 - q^4} < \frac{r_t}{q} = \frac{\beta}{(1 + \beta^2)(1 - h)} < \beta, \quad \frac{q}{m_q} > 1. \quad (59)$$

Диапазон параметров, соответствующих выполнению этих неравенств, можно определить из графиков, представленных на рис. 2.

Здесь также стоит рассмотреть одно кажущееся противоречие, связанное с возможным пересечением слоев пыли. Как было показано для пробных частиц, они не достигают радиуса r_q при конечных значениях R . То же самое можно утверждать и для внутренних слоев пылевой оболочки, поскольку для

этих внутренних слоев гравитационный потенциал еще недостаточен даже для образования горизонтов ЧД. Поэтому в какой-то момент внутренние слои пылевой оболочки начнут движение от центра. При этом внешние слои пылевой оболочки обладают уже достаточным гравитационным потенциалом для образования горизонтов ЧД и достижения точки поворота r_t . Таким образом, внутренние слои в какой-то момент пересекутся со внешними слоями и поменяются ролями. Теоретически наша модель не может корректно работать после пересечения непробных слоев пыли, но практически мы имеем дело с достаточно тонкой пылевой оболочкой, толщина которой выбрана нами несоизмеримо меньше радиуса r_q , см. (11). Поэтому под и над этой тонкой пылевой оболочкой мы можем пренебречь внутренним пересечением ее слоев. А внутри пылевой оболочки будет постоянно происходить перемешивание ее внутренних и внешних слоев. В целом это не должно повлиять на динамику модели. Кроме того, мы можем слегка модифицировать нашу модель и считать, что массивные слои пыли состоят всего из одного слоя, причем размеры каждой «пылинки» в этом слое порядка толщины всего слоя пыли d_{dust} , при этом $d_{dust} \ll r_q$. В этом случае никакого пересечения слоев пыли не будет и каждая массивная «пылинка» будет двигаться в самосогласованном гравитационном поле. Согласно оценкам разд. 2, в нашей модели $m_{dust} \sim m_q \sim M$, поэтому при плотности материи «пылинок» $\sim 1 \text{ г/см}^3$ можно получить ограничение на размер «пылинок»: $d_{dust} \lesssim d_q \approx 70 \text{ м}$. Поэтому наши «пылинки» в пылевом слое могут быть просто мелкими астероидами или булыжниками.

7. ПОДБОР ПОДХОДЯЩИХ ПАРАМЕТРОВ

Учитывая (23), далее обозначим

$$\alpha := \frac{q}{m_q} > 1. \quad (60)$$

Для того чтобы электростатическо-гравитационное равновесие заряда q на шаре с массой m_q и радиусом r_q стало возможным, необходимо подобрать параметры α , β и h так, чтобы неравенства (59) были выполнены. Это возможно, например, при параметрах

$$\begin{aligned} \alpha^2 &= 1.1, & \beta &= 0.9, & h &= 0.4, \\ \Rightarrow \frac{r_q}{q} &\approx 0.731 < \frac{r_t}{q} &\approx 0.829, & & & (61) \\ \kappa &\approx 0.997, & \frac{R_1}{r_q} &\approx 1.706 & & \end{aligned}$$

или при параметрах

$$\begin{aligned} \alpha^2 &= 1.01, & \beta &= 0.8, & h &= 0.3, \\ \Rightarrow \frac{r_q}{q} &\approx 0.673 < \frac{r_t}{q} &\approx 0.697, & & & (62) \\ \kappa &\approx 0.988, & \frac{R_1}{r_q} &\approx 2.447. & & \end{aligned}$$

Таким образом, задачу вычисления равновесия заряда q на шаре можно считать решенной.

8. АККРЕЦИЯ МАТЕРИИ НА УЖЕ СУЩЕСТВУЮЩУЮ ЧЕРНУЮ ДЫРУ РЕЙСНЕРА – НОРДСТРЕМА

Аккрецию пылевой оболочки на заряженный шар, находящийся в равновесии, в отсутствие ЧД мы рассмотрели. Рассмотрим теперь аккрецию пылевой оболочки на ЧД Рейснера – Нордстрема.

В соответствии с (1) для любой заряженной ЧД с массой M и зарядом q верно неравенство

$$r_h^- \leq q \leq M \leq r_h^+. \quad (63)$$

Но тогда отсюда следует, что если в начальный момент ЧД уже существует и в дальнейшем ее заряд не меняется, а увеличивается только ее масса, то для любых двух моментов времени a и b можно утверждать, что всегда будет выполняться неравенство

$$r_{ha}^- \leq r_{hb}^+. \quad (64)$$

Здесь индексы « a » и « b » соответствуют радиусам горизонтов ЧД, которые будут у нее в соответствующие (любые) моменты времени. То есть ситуация, когда в какой-то момент времени a внутренний горизонт Коши окажется больше, чем внешний горизонт ЧД в какой-то другой момент времени b , невозможна. Отсюда следует, что независимо от особенностей аккреции незаряженной материи на ЧД, точка поворота у ЧД будет только одна, поэтому ситуация, когда еще одна точка поворота возникла бы над первоначальным горизонтом ЧД (в результате образования еще одной внешней T -области), невозможна.

9. ОБСУЖДЕНИЕ

Итак, образование еще одной точки поворота для заряженной ЧД невозможно уже после образования самой ЧД. Поэтому обязательным начальным условием для образования точки поворота является отсутствие самой ЧД в начальный момент. Следовательно, возникновение новой черной дыры и новой вселенной (вместе с возникновением белой дыры) возможно только в момент появления горизонтов новой ЧД Рейснера – Нордстрема (или, возможно, ЧД Керра).

Поэтому рассмотренный выше механизм образования точки поворота в ЧД Рейснера – Нордстрема является единственным для такой ЧД. То есть в нашей модели в начальный момент есть заряженный шар, заряд и вся материя этого шара сосредоточены в тонкой заряженной сферической пленке. Вне этого шара материя отсутствует вплоть до некоторого радиуса $r_i = R_1$. На этом радиусе R_1 покоится пылевая сферическая оболочка с массой m_{dust} , толщиной этой пылевой сферы d_{dust} мы пренебрегаем (по сравнению с радиусом r_q). Горизонты в начальный момент отсутствуют (черной дыры нет). Материей вне радиуса $r_i = R_1$ мы не интересуемся.

В последующие моменты времени пылевая сфера под действием гравитации начинает падать к центру (в сторону заряженного шара). В некоторый момент пылевая сфера достигает своего гравитационного радиуса r_h^+ , см. (53), и в следующий момент оказывается под горизонтом образовавшейся черной дыры Рейснера – Нордстрема.

Когда пылевая сфера достигает радиуса точки поворота, то согласно (49) ее скорость V уменьшается до нуля, а затем пылевая сфера отскакивает. . . в другую вселенную. Так происходит, потому что пылевая сфера уже находится во внутренней R -области (под обоими горизонтами ЧД). Поэтому обратно пылевая сфера вылететь уже не может, а решение говорит о том, что ее радиус должен увеличиваться после отскока. То есть единственной возможностью остается вылет пылевой сферы в другую вселенную. Это событие является моментом образования новой белой дыры и новой расширяющейся вселенной. По-видимому, вселенная, в которую вылетает пылевая сфера, появляется вместе с образованием обоих горизонтов ЧД Рейснера – Нордстрема.

Один из наиболее интересных выводов, которые можно сделать, состоит в том, что падающая пылевая сфера в рассмотренной модели так и не достигает заряженного шара радиусом r_q . Это происходит потому, что точка поворота для пылевой сферы r_t находится вне заряженного шара. Поэтому вне заряженного шара возникнет черно-белая дыра Рейснера – Нордстрема со всеми ее горизонтами и R - T -областями. По-видимому, внутри заряженного шара радиусом r_q ничего измениться не должно: электрическое поле и сингулярность отсутствуют даже после образования снаружи шара ЧД Рейснера – Нордстрема. При этом метрические коэффициенты в модели должны оставаться везде такими, чтобы постоянно и непрерывно сшивались две области — внутри и вне заряженного шара.

Таким образом, в работе была предложена модель, в которой и сама черно-белая дыра, и ее точка поворота образуются в уже существующей Вселенной, т.е. черно-белая дыра в модели не является «вечной». Решить аналитически аналогичную самосогласованную задачу аккреции для реальной вращающейся черной дыры Керра было бы практически невозможно ввиду ее сложности. Однако можно сделать предположение, что образование новой черно-белой дыры Керра при коллапсе вращающейся звезды имеет похожий механизм. Важным отличием от динамического решения Рейснера – Нордстрема является то, что в решении Керра нет ограничений, рассмотренных в разд. 2, на величину электрического поля, а значит, на размеры и массу черно-белой дыры. Особенности возникающей сложной топологии в черно-белой дыре Керра были рассмотрены, например, в работах [5, 10, 11].

Благодарности. Автор благодарен организаторам и всем участникам семинаров по гравитации и космологии им. А. Л. Зельманова в Государственном астрономическом институте им. П. К. Штернберга Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова за вопросы, обсуждения и высказанные ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ч. Мизнер, К. Торн, Дж. Уилер, *Гравитация*, т. 3, Мир, Москва (1977).
2. D. A. Tretyakova, A. A. Shatskiy, I. D. Novikov, and S. Alexeyev, *Phys. Rev. D* **85**, 124059 (2012).
3. А. А. Шацкий, А. Г. Дорошкевич, Д. И. Новиков, И. Д. Новиков, *ЖЭТФ* **137**, 268 (2010) [A. A. Shatskiy, A. G. Doroshkevich, D. I. Novikov, and I. D. Novikov, *JETP* **110**, 235 (2010)].
4. V. A. Berezin and V. I. Dokuchaev, arXiv:gr-qc/1404.2726, gr-qc/1404.2727.
5. А. А. Шацкий, *ЖЭТФ* **157**, 487 (2020) [A. A. Shatskiy, *JETP* **130**, 409 (2020)].
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, т. 2, Наука, Москва (1988).
7. R. C. Tolman, *Proc. Nat. Acad. Sci. US* **20**, 169 (1934).
8. J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **56**, 455 (1939).
9. А. Шацкий, А. Ю. Андреев, *ЖЭТФ* **116**, 353 (1999).
10. B. Carter, *Phys. Lett.* **21**, 423 (1966).
11. B. Carter, *Comm. Math. Phys.* **10**, 280 (1968).

РЕЛАКСАЦИОННЫЙ ВКЛАД СИСТЕМЫ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ В МОДУЛИ УПРУГОСТИ ЛЕГИРОВАННЫХ ФЛЮОРИТОВ

М. Н. Сарычев^a, *А. С. Бондаревская*^a, *И. В. Жевстовских*^{a,b}, *В. А. Уланов*^{c,d},
Г. С. Шакуров^d, *А. В. Егранов*^{e,f}, *В. Т. Суриков*^g, *Н. С. Авержиев*^h, *В. В. Гудков*^{a,i*}

^a Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, Россия

^b Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620137, Екатеринбург, Россия

^c Казанский государственный энергетический университет, 420066, Казань, Россия

^d Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского
ФИЦ Казанский научный центр Российской академии наук, 420029, Казань, Россия

^e Институт геохимии им. А. П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук
664033, Иркутск, Россия

^f Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, Россия

^g Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия

^h Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

ⁱ Южно-Уральский государственный университет, 454080, Челябинск, Россия

Поступила в редакцию 30 декабря 2020 г.,
после переработки 27 января 2021 г.
Принята к публикации 28 января 2021 г.

Представлены результаты исследований температурных зависимостей поглощения и скорости ультразвуковых волн в кристаллах $\text{CaF}_2 : \text{Cr}$ и $\text{CaF}_2 : \text{Ni}$, в которых ионы Cr^{2+} и Ni^{2+} замещают кальций, образуя ян-теллеровские комплексы $[\text{CrF}_8]^{6-}$ и $[\text{NiF}_8]^{6-}$. Ионы Cr^{2+} и Ni^{2+} в структуре флюорита в основном состоянии обладают трехкратным орбитальным вырождением, описываются задачей $T \otimes (e + t_2)$ эффекта Яна – Теллера и имеют адиабатический потенциал, заданный в пятимерном пространстве тригональных и тетрагональных симметризованных координат, нижний лист которого представляет собой односвязную поверхность с орторомбическими минимумами, разделенными потенциальными барьерами. На температурных зависимостях поглощения и скорости ультразвука в области низких температур обнаружены аномалии, характерные для релаксационных вкладов систем ян-теллеровских комплексов. Проанализировано влияние туннельных механизмов релаксации (прямых и двухфононных переходов) на величину ян-теллеровского вклада в комплексные модули упругости и на погрешность определения времени релаксации. На основе подхода, учитывающего как туннельные, так и активационные механизмы релаксации, в кристаллах $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ и $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$ определены значения энергии активации и константы, характеризующие эти механизмы релаксации.

DOI: 10.31857/S0044451021050059

1. ВВЕДЕНИЕ

Орбитальное вырождение энергетических состояний ионов полиатомных систем может быть снято за счет понижения симметрии (эффект Яна – Тел-

* E-mail: v.v.gudkov@urfu.ru

лера (ЭЯТ) [1, 2]), что влияет на их структуру и физические свойства. ЭЯТ наблюдается в мультиферроиках [3–5], фуллеренах [6, 7], магнетиках [8], перовскитах [9, 10], двухслойных графенах [11] и ряде других систем [12, 13]. В твердых телах он проявляется в виде кооперативного эффекта, где ян-теллеровские (ЯТ) центры встроены в элементарную ячейку, или наблюдаются в системе не взаимодействующих между собой ЯТ-комплексов, образованных вакансиями или примесями малой концентрации. Одной из наиболее часто обсуждаемых ЯТ-систем являются кристаллы с примесями $3d$ -ионов.

Традиционными методами исследования легированных кристаллов являются оптические или магниторезонансные [14–19]. Это связано, в первую очередь, с их практическим применением в оптоэлектронике и спинтронике, а также наличием хорошо разработанных стандартных экспериментальных комплексов для таких исследований. Ультразвуковые исследования (имеются в виду эксперименты на частотах выше 10^7 Гц) выполняются на единичных оригинальных установках, в связи с чем таких работ значительно меньше. В то же время они позволяют получать информацию, недоступную другими методами. В последнее время была разработана теоретическая база, которая позволяет на основе данных ультразвуковых экспериментов определять симметричные свойства экстремумов нижнего листа адиабатического потенциала (АП) ЯТ-комплексов, получить значения констант вибронной связи (линейных и квадратичных), основные параметры АП (значения энергий ЯТ-стабилизации и положения глобальных минимумов и седловых точек в системе симметричных координат), а также исследовать динамические свойства ЯТ-комплексов: времена релаксации и определяющие их механизмы релаксации. Наибольший интерес при построении АП представляет активационный механизм, поскольку величина энергии активации в сумме с энергией нулевых колебаний представляет собой потенциальный барьер и позволяет определить глубину минимума АП относительно нижней седловой точки.

Расчетная часть исследований основана на выражении для вклада в комплексные модули упругости, обусловленного ЯТ-подсистемой. В ранних работах по исследованию ЭЯТ ультразвуковыми методами было показано, что этот вклад имеет релаксационную природу (см., например, обзор [14]). Основными определяющими его факторами являются изотермические модули ЯТ-подсистемы и параметр временной дисперсии $\omega\tau$ [20], где ω — циклическая частота ультразвуковой волны, а τ — время релаксации

функции распределения ЯТ-подсистемы по состояниям, соответствующим эквивалентным локальным симметризованным деформациям. Здесь есть два момента, на которые следует обращать особое внимание, поскольку они существенно влияют на полученную в результате количественную информацию.

Первый — в выражения для тензорных компонент изотермического модуля входят линейные константы вибронной связи и, в принципе, эти выражения получить можно. Сложность носит чисто технический характер и состоит в том, что они зависят не только от симметрии кристалла в целом, но и от типа ЯТ-комплекса (тетраэдрический, октаэдрический и т. д.), его расположения в элементарной ячейке и его ориентации относительно кристаллографических осей. Таким образом, вариантов здесь значительно больше, чем кристаллографических структур. В качестве примера можно привести кристалл бариевого гексаферрита $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ (кристаллографическая структура магнетоплюмбит, пространственная группа $P6_3/mmc$). Допирование титаном приводит к восстановлению части ионов железа до состояния Fe^{2+} [21], которые могут занимать 5 различных положений, формируя октаэдрические и тетраэдрические ЯТ-комплексы. Каждый из этих комплексов будет индивидуально искажаться при прохождении ультразвуковой волны, а значит иметь свое индивидуальное выражение для изотермического вклада в модули упругости кристалла. Более того, выражения для изотермических модулей ЯТ-подсистемы зависят от типа глобальных минимумов (их симметричных свойств). В случае двукратного орбитального вырождения это всего один вариант (тетрагональные минимумы). При трехкратном вырождении глобальные минимумы могут обладать тетрагональной, тригональной, либо орторомбической симметрией (см. табл. 3.1 в работе [2]). В каждом из этих случаев выражения для изотермических модулей будут свои. В настоящее время, насколько нам известно, таблицы для изотермических модулей с учетом возможных типов глобальных минимумов составлены для кубических комплексов в кристаллах со структурой флюорита ($(c_{11} - c_{12})/2$ и c_{44} [22]) и для тетраэдрических комплексов в кристаллах со структурой вюрцита (c_{11} , c_{33} , c_{44} , c_{55} и c_{66} [23]).

Второй момент — в ходе экспериментов измеряются действительные и мнимые составляющие динамических модулей упругости (или скорость и поглощение ультразвуковых волн), т. е. параметры, характеризующие кристалл в целом. ЯТ-подсистема вносит аддитивный вклад, который необходимо вы-

делить, потому что именно он описывается выражением, содержащем изотермические модули, зависящие от линейных констант вибронной связи, и время релаксации, определяющее энергию активации. Очевидно, что степень корректности выделения ЯТ-вклада в комплексные модули упругости напрямую влияет на точность определения параметров АП из экспериментальных данных.

Релаксационный вклад в комплексные модули упругости имеет наибольшую величину в области $\omega\tau \approx 1$ и является немонотонным на температурных зависимостях. В ультразвуковом эксперименте, проводимом на частотах $(10-200) \cdot 10^6$ Гц, значение температуры $T = T_1$, соответствующее условию $\omega\tau = 1$, обычно лежит в интервале 20–60 К. При температурах ниже 100 К фоновый вклад (вклад от остальных подсистем кристалла, т.е. комплексный модуль номинально чистого кристалла) в действительную и мнимую составляющие модулей упругости, как правило, монотонный. В экспериментах, в которых измеряется температурная зависимость скорости ультразвука для определения фонового модуля, использовалась формула Varshni [24]. В экспериментах, где измеряется температурная зависимость поглощения ультразвука, фоновое поглощение моделировалось монотонной функцией, совпадающей с измеренным поглощением при температурах существенно ниже и выше релаксационного максимума (см., например, рис. 6 в [23] или рис. 2 в [25]). В области высоких температур ($T \gg T_1$) это представляется вполне справедливым, потому что в условиях $\omega\tau \ll 1$ поглощение пропорционально $\omega\tau$, что само по себе мало и уменьшается с ростом температуры, а изотермический модуль обратно пропорционален температуре. Оба этих фактора приводят к пренебрежимо малому значению поглощения при высоких температурах. При низких температурах фактор $1/T$ увеличивает поглощение, однако при $\omega\tau \gg 1$ поглощение пропорционально скорости релаксации τ^{-1} , которая уменьшается с понижением температуры. Таким образом, если τ^{-1} растет от T быстрее, чем линейно, такой подход тоже справедлив. Он также справедлив, если имеется линейный вклад, но сама скорость релаксации очень мала при низких температурах. Основанием этому утверждению может служить тот факт, что механизмами низкотемпературной релаксации являются туннельные [14], а туннелирование как квантовый процесс является малоэффективным при высоких потенциальных барьерах, характерных для хорошо выраженного ЭЯТ (т.е., когда имеется большое число

вибронных уровней в потенциальной яме ниже седловой точки).

Однако эксперименты, выполненные недавно на кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ [26], показали, что возможна ситуация, когда потенциальные барьеры не столь высоки и туннельные механизмы релаксации вносят заметный вклад в комплексные модули упругости при низких температурах, в связи с чем требуется иной подход к выделению вклада ЯТ-подсистемы. Предлагаемый в данной работе метод выделения релаксационного вклада и определения энергии активации состоит в измерении температурных зависимостей действительной и мнимой составляющих фонового модуля упругости на номинально чистом кристалле, не содержащем искусственно введенных ЯТ-примесей, и моделировании температурной зависимости времени релаксации с учетом активационного и туннельных механизмов релаксации (прямых переходов и двухфононных). Такой подход был применен к кристаллам флюорита, имеющим различные по величине потенциальные барьеры. В качестве примера кристалла с низкими потенциальными барьерами был взят $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$, а с высокими потенциальными барьерами — также CaF_2 , чтобы фоновый модуль был таким же, но с иной примесью, а именно, Ni^{2+} .

2. ВКЛАД ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ В МОДУЛИ УПРУГОСТИ

В ходе ультразвуковых экспериментов, как правило, измеряются температурные зависимости поглощения и скорости ультразвука, однако обсуждение удобнее вести в терминах динамических (зависящих от частоты) комплексных модулей упругости c , где действительная часть определяет скорость звука (т.е. дисперсию), а мнимая — поглощение (диссипацию энергии). Если пространственную и временную зависимости осциллирующих величин записать как

$$\exp[i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$$

и при этом комплексный волновой вектор определить в виде

$$\mathbf{k} = (\omega/v - i\alpha)\mathbf{e}_k,$$

то относительные изменения c связаны с изменениями фазовой скорости v и коэффициента поглощения α нормальных мод следующим образом [27]:

$$\frac{\Delta c}{c_0} = 2 \left(\frac{\Delta v}{v_0} + i \frac{\Delta \alpha}{k_0} \right), \quad (1)$$

где

$$k_0 = \omega/v_0, \quad v_0 = v(T_0), \quad \Delta v = v(T) - v_0,$$

$$\Delta c = c(T) - c_0, \quad c_0 = c(T_0), \quad \Delta\alpha = \alpha(T) - \alpha_0, \\ \alpha_0 = \alpha(T_0),$$

T_0 — некоторое фиксированное значение температуры. Вклад релаксационной природы в динамический модуль упругости, в нашем случае это ЯТ-вклад c_{JT} , описывается с помощью изотермического модуля c_{JT}^T и фактора $\omega\tau$:

$$\frac{c_{JT}}{c_0} = \frac{c_{JT}^T}{c_0} \left[\frac{1 - i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right]. \quad (2)$$

Отметим, что в уравнении (1) фигурируют относительные изменения величин, так как в эксперименте изменения величин измеряются значительно более точно, чем сами величины, в то время как в уравнение (2) входят абсолютные величины, явный вид которых может быть получен в результате теоретического рассмотрения.

3. ЭКСПЕРИМЕНТ

Кристаллы $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ были выращены в Физико-техническом институте им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН методом Чохральского, детали которого изложены в работе [28]. Рост номинально чистых кристаллов CaF_2 и допированных ионами никеля $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ осуществлен методом Бриджмана–Стокбаргера (см. [25]) в Институте геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН. Анализ состава исследуемых кристаллов выполнялся с помощью ELAN 9000 ICPMS (PerkinElmer SCIEX) в Институте химии твердого тела УрО РАН. Концентрации примеси хрома и никеля составляли соответственно $n_{\text{Cr}} = (4.74 \pm 0.03) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (или $x = 0.128$ в $\text{Ca}_{1-x}\text{Cr}_x\text{F}_2$) и $n_{\text{Ni}} = (1.48 \pm 0.03) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (или $x = 0.059$ в $\text{Ca}_{1-x}\text{Ni}_x\text{F}_2$).

В кристаллах со структурой флюорита (пространственная группа $Pm\bar{3}m$) $3d$ -ионы замещают катионы Ca^{2+} , формируя кубические ЯТ-комплексы (см. рис. 1), при этом изовалентное замещение ионами Cr и Ni приводит к трехкратно орбитально-вырожденным ЯТ-центрам соответственно с термами ${}^5T_{2g}(e_g^2 t_{2g}^2)$ и ${}^3T_{1g}(e_g^4 t_{2g}^4)$ (см., например, табл. 1 в [14]). Установлено, что глобальные минимумы АП этих комплексов имеют орторомбическую симметрию [25, 29].

Измерения температурных зависимостей поглощения и скорости ультразвуковых волн проводились в Физико-технологическом институте УрФУ на установке, работающей по принципу перестраиваемого по частоте высокочастотного моста. Ультразвуковые волны генерировались и регистрировались

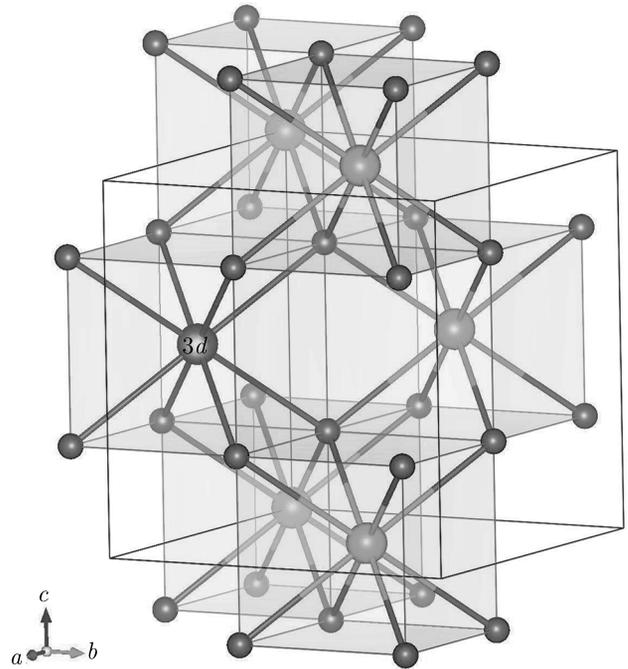


Рис. 1. Структура кристалла флюорита. $3d$ -ион (в данной работе Cr^{2+} или Ni^{2+}) замещает Ca^{2+} и, находясь в окружении восьми ионов фтора, формирует кубический ЯТ-комплекс

с помощью резонансных пьезопреобразователей, изготовленных из ниобата лития. Относительная погрешность измерений поглощения и скорости ультразвука составляла соответственно 0.1 дБ и 10^{-5} .

Были исследованы тетрагональный модуль упругости $c_E = (c_{11} - c_{12})/2$, тригональный $c_T = c_{44}$ и продольный $c_L = (c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2$. Эти модули в приведенных выше формулах связаны с модами, распространяющимися вдоль кристаллографической оси [110]: поперечными, поляризованными вдоль осей $[\bar{1}10]$ и $[001]$, и продольной, соответственно. Вклад ЯТ-подсистемы в модули упругости проявляется в виде пика в мнимой части и минимума в действительной части в области температур $T \approx T_1$. Как было отмечено ранее, изотермические модули обратно пропорциональны температуре (см., например, [25], где приведены эти модули для кубических ЯТ-комплексов в кристалле со структурой флюорита). В связи с этим положение пика релаксационного поглощения, строго говоря, не совпадает с T_1 , но значение T_1 можно определить по максимуму функции

$$f(T) = \text{Im}[c_{JT}(T)] \cdot T/c_0$$

или нулю ее производной df/dT . С учетом этого выражение (2) можно представить в виде

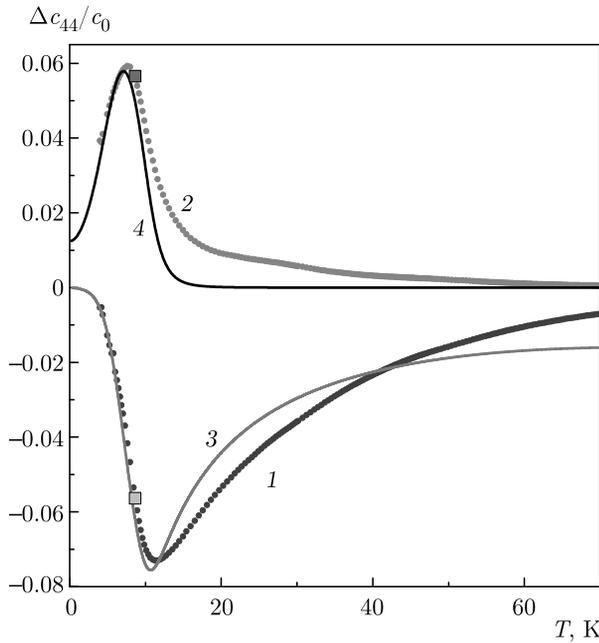


Рис. 2. Температурные зависимости действительной (кривая 1) и мнимой (2) составляющих модуля упругости c_{44} , измеренные на частоте $\omega/2\pi = 39$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$. Кривые 3 и 4 — модельные кривые $(c_{JT} + c_b)_{44}/c_0$. $\Delta c_{44} = c_{44}(T) - c_0$, $c_0 = c_{44}(T_0)$, $T_0 = 100$ К. $(c_{JT})_{44}/c_0$ рассчитан по формуле (3) с $\tau = (\tau_a^{-1} + \tau_l^{-1} + \tau_R^{-1})^{-1}$. Параметры, характеризующие отдельные механизмы релаксации, приведены в подписи к рис. 4. $(c_b)_{44}/c_0$ — фоновый модуль упругости, определенный из температурных зависимостей, полученных на номинально чистом кристалле и показанных на рис. 3. Квадратные символы соответствуют значениям действительной и мнимой составляющих модуля при температуре $T = T_1$, при которой $\omega\tau = 1$

$$\frac{c_{JT}}{c_0} = 2 \frac{\text{Re}[c_{JT}(T_1)]}{c_0} \frac{T_1}{T} \frac{1}{1 + (\omega\tau)^2} + 2i \frac{\text{Im}[c_{JT}(T_1)]}{c_0} \frac{T_1}{T} \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (3)$$

Для выделения ЯТ-вклада (релаксационного) в мнимую часть модуля упругости в предыдущих работах (см., например, [25]) предполагалось, что фоновый модуль (вклад от остальных механизмов, кроме ЭЯТ) можно представить в виде монотонной функции, совпадающей с измеренной при высоких ($T \gg T_1$) и низких ($T \ll T_1$) температурах. Очевидно, что такой подход может быть применен, если пик релаксационного поглощения хорошо разрешен. Но оказалось, что в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ низкотемпературный предел не был достигнут, и релаксационный пик поглощения не был полностью измерен при $T \ll T_1$. На рис. 2 приведены температурные зави-

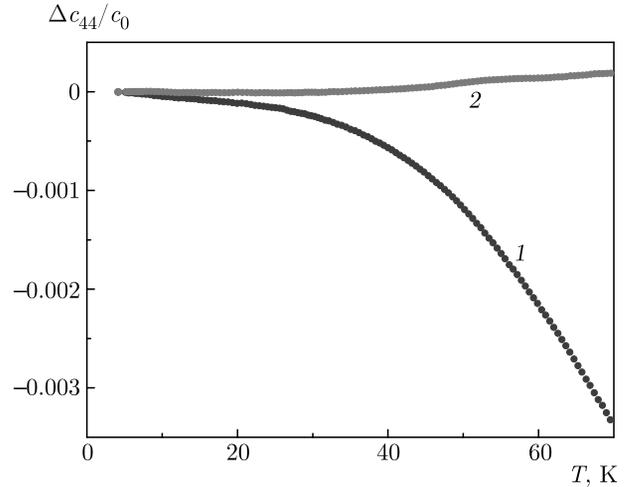


Рис. 3. Температурные зависимости действительной (кривая 1) и мнимой (2) составляющих модуля упругости c_{44} , измеренные на частоте $\omega/2\pi = 56$ МГц в номинально чистом кристалле CaF_2 . $\Delta c_{44} = c_{44}(T) - c_0$, $c_0 = c_{44}(T_0)$, $T_0 = 4$ К

симости относительных изменений действительной и мнимой составляющих модуля c_{44} , полученные на частоте 39 МГц (кривые 1 и 2). Качественно похожие зависимости получены для всех исследованных модулей (для продольного модуля см. рис. 1 в работе [26]), при этом наибольшие изменения, связанные с проявлением ЭЯТ, наблюдались для тригонального модуля. Выделение релаксационного вклада потребовало измерения действительной и мнимой составляющих модулей на номинально чистом кристалле CaF_2 (см. рис. 3). Определение релаксационного вклада в мнимую составляющую модуля было выполнено в предположении, что при высоких температурах (в нашем случае выше 100 К) этот вклад стремится к нулю в силу малости $\omega\tau$ и пропорциональности изотермического модуля величине $1/T$, а вклад в действительную часть модуля получен из соотношения

$$\text{Re } c_{JT}(T_1) = -\text{Im } c_{JT}(T_1),$$

которое следует из уравнения (2).

4. ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ

4.1. $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$

Если уравнение (3) представить в виде двух уравнений, записанных относительно действительной и мнимой частей входящих в него комплексных величин, а затем решить эти два уравнения от-

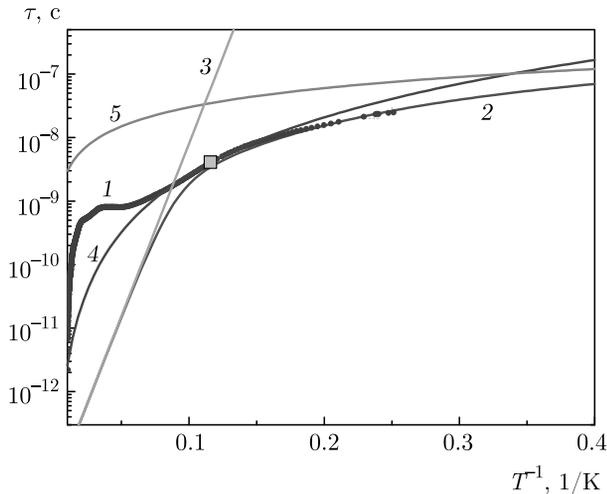


Рис. 4. Зависимость времени релаксации от обратной температуры (кривая 1), полученная на основе данных $\text{Im } \Delta c_{44}(T)/c_0$ на частоте $\omega/2\pi = 39$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$. Кривая 2 — результат моделирования времени релаксации с учетом активационного механизма (τ_a), туннельного (τ_t) и двухфононного (τ_R). Кривая 3 — $\tau_a = 0.3 \cdot 10^{-13} \exp(125/T)$, 4 — $\tau_R = 2.6 \cdot 10^{-6}/T^3$ и 5 — $\tau_t = 3 \cdot 10^{-7}/T$. Квадратный символ соответствует условию $\omega\tau = 1$

носителю τ , то получатся уравнения для температурной зависимости времени релаксации, в которые будут входить измеряемые в эксперименте величины (действительные или мнимые составляющие ЯТ-вклада в модули упругости):

$$\tau = \frac{1}{\omega} \frac{\text{Im } c_{JT}(T_1) T_1}{\text{Im } c_{JT}(T) T} \pm \frac{1}{\omega} \sqrt{\left[\frac{\text{Im } c_{JT}(T_1) T_1}{\text{Im } c_{JT}(T) T} \right]^2 - 1}, \quad (4)$$

$$\tau = \frac{1}{\omega} \sqrt{2 \left[\frac{\text{Re } c_{JT}(T_1) T_1}{\text{Re } c_{JT}(T) T} \right] - 1}. \quad (5)$$

Построение температурных зависимостей времени релаксации (один из примеров приведен на рис. 4) показало, что кривые $\tau(T)$ в области температур ниже 10 К, полученные на разных модулях и разных частотах, совпадали в пределах точности измерений, как и должно быть, и не совпадали при более высоких температурах. Более того, в этой области они оказались немонотонными функциями температуры, что представляется нереальным.

На наш взгляд, существенное различие времен релаксации при температурах выше 10 К может быть связано с наличием других подсистем, вносящих вклад в модули. На рис. 2 видно, что на за-

висимости мнимой части модуля упругости в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ (кривая 2) в области температур около 20 К имеется «плечо», обусловленное, по-видимому, еще одним или более релаксационными вкладами, в то время как выражения (4) и (5) получены в предположении наличия лишь одной релаксирующей подсистемы. Анализ состава исследуемого кристалла показал, что имеется только одна примесь, сопоставимая по концентрации с хромом, а именно примесь железа (его концентрация оказалась $3.45 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Изовалентное замещение кальция железом привело бы к задаче $E \otimes e$ ЭЯТ, т.е. тетрагональным искажениям комплекса и, как следствие, к отсутствию аномалий в тригональном модуле c_{44} . В наших экспериментах ЯТ-аномалии наблюдаются во всех модулях. Это означает, что глобальные минимумы АП имеют орторомбическую симметрию, что возможно лишь в случае T -терма. Возможно, наличие «плеча» на кривой 2 рис. 2 связано с присутствием ионов Cr^{3+} или вакансий, обладающих трехкратно вырожденными орбитальными состояниями, которые могут приводить к аномалиям в модулях упругости, обусловленным проявлением ЭЯТ. Таким образом, требовалось определить истинную температурную зависимость времени релаксации системы ЯТ-комплексов $[\text{CrF}_8]^{6-}$ в матрице CaF_2 .

С этой целью нами была промоделирована температурная зависимость времени релаксации с учетом трех механизмов: термической активации $\tau_a = \tau_0 \exp(V_0/T)$, прямых $\tau_t = (BT)^{-1}$ и двухфононных $\tau_R = (B\Theta^2)^{-1}T^{-3}$ туннельных переходов. Рассмотрение этих механизмов было предложено Стурджем в первых работах по ультразвуковым исследованиям ЭЯТ [14]. Критерием правильности подбора параметров, входящих в выражения для разных механизмов времени релаксации, служило совпадение модельных, рассчитанных с использованием выражения (3), и экспериментальных температурных зависимостей действительных и мнимых составляющих всех измеренных на различных частотах модулей упругости в области температур ниже 10 К: c_L (26 МГц, 54 МГц и 158 МГц), c_{44} (39 МГц) и c_E (55 МГц). При этом формулировалось требование единого описания $\tau(T)$ для всех 10 полученных кривых. В эксперименте измеряются температурные зависимости модулей кристалла в целом, в то время как моделирование относится к ЯТ-подсистеме. Поэтому расчетные кривые формировались из модельных $\text{Re } c_{JT}/c_0$, $\text{Im } c_{JT}/c_0$ и измеренных на номинально чистом кристалле $\text{Re } \Delta c/c_0$, $\text{Im } \Delta c/c_0$ (пример которых приведен на рис. 3).

Результаты расчета для модуля c_{44} , полученные на частоте 39 МГц, приведены на рис. 2 (кривые 3 и 4). В процессе моделирования активационный механизм всегда описывался временем релаксации $\tau_a = 3 \cdot 10^{-14} \exp(125/T)$, а остальные параметры лежали в интервалах $B^{-1} = (2.9-3.3) \cdot 10^{-7} \text{ с}\cdot\text{К}$ и $(B\Theta^2)^{-1} = (2.4-2.6) \cdot 10^{-6} \text{ с}\cdot\text{К}^3$. Можно заметить, что погрешность определения параметров туннельных механизмов релаксации не превышала 10%. Оценка $V_0 = 125 \text{ К}$ обусловлена следующим: меньшее значение энергии активации V_0 привело бы к тому, что преобладающими механизмами релаксации стали бы туннельные не только в области низких температур, но и при $T \gg T_1$, что физически нереально, а при $V_0 > 125 \text{ К}$ ЯТ-аномалии переместились бы в область более высоких, чем наблюдаемые в эксперименте, температур. На рис. 4 кривыми 3–5 показаны времена релаксации, соответствующие рассмотренным механизмам, и кривой 2 – суммарное время релаксации. Видно, что при температурах выше 12 К преобладающим механизмом релаксации является активационный (кривая 3 лежит ниже кривых 4 и 5, что соответствует наибольшей скорости релаксации), ниже 3 К доминирует туннельный механизм с $\tau_t = (BT)^{-1}$, а в промежуточной области – двухфононный. Туннельные механизмы релаксации в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ оказались доминирующими, поскольку энергия активации ($V_0 = 125 \text{ К} = 87 \text{ см}^{-1}$), определяющая потенциальный барьер, оказалась существенно меньше, чем в других флюоритах, где этот параметр равен: $570 \text{ К} = 396 \text{ см}^{-1}$ для $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ [25] и $390 \text{ К} = 271 \text{ см}^{-1}$ для $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ [30].

Еще одним важным результатом является то, что при низких температурах имеет место линейный по температуре вклад в скорость релаксации $\tau_t^{-1} = BT$. Это приводит к линейной зависимости скорости ультразвука и фиксированному, отличному от нуля уровню поглощения при низких температурах. Этот вывод ставит под сомнение корректность выделения релаксационного вклада в поглощение, основанного на утверждении, что при низких температурах релаксационное поглощение пренебрежимо мало. Напомним, что именно это предположение использовалось при выделении релаксационного вклада в предыдущих работах, таких, например, как [22, 25, 27, 30]. В связи с этим нами была предпринята попытка более корректно подойти к процедуре выделения релаксационного вклада в модуль упругости на кристалле с более высокой энергией активации, учесть вклад туннельных механизмов релаксации и определить низкотемпературный

предел поглощения ультразвука (мнимой составляющей модуля упругости).

4.2. $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$

В качестве ЯТ-комплекса с более высоким потенциальным барьером был выбран Ni^{2+} в той же матрице CaF_2 . Температурные зависимости действительной и мнимой частей модулей c_L и c_{44} для легированного и номинально чистого кристаллов приведены на рис. 5 и 6.

Исследования, выполненные на кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$, показали, что при низких температурах основной вклад в релаксацию вносят туннельные механизмы, которые описываются скоростями релаксации $\tau_t^{-1} = BT$ и $\tau_R^{-1} = B\Theta^2 T^3$. С учетом этого, уравнение (3) в высокочастотном пределе $\omega\tau \gg 1$ можно записать в виде

$$\text{Re} \frac{c_{JT}}{c_0} = \frac{c_{JT}^T}{c_0} \frac{1}{\omega\tau^2} = 2 \frac{\text{Re}[c_{JT}(T_1)]}{c_0} T_1 \left(\frac{B}{\omega}\right)^2 T, \quad (6)$$

$$\text{Im} \frac{c_{JT}}{c_0} = \frac{c_{JT}^T}{c_0} \frac{1}{\omega\tau} = 2 \frac{\text{Im}[c_{JT}(T_1)]}{c_0} T_1 \left(\frac{B}{\omega}\right). \quad (7)$$

Из этих выражений следует, что при низких температурах мнимая часть ЯТ-вклада в модуль упругости постоянна и отлична от нуля, тогда как его действительная часть линейна по температуре, а в пределе нулевой температуры равна нулю. На рис. 7 видно, что выражения (6) и (7) хорошо описывают экспериментальные зависимости (кривые 1 и 2), более того, появляется возможность из температурной зависимости $\text{Re} c_{JT}/c_0$ с использованием уравнения (6) найти величину B и, подставив ее в уравнение (7), определить значение низкотемпературного предела $\text{Im} c_{JT}/c_0$. В результате, было получено:

$$B = 5.8 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1},$$

$$\text{Im} [c_{JT}(T=0)]_{44}/c_0 = 3.7 \cdot 10^{-3}.$$

При этом релаксационный вклад в модуль упругости определялся с помощью данных, полученных на легированном ($\text{Re} c_{44}/c_0$) и номинально чистом ($\text{Re} c_b/c_0$) кристаллах:

$$\text{Re} \frac{(c_{JT})_{44}}{c_0} = \text{Re} \frac{c_{44}}{c_0} - \text{Re} \frac{(c_b)_{44}}{c_0}. \quad (8)$$

Для построения температурной зависимости времени релаксации с помощью уравнения (5) необходимо найти значения T_1 и $\text{Re} [c_{JT}(T_1)]_{44}/c_0$. Чтобы определить T_1 , необходимо найти низкочастотный

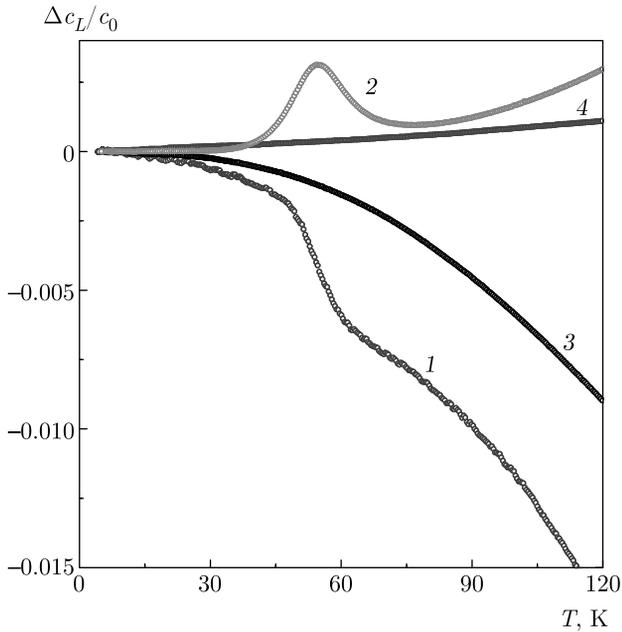


Рис. 5. Температурные зависимости действительной (кривая 1) и мнимой (2) составляющих модуля упругости c_L , измеренные на частоте $\omega/2\pi = 56$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$. Кривые 3 и 4 — действительная и мнимая части этого же модуля в номинально чистом кристалле CaF_2 .
 $\Delta c_L = c_L(T) - c_0$, $c_0 = c_L(T_0)$, $T_0 = 4$ К

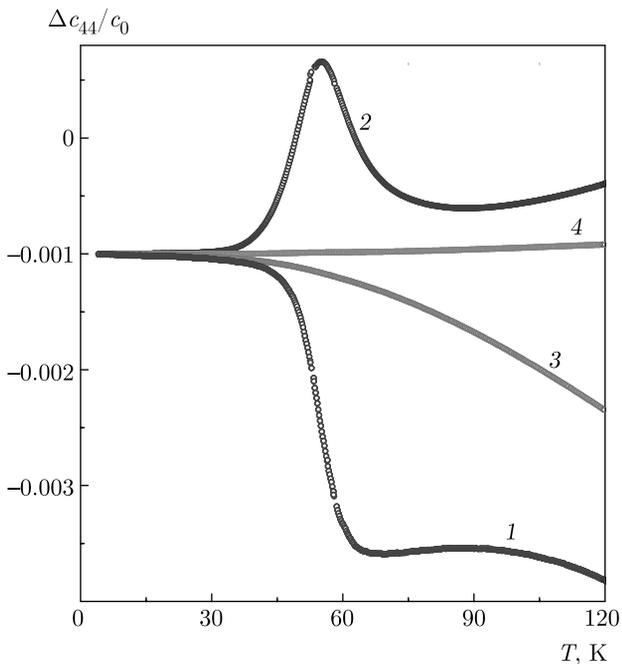


Рис. 6. Температурные зависимости действительной (кривая 1) и мнимой (2) составляющих модуля упругости c_{44} , измеренные на частоте $\omega/2\pi = 54$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$. Кривые 3 и 4 — действительная и мнимая части этого же модуля в номинально чистом кристалле CaF_2 . $\Delta c_{44} = c_{44}(T) - c_0$, $c_0 = c_{44}(T_0)$, $T_0 = 4$ К

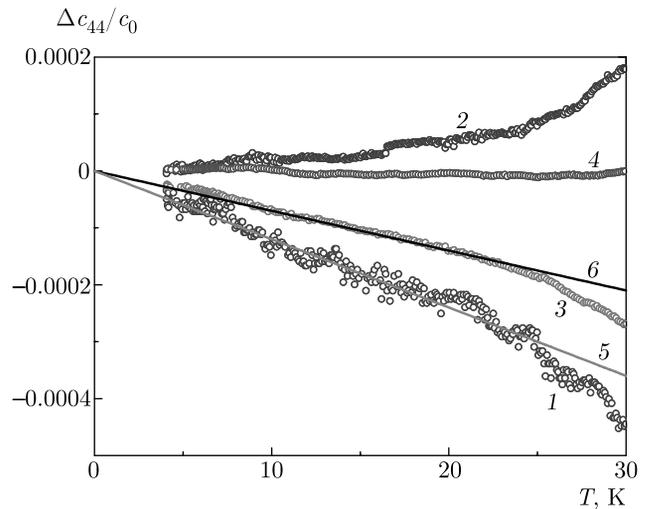


Рис. 7. Температурные зависимости, изображенные на рис. 6, но представленные в области низких температур и при $T_0 \rightarrow 0$ К. Линии 5 и 6 проведены для определения асимптотики зависимостей 1 и 3

предел этой величины, т.е. выражение, при котором $\omega\tau \ll 1$. Будем считать, что при $T_2 = 100$ К это неравенство уже выполняется, и введем обозначение

$$f_1 = \text{Re} [c_{JT}(T)]_{44} T / \{ \text{Re} [c_{JT}(T_2)]_{44} T_2 \}.$$

Из уравнения (3) видно, что

$$f_1 = 1 / [1 + (\omega\tau)^2].$$

Температурная зависимость $f_1(T)$ показана на рис. 8, а значение $f_1 = 0.5$ соответствует $T = T_1$.

Кроме того, температурная зависимость времени релаксации может быть определена и с помощью уравнения (4). Для этого надо сначала сформировать релаксационный вклад в мнимую часть модуля упругости $\text{Im}(c_{JT})_{44}/c_0$, затем найти T_1 и $\text{Im}[c_{JT}(T_1)]_{44}/c_0$. Можно упростить задачу тем, что значение T_1 уже определено выше, а

$$\text{Im}[c_{JT}(T_1)]_{44}/c_0 = -\text{Re}[c_{JT}(T_1)]_{44}/c_0.$$

Однако измерения действительной и мнимой частей модулей упругости являются независимыми измерениями, выполненными с помощью совершенно разных методик. Поэтому определение $\tau(T)$ на основе данных только о мнимой составляющей модуля упругости и совпадения результатов, полученных с помощью данных о действительной части модулей, служит проверкой применимости обоих методов.

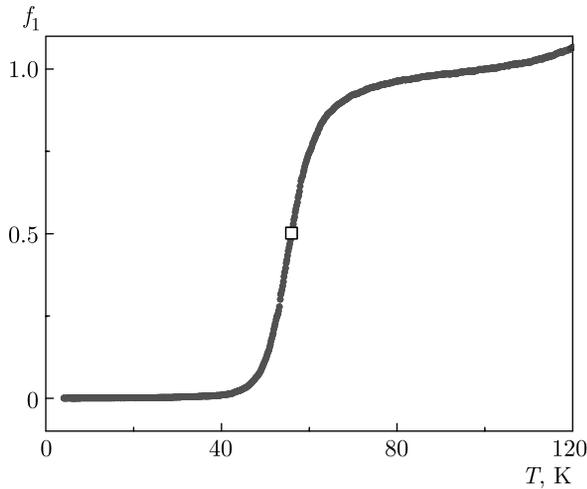


Рис. 8. Температурная зависимость функции $f_1 = 1/[1 + (\omega\tau)^2]$, построенная на основе экспериментальных данных $\text{Re}[(\Delta c_{44} - c_b)/c_0] T$ и отнормированная на значение при $T_2 = 100$ К. Квадратный символ соответствует уровню 0.5 при $T = T_1$

Запишем мнимую часть модуля упругости в виде суммы фонового модуля $\text{Im}(c_b)_{44}/c_0$ и ЯТ-вклада $\text{Im}(c_{JT})_{44}/c_0$:

$$\text{Im} \frac{c_{44}}{c_0} = \text{Im} \frac{(c_{JT})_{44}}{c_0} + \text{Im} \frac{(c_b)_{44}}{c_0}. \quad (9)$$

Если определять температурную зависимость мнимой части модуля от уровня фонового модуля при $T = 0$, то

$$\Delta \text{Im} c_{44}/c_0 = \delta \text{Im} c_{44}/c_0 + \text{Im} [c_{JT}(T = 0)]_{44}/c_0.$$

Низкотемпературный предел ЯТ-вклада был определен ранее,

$$\text{Im} [c_{JT}(T = 0)]_{44}/c_0 = 3.7 \cdot 10^{-3},$$

а $\delta \text{Im} c_{44}/c_0$ — это зависимость, представленная на рис. 6 кривой 2. Определенная таким образом $\Delta \text{Im} c_{44}/c_0$ показана кривой 1 на рис. 9. Мнимая часть фонового модуля задавалась монотонной функцией, асимптотически приближающейся к экспериментальной зависимости при высоких температурах, а при низких температурах — лежащей ниже экспериментальной на величину $3.7 \cdot 10^{-3}$. На рис. 9 она представлена кривой 2, заданной как

$$[\Delta \text{Im}(c_b)_{44}]/c_0 = 8 \cdot 10^{-6}T + 37 \cdot 10^{-12}T^4.$$

Поскольку ЯТ-вклад в мнимую часть модуля упругости определяется

$$\text{Im}(c_{JT})_{44}/c_0 = \text{Im} c_{44}/c_0 - \text{Im}(c_b)_{44}/c_0,$$

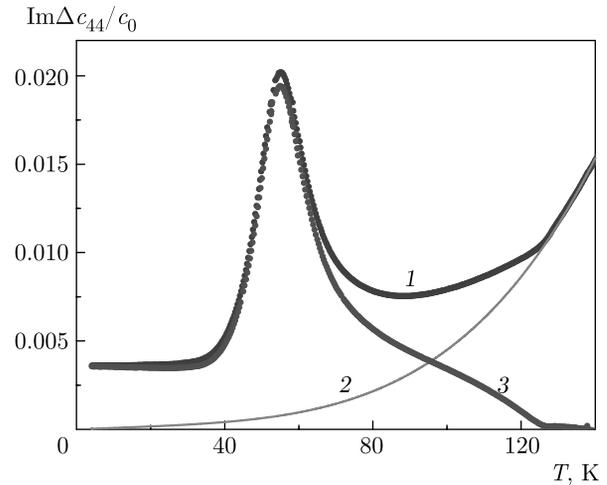


Рис. 9. Температурные зависимости мнимой части модуля упругости: кривая 1 — $[\Delta c(T) + c_{JT}(T = 0)]_{44}/c_0$, где $[\Delta c(T)]_{44}/c_0$ — измеренная на частоте $\omega/2\pi = 54$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$, $T_0 = 4$ К; кривая 2 — фоновая часть модуля примесного кристалла, определенная как $[\Delta \text{Im}(c_b)_{44}]/c_0 = 8 \cdot 10^{-6}T + 37 \cdot 10^{-12}T^4$; кривая 3 — вклад ЯТ-подсистемы в модуль c_{44}

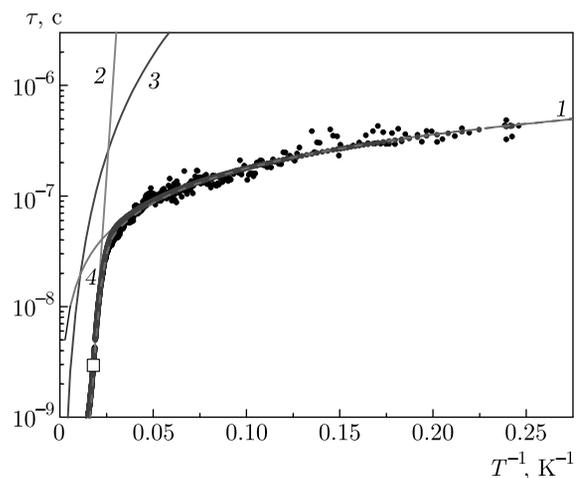


Рис. 10. Зависимость времени релаксации от обратной температуры, полученная на основе данных $\text{Re} \Delta c_{44}(T)/c_0$ (светлые символы) и $\text{Im} \Delta c_{44}(T)/c_0$ (темные символы) на частоте $\omega/2\pi = 54$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$. Кривая 1 — результат моделирования времени релаксации с учетом активационного механизма (τ_a), туннельного (τ_t) и двух-фононного (τ_R). Кривая 2 — $\tau_a = 10^{-13} \exp(570/T)$, 3 — $\tau_R = 1.5 \cdot 10^{-2}/T^3$ и 4 — $\tau_t = 1.8 \cdot 10^{-6}/T$. Квадратный символ соответствует условию $\omega\tau = 1$.

температуру T_1 находим из максимума функции $[\text{Im}(c_{JT})_{44}/c_0] T$, и у нас есть все данные, чтобы использовать уравнение (4) для построения температурной зависимости τ на основе данных о мнимой

Таблица. Параметры, характеризующие релаксацию в кристаллах $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ и $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$

Параметр	$\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$	$\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$
$\nu_0, \text{с}^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{13}$
$V_0, \text{см}^{-1}$	87	396
$B, \text{с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$	$3.3 \cdot 10^6$	$5.5 \cdot 10^5$
$(B\Theta^2), \text{с}^{-1} \cdot \text{К}^{-3}$	$3.8 \cdot 10^5$	66

части модуля упругости. Полученные описанными выше способами зависимости приведены на рис. 10. Видно, что времена релаксации, определенные двумя независимыми способами, с достаточно хорошей степенью точности совпадают. Моделирование зависимости $\tau (T^{-1})$ с помощью трех обсуждавшихся ранее механизмов дало следующие значения:

$$\tau_a = 10^{-13} \exp(570/T), \quad \tau_t = 1.8 \cdot 10^{-6}/T,$$

$$\tau_R = 1.5 \cdot 10^{-2}/T^3,$$

которые представляются вполне разумными по сравнению со значениями в кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$, где потенциальный барьер значительно меньше и релаксация проходит быстрее.

При наличии нескольких механизмов релаксации аддитивной является скорость релаксации (τ^{-1}), поэтому сравнение удобнее проводить в терминах скоростей релаксации

$$\tau_a^{-1} = \nu_0 \exp(-V_0/T), \quad \tau_t^{-1} = BT, \quad \tau_R^{-1} = B\Theta^2 T^3.$$

Полученные в работе параметры, характеризующие скорости релаксации отдельных вкладов, приведены в таблице.

Следует отметить, что упрощенный подход к выделению релаксационного вклада, использованный ранее [25], дает такое же значение энергии активации V_0 , как и предложенный в данной работе. В то же время, вклад в мнимую часть модуля, обусловленный туннельным механизмом релаксации, не может не сказаться на значении $\text{Im}[c_{JT}(T_1)]/c_0$, которое входит в выражение для определения линейных констант вибронной связи (см., например, уравнения (16) и (17) в [25]).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате ультразвуковых исследований ЯТ-комплексов $[\text{CrF}_8]^{6-}$ и $[\text{NiF}_8]^{6-}$ в кристаллах

CaF_2 при низких температурах обнаружены аномалии в действительной и мнимой составляющих модулей упругости, характерные для релаксационных вкладов ЯТ-систем. Корректное выделение релаксационного вклада в модули упругости потребовало разработки метода, основанного на учете как активационного механизма релаксации, так и туннельных механизмов — прямых и двухфононных переходов. Температурные зависимости времени релаксации, полученные в кристаллах $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ и $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$ из независимых измерений действительной и мнимой составляющих модуля упругости, показали хорошее совпадение, что свидетельствует о достоверности предложенного в работе метода.

В работе показано, что при низких температурах имеет место линейный по температуре вклад в скорость релаксации. Это приводит к линейной зависимости действительной части модуля упругости и отличному от нуля уровню поглощения, что необходимо учитывать при корректном выделении вклада ЯТ-комплексов в модули упругости.

Обнаружено существенное различие в температурных зависимостях времени релаксации для кристаллов $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ и $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$. В $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$, обладающем низким потенциальным барьером, при температурах выше 12 К доминирующим механизмом релаксации системы ЯТ-комплексов является активационный, и ниже 10 К преобладает туннелирование. В кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$, имеющем высокий потенциальный барьер, уже при температурах ниже 40 К доминирующим становится туннельный механизм релаксации.

Предложенный метод определения времени релаксации системы ЯТ-комплексов с учетом трех механизмов релаксации показал, что даже при высоких потенциальных барьерах низкотемпературный предел мнимой части модуля упругости (поглощения ультразвука) не является пренебрежимо малой величиной. Методика его определения требует измерений действительной части модуля. Отсюда следует, что для корректного построения температурных зависимостей времени релаксации и мнимой составляющей модуля упругости необходимы измерения как мнимой, так и действительной составляющих модуля.

Финансирование. В Уральском федеральном университете работа выполнялась при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-02-00332а), Центра превосходства «Радиационные и ядерные технологии» Уральского федерального университета и в рамках гос-

задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № FEUZ-2020-0060. В Южно-Уральском государственном университете работа выполнялась при поддержке Правительства Российской Федерации (Акт 211, контракт № 02.А03.21.0011, проект 5-100). Исследование в ИФМ УрО РАН было выполнено в рамках госзадания № АААА-А18-118020190098-5. Исследование в КФТИ ФИЦ КазНЦ РАН выполнено в рамках госзадания № АААА-А18-118030690040-8.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. A. Jahn and E. Teller, Proc. Roy. Soc. A **161**, 220 (1937).
2. I. B. Bersuker, *The Jahn–Teller Effect*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2006).
3. I. B. Bersuker, J. Phys.: Conf. Ser. **833**, 012001 (2017).
4. M. Acosta, N. Novak, V. Rojas, S. Patel, R. Vaish et al., Appl. Phys. Rev. **4**, 041305 (2017).
5. M. D. Kaplan and G. O. Zimmerman, J. Phys.: Conf. Ser. **833**, 012007 (2017).
6. D. Liu, N. Iwahara, and L. F. Chibotaru, Phys. Rev. B **97**, 115412 (2019).
7. J. L. Dunn and E. Rashed, J. Phys.: Conf. Ser. **1148**, 012003 (2018).
8. Ю. С. Орлов, С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, А. И. Нестеров, Письма в ЖЭТФ **112**, 268 (2020).
9. S. Merten, O. Shapoval, B. Damaschke et al., Sci. Rep. **9**, 2387 (2019).
10. V. Polinger and I. B. Bersuker, J. Phys.: Conf. Ser. **833**, 012012 (2017).
11. M. Angeli, E. Tosatti, and M. Fabrizio, Phys. Rev. X **9**, 041010 (2019).
12. А. В. Кузьмин, С. С. Хасанов, К. П. Мелетов, Р. П. Шибяева, ЖЭТФ **155**, 1037 (2019).
13. К. М. Красилов, А. Н. Азаревич, В. В. Глушков и др., Письма в ЖЭТФ **112**, 451 (2020).
14. M. D. Sturge, Solid State Phys. **20**, 91 (1968).
15. W. Ulrici, Phys. Stat. Sol. **84**, K155 (1977).
16. M. M. Zaripov, V. F. Tarasov, V. A. Ulanov et al., Phys. Sol. State **37**, 437 (1995).
17. P. B. Oliete, V. M. Orera, and P. J. Alonso, Phys. Rev. B **53**, 3047 (1996).
18. P. B. Oliete, V. M. Orera, and P. J. Alonso, Phys. Rev. B **54**, 12099 (1996).
19. S. K. Hoffmann, J. Goslar, S. Lijewski, and V. A. Ulanov, J. Chem. Phys. **127** 124705 (2007).
20. C. Zener, *Elasticity and Anelasticity of Metals*, University of Chicago Press, Chicago (1948).
21. V. V. Gudkov, M. N. Sarychev, S. Zherlitsyn et al., Sci. Rep. **10** 7076 (2020).
22. N. S. Averkiev, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov, I. V. Zhevstovskikh, M. N. Sarychev, S. Zherlitsyn, S. Yasin, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, and V. T. Surikov, in: *Fluorite: Structure, Chemistry and Applications*, ed. by M. van Asten, Nova Science Publishers, New York (2019), Ch. 2, p. 111.
23. Н. С. Аверкиев, И. Б. Берсукер, В. В. Гудков и др., ЖЭТФ **156**, 87 (2019).
24. Y. P. Varshni, Phys. Rev. B **2**, 3952 (1970).
25. M. N. Sarychev, W. A. L. Hosseny, A. S. Bondarevskaya et al., J. Alloy. Comp. **848**, 156167 (2020).
26. М. Н. Сарычев, А. С. Бондаревская, И. В. Жевстовских и др., Письма в ЖЭТФ **113**, 52 (2021).
27. V. V. Gudkov, in: *The Jahn–Teller Effect: Fundamentals and Implications for Physics and Chemistry*, ed. by H. Koppel, D. R. Yarkony, and H. Barentzen, Springer, Berlin, Heidelberg (2009), p. 743.
28. М. М. Зарипов, В. С. Кропотов, Л. Д. Ливанова, В. Г. Степанов, ФТТ **9**, 209 (1967).
29. М. М. Зарипов, В. Ф. Тарасов, В. А. Уланов, Г. С. Шакуров, ФТТ **344**, 1958 (2002).
30. I. V. Zhevstovskikh, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov et al., J. Appl. Phys. **119**, 225108 (2016).

ГЕНЕРАЦИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ДРОБНЫХ ФЛАКСОНОВ В ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ СРЕДАХ

В. И. Ружижский^{a,b,c}, А. А. Максимовская^{a,b}, И. И. Соловьев^{a,b,c},

С. В. Бакурский^{b,c}, Н. В. Кленов^{a,d}*

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

^b *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова
127055, Москва, Россия*

^c *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
НИИ ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
119991, Москва, Россия*

^d *Московский технический университет связи и информатики
111024, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 8 октября 2020 г.,
после переработки 8 октября 2020 г.
Принята к публикации 28 октября 2020 г.

Рассмотрены проблемы, связанные с использованием в джозефсоновских передающих линиях $0-\pi$ -контактов, имеющих нетривиальную ток-фазовую зависимость. Изучены различные типы возбуждений (дробных флаксонов), распространяющихся в таких джозефсоновских средах. Исследована проблема интеграции джозефсоновских передающих линий из $0-\pi$ -контактов (нетривиальных джозефсоновских передающих линий) с обычной быстрой одноквантовой электроникой. Разобраны характерные процессы преобразований возбуждений на границах обычных и нетривиальных джозефсоновских передающих линий, во многом аналогичные андреевским отражениям от границы сверхпроводника и нормального металла.

DOI: 10.31857/S0044451021050060

1. ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день «бистабильные» джозефсоновские контакты, для которых функция, связывающая джозефсоновские ток I и фазу φ дважды за период пересекает нуль с положительной производной [1, 2], представляют существенный теоретический и практический интерес. В частности, их можно использовать для создания быстрой криогенной памяти, компактных и быстрых элементов цифровой сверхпроводниковой электроники, перспективных квантовых битов [3–16]. С фундаментальной точки зрения, такие структуры интересны в связи с открывающейся возможностью исследовать процессы рождения, распространения и гибели дроб-

ных флаксонов — возбуждений, переносящих долю кванта магнитного потока топологический заряд которых менее единицы [17–24].

Данная работа находится на стыке фундаментальных и прикладных исследований.

В разд. 2 мы рассматриваем динамические процессы в джозефсоновской структуре на основе параллельной цепочки из бистабильных джозефсоновских контактов, т. е. в джозефсоновской передающей линии (Josephson transmission line, JTL).

В разд. 3 подробно исследуется ставшая недавно актуальной в связи с развитием технологий [25–29] проблема интеграции JTL, где перемещаются дробные флаксоны, с традиционными джозефсоновскими цифровыми схемами, где в качестве носителей информации используются вихревые токи, создающие магнитный поток, равный кванту Φ_0 (возбуждения с единичным топологическим зарядом).

* E-mail: nvklenov@gmail.com

2. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПОЛУФЛАКСОНОВ ПО ТОПОЛОГИЧЕСКИ-НЕТРИВИАЛЬНЫМ ДЖОЗЕФСОНОВСКИМ ПЕРЕДАЮЩИМ ЛИНИЯМ

Рассмотрим динамические процессы, включая и процессы распространения дробных флаксонов, в структурах на основе джозефсоновского контакта с несинусоидальной ток-фазовой зависимостью (ТФЗ) $I(\varphi)$. Будем далее для простоты считать, что ТФЗ содержат только две первые гармоники, амплитуды которых обозначим A и B :

$$I(\varphi) = A \sin \varphi + B \sin 2\varphi.$$

Именно среди подобных контактов существуют «бистабильные», причем особый интерес ввиду наглядности получаемых результатов для нас далее представляют $0-\pi$ -контакты, имеющие при нулевом протекающем токе устойчивые состояния с фазами πn , где $n = 0, 1, 2, \dots$. Далее будем говорить о 0 - и π -состояниях (соответственно четное и нечетное n). На рис. 1 видно, что при увеличении амплитуды A (амплитуда первой гармоники) для фиксированного $B = 1$ (амплитуда второй гармоники) увеличивается энергия метастабильного π -состояния и уменьшается барьер, разделяющий минимумы на зависимости энергии от фазы. При $A > 2B$ π -состояние разрушается (исчезает «бистабильность»), тогда как при $A = 0$ барьеры энергии 0 - и π -состояний совпадают.

При рассмотрении генерации и перемещения дробных квантов магнитного потока в системах, состоящих из таких контактов, удобно полагать значение A малым ($A = 0$ для так называемых 2φ -контактов). В этом случае системе требуется примерно

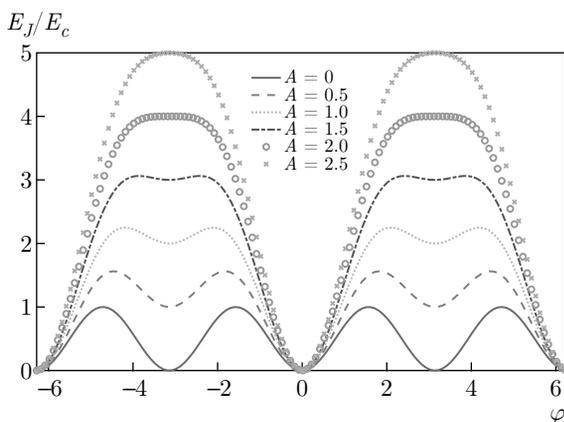


Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимости джозефсоновской энергии от фазы для $0-\pi$ -контакта при разных значениях амплитуды A в ТФЗ; амплитуда $B = 1$

одна и та же энергия для перехода из 0 -состояния в π -состояние и из π -состояния в состояние с фазой 2π (в случае 2φ -контактов энергии одинаковы), причем этим динамическим процессам можно поставить в соответствие прохождение части кванта магнитного потока через слабую связь в сверхпроводящем контуре.

Разберем процессы в нетривиальной джозефсоновской передающей линии (nontrivial Josephson transmission line, NJTL), которая получается из обычной заменой 0 -контактов на 2φ -контакты. Пусть на первый из соединенных параллельно 2φ -контактов приходит импульс тока, который переведет его из 0 -состояния в π -состояние. Тогда, если ток через индуктивность больше B (с учетом токов питания), второй контакт тоже перейдет в состояние с фазой π . Таким образом, возбуждение в виде волны токов и напряжений на контактах распространяется по NJTL, но переносимый поток в два раза меньше: мы получаем распространение полуфлаксонов. На рис. 2 показаны рассчитанные нами напряжения и фазы на контактах при распространении флаксонов в обычной JTL и полуфлаксонов в NJTL. В рамках расчетов мы всюду считали, что R — нормальное сопротивление джозефсоновских гетероструктур, C — их емкость, время и частота везде нормируются на обратную плазменную частоту используемых джозефсоновских контактов ($\omega_p = \sqrt{2eA/\hbar C}$), определяющую коэффициент затухания в системе $a = \omega_p/\omega_c$ ($\omega_c = 2eRA/\hbar$ — характерная частота).

Заметим, что полуфлаксоны распространяются быстрее флаксонов даже в случае одинаковых критических токов (синяя и красная кривые на рис. 2), так как в случае полуфлаксонов контакты в JTL меняют фазу не на 2π , а на π . Аналогично обычной JTL, уменьшение нормированной величины соединительной индуктивности l приводит к увеличению скорости движения полуфлаксона из-за увеличения тока через индуктивность (величина последнего близка к π/l). Получается, что NJTL можно использовать для увеличения скорости передачи информации в джозефсоновских цифровых устройствах.

Для сравнения приведем результаты расчетов в рамках обобщенной резистивной модели для динамических процессов в системе из соединенных параллельно $0-\pi$ -контактов с малыми значениями A ($A < 0.3$). При больших значениях A системе будет сложно перейти из 0 -состояния в π -состояние, так как из-за малой «глубины» потенциальной ямы, соответствующей π -состоянию, система будет проска-

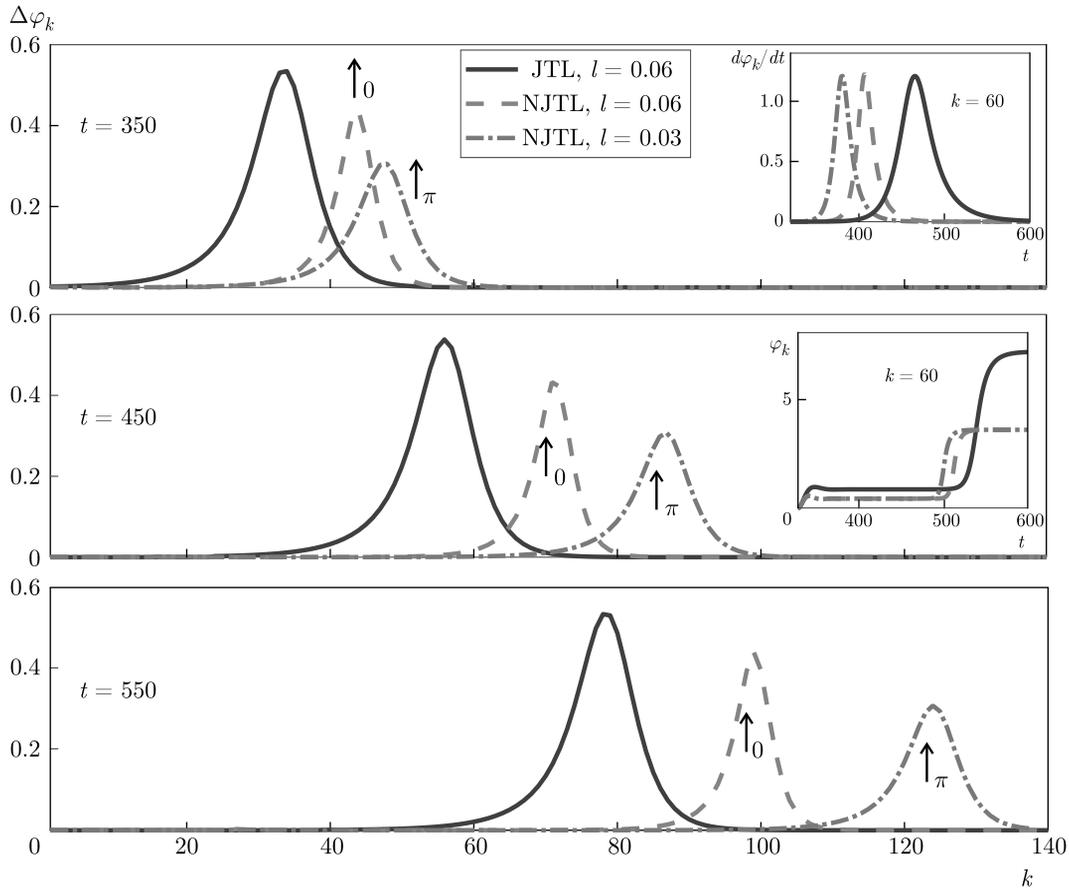


Рис. 2. (В цвете онлайн) Изменения фазы на индуктивностях как функция их положения (номера k), а также напряжения и фазы на джозефсоновских контактах как функции времени в разные моменты времени (вставка для элемента под номером $k = 60$) в обычной JTL (сплошная линия) и полуфлаксонов в NJTL (штриховая и штрихпунктирная линии). Для JTL $A = 1, B = 0$, для NJTL $A = 0, B = 1$; частота следования импульсов 0.033, ток питания $i_b = 0.75$ (величина нормирована на A)

кивать в состояние с фазой 2π . В зависимости от того, из какого состояния в какое переходит контакт (из 0- в π -, или из π - в 2π -), наблюдаются два типа дробных флаксонов. Эти два типа возбуждений отличаются друг от друга по форме переносимой их волны токов и напряжений, их суммарный поток все равно равен кванту Φ_0 . На рис. 3 представлены графики $\dot{\varphi}(t)$ для выбранного контакта в NJTL (временное отображение движения возбуждений в среде) для разных значений A .

Дробные флаксоны, образуемые в результате перехода из 0- в π -состояние и обратно, будем называть соответственно первым, \uparrow_0 , и вторым, \uparrow_π , типом дробных флаксонов. Видно, что при увеличении веса первой гармоники A в ТФЗ дробные флаксоны первого типа дольше проходят через выбранный контакт и имеют меньшую «высоту». Для дроб-

ных \uparrow_π -флаксонов все наоборот. Проинтегрировав площадь под графиками, мы получим нормированное значение потока, которое переносит конкретный дробный факсон (обычный факсон переносит нормированный поток, равный 2π).

На рис. 4 на вставке показана зависимость переносимого нормированного потока от амплитуды A первой гармоники для двух типов возбуждений и разных значений амплитуды B второй гармоники. Отметим, что индуктивность влияет на форму и скорость распространения дробных флаксонов, но не влияет на величину указанного потока. На основном графике показана зависимость размера дробного флаксона, выраженного через количество занимаемых вихревым током джозефсоновских контактов, от величины соединительной индуктивности для разных значений A и для разных типов воз-

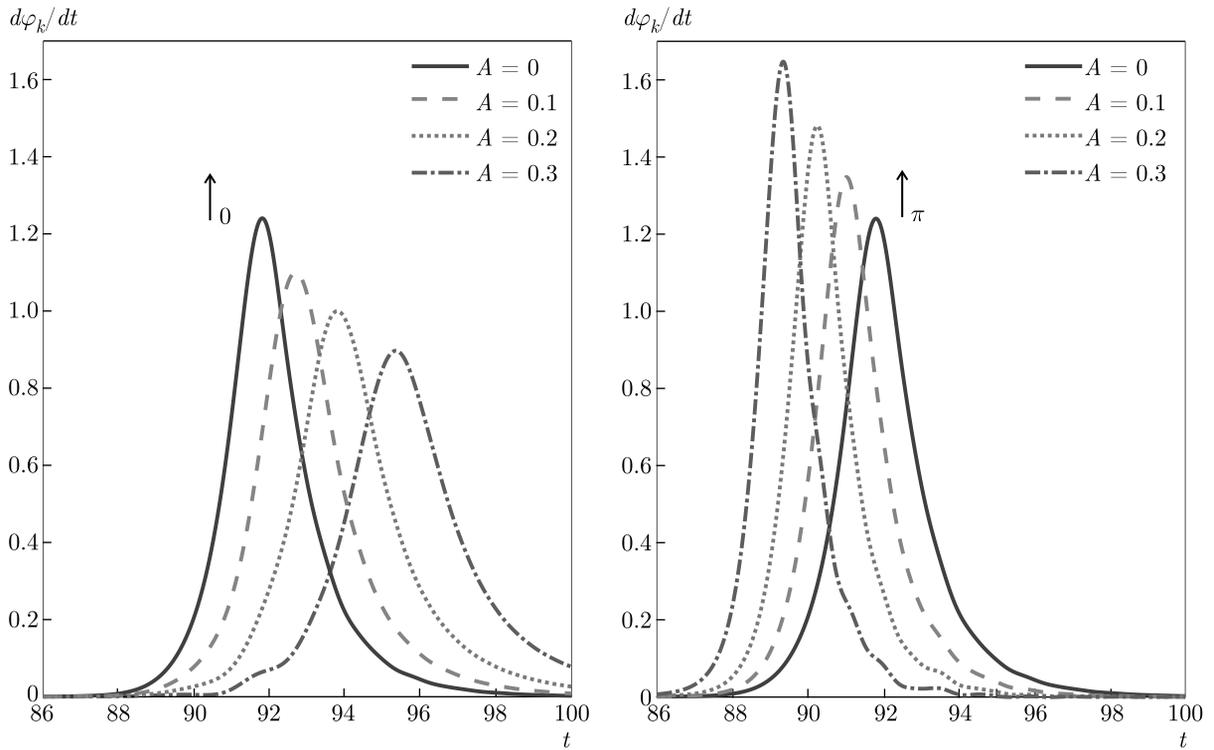


Рис. 3. (В цвете онлайн) Напряжения на выбранном джозефсоновском контакте как функция времени для распространения дробных флаксонов первого (слева, \uparrow_0) и второго (справа, \uparrow_π) типов при разных видах ТФЗ

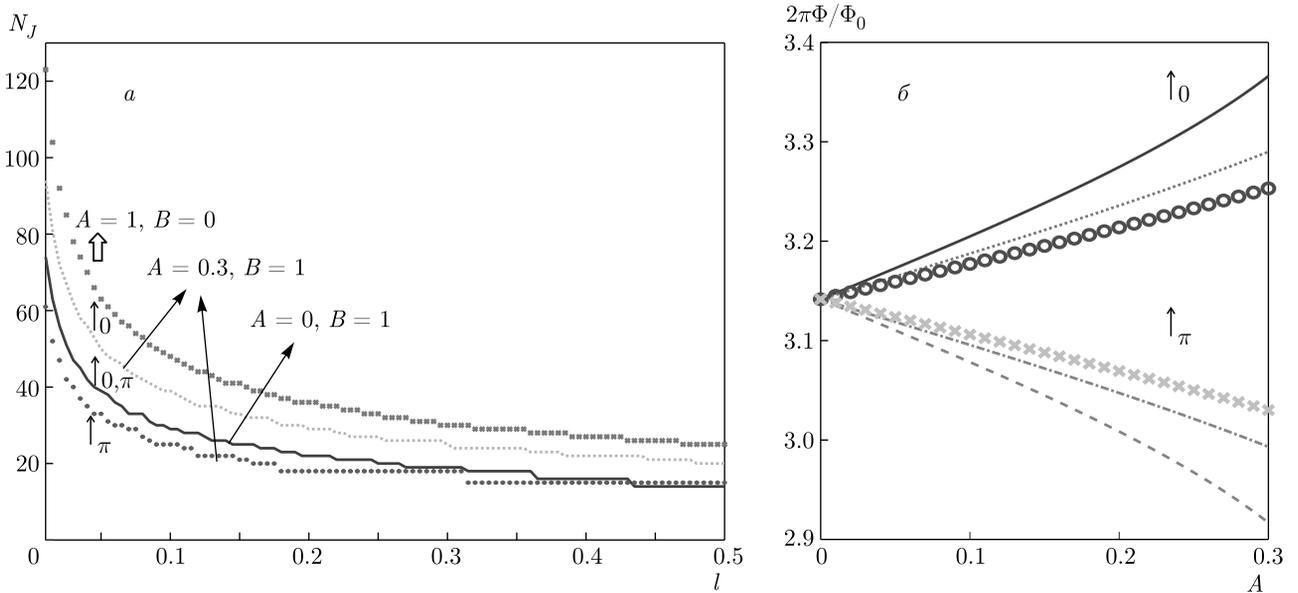


Рис. 4. (В цвете онлайн) а) Зависимости размеров флаксонов (\uparrow) и полуфлаксонов первого (\uparrow_0) и второго (\uparrow_π) типов, выраженных в количестве N_J контактов, от величины соединительной индуктивности. б) Зависимость нормированного потока, который переносит дробный флаксон, от амплитуды A первой гармоники для разных значений амплитуды B второй гармоники

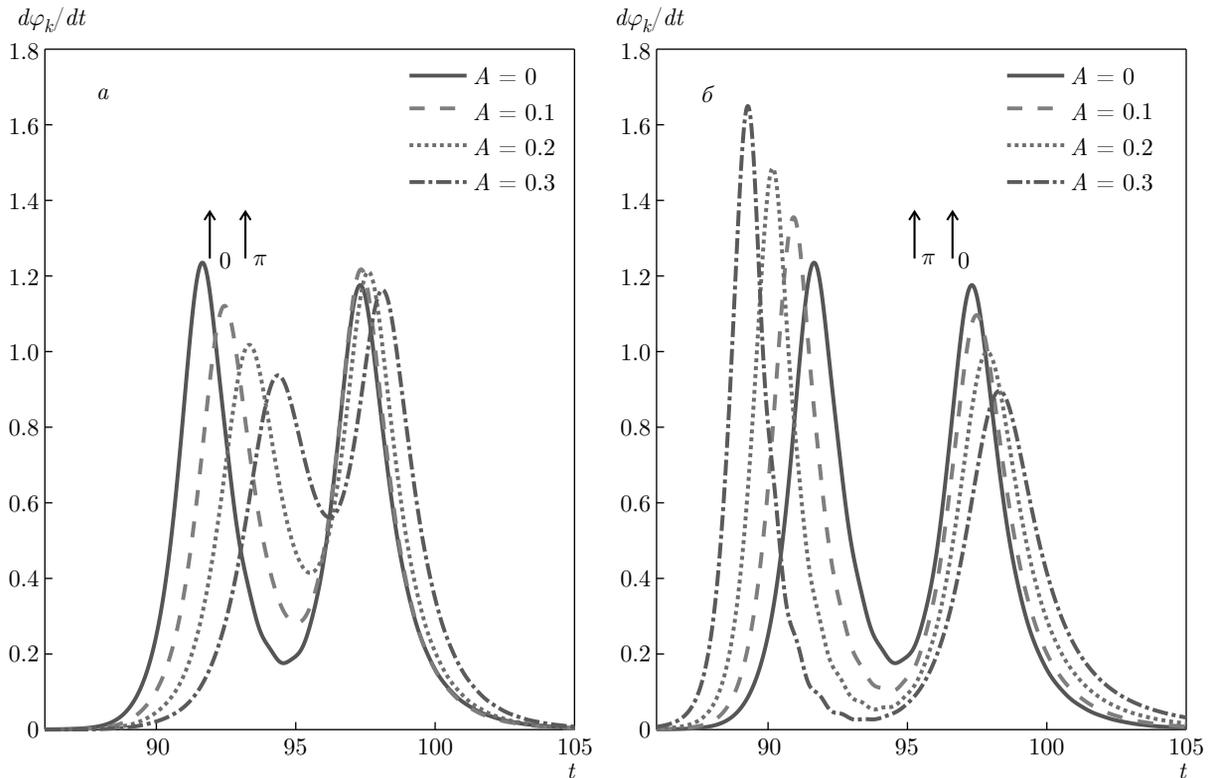


Рис. 5. (В цвете онлайн) Напряжения на выбранном джозефсоновском контакте как функция времени для возникновения пар дробных флаконов первого $\uparrow_0\uparrow_\pi$ (а) и второго $\uparrow_\pi\uparrow_0$ (б) типов при разных видах ТФЗ

буждений. Заметим, что размер дробного флакона при $A = 0$ в точке $l = 0.1$ равен половине размера обычного флакона в точке $l = 0.05$; при таких значениях индуктивностей через них течет одинаковый ток (величины соединительных индуктивностей всюду нормированы на характерную индуктивность используемых джозефсоновских контактов). Область $l < 0.1$ соответствует случаю, когда JTЛ можно считать непрерывной структурой. В области параметров, когда применима модель сосредоточенных элементов ($l > 0.1$), размер возбуждений слабо зависит от индуктивности. Также видно, что дробные флаконы первого типа увеличиваются в размере с ростом A , а второго типа — уменьшаются.

При определенных условиях, которые будут рассмотрены ниже, могут формироваться связанные пары дробных флаконов (обычные флаконы по NJTL распространяться не могут). Их тоже можно разделить на два типа (рис. 5): первый тип (пары $\uparrow_0\uparrow_\pi$) соответствует переходу выбранного джозефсоновского контакта из 0-состояния в состояние с фазой 2π ; а второй (пары $\uparrow_\pi\uparrow_0$) — переходу из π -состояния в состояние с фазой 3π .

3. ИНТЕГРАЦИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИ-НЕТРИВИАЛЬНЫХ ПЕРЕДАЮЩИХ ЛИНИЙ В СОСТАВ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ ЦИФРОВЫХ СХЕМ

После исследования процессов в изолированной NJTL (где существуют возбуждения-флаконы с топологическим зарядом менее единицы) необходимо рассмотреть ее взаимодействие с обычными джозефсоновскими цифровыми схемами. Для выявления ключевых закономерностей рассмотрим композитную структуру (рис. 6), состоящую из двух обычных JTЛ, соединенных между собой при помощи NJTL, причем в качестве соединений нам потребуются $0-\pi$ -контакт, а не индуктивность.

Последнее требование к границам топологически-нетривиальной области важно для рассмотрения процессов рождения и распространения дробных флаконов. При использовании индуктивности в качестве границы двух сред фаза на соединении будет возможно только одно устойчивое состояние. При использовании в качестве соединения $0-\pi$ -контакта флакон может преобразоваться на границе в дробный флакон, причем детали процесса зави-

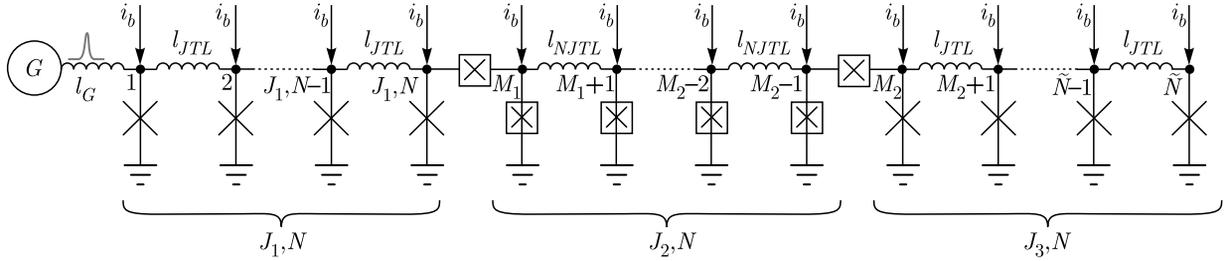


Рис. 6. Схема из двух обычных JTL, соединенных между собой NJTL. Обычными крестами обозначены джозефсоновские контакты с синусоидальными ТФЗ; крестами в квадратах — 2φ -контакты, G и l_G — генератор флаксонов и индуктивность, связывающая с ним структуру

сят от критического тока и затухания элемента-соединения. На рис. 2 было показано распространение флаксонов для случая непрерывной структуры с большим числом контактов, связанных малой индуктивностью ($l \ll 1$). Теперь удобнее будет рассмотреть структуру с лучшей локализацией флаксонов ($l_{JTL} \sim 1$). Кроме того, будем для простоты рассматривать случай 2φ -контактов.

Безразмерный ток через соединительный 2φ -контакт в рамках обобщенной резистивной модели имеет вид

$$i_{con} = B_0 \sin(2\varphi_{k-1} - 2\varphi_k) + \alpha_0(\dot{\varphi}_{k-1} - \dot{\varphi}_k) + (\ddot{\varphi}_{k-1} - \ddot{\varphi}_k), \quad (1)$$

где B_0 — амплитуда второй гармоники соединительного контакта (т. е. его критический ток), α_0 — коэффициент затухания на соединении, k и $k-1$ — номера узлов в соединении. Теперь запишем систему уравнений для всей системы, пользуясь введенными выше безразмерными величинами:

$$i_{pulse} + i_b - \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{l_{JTL}} = A_1 \sin(\varphi_1) + \alpha \dot{\varphi}_1 + \ddot{\varphi}_1, \quad (2)$$

$$i_b + \frac{\varphi_{k_1-1} - \varphi_{k_1}}{l_{JTL}} - \frac{\varphi_{k_1} - \varphi_{k_1+1}}{l_{JTL}} = A_1 \sin(\varphi_{k_1}) + \alpha \dot{\varphi}_{k_1} + \ddot{\varphi}_{k_1}, \quad (3)$$

$$i_b + \frac{\varphi_{J_1, N-1} - \varphi_{J_1, N}}{l_{JTL}} - i_{con1} = A_1 \sin(\varphi_{J_1, N}) + \alpha \dot{\varphi}_{J_1, N} + \ddot{\varphi}_{J_1, N}, \quad (4)$$

$$i_b - (\varphi_{M_1} - \varphi_{M_1+1})/l_{NJTL} + i_{con1} = B \sin(2\varphi_{M_1}) + \alpha \dot{\varphi}_{M_1} + \ddot{\varphi}_{M_1}, \quad (5)$$

$$i_b + \frac{\varphi_{k_2-1} - \varphi_{k_2}}{l_{NJTL}} + \frac{\varphi_{k_2} - \varphi_{k_2+1}}{l_{NJTL}} = B \sin(2\varphi_{k_2}) + \alpha \dot{\varphi}_{k_2} + \ddot{\varphi}_{k_2}, \quad (6)$$

$$i_b + \frac{\varphi_{M_2-2} - \varphi_{M_2-1}}{l_{NJTL}} - i_{con2} = B \sin(2\varphi_{M_2-1}) + \alpha \dot{\varphi}_{M_2-1} + \ddot{\varphi}_{M_2-1}, \quad (7)$$

$$i_b - \frac{\varphi_{M_2} - \varphi_{M_2+1}}{l_{JTL}} + i_{con2} = A \sin(\varphi_{M_2}) + \alpha \dot{\varphi}_{M_2} + \ddot{\varphi}_{M_2}, \quad (8)$$

$$i_b + \frac{\varphi_{k_3-1} - \varphi_{k_3}}{l_{JTL}} + \frac{\varphi_{k_3} - \varphi_{k_3+1}}{l_{JTL}} = A_2 \sin(\varphi_{k_3}) + \alpha \dot{\varphi}_{k_3} + \ddot{\varphi}_{k_3}, \quad (9)$$

$$i_b + \frac{\varphi_{\tilde{N}-1} - \varphi_{\tilde{N}}}{l_{JTL}} = A_1 \sin(\varphi_{\tilde{N}}) + \alpha \dot{\varphi}_{\tilde{N}} + \ddot{\varphi}_{\tilde{N}}, \quad (10)$$

где i_b — токи питания, l_{JTL} — индуктивности в JTL, l_{NJTL} — индуктивности в NJTL, A_1 и A_2 — критические токи контактов в первой и второй JTL, B — критический ток контактов в NJTL. Критический ток B_0 и коэффициент затухания α_0 на соединениях возьмем равными единице.

Начнем с анализа процессов на границе между джозефсоновскими средами с разными ТФЗ контактов. Меняя параметры соединительного контакта (аналог границы на разделе двух сред), мы получаем разные режимы работы. На рис. 7 для границы JTL/NJTL видно, что при малых значениях α_0 пришедший из обычной передающей линии флаксон меняет фазу соединительного 2φ -контакта на величину 2π , не меняя фазу в NJTL (режим затухания «1»). В случае больших значений α_0 и B_0 соединительный контакт переключается медленнее, чем

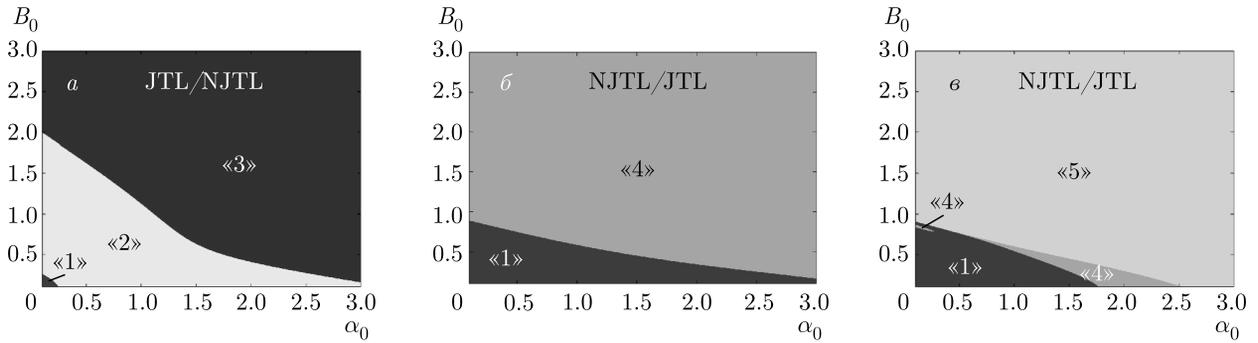


Рис. 7. (В цвете онлайн) Различные режимы прохождения возбуждений через границу JTL/NJTL на плоскости параметров соединительного контакта B_0 и α_0 : *a* — на границу JTL/NJTL из обычной передающей линии приходит флаксон (режим «1» — затухание флаксона на соединительном контакте, «2» — преобразование флаксона в дробный флаксон, «3» — преобразование флаксона в пару дробных флаксонв); *б* — на границу NJTL/JTL из топологически-нетривиальной передающей линии приходит дробный флаксон (режим «1» — затухание дробного флаксона на соединительном контакте, «4» — преобразование дробного флаксона в флаксон с отражением дробного флаксона назад); *в* — на границу NJTL/JTL из топологически-нетривиальной передающей линии приходит пара дробных флаксонв (режим «1» — затухание полуфлаксонной пары на соединительном контакте, «4» — преобразование в флаксон с отражением дробного флаксона назад, «5» — преобразование в флаксон без отражения)

контакты в JTL и NJTL, что приводит к преобразованию флаксона в пару дробных флаксонв (режим прохождения «3»). Наконец, при промежуточных значениях параметров «границы» флаксон переключает фазы соединительного контакта и первого контакта в NJTL на величину π , что приводит к преобразованию флаксона в дробный флаксон (режим «2»).

При анализе процессов на границе NJTL/JTL следует рассмотреть два случая, когда из NJTL на границу падает 1) дробный флаксон и 2) пара дробных флаксонв. Для обоих случаев возможен описанный выше режим затухания при малых значениях параметров α_0 и B_0 . На рис. 7 на плоскости параметров (α_0 , B_0) голубым цветом отмечен режим отражения от границы (режим «4»): дробный флаксон создает на границе достаточно большой ток, чтобы переключить контакт в JTL, который, в свою очередь, создает ток через соединение в обратном направлении, не давая измениться фазе соединительного контакта на $-\pi$. Это приводит к образованию дробного флаксона, движущегося в обратном направлении. В случае, когда по NJTL движется пара дробных флаксонв (рис. 7), кроме режима затухания возможны еще два типа процессов. При больших значениях параметров α_0 и B_0 реализуется режим прохождения, аналогичный наблюдавшемуся в случае границы JTL/NJTL (режим «5»). Также возможен процесс (тот же режим «4»), когда дробный флаксон преобразуется в флак-

сон и создает ток в обратном направлении, который складывается с током второго дробного флаксона, что приводит к переключению соединительного контакта с изменением фазы на π и рождению дробного флаксона, распространяющегося в обратном направлении. Отметим, что знак осциллирующего тока на соединении может совпасть или не совпасть с направлением тока следующего дробного флаксона. Сложение этих токов приводит к образованию области существования режима «4» при малых значениях α_0 . Как видим, суммарный топологический заряд возбуждений сохраняется во всех описанных процессах аналогично сохранению заряду возбуждений в электронных коллективах в рамках андреевского отражения от границы между нормальным металлом (N) и сверхпроводником (S).

Применим выявленные закономерности для анализа проблемы интеграции JTL из $0-\pi$ -контактов (нетривиальных JTL) в обычные быстрые одноквантовые схемы (rapid single flux quantum, RSFQ). Рассмотрим для этого композитную структуру, состоящую из JTL и NJTL, соединенных 2φ -контактами с параметрами $B_0 = 1$, $\alpha_0 = 1$. На входе такой структуры возможно возбуждение только в виде флаксона, который, проходя через границу JTL/NJTL, преобразуется в дробный флаксон, который, в свою очередь, на границе NJTL/JTL превращается во флаксон с отражением дробного флаксона.

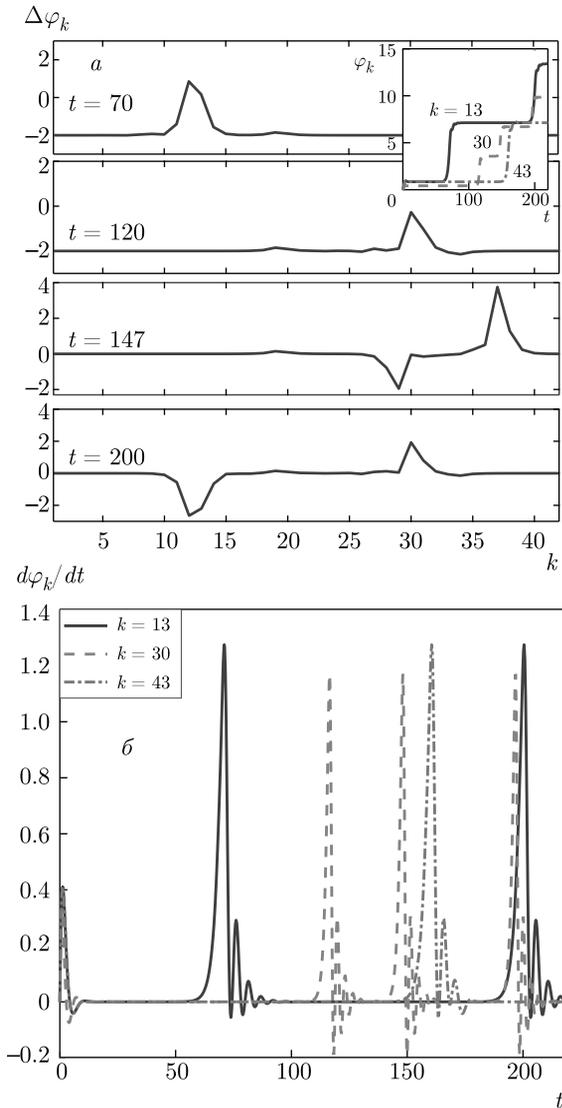


Рис. 8. (В цвете онлайн) Динамика переносящих топологический заряд возбудений в системе из двух обычных JTL, соединенных между собой NJTL, при параметрах соединения $B_0 = 1$, $\alpha_0 = 1$. Первая JTL состоит из 20 контактов, вторая из 15, третья из 10. *а*) Изменения фазы на соединительных индуктивностях в зависимости от номера перехода k . *б*) Нормированное напряжение на джозефсоновских контактах в разных частях структуры ($k = 13, 30, 43$) как функция времени

Результаты расчетов (рис. 8) показывают, что в момент времени $t = 70$ по первой JTL распространяется флаксон с единичным топологическим зарядом. На зависимости видно, что контакт $k = 13$ перешел в состояние с фазой 2π , а на зависимости видно возникновение «стандартного одноквантового» импульса напряжения на джозефсоновском контакте. К моменту времени $t = 120$ флаксон (\uparrow) из

первой JTL перешел в NJTL, трансформировавшись в полуфлаксон. Контакт $k = 30$ перешел в состояние с фазой π . Этот процесс можно описать следующей символической формулой: $\uparrow \rightarrow \uparrow_{0,\pi}$. Далее, в момент времени $t = 147$, полуфлаксон преобразовался в флаксон, который прошел во вторую JTL и отразился в виде антиполуфлаксона. Контакты $k = 30$ и $k = 43$ перешли в состояния с фазой 2π . На зависимости видно, что формы полуфлаксона и антиполуфлаксона неотличимы, так как в обоих случаях фаза меняется в положительном направлении (сначала из 0 в π , затем из π в 2π); различается для этих возбудений лишь направление распространения по NJTL. Представим процесс в виде символов, разделяя скобками разные JTL. В момент времени $t = 200$ антиполуфлаксон прошел в первую JTL в виде антифлаксона и отразился в виде полуфлаксона. Это можно представить следующим образом¹⁾:

$$()(\downarrow^{0,\pi})() \rightarrow (\downarrow)(\uparrow_{0,\pi})().$$

На практике довольно сложно отследить импульсы напряжения на джозефсоновских контактах пикосекундной длительности, соответствующие прохождению через них одиночных флаксонов и полуфлаксонов. Поэтому необходимо проанализировать поведение структуры JTL/NJTL/JTL под действием последовательности токовых импульсов с частотой 0.01. На рис. 9 продемонстрированы динамические процессы в исследуемой структуре для такого случая. Заметим, что они почти не отличаются от рассмотренных ранее, кроме одного момента: на зависимости на контакте $k = 13$ виден ($t \approx 170$) второй флаксон, пришедший со входа, а в момент времени $t \approx 200$ антифлаксон отсутствует. Таким образом, флаксон и антифлаксон аннигилируют, как и ожидалось. Запишем это в виде формулы:

$$(\uparrow)(\downarrow^{0,\pi})() \rightarrow (\uparrow + \downarrow)(\uparrow_{0,\pi})() \rightarrow ()(\uparrow_{0,\pi})().$$

В эксперименте может быть изучена зависимость среднего напряжения на выходе от частоты следования токовых импульсов на входе (аналог вольт-амперной характеристики). На рис. 10 показана зависимость как выходного (на последнем контакте, V_{out}), так и входного (на первом, V_{in}) напряжений от частоты следования импульсов тока на входе, ω_{puls} .

При низких частотах следования задаваемых на вход импульсов (вплоть до частоты осцилляций по-

¹⁾ Здесь каждая из скобок символизирует состояние соответственно первой JTL, NJTL и второй JTL в определенный момент времени: нет возбудения (пустая скобка), есть флаксон/антифлаксон, есть дробный флаксон.

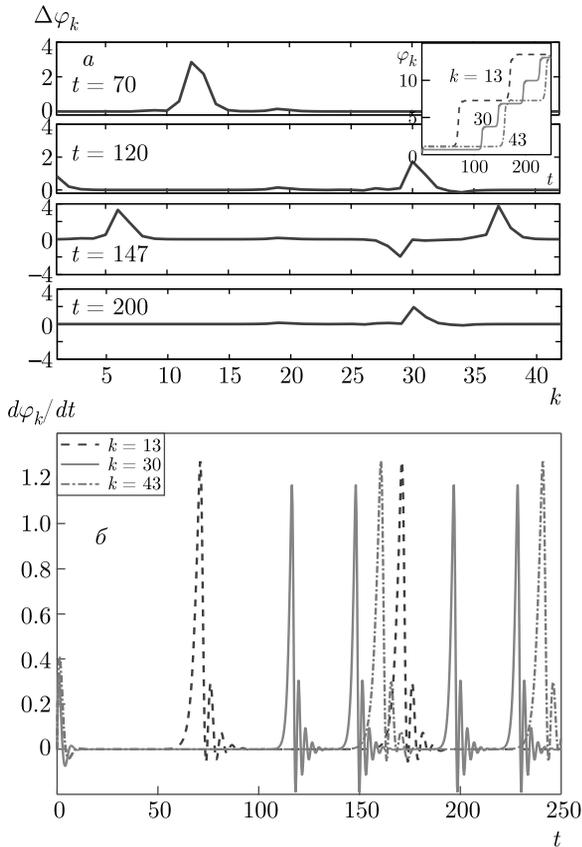


Рис. 9. (В цвете онлайн) *a*) Изменения фазы на соединительных индуктивностях и на джозефсоновских контактах (на вставке) для дробных флаконов в структуре из двух JTL, соединенных NJTL, при наличии периодических импульсов на входе с нормированной частотой 0.01. *б*) Нормированные напряжения как функции времени на джозефсоновских контактах в разных частях структуры, соответствующие различным возбуждениям

луфлаксона, ω_{SFO}) напряжения постоянны и практически равны, так как «источником» напряжения на выходе является осциллирующий в NJTL полуфлаксон (редкие флаконы на входе аннигилируют с антифлаконами). Напряжение снимается с джозефсоновских контактов, из чего следует, что знак для входного и выходного напряжений положительный. При рассмотрении напряжения на индуктивностях знак будет противоположным.

При дальнейшем увеличении частоты основной вклад в напряжение будут вносить флаконы на входе, что объясняет линейные зависимости $\langle V_{out,in} \rangle$ от ω_{puls} при частотах больше ω_{SFO} . Аннигиляция возбуждений будет происходить всегда в разных участках структуры. Рассчитанная зависимость $\langle V_{out} \rangle(\omega_{puls})$ имеет более сложный вид, чем можно было ожидать: имеется несколько линейных

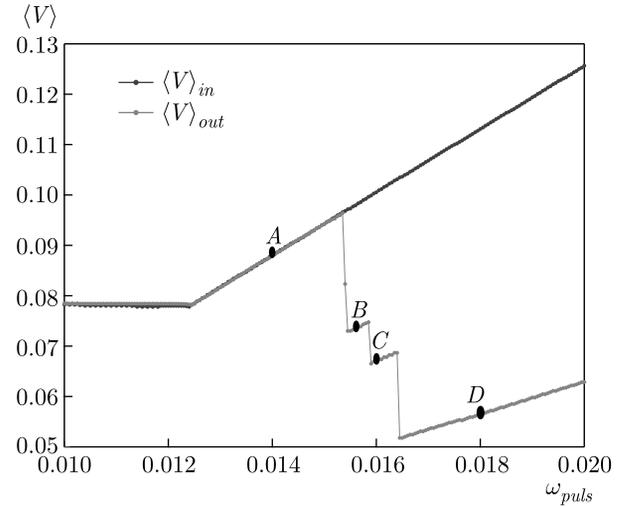


Рис. 10. (В цвете онлайн) Зависимости нормированных входного и выходного (синяя и красная линии) средних напряжений от частоты входящих импульсов для структуры JTL/NJTL/JTL. Параметры линий и соединений приведены в подписи к рис. 8

участков, разделенных скачками. Понять такое поведение структуры JTL/NJTL/JTL можно из анализа рис. 11, на котором представлены динамические процессы при нормированных частотах ω_{puls} , равных 0.014, 0.0156, 0.016 и 0.018 (точки A, B, C и D на рис. 10). Эти частоты соответствуют разным линейным участкам на зависимости $\langle V_{out} \rangle(\omega_{puls})$.

Точке A на рис. 10 соответствует ситуация, когда редкие флаконы (которые не аннигилировали во входной JTL) со входа поступают на границу одновременно (смещение во времени равно или меньше времени переключения соединительного контакта) с антиполуфлаксоном. В результате их взаимодействия антиполуфлаксон и флаксон уничтожаются и рождается полуфлаксон:

$$(\uparrow)(\downarrow^{0,\pi})() \rightarrow ()(\uparrow_{0,\pi})().$$

Данный процесс происходит быстрее, чем просто отражения антиполуфлаксона, что приводит к росту напряжения на выходе. Отметим, что флаконы и антиполуфлаконы приходят на границу одновременно в некотором диапазоне частот ω_{puls} , так как рассматриваемые возбуждения имеют размер больше одной ячейки.

При больших частотах (точка D на рис. 10) в NJTL будет поступать флаксон со входа быстрее, чем произойдет одна осцилляция полуфлаксона, что приводит к тому, что каждый второй флаксон со входа будет аннигилировать в NJTL. На выходе будет в два раза меньше флаконов, чем на входе, что

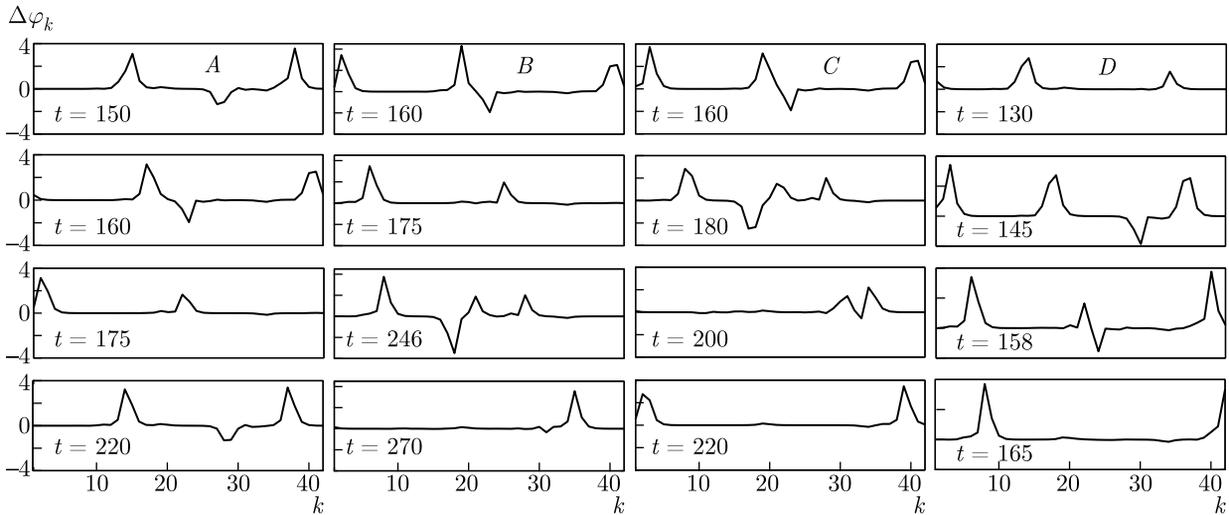


Рис. 11. Падения фазы на соединительных индуктивностях в структуре из двух JTL, соединенных NJTL, для разных частот входного импульса (точки A, B, C и D на рис. 10)

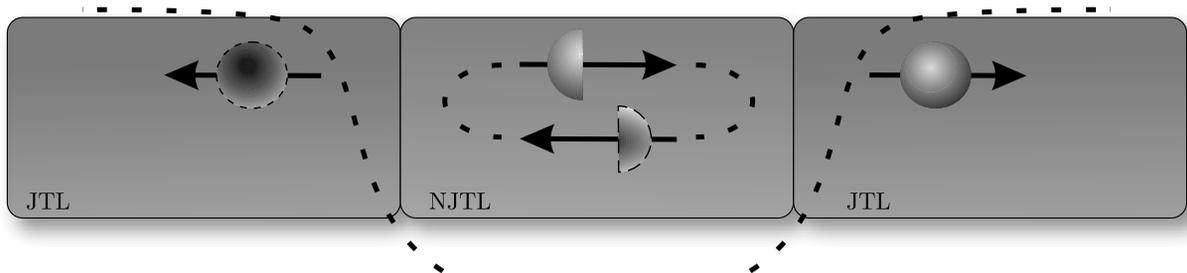


Рис. 12. (В цвете онлайн) Схематическое изображение осцилляций полуфлаксона между границами топологически-нетривиальной джозефсоновской среды, иллюстрирующее аналогию между переносом топологического заряда через структуру JTL/NJTL/JTL и куперовских пар через джозефсоновский SNS-контакт

приводит к уменьшению напряжения V_{out} в два раза по сравнению с V_{in} :

$$(\uparrow)(\uparrow_{0,\pi})(\downarrow) \rightarrow (\uparrow)(\uparrow_{0,\pi} + \downarrow_{0,\pi})(\uparrow) \rightarrow (\uparrow)(\downarrow)(\uparrow).$$

До выхода на режим, при котором происходит деление напряжения пополам, присутствуют процессы, в которых до аннигиляции осциллирующего полуфлаксона с флаксоном от входа происходит конечное число раз отражений первого от границ, что приводит к скачкам на зависимости $\langle V_{out} \rangle(\omega_{puls})$ (точки B и C на рис. 10). Так, в процессе, соответствующем точке C, полуфлаксон успевает отразиться один раз от границы на выходе. Линейный рост на участках с определенным числом осцилляций полуфлаксона между границам NJTL связан с тем, что при увеличении частоты после аннигиляции следующий флаксон приходит быстрее.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Можно заключить, что в численном эксперименте было продемонстрировано распространение дробного флаксона по JTL с контактами, имеющими нетривиальную ток-фазовую зависимость (NJTL). Показано, что скорость распространения полуфлаксонов выше, чем скорость распространения флаксонов. Выявлены два различных типа дробных флаксонов, каждый со своей спецификой распространения в такой джозефсоновской среде.

При исследовании проблем интеграции топологически-нетривиальных передающих линий (NJTL) в состав джозефсоновских цифровых схем мы обнаружили для границ между NJTL и JTL аналог андреевского отражения электронов и дырок от границы нормального металла (N) со сверхпроводником (S).

Выделено несколько типов процессов на границах NJTL/JTL и JTL/NJTL, возникающих для разных параметров соединительного контакта (разных «граничных условий»): затухание флаксона на границе, создание полуфлаксонов, создание полуфлаксоновых пар, прохождение возбуждения.

В частности, найдены условия, при которых структура JTL/NJTL/JTL является аналогом джозефсоновского SNS-контакта (идея аналогии представлена на рис. 12). В этом случае в NJTL оказался запертым полуфлаксон, который, отражаясь от границ JTL/NJTL, генерирует флаксоны во вторую JTL и антифлаксоны в первую JTL. Аналогом параметра порядка и потенциала спаривания, формирующего «потенциальную яму» для возбуждения с дробным топологическим зарядом, будет выступать функция от амплитуд гармонических компонент в ТФЗ: $(1 + \{A - B\})/2$.

Рассчитанные аналоги вольт-амперных характеристик для систем JTL/NJTL/JTL открывают возможности для новых экспериментальных исследований процессов переноса топологического заряда в джозефсоновских гетероструктурах. Специфические для бистабильных джозефсоновских элементов динамические процессы могут быть использованы при создании компактных элементов фазовой логики и памяти.

Благодарности. Один из авторов (В. И. Р.) благодарит за поддержку стипендиальную программу Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС»; другой автор (Н. В. К.) признателен Междисциплинарной научно-образовательной школе Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

Финансирование. Моделирование динамических процессов в джозефсоновских средах выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00130). Исследование возможности интеграции топологически-нетривиальных передающих линий с цифровыми схемами поддержано Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 19-32-90208). Аналогия между переносом топологического заряда и транспортом куперовских пар разработана в рамках гранта Президента Российской Федерации (МД-186.2020.8).

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Il'ichev, M. Grajcar, R. Hlubina, R. P. J. IJsselsteijn, H. E. Hoenig, H.-G. Meyer, A. Golubov, M. H. S. Amin, A. M. Zagoskin, A. N. Omelyanchouk, and M. Yu. Kupriyanov, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5369 (2001).
2. A. Buzdin and A. Koshelev, *Phys. Rev. B* **67**, 220504 (2003).
3. L. Trifunovic, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047001 (2011).
4. C. Richard, M. Houzet, and J. S. Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 217004 (2013).
5. Avradeep Pal, Z. H. Barber, J. W. A. Robinson and M. G. Blamire, *Springer Science and Business Media* **5**, 3340 (2014).
6. E. Goldobin, D. Koelle, and R. Kleiner, *Phys. Rev. B* **67**, 224515 (2003).
7. A. Zenchuk and E. Goldobin, *Phys. Rev. B* **69**, 024515 (2004).
8. N. G. Pugach, E. B. Goldobin, R. Kleiner, and D. Koelle, *Phys. Rev. B* **81**, 104513 (2010).
9. E. Goldobin, D. Koelle, and R. Kleiner, *Phys. Rev. B* **91**, 214511 (2015).
10. H. Sickinger, A. Lipman A., Weides M., R. G. Mints, H. Kohlstedt, D. Koelle, R. Kleiner, and E. Goldobin, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 107002 (2012).
11. E. Goldobin, H. Sickinger, M. Weides, N. Ruppelt, H. Kohlstedt, R. Kleiner, and D. Koelle, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 242602 (2013).
12. S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, T. Yu. Karminskaya, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Supercond. Sci. and Technol.* **26**, 015005 (2013).
13. D. B. Szombati, S. Nadj-Perge, D. Car, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, *Nature Phys.* **12**, 568 (2016).
14. S. V. Bakurskiy, V. I. Filippov, V. I. Ruzhickiy, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Phys. Rev. B* **95**, 094522 (2017).
15. S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, N. G. Pugach, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Appl. Phys. Lett.* **113**, 082602 (2018).
16. S. V. Bakurskiy, A. A. Neilo, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, and M. Yu Kupriyanov, *Nanotechnology* **30**, 324004 (2019).
17. Y. S. Kivshar and B. A. Malomed, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 763 (1989).
18. A. V. Ustinov, M. Cirillo, and B. A. Malomed, *Phys. Rev. B* **47**, 8357 (1993).
19. A. V. Ustinov, *Physica D* **123**, 315 (1998).

20. O. M. Braun and Y. S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, 1 (1998).
21. O. M. Braun, B. Hu, and A. Zeltser, *Phys. Rev. E* **62**, 4235 (2000).
22. O. M. Braun and Yu. S. Kivshar, *The Frenkel-Kontorova Model: Concepts, Methods, and Applications*, Springer-Verlag, Berlin (2004).
23. R. Mints and I. Papiashvili, *Phys. Rev. B* **64**, 134501 (2001).
24. R. Mints, I. Papiashvili, J. Kirtley, H. Hilgenkamp, G. Hammerl, and J. Mannhart, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 067004 (2002).
25. T. Ortлеpp, Ariando, O. Mielke, C. J. M. Verwijs, K. F. K. Foo, H. Rogalla, F. H. Uhlmann, and H. Hilgenkamp, *Science* **312**, 1495 (2006).
26. M. I. Faley, P. Reith, V. S. Stolyarov, I. A. Golovchanskiy, A. A. Golubov, H. Hilgenkamp, and R. E. Dunin-Borkowski, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**, 1100405 (2019).
27. M. I. Khabipov, D. V. Balashov, F. Maibaum, A. B. Zorin, V. A. Oboznov, V. V. Bolginov, A. N. Rossolenko, and V. V. Ryazanov, *Supercond. Sci. and Technol.* **23**, 045032 (2010).
28. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, R. Rastogi, S. Zarr, A. L. Day, E. Golden, T. J. Weir, A. Wynn, and L. M. Johnson, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**, 1 (2019).
29. D. Hasegawa, Y. Takeshita, K. Sano, M. Tanaka, A. Fujimaki, and T. Yamashita, in *17th IEEE International Superconductive Electronics Conference, ISEC-2019, Riverside, California* (2019), pp. 1–3.

СПИНОВОЕ СТЕКЛО И ИЗОТРОПНОЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ GaAs–AlGaAs С ВИРТУАЛЬНЫМ ПЕРЕХОДОМ АНДЕРСОНА

А. В. Шумилин*, В. И. Козуб, Н. В. Агринская,

Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамиур

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 24 ноября 2020 г.,
после переработки 18 января 2021 г.
Принята к публикации 19 января 2021 г.

Приведены результаты экспериментов, указывающих на существование спинового стекла в легированных бериллием квантовых ямах GaAs–AlGaAs с виртуальным переходом Андерсона. Экспериментально наблюдались медленная релаксация сопротивления после приложения магнитного поля и гистерезис кривой намагниченности. Возникновение спинового стекла связано с непрямым обменом спинов локализованных дырок через делокализованные состояния в области виртуального перехода Андерсона. Показано, что изотропное отрицательное магнитосопротивление, наблюдавшееся в этих структурах, также может быть связано со свойствами спинового стекла.

DOI: 10.31857/S0044451021050072

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение длительного времени ведется работа по созданию структур, которые обладали бы одновременно полупроводниковыми и магнитными свойствами. Как правило, для того чтобы придать полупроводнику магнитные свойства, в него вносят магнитные примеси. Так, например, легируя GaAs-структуры примесью Mn, можно добиться ферромагнетизма с температурой Кюри вплоть до 100 К [1, 2].

Тем не менее, даже если в полупроводнике имеются только обычные (не магнитные) примеси, в нем есть нескомпенсированные спины, так как у электрона, локализованного на доноре, или у дырки, локализованной на акцепторе, есть спин. Возникает вопрос, не может ли магнитно-упорядочение состояние (ферромагнитное или спиновое стекло) появляться в системе заполненных доноров и акцепторов. Известно, что такое состояние не возникает вдали от перехода металл–диэлектрик. В том случае, если концентрация N легирующей примеси и длина локализации a достаточно велики, $Na^2 \gg 0.2$ (в дву-

мерном случае), примесные состояния сливаются с краем зоны проводимости или валентной зоны и локализованные электроны в системе фактически исчезают. В противоположном случае малого легирования, $Na^2 \ll 0.2$, локализованные электроны связаны антиферромагнитным взаимодействием, экспоненциально убывающим на расстояниях порядка a . При низкой температуре подобные электроны образуют структуру, известную как глобальное синглетное состояние или фаза Бхатта–Ли [3]. При этом все связанные спины образуют общее синглетное состояние, которое не связано со спонтанным нарушением симметрии и практически не взаимодействует с окружением. В теории такое состояние появляется при выполнении двух условий:

1) обменное взаимодействие антиферромагнитно, изотропно и экспоненциально убывает с расстоянием между центрами;

2) характерное расстояние между центрами, $N^{-1/2}$, много больше расстояния, на котором убывает обменное взаимодействие (обычно это $a/2$).

Тем не менее не существует однозначных предсказаний о том, каким будет магнитное состояние электронов на примесях вблизи перехода металл–диэлектрик. Строгой теории для этого случая не существует, и особый интерес представля-

* E-mail: avshumilin@mail.ioffe.ru

ют экспериментальные исследования. В частности, в работе [4] были получены результаты, интерпретированные как появление ферромагнитной фазы в объемных образцах Ge:As, близких к переходу металл–диэлектрик.

В данной работе мы приводим результаты, указывающие на существование спинового стекла в легированных бериллием квантовых ямах GaAs–Al GaAs, в которых происходит виртуальный переход Андерсона [5, 6]. Он соответствует появлению делокализованных состояний при концентрациях примесей, значительно меньших тех, которые обычно соответствуют переходу Мотта–Андерсона. Делокализованные состояния возникают из-за аномально малого разброса энергий примесей, связанного с малым количеством компенсирующей примеси и удалением компенсирующей примеси из квантовых ям в барьеры. Из-за этого для части состояний в примесной зоне оказывается выполнен критерий перехода Андерсона. Важно при этом, что система по-прежнему находится на диэлектрической стороне перехода Мотта. Таким образом, делокализованные состояния однократно заполнены, и проводимость по ним возможна только в результате активационных процессов. Экспериментально виртуальный переход Андерсона проявляется в активационной температурной зависимости проводимости с малой энергией активации (на порядок меньшей, чем энергия активации в зону) и в возможности ударной ионизации носителей в делокализованную часть примесной зоны, приводящей к пробое при низких температурах при измерении проводимости в режиме постоянного тока [6].

Основными экспериментами, подтверждающими состояние спинового стекла, являются наблюдение различий свойств системы, охлажденной в поле и без поля, логарифмические релаксации свойств после выведения спиновой подсистемы из равновесия и гистерезис кривых намагниченности. Медленная релаксация сопротивления и гистерезис намагниченности наблюдались в нашем образце. Кроме того, в образце наблюдается линейное изотропное отрицательное магнитосопротивление, которое мы также связываем с фазой спинового стекла.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ СВИДЕТЕЛЬСТВА СПИНОВОГО СТЕКЛА

В этом разделе мы приводим результаты измерений зависимостей проводимости от времени и магнитного поля в образце с квантовыми ямами

GaAs–Al_{0.3}Ga_{0.7}As, выращенном методом молекулярной эпитаксии. Образец содержит 5 квантовых ям GaAs размером 15 нм и разделяющие их барьеры Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 100 нм. При этом акцепторами (Be) легировался центр квантовых ям, а компенсирующая примесь (Si) вносилась в узкую область шириной 5 нм в центре барьеров. Концентрация акцепторной примеси в ямах была равна $N_a \approx 10^{12} \text{ см}^{-2}$, что соответствует значению $Na^2 = 0.09$. Это примерно в 1.5–2 раза меньше значения Na^2 , соответствующего переходу Мотта–Андерсона в двумерных структурах со степенью компенсации, близкой к 1/2. Степень компенсации донорными примесями в барьере с концентрацией N_d составляла $N_d/N_a \sim 0.1$. Существенно, что компенсирующие примеси располагались вне двумерного проводящего слоя, что уменьшает энергетический беспорядок в примесной зоне и способствует виртуальному переходу Андерсона [5].

При низких температурах температурная зависимость проводимости (рис. 1а) следует закону Аррениуса с малой энергией активации $\varepsilon_4 \approx 3 \text{ мэВ}$. Это соответствует активации носителей с уровня Ферми в делокализованные состояния в примесной зоне. При высоких температурах становятся важны другие процессы, идущие с энергией активации $\varepsilon_1 \approx 22 \text{ мэВ}$. Мы предполагаем, что это — активация дырок в валентную зону. При температурах $T \approx 4 \text{ К}$ и токе 1 нА наблюдался пробой, характерный для систем с виртуальным переходом Андерсона.

На рис. 1б приведены результаты измерения магнитосопротивления в образце при температуре 8 К. Скорость развертки магнитного поля составляла 0.8 Тл/мин. При достаточно больших полях (около 10 Тл) магнитосопротивление положительно и сильно анизотропно, что естественно для двумерных структур с квантовыми ямами. Однако при малых полях магнитосопротивление оказывается изотропным, отрицательным и линейным. Такое поведение магнитосопротивления было подробно описано в работе [7]. Изотропный характер магнитосопротивления в двумерной структуре может указывать на его спиновую природу. Ниже мы покажем, что именно такой характер магнитосопротивления следует ожидать в случае появления в образце спинового стекла.

Изображенное на рис. 1б магнитосопротивление было измерено после первого (после охлаждения образца) включения магнитного поля и при большой скорости развертки. Однако при непрерывном пилообразном изменении магнитного поля магнитосопротивление медленно релаксирует к стационар-

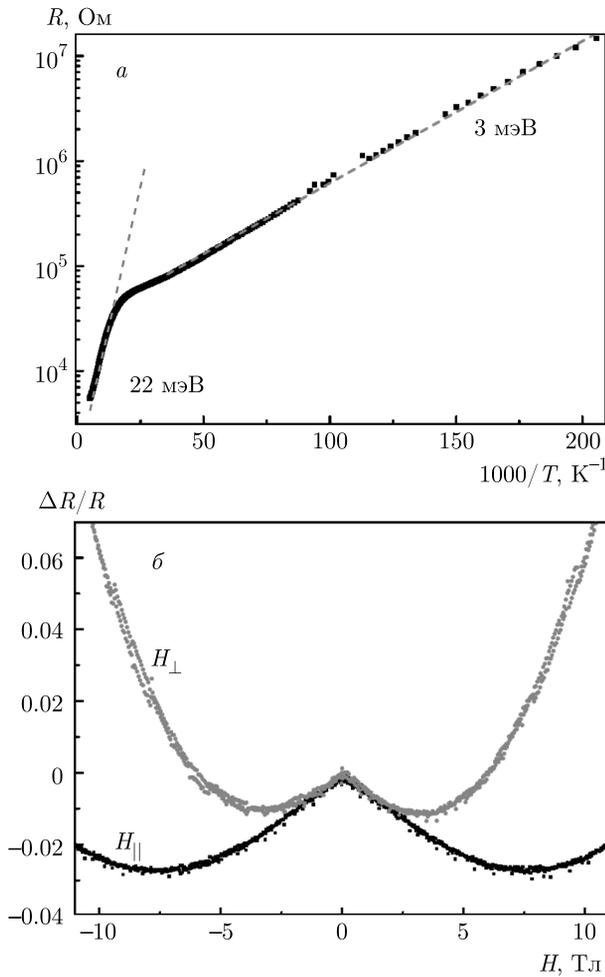


Рис. 1. а) Зависимость сопротивления образца от температуры. Штриховыми прямыми изображен закон Аррениуса с энергиями активации $\varepsilon_1 \approx 22$ мэВ и $\varepsilon_2 \approx 3$ мэВ. б) Зависимости магнитосопротивления, измеренного при 8 К для двух направлений магнитного поля: параллельного (H_{\parallel}) и перпендикулярного (H_{\perp}) плоскости образца

ной форме, как показано на рис. 2а. Магнитосопротивление измерялось при токе 1 нА и температуре 4.2 К, скорость развертки магнитного поля 0.2 Тл/мин. Видно, что сопротивление медленно уменьшается после приложения магнитного поля независимо от его направления. Очень похожая зависимость магнитосопротивления от времени наблюдалась в спиновом стекле, возникающем в субмонослойных пленках железа [8]. На рис. 2б построена зависимость медленной релаксации сопротивления от времени в логарифмическом масштабе. Исследуя поведение сопротивления в точках, соответствующих магнитному полю, равному нулю (показаны стрелками на рис. 2б), можно заметить, что в процессе релаксации сопротивление зависит от вре-

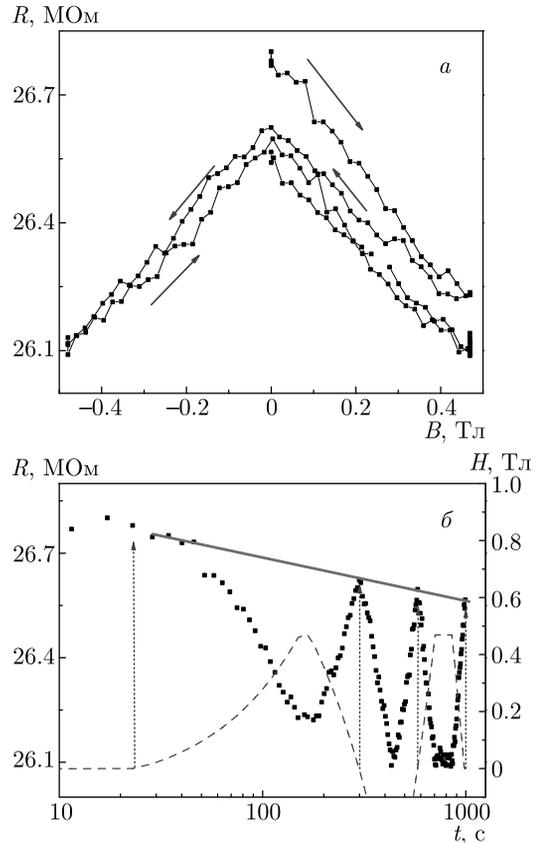


Рис. 2. Зависимости сопротивления при температуре 4.2 К при скорости развертки магнитного поля 0.2 Тл/мин, а — зависимость сопротивления от поля при нескольких последовательных изменениях магнитного поля. Стрелками показано направление изменения магнитного поля; б — зависимость сопротивления от времени в логарифмическом масштабе. Стрелками показаны точки, соответствующие нулевому полю. Штриховая линия изображает протокол развертки поля. Прямая соответствует закону $R = R_0 - \delta R \ln t$

мени как линейная функция $\ln t$. Такая зависимость является одним из характерных признаков спинового стекла.

Похожая картина наблюдалась и при температуре 7 К (рис. 3). На рис. 3а изображены протокол изменения магнитного поля от времени (синяя штриховая линия), а также зависимость сопротивления от времени. Важно, что в этой схеме развертки поля есть промежутки времени, когда поле удерживалось при нулевом значении. В эти моменты времени было возможно провести измерение температуры образца. На рис. 3б изображена зависимость сопротивления от времени в логарифмическом масштабе. В моменты времени, когда магнитное поле равнялось нулю, приведены измерения тем-

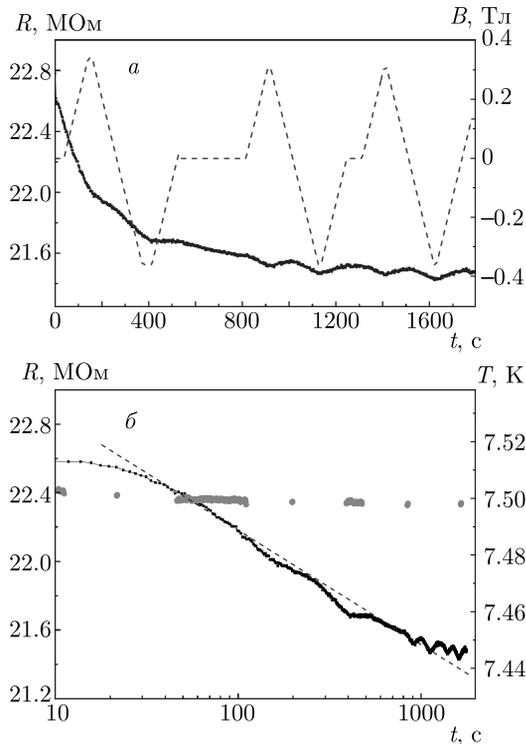


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости сопротивления при медленной развертке магнитного поля при температуре 7 К: *a* — зависимости сопротивления (черная сплошная линия) и магнитного поля (синяя штриховая линия) от времени; *б* — зависимости сопротивления (черная сплошная линия) и температуры (красные точки) от времени в логарифмическом масштабе

пературы (красные точки). Флуктуации температуры с учетом точности измерений составляли примерно 0.01 К, что с учетом температурной зависимости $R \propto \exp(3 \text{ мэВ}/T)$ соответствует изменению сопротивления на 0.6 % и позволяет исключить нестабильность температуры как паразитное явление, приводящее к медленным релаксациям. Штриховая прямая на рис. 3б показывает, что и в этом случае медленная релаксация сопротивления хорошо описывается законом

$$R = R_0 - \delta R \ln t,$$

характерным для спиновых стекол.

Контроль температуры в процессе измерения медленной релаксации однозначно свидетельствует о том, что она связана непосредственно со свойствами образца. Однако в диэлектрических материалах существует еще один физический механизм, приводящий к медленной релаксации свойств со временем, так называемое кулоновское стекло [9]. С помощью этого механизма были объяснены медлен-

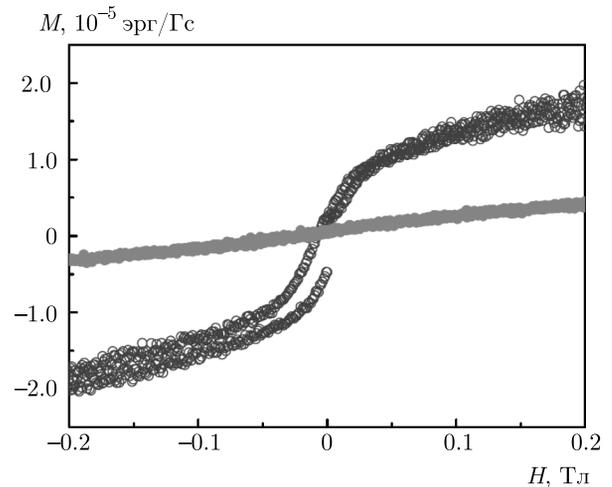


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимость магнитного момента M образца от поля при медленной развертке магнитного поля при $T = 2$ К (синие кружки), наблюдается гистерезис в полях около 0.1 Тл. Для сравнения приведена кривая намагниченности аналогичного образца, находящегося на металлической стороне перехода Мотта – Андерсона (красные заполненные кружки)

ные релаксации магнитосопротивления в похожей системе с модуляционно-легированными квантовыми ямами, где и барьеры, и ямы легировались акцепторами, что приводило к заполнению верхней зоны Хаббарда [10, 11]. Тем не менее кулоновское стекло тесно связано с температурной зависимостью сопротивления

$$R \propto \exp\left(\sqrt{T_0/T}\right)$$

(так называемый закон Эфроса – Шкловского [12]). Этот закон наблюдался в работах [10, 11], но не наблюдается в исследуемом образце. Кроме того, механизм влияния магнитного поля на кулоновское стекло, вообще говоря, не очевиден. В работах [10, 11] был предложен подобный механизм, основанный на частичном заполнении верхней зоны Хаббарда. Этот механизм не применим в нынешнем случае, так как в исследуемом образце верхняя зона Хаббарда не заполнена.

Для того чтобы доказать, что медленные изменения сопротивления связаны именно с образованием спинового стекла, мы провели измерения кривой намагниченности (рис. 4). Намагниченность измерялась при медленной развертке магнитного поля и температуре 2 К. Синими кружками изображена кривая намагниченности нашего образца. Кривая содержит гистерезис в полях около 0.1 Тл. Для сравнения мы привели кривую намагниченности аналогичного образца, в котором концентрация акцептор-

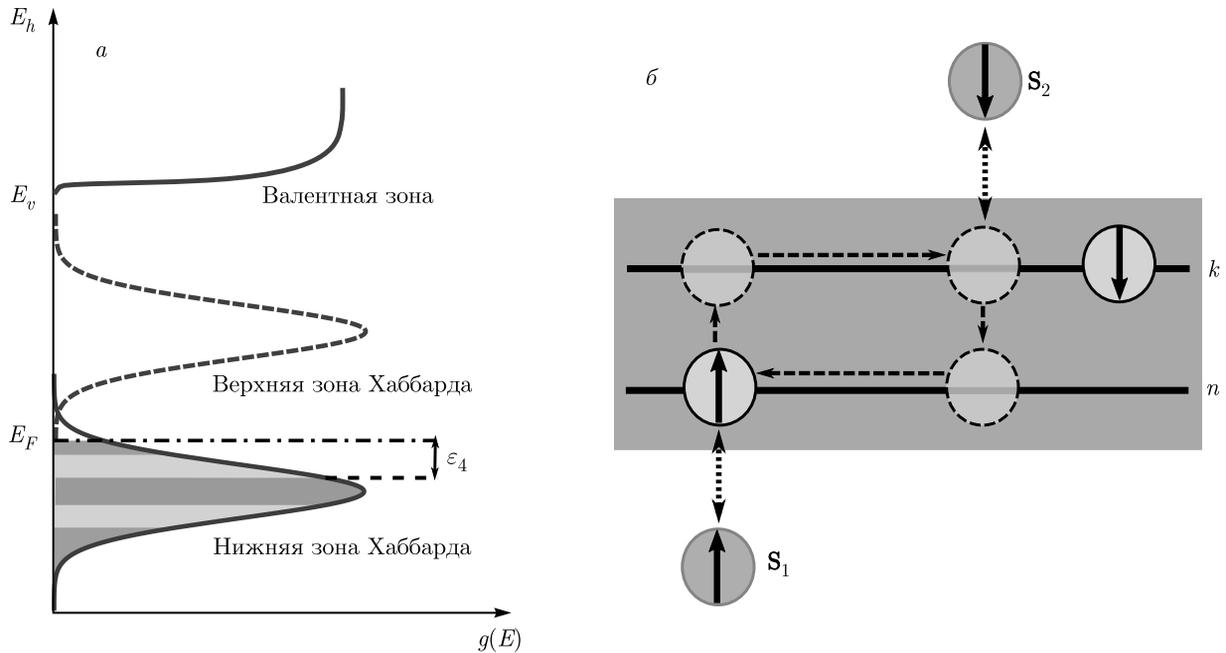


Рис. 5. а) Структура примесной зоны (зависимость плотности состояний g от энергии дырок E_h). б) Схема косвенного обменного взаимодействия

ной примеси составляла $1.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, а измерения проводимости показывали, что образец находится на металлической стороне перехода Мотта–Андерсона (красные заполненные кружки). В этом образце гистерезис не наблюдается. Гистерезис кривых намагниченностей, как и линейная зависимость сопротивления от $\ln t$, является одним из характерных признаков спинового стекла.

Полученные нами данные говорят, что в нашем образце реализуется фаза спинового стекла. Ниже, в разд. 3, мы покажем, почему спиновое стекло может возникать в немагнитных полупроводниках, где наблюдается виртуальный переход Андерсона. В разд. 4 мы покажем, как с фазой спинового стекла связано изотропное отрицательное магнитосопротивление.

3. КОСВЕННОЕ ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В МАТЕРИАЛАХ С ВИРТУАЛЬНЫМ ПЕРЕХОДОМ АНДЕРСОНА

В этом разделе мы показываем, что виртуальный переход Андерсона приводит к особенному косвенному обменному взаимодействию, не характерному ни для диэлектрических, ни для металлических систем. Оно связано с комбинацией сильнолокали-

зованных состояний и однократно заполненных делокализованных состояний. Заметим, что однократность заполнения тесно связана с тем, что система находится на диэлектрической стороне перехода Мотта: в металлических системах делокализованные состояния ниже уровня Ферми заполнены двукратно.

Структура примесной зоны в исследуемом образце изображена на рис. 5а. По вертикальной оси на рисунке отложена энергия дырок E_h , соответственно, валентная зона находится наверху зонной диаграммы. По горизонтальной оси отложена плотность состояний $g(E)$. Примесные состояния (нижняя зона Хаббарда) заполнены дырками вплоть до энергии Ферми E_F . При этом дырки могут быть разделены на сильнолокализованные, имеющие длину локализации, сопоставимую с длиной локализации одиночного акцептора (показанные красным цветом) и делокализованные (показаны зеленым). Так как длина локализации как функция энергии непрерывна, между этими двумя областями лежат «псевдолокализованные» состояния. Для этих состояний волновые функции имеют конечную длину локализации \tilde{a} , однако эта длина больше характерного расстояния между примесями $N^{-1/2}$. Уровень Ферми лежит в области сильнолокализованных дырок. Проводимость определяется активацией делокали-

зованных дырок из «зеленой» области на зонной диаграмме в состояния выше уровня Ферми. Этой активации соответствует энергия ε_4 .

Для нашей задачи важно, что система все еще находится на диэлектрической стороне перехода Мотта, т. е. энергия Хаббарда $E_{Hub} > I$, где I — типичное значение интегралов перекрытия. Это означает, что делокализованные и псевдоделокализованные состояния заполнены лишь однократно. Двукратное заполнение состояния соответствует верхней зоне Хаббарда, которая отделена от нижней достаточно большой энергией E_{Hub} и обозначена на рис. 5а штриховой линией. В равновесии верхняя зона Хаббарда не заполнена, однако ее наличие делает возможными виртуальные переходы дырок между различными делокализованными уровнями. Такие переходы связаны с виртуальным увеличением энергии дырки на величину E_{Hub} . В полностью металлической системе, где делокализованные состояния заполнены двукратно, подобные виртуальные переходы между заполненными уровнями невозможны. Мы предполагаем, что дырки в делокализованных состояниях остаются парамагнитными. Тем не менее, мы считаем, что делокализованные дырки могут участвовать в обменном взаимодействии между спинами локализованных дырок.

Рассмотрим обменное взаимодействие спинов двух дырок в сильнолокализованных состояниях. Известно, что между ними существует прямой обмен, энергия которого J_{dir} экспоненциально убывает с расстоянием:

$$J_{dir} \sim J_0 \exp\left(-\frac{2}{a}|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|\right) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ — положения спинов, $a \ll N^{-1/2}$ — длина локализации для сильнолокализованных состояний, J_0 — энергия взаимодействия двух близко расположенных спинов, \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 — операторы спинов сильнолокализованных дырок.

Тем не менее существует также обменная энергия между локализованным в точке \mathbf{R}_1 спином и делокализованными дырками. Оператор такого обмена можно написать в виде $J_0 a^2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{s}(\mathbf{R}_1)$. Здесь $\mathbf{s}(\mathbf{R}_1) = \mathbf{s}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)$ — оператор спина делокализованных дырок с координатой \mathbf{r} , равной \mathbf{R}_1 . Эта обменная энергия может приводить к виртуальным переходам между делокализованными уровнями, которые, в свою очередь, приводят к косвенному обменному взаимодействию между локализованными дырками. В первом порядке по J_0/E_{Hub} энергию такого косвенного обмена можно записать в виде

$$J_{ind} = \frac{1}{2} \sum_{n,k} \frac{2J_0^2 a^4 (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{s}(\mathbf{R}_1))_{nk} (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{s}(\mathbf{R}_2))_{kn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_k - E_{Hub}}. \quad (2)$$

Схематично процесс, соответствующий слагаемому n, k , изображен на рис. 5б. Обменное взаимодействие с локализованным спином \mathbf{S}_1 виртуально переводит дырку с уровня n на уровень k верхней зоны Хаббарда. Этот процесс возможен, только если спин дырки, уже занимающей состояние k в нижней зоне Хаббарда, противоположен спину дырки на уровне n , что приводит к множителю $1/2$ перед суммой. Далее дырка движется по делокализованному уровню k и взаимодействует с локализованным спином \mathbf{S}_2 , приводя к косвенному обменному взаимодействию.

Так как мы предполагаем $E_{Hub} \gg |\varepsilon_n - \varepsilon_k|$, энергию косвенного обмена можно оценить как

$$J_{ind} \sim -\frac{J_0^2}{E_{Hub}} \Lambda(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (3)$$

где $\Lambda(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ — двухдырочная корреляционная функция,

$$\Lambda(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \sum_{n,k} \psi_n^*(\mathbf{R}_1) \psi_n(\mathbf{R}_2) \psi_k^*(\mathbf{R}_2) \psi_k(\mathbf{R}_1). \quad (4)$$

Здесь суммирование по n и k происходит по всем делокализованным и псевдоделокализованным состояниям (поскольку длина локализации псевдоделокализованных состояний больше расстояния между примесями, они, как и делокализованные состояния принимают участие в косвенном обмене), $\psi_n(\mathbf{r})$ — волновая функция делокализованного состояния n .

Такой механизм косвенного обмена напоминает РККИ-обмен в металлах [13], но также имеет и существенные отличия. В металлах состояния ниже уровня Ферми двукратно заполнены, все состояния выше уровня Ферми пусты. Из-за этого даже виртуальные переходы могут идти, только если состояние n лежит ниже уровня Ферми, а k — выше. В нашем случае все состояния заполнены однократно, так что n и k — любые делокализованные состояния. Необходимо, разумеется, чтобы они были заполнены дырками с разными проекциями спина, что происходит с вероятностью $1/2$. При этом в обменной энергии (3) в знаменателе появляется E_{Hub} .

Косвенная обменная энергия содержит малый множитель J_0/E_{Hub} , однако она не убывает экспоненциально на расстояниях порядка a . Ее зависимость от расстояния определяется функцией Λ . При малых $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$ функция Λ положительна, и ее можно оценить как $N^2 a^4$. Ее зависимость от расстояния $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$ связана с характером состояний, которые обеспечивают косвенный обмен.

Для псевдолокализованных состояний с длиной локализации \tilde{a} имеем $\Lambda \propto \exp(-2|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|/\tilde{a})$, т.е. Λ убывает экспоненциально, но на больших длинах $\tilde{a} \gg N^{-1/2}$, что позволяет иметь эффективный обмен со многими соседями. Для состояний с определенным импульсом, волновые функции которых представляют собой осциллирующие экспоненты, асимптотика Λ была бы степенной (пропорциональной $1/|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^2$). При этом кроме степенного убывания функция $\Lambda(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ содержала бы некоторые осцилляции, но всегда оставалась бы положительной. Вблизи перехода металл–диэлектрик волновые функции имеют сложную структуру. Это может, в принципе, сделать функцию Λ отрицательной на определенных расстояниях.

Для нашей теории важно, что косвенный обмен приводит к обменной энергии порядка J_0^2/E_{Hub} , имеющей отрицательный или случайный знак, на расстояниях, по крайней мере сопоставимых с несколькими расстояниями между примесями. Это нарушает основные предположения теории [3], из которых следует, что при низкой температуре спины образуют глобальное синглетное состояние.

Наиболее вероятная спиновая структура, возникающая при низких температурах при конкурирующих отрицательной J_{dir} и положительной (или имеющей случайный знак) J_{ind} энергиях обмена, — это спиновое стекло. Наличие в образце спинового стекла позволяет объяснить наши результаты: медленную релаксацию магнитосопротивления и гистерезис кривой намагниченности. Ниже мы покажем также, что с помощью спинового стекла можно объяснить и необычное изотропное отрицательное магнитосопротивление.

4. МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ

Как правило, отрицательное магнитосопротивление, линейное по магнитному полю, в диэлектрических образцах связывают с интерференционными (орбитальными) явлениями в прыжковой проводимости [14, 15]. При проводимости по делокализованным состояниям орбитальное отрицательное магнитосопротивление может быть связано с явлением слабой локализации. В обоих случаях магнитосопротивление определяется потоком магнитного поля через некий замкнутый контур, соответствующих возможным путями движения электрона или дырки. Магнитосопротивление должно исчезать в случае, когда движение носителей происходит в одной плоскости и направление магнитного поля так-

же лежит в этой плоскости. Тем не менее измеренное нами отрицательное магнитосопротивление изотропно (см. рис. 1б). Это указывает на его спиновую природу и его связь с фазой спинового стекла. Заметим, что отрицательное магнитосопротивление, линейное в определенной области полей, наблюдалось в различных материалах, где фаза спинового стекла связана с магнитными атомами [8, 16–18]. В этом разделе мы показываем, как такое магнитосопротивление может появляться в спиновых стеклах из-за близости материала к переходу металл–диэлектрик.

Вблизи перехода Андерсона проводимость системы достаточно резко зависит от соотношения $\Delta E/I$, где I — типичное значение интегралов перекрытия, ΔE — разброс энергий примесей. Мы предполагаем, что ΔE состоит из двух частей: случайной энергии ΔE_0 , связанной со случайными электрическими полями, и спиновой случайной энергии ΔE_s . При этом $\Delta E_s \ll \Delta E_0$ и напрямую зависит от намагниченности локализованных спинов. Если локализованные спины полностью поляризованы, то магнитного беспорядка нет и $\Delta E_s = 0$. Эти две энергии никак не коррелированы друг с другом, поэтому полный разброс случайной энергии можно описать как

$$\Delta E = \sqrt{(\Delta E_0)^2 + (\Delta E_s)^2} = \Delta E_0 + \frac{1}{2} \frac{\Delta E_s^2}{\Delta E_0}. \quad (5)$$

Сопротивление системы является функцией $\Delta E/I$, поэтому поправку к нему можно описать как

$$\delta R = \frac{\partial R}{\partial \Delta E/I} \frac{\Delta E_s^2}{2I \Delta E_0}. \quad (6)$$

Для объяснения изотропного линейного магнитосопротивления мы используем модель капель. Мы предполагаем, что спиновое стекло имеет самоподобную структуру, т.е. его поведение можно рассматривать на различных масштабах, различающихся в какое-то число раз.

Рассмотрим масштаб m (где m — длина, измеренная в единицах $N^{-1/2}$, соответствующих расстоянию между соседними локализованными спинами). На этом масштабе мы можем считать, что спиновое стекло условно разбито на капли с концентрацией порядка m^{-2} . Внутри капли спины жестко связаны в каких-то случайных положениях, однако капля может перевернуть свой спин как целое. Полный спин капли связан со случайным характером спинов внутри нее. Он пропорционален корню из площади капли, $\sqrt{m^2} = m$. Соответственно, зеemannовская энергия капли на этом масштабе может быть оценена как $\mu_B g H m$, где μ_B — магнетон Бора, g —

g -фактор дырки. Если границу капли провести фиксированным образом, то с учетом того, что обменная энергия имеет случайный знак, энергия границы капли окажется порядка $\tilde{J}_0 m^{1/2}$. Здесь $\tilde{J}_0 \lesssim J_0$ — характерная обменная энергия, приходящаяся на одну пару локализованных спинов. Уже в таком приближении видно, что вначале происходит перемагничивание на больших масштабах, а только потом — на малых. Тем не менее существует очень большое число возможностей, как именно провести границу капли. Намагниченность капли будет переворачиваться в тот момент, когда зеемановская энергия станет больше минимальной из энергий ее границы. Чем больше размер капли, тем больше существует возможностей провести ее границу. Таким образом, энергия границы больших капель будет существенно меньше $\tilde{J}_0 m^{1/2}$. Соответственно, мы предполагаем, что энергия границы капли зависит от ее размера:

$$J(m) = \tilde{J}_0/m^\alpha, \quad \alpha > -1/2.$$

Мы ожидаем, что величина α может быть положительной, т. е. из-за того, что у больших капель существует очень большое число независимых способов выбора границы, энергия границы даже уменьшается с увеличением размера капли. Подобная модель капель рассматривалась в работе [19].

Капли масштаба m намагничиваются в поле $\mu_B g H = \tilde{J}_0/m^{\alpha+1}$. Или можно сказать наоборот, в магнитном поле H переворачиваются капли на масштабе

$$m = \left(\frac{\tilde{J}_0}{\mu_B g H} \right)^{1/(\alpha+1)}. \quad (7)$$

При намагничивании капель с масштабом m система получает средний спин порядка m^{-1} (поскольку суммарный спин капли порядка m , а концентрация капель порядка m^{-2}). При этом, так как соседние масштабы отличаются друг от друга в какое-то число раз (т. е. их последовательность образует геометрическую прогрессию), эту же оценку можно использовать и для полной намагниченности (средней проекции спина) в поле H :

$$\bar{S} = \left(\frac{\mu_B g H}{\tilde{J}_0} \right)^{1/(\alpha+1)}. \quad (8)$$

Заметим, что такая зависимость намагниченности от поля неаналитична в малых полях.

При выстраивании спинов случайная энергия ΔE_s , связанная с ними, становится меньше. Если средняя намагниченность равна \bar{S} , то примерно $(1 + \bar{S})/2$ спинов смотрят вверх, а $(1 - \bar{S})/2$ — вниз.

Это соответствует дисперсии проекций спина на ось магнитного поля $(1/4)(1 - \bar{S}^2)$. При этом спиновую случайную энергию можно описать как

$$\Delta E_s(H) = \Delta E_s(0) \sqrt{1 - \bar{S}^2}. \quad (9)$$

Это приводит к следующему выражению для магнитосопротивления:

$$R(H) - R(0) = -\frac{\partial R}{\partial \Delta E/I} \frac{\Delta E_s^2(0)}{I \Delta E_0} \left(\frac{\mu_B g H}{\tilde{J}_0} \right)^{2/(\alpha+1)}. \quad (10)$$

При $\alpha > 0$ магнитосопротивление неаналитично при $H \rightarrow 0$. При $\alpha = 1$ оно линейно.

В рамках рассмотренной простой модели намагниченности невозможно надежно определить α . Тем не менее эта модель не специфична для спинового стекла в полупроводниковых структурах, и ее результаты можно сравнить с численными расчетами и измерениями намагниченности и магнитосопротивления в более традиционных спиновых стеклах. Численные расчеты основного состояния двумерного изинговского спинового стекла [20–22] подтверждают неаналитичность зависимости намагниченности от магнитного поля. Тем не менее значения степени в зависимости $\bar{S} \propto H^{1/(\alpha+1)}$, полученные разными методами, различаются (от $1/(\alpha + 1) = 1/3$ [22] до $1/(\alpha + 1) = 0.77$ [21]). Несмотря на то, что мы предполагаем в нашем случае обменное взаимодействие гейзенберговским, мы надеемся, что результаты расчета намагниченности в двумерном изинговском спиновом стекле качественно применимы и к нашему случаю.

При сравнении наших результатов с данными для других спиновых стекол следует заметить, что хотя обсуждающийся нами механизм магнитосопротивления и связан с близостью перехода металл–диэлектрик, связь квадрата намагниченности и магнитосопротивления, $R(H) - R(0) \propto \bar{S}^2$, возникает и при других механизмах и наблюдалась, например, в металлических сплавах [23, 24], проявляющих свойства спинового стекла. Зависимость $\bar{S} \propto \sqrt{H}$ и связанное с этим линейное отрицательное изотропное магнитосопротивление наблюдались в сплаве $\text{Fe}_{61}\text{Ni}_{19}\text{Cr}_{20}$ [25]. Также отрицательное магнитосопротивление, линейное в определенной области полей, наблюдалось в спиновых стеклах, образующихся в субмонослойных пленках железа на InAs [8] и в гидрогенизированном графене [18]. Таким образом, хотя описанная нами картина и не универсальна (например, теоретическая модель не учитывает гистерезиса кривой намагниченности, который не очень велик

в нашем случае, но может играть определяющую роль в других спиновых стеклах), она согласуется с численными расчетами и результатами реальных экспериментов в некоторых спиновых стеклах.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы привели результаты экспериментов, показывающие, что легированный бериллием образец с квантовыми ямами GaAs–AlGaAs, в котором происходит виртуальный переход Андерсона, демонстрирует свойства, типичные для спиновых стекол. В частности, кривая намагниченности образца содержит гистерезис, и сопротивление образца медленно релаксирует во времени после приложения магнитного поля. Также в образце наблюдается изотропное отрицательное магнитосопротивление, линейное в широкой области магнитных полей. Мы связываем эти свойства с тем, что благодаря виртуальному переходу Андерсона в системе дырок, локализованных на акцепторах, возникает спиновое стекло. Его возникновение обусловлено косвенным обменом между спинами сильнолокализованных дырок через однократно заполненные состояния в области виртуального перехода Андерсона. Линейное изотропное отрицательное магнитосопротивление при этом связано с влиянием спинового стекла на переход металл–диэлектрик.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00184). Теоретическая часть работы поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Dietl and H. Ohno, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
2. N. V. Agrinskaya, V. A. Berezovets, A. Bouravlev, and V. I. Kozub, *Sol. St. Comm.* **183**, 2730 (2014).
3. R. N. Bhatt and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 344 (1982).
4. А. И. Вейнгер, А. Г. Забродский, Т. Л. Макарова, Т. В. Тиснек, С. И. Голощанов, П. В. Семенихин, *ЖЭТФ* **143**, 918 (2013).
5. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, Д. С. Полоскин, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 202 (2007).
6. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, Yu. M. Galperin, and D. V. Shamshur, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 395216 (2008).
7. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, N. Yu. Mikhailin, and D. V. Shamshur, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 77 (2017).
8. T. Mochizuki, R. Masutomi, and T. Okamoto, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 267204 (2008).
9. Sh. Kogan, *Phys. Rev. B* **57**, 9736 (1998).
10. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, D. V. Shamshur, and A. Shumilin, *Sol. St. Comm.* **149**, 576 (2009).
11. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, D. V. Shamshur, A. V. Shumilin, and Y. M. Galperin, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 405301 (2010).
12. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer, Berlin (1984).
13. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).
14. В. Л. Нгуен, Б. З. Спивак, Б. И. Шкловский, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 35 (1985); *ЖЭТФ* **89**, 1770 (1985).
15. B. I. Shklovskii and B. Z. Spivak, in *Hopping Transport in Solids*, ed. by M. Pollak and B. Shklovskii, Elsevier, New York (1991), p. 271.
16. A. K. Nigam and A. K. Majumdar, *Phys. Rev. B* **27**, 495 (1983).
17. T. Okamoto, T. Mochizuki, M. Minowa, K. Komatsuzaki, and R. Masutomi, *J. Appl. Phys.* **109**, 102416 (2011).
18. B. R. Matis, B. H. Houston, and J. W. Baldwin, *ACS Nano* **10**, 4, 4857 (2016), <https://doi.org/10.1021/acsnano.6b01982>.
19. D. S. Fisher and D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601 (1986).
20. F. Barahona, *Phys. Rev. B* **49**, 12864 (1994).
21. F. Liers and O. C. Martin, *Phys. Rev. B* **76**, 060405(R) (2007).
22. R. Sepehrinia and F. Chalangari, *Phys. Rev. B* **97**, 104201 (2018).
23. A. K. Majumdar, *Phys. Rev. B* **28**, 2750 (1983).
24. A. K. Majumdar and V. Oestreich, *Phys. Rev. B* **30**, 5342 (1984).
25. T. K. Nath and A. K. Majumdar, *Phys. Rev. B* **57**, 10655 (1998).

АГЛОМЕРАЦИЯ НАНОПРОВОЛОК НА ПОДЛОЖКЕ ДЛЯ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

И. В. Разумовская^{a}, Н. П. Ковалец^a, С. А. Бедин^{a,b}, Ю. В. Григорьев^b*

*^a Московский педагогический государственный университет
119435, Москва, Россия*

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

Поступила в редакцию 29 ноября 2020 г.,
после переработки 16 декабря 2020 г.
Принята к публикации 17 декабря 2021 г.

Предложен энергетический критерий уровня агломерации (слипаемости) нанопроволок, зафиксированных у основания на жесткой подложке и находящихся в сплошной среде (воздух, жидкость), исключающей капиллярные явления. Критерий основан на конкуренции упругой энергии согнутой нанопроволоки и энергии образования ее поверхности и может быть применен также к прилипанию нанопроволок к поверхности, а в модифицированном виде — к слипанию деталей микро- и наномеханизмов. В качестве конкретного примера рассмотрены нанопроволоки для гигантского комбинационного рассеяния света, полученные методом шаблонного синтеза на базе трековых мембран с последующим удалением полимера.

DOI: 10.31857/S0044451021050084

1. ВВЕДЕНИЕ

Массивы нанопроволок (НП), выращенные на подложке, могут быть перспективны при производстве электродов для солнечных батарей и топливных элементов [1–5]. Увеличение длины НП значительно увеличивает эффективную площадь таких электродов. Однако при изготовлении подобных массивов возникает проблема агломерации НП при высыхании. При этом резко уменьшается эффективная площадь поверхности, а вслед за ней и эффективность электродов.

Вместе с тем эффект агломерации (группирование) в ансамблях НП оказался полезным при создании ГКР-активных (ГКР — гигантское комбинационное рассеяние) структур-наноантенн и поверхностей (ГКР-подложек) с большим коэффициентом усиления [6–8]. Особым образом изготовленные метаструктуры/металповерхности могут обладать уникальными магнитными свойствами [9, 10], а также позволяют существенно усиливать сигналы комбинационного рассеяния света и/или люминесцен-

ции вплоть до возможности детектирования отдельных молекул, полупроводниковых квантовых точек (нанокристаллов), центров окраски в кристаллах [11–14].

В нашем случае НП изготавливают из плазменных металлов (или покрывают плазмонными металлами) [15–17]. Оказывается, что при агломерации НП в области их контакта образуется область локального увеличения электрического поля, так называемая горячая точка. За счет этого и удается получить значительное усиление ГКР-сигнала исследуемого вещества, помещенного на такую подложку. При этом наибольшее усиление наблюдается при точечном контакте нескольких НП [18].

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Одним из эффективных и простых способов получения ГКР-подложек с НП является метод шаблонного синтеза [19]. В этом случае поры в шаблоне заполняются металлом (например, серебром). В данной работе в качестве шаблонов были использованы полимерные трековые мембраны (ТМ). На сегодняшний день в мире отлажено производство ТМ с порами разного диаметра, вариацией плотнос-

* E-mail: irinasum9@mail.ru

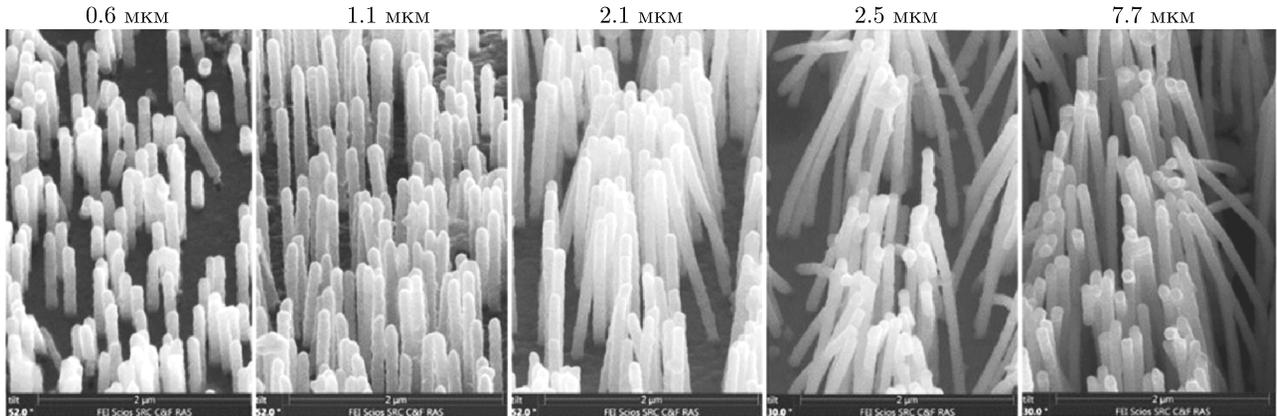


Рис. 1. Микрофотографии НП радиусом 50 нм различной длины

ти их распределения по поверхности, с системами различно ориентированных пор [20]. Используются особенности структуры ТМ, прежде всего одинаковый размер пор в данной партии. В данной работе для получения подложки с НП поры в ТМ из полиэтилентерефталата заполняются серебром, после чего полимерный шаблон удаляется в концентрированном растворе щелочи (6М NaOH) при температуре 60 °С [21], а подложка с НП промывается и сушится. Диаметры пор были выбраны от 60 до 150 нм, поверхностная плотность пор — от $8.4 \cdot 10^9$ до $9.3 \cdot 10^8$ см⁻² соответственно.

Было обнаружено, что при высыхании НП начинают группироваться (рис. 1). При этом чем больше длина НП, тем большее их количество оказывается в пучке. Отмечено, что существует минимальная длина, при которой происходит группировка единичных НП. Поэтому НП именно такой длины являются наиболее эффективными для применения в качестве ГКР-подложек. При слипании соседние НП сгибаются (рис. 1), т. е. возникают упругие силы, препятствующие слипанию. Во многих работах [1, 2, 22], относящихся как к проволокам на подложке, так и к массе отдельных НП, проведены расчеты всех действующих в данной ситуации сил, включая силы межмолекулярного взаимодействия, упругие силы, капиллярные. Задача включает многие параметры, не только физические, но и геометрические, не всегда определяемые, поэтому предсказательная сила расчетов проблематична. Мы предлагаем другой подход, не силовой, а энергетический, сходный с теорией роста трещин в твердом теле, предложенной Гриффитом [23]. Рассматриваем случай, когда НП расположены на жесткой подложке и целиком в среде (воздух, жидкость), так что капиллярные эффекты исключены.

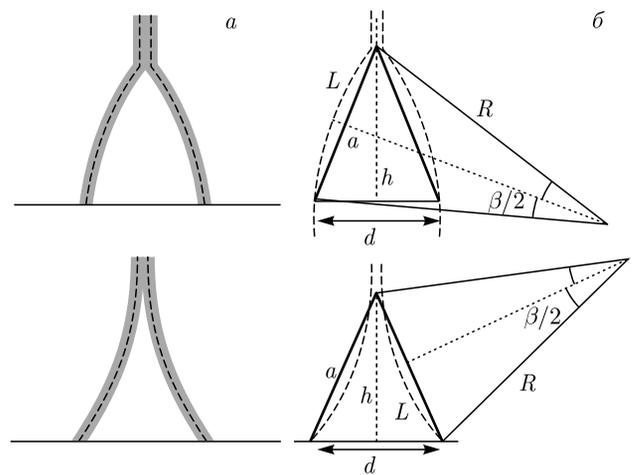


Рис. 2. а) Модель симметричного слипания двух НП (два варианта). б) Геометрические параметры модели, пунктиром изображены оси НП

Рассмотрим модель, в которой слипшиеся НП расположены симметрично (рис. 2а). В других случаях, включая вариант, когда деформацию изгиба испытывает только одна НП, в расчетах появится коэффициент порядка единицы. Обозначим всю длину НП как L_0 , не слипшуюся на данный момент длину обозначим L . Среднее расстояние между НП, полученными на базе ТМ, связано с плотностью пор n соотношением $d = 1/\sqrt{n}$ ¹⁾.

При уменьшении области слипания («раздире» проволок) уменьшается энергия упругой деформации: НП согнуты в меньшей степени. Для умень-

¹⁾ Фактически поры расположены достаточно неравномерно [24], так что использовать это соотношение следует только на конкретном небольшом участке со сравнительно постоянным значением n .

шения области слипания необходимо, чтобы высвобождающейся упругой энергии хватило на образование новой свободной поверхности. При этом энергия образования единицы площади новой поверхности включает собственно поверхностную энергию α_s и энергетические потери. Обозначим эту суммарную энергию α .

Заметим, что такая же ситуация существует в классической теории трещин: необходимость замены в формуле Гриффита α_s на α . Таким образом, чем больше модуль Юнга E и больше упругая энергия, тем меньше вероятность слипания НП. Аналогично эта вероятность уменьшается с увеличением α .

Первоначально НП часто располагаются на расстояниях, существенно больших радиуса межатомного взаимодействия. Можно предположить, что они слипаются в итоге действия среды, случайных механических воздействий и пр. Но сохранится ли это слипание, распространится ли на большую длину или упругость НП уменьшит длину слипания и даже разорвет контакт — все варианты будут зависеть от соотношения двух энергий.

При увеличении не слипшейся части L на величину dL упругая энергия двух НП E_{el} уменьшается на величину dE_{el} из-за их частичного распрямления. Одновременно уменьшается область слипания, для чего надо затратить энергию dE_s . Если $dE_{el} > dE_s$, то слипание при данной длине L энергетически невыгодно, и упругость НП начинает раздирать слипшиеся концы. Если $dE_{el} < dE_s$, упругости НП недостаточно, чтобы препятствовать дальнейшему слипанию, и L уменьшается до установления равновесия. Не исключен случай отсутствия равновесия, хотя бы из-за ограниченной длины проволок.

Для прикладного использования слипания в оптике [19] желательно, чтобы слиплись лишь самые концы НП. Это означает, что равновесие должно возникать при $L \approx L_o$, где НП практически выпрямились и не напряжены.

Следует заметить, что переход к слипшейся части, вероятно, не должен быть столь резким, как на нашей верхней схеме (рис. 2). Здесь также прослеживается аналогия с теорией трещин, которые в действительности в конце имеют не конечный радиус кривизны, а переход от него к асимптотически смыкающимся атомным плоскостям [23]. Мы предполагаем, что этот переходный участок при увеличении или уменьшении области смыкания передвигается, как бегунок застежки «молния», с постоянной энергией, которую в силу постоянства можно не учитывать при изменении L .

Заметим, что сходный расчет Френкель выполнил для расщепления пластины неограниченной длины [25], пытаясь обосновать существование равновесных трещин и используя для этого нелинейный характер сил межатомного взаимодействия.

Предполагаем, что изгиб НП соответствует окружности радиусом R . Обозначим радиус самих НП r . Тогда теория упругости дает следующее выражение для упругой энергии двух НП [26]:

$$E_{el} = \frac{E\pi r^4 L}{4R^2}, \quad (1)$$

где E — модуль Юнга.

Радиус R является функцией длины L , поэтому изменение упругой энергии при изменении L на величину dL равно

$$dE_{el} = \frac{E\pi r^4}{4} \left(\frac{1}{R^2} - \frac{2L}{R^3} \frac{\partial R}{\partial L} \right) < 0. \quad (2)$$

Изменение энергии поверхности двух НП при изменении L на dL равно

$$dE_s = 2\alpha\Phi(r) dL. \quad (3)$$

Функция $\Phi(r)$ отражает зависимость размера области действия сил межмолекулярного взаимодействия от радиуса r . Можно показать, что $\Phi(r) \approx 2\sqrt{2rx_o}$, где x_o — некоторый характерный радиус взаимодействия, порядка равновесного расстояния между атомами. Условие равновесия²⁾

$$dE_{el} + dE_s = 0$$

или

$$\frac{E\pi r^4}{4} \left[\frac{1}{R^2} - \frac{2L}{R^3} \frac{\partial R}{\partial L} \right] = 0 \quad (4)$$

удовлетворяется при некотором значении $L = L^*$ и соответствующем $R^* = R(L^*)$, когда

$$\frac{2L}{R^3} \frac{\partial R}{\partial L} - \frac{1}{R^2} = \frac{8\alpha\Phi(r)}{E\pi r^4}. \quad (4a)$$

Из рис. 2б следуют три геометрических условия:

$$L = R\beta, \quad (5)$$

$$a^2 = h^2 + \frac{d^2}{4}, \quad (6)$$

²⁾ В модели не учтена работа по перемещению центра тяжести НП по мере увеличения или уменьшения степени слипания. Полагая, что такое перемещение не превышает $dh \approx dL$, можно показать, что эта работа в силу наноразмеров проволок на порядки меньше dE_s .

$$\frac{a}{2} = R \sin \frac{\beta}{2}. \tag{7}$$

Кроме того, в соответствии с нашей моделью $dL = dh$, откуда с учетом начальных условий имеем

$$L = h + L_n - h_n = h + C, \tag{8}$$

где $C = L_n - h_n$ — величина случайная (учитывая случайный характер начального соприкосновения НП), но меняющаяся в некоторых разумных пределах, порядка $d \div d/2$.

Отметим также очевидное геометрическое условие самой возможности слипания:

$$L_o > \frac{d}{2}. \tag{9}$$

Из уравнений (5)–(7) следует, что

$$2 \sin \left(\frac{L}{2R} \right) = \frac{\sqrt{(L-C)^2 + d^2/4}}{R}. \tag{10}$$

Дифференцирование (9) по L дает значение $\partial R/\partial L$:

$$\frac{\partial R}{\partial L} = \frac{R \left[\frac{L-C}{\sqrt{(L-C)^2 + d^2/4}} - \cos \left(\frac{L}{2R} \right) \right]}{\sqrt{(L-C)^2 + d^2/4} - L \cos \left(\frac{L}{2R} \right)}. \tag{11}$$

Рассмотрим частный случай «длинных» НП, слипающихся достаточно близко к вершине. Это тот случай, который представляет интерес для их практического использования в оптике. Тогда

$$h^2 = (L-C)^2 \gg \frac{d^2}{4}, \quad L \gg C. \tag{12}$$

В этом случае

$$\frac{\partial R}{\partial L} \approx \frac{R}{L} \tag{13}$$

и условие равновесия приобретает следующий простой вид:

$$\frac{E\pi r^4}{8\alpha\Phi(r)} = R_*^2,$$

или

$$\frac{Er^3\sqrt{r}}{\alpha} = C_o R_*^2, \tag{14}$$

где $C_o = 16\sqrt{2x_o}/\pi$, откуда

$$R_* = \sqrt{\frac{E}{\alpha C_o}} r^{7/4}. \tag{15}$$

Уравнение (15) определяет радиус R_* изгиба длинных НП, при котором наступает равновесие при смыкании вблизи их концов. Действительно, при условии (12) формула (10) приобретает вид $\sin(L/2R) \approx L/2R$, соответствующий разложению в

Таблица. Значения равновесного радиуса изгиба R_* для НП разных радиусов и соответствующие значения L_*

r , нм, радиус НП	R_* , мкм, по формуле (16)	R_* , мкм, по формуле (17)	L_* , мкм, графическое решение
75	2.4	6.3	2.7
50	1.3	3.4	1.8
30	0.6	1.6	0.8

ряд синуса малого угла. Когда проволока выпрямляется полностью, в момент полного отлипания, радиус кривизны R становится бесконечно большим, а угол $\beta = 0$. Значение случайной константы C в формулу (15) не входит.

Условие (15) определяется материальными константами проволочек (E , α , отчасти x_o) и в существенной степени их радиусом r . Не исключено, что при некоторых сочетаниях этих констант условие не удовлетворяется, равновесие сил невозможно. Полная длина проволочки L_o в итоговую формулу не входит, она только определяет возможность приближения (12).

Из формулы (15) следует, что увеличение упругости (модуля Юнга E) и уменьшение удельной работы образования свободной поверхности α приводят к увеличению R_* , т. е. к уменьшению слипшейся области. Один из методов влияния на α — введение среды, изменяющей поверхностную энергию. Применительно к разрушению это эффект Ребиндера. В работе [27] для изолированных силиконовых НП в водной среде использовалась обработка, приводящая к гидрофобности поверхности и уменьшению α . R_* увеличивается также с увеличением радиуса r НП.

Проведем некоторые оценки R_* для серебряных НП.

Для оценок можно считать сечение проволок квадратным, со стороной $2r$, т. е. $\Phi(r) = 2r$. Тогда выражение для R_* запишется в виде

$$R_* = \sqrt{\frac{E\pi r^4}{8\alpha\Phi(r)}} = \sqrt{\frac{E\pi r^3}{16\alpha}}. \tag{16}$$

Полагая, что $\alpha = \alpha_s$ и для серебра значения модуля упругости и поверхностного натяжения такие же, как для массивного материала ($E_{Ag} = 7.9 \cdot 10^{10}$ Н/м² и $\alpha_{Ag} = 1140$ мН/м), получаем для НП разных радиусов r результаты, приведенные в таблице.

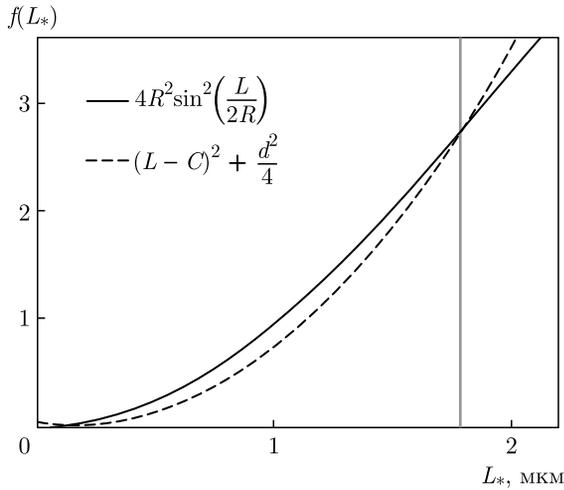


Рис. 3. Пример графического решения уравнения (10) для НП радиусом 50 нм. Принято $C = d/2$

Для грубых оценок можно использовать известную формулу Орована для теоретической прочности σ_m : $\sigma_m \approx 0.1E$, вместе с оценкой σ_m по Цвикки: $2\alpha \approx 0.1b\sigma_m$, где b — постоянная решетки. Тогда R_* для данного материала будет зависеть только от его значения b :

$$R_* \approx 3.5 \sqrt{\frac{\pi r^3}{b}}. \tag{17}$$

Для массивного серебра $b = 4.1 \text{ \AA}$. Значения R_* , полученные по формуле (17), отличаются примерно в 2.5 раза от результатов расчетов по формуле (16) и меняются с r симбатно с ними.

Для более точных расчетов следует учитывать размерный эффект, т.е. зависимость E , α и b от диаметра НП, а также от специфических условий ее выращивания и ориентации кристаллов внутри поры ТМ.

НП слипаются вблизи вершины, если их не слипшаяся длина L_* , соответствующая R_* , примерно равна всей длине L_0 . Если $L_* > L_0$, слипания вообще не происходит.

Чтобы по значениям R_* найти равновесную длину L_* не слипшейся части НП, надо графически решить трансцендентное уравнение (10), т.е. найти точку пересечения графиков двух функций от L , рассматривая R_* как параметр. Удобнее возвести обе стороны уравнения (10) в квадрат. На рис. 3 приведены такие графики для НП радиусом 50 нм. При $C = d/2$ длина $L_* = 1.8 \text{ мкм}$, при $C = d$ длина $L_* = 2.3 \text{ мкм}$.

Значения L_* , равные примерно $1.8 \div 2.3 \text{ мкм}$, соответствуют фотографии рис. 1. Слипания НП длиной 0.6 и 1.1 мкм не происходит, так как их длина

меньше L_* , а при длине 2.1 мкм и больше наблюдается слипание их вершин.

Заметим, что существование равновесия при R_* и L_* подразумевает уменьшение упругой энергии при положительном значении dL , т.е. отрицательное значение выражения в скобках в равенствах (2) и (4):

$$\frac{1}{R^2} - \frac{2L}{R^3} \frac{\partial R}{\partial L} < 0 \text{ или } \frac{2L}{R} \frac{\partial R}{\partial L} > 1. \tag{18}$$

Чисто геометрическое, на первый взгляд, условие (18) фактически в неявном виде наследует зависимость от геометрии упругой и поверхностной энергии. Упругая энергия в данной задаче зависит и от длины напряженной части проволоки L , и от радиуса ее изгиба R , причем обе эти величины в процессе изменяются. Можно показать, что для использованного ранее условия (12) ($L \gg C$) неравенство (18) приобретает вид

$$\frac{2\beta(\beta - \sin \beta)}{4 \sin^2(\beta/2) - \beta \sin \beta} > 1, \tag{19}$$

где β — угол на рис. 2. Графическое рассмотрение неравенства (19) показывает его справедливость. При этом

$$\frac{\partial \beta}{\partial L} = -\frac{1}{R} \left(\frac{L}{R} \frac{\partial R}{\partial L} - 1 \right) \tag{20}$$

и при выполнении условия (18) производная $\partial \beta / \partial L < 0$: с уменьшением области слипания (увеличением L) угол β уменьшается, и НП распрямляются.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Предложена модель и простой энергетический критерий слипания НП на жесткой подложке при исключении капиллярных эффектов, т.е. в сплошной газовой или жидкой среде. В критерий кроме радиуса НП и расстояния между ними входят только две характеристики их материала (E и α , зависящее от среды).

2. Выведена формула для случая слипания «длинных» НП вблизи их вершины, представляющего интерес для оптики.

3. Результаты расчета для серебряных НП радиусом 50 нм соответствуют экспериментальным данным.

4. Предложенный энергетический критерий и часть формул могут быть обобщены на случаи слипания НП с поверхностью и на другие случаи слипания деталей микро- и наномеханизмов в газовой или жидкой среде.

Благодарности. Авторы благодарят А. В. Наумова за ценные замечания.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания МПГУ по теме «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике». Измерения проводились с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.S. Togonal, L. He, P. Roca i Cabarrocas and Rusli, *Langmuir* **30**, 10290 (2014).
2. M. Tian, W. Wang, Y. Wei, and R. Yang, *J. Power Sources* **211**, 46 (2012).
3. X. Wu, *Sol. St. Ionics* **149**, 185 (2002).
4. В. М. Федосюк, *Наноструктурные пленки и нанопроволоки*, Изд. центр БГУ, Минск (2006).
5. M. Vazquez, *Magnetic Nano-and Microwires: Design, Synthesis, Properties and Applications*, Woodhead Publ. (2020).
6. А. Е. Краснок, И. С. Максимов, А. И. Денисюк, П. А. Белов, А. Е. Мирошниченко, К. Р. Симовский, Ю. С. Кившарь, *Письма в ЖЭТФ* **183**, 561 (2013).
7. В. И. Кукушкин, В. Е. Кирпичев, Е. Н. Морозова, В. В. Соловьев, Я. В. Федотова, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 38 (2020).
8. К. В. Аникин, А. Г. Милехин, Е. Е. Родякина, С. Л. Вебер, А. В. Латышев, Д. Р. Т. Зан, *Сибирский физич. ж.* **14**, 63 (2019).
9. D. A. Cherkasov, D. L. Zagorskii, R. I. Khaibullin, A. E. Muslimova, and I. M. Doludenko, *Phys. Sol. St.* **62**, 1695 (2020).
10. D. L. Zagorskiy, K. V. Frolov, S. A. Bedin, I. V. Perunov, M. A. Chuev, A. A. Lomov, and I. M. Doludenko, *Phys. Sol. St.* **60**, 2115 (2018).
11. И. Ю. Еремчев, М. Ю. Еремчев, А. В. Наумов, *УФН* **189**, 312 (2019).
12. С. И. Кулик, И. Ю. Еремчев, П. Ю. Апель, Д. Л. Загорский, А. В. Наумов, *Ж. прикл. спектр.* **85**, 814 (2018).
13. K. R. Karimullin, A. I. Arzhanov, I. Yu. Eremchev, A. V. Naumov, B. A. Kulnitskiy, and N. V. Surovtsev, *Laser Phys.* **29**, 124009 (2019).
14. A. G. Milekhin, S. A. Kuznetsov, L. L. Sveshnikova, T. A. Duda, I. A. Milekhin, E. E. Rodyakina, A. V. Latyshev, V. M. Dzhagan, and D. R. T. Zahn, *J. Phys. Chem. C* **121**, 5779 (2017).
15. S. J. Lee, A. R. Morrill, and M. Moskovits, *J. Amer. Chem. Soc.* **128**, 2200 (2006).
16. M. S. Schmidt, J. Hubner, and A. Boisen, *Adv. Mater.* **24**, OP11 (2012).
17. T. Qiu, X. L. Wu, J. C. Shen, P. C. T. Ha, and P. K. Chu, *Nanotechnology* **17**, 5769 (2006).
18. C. Zhu, G. Meng, P. Zheng, Q. Huang, Z. Li, X. Hu, X. Wang, Z. Huang, F. Li, and N. Wu, *Adv. Mater.* **28**, 4871 (2016).
19. E. P. Kozhina, S. A. Bedin, I. V. Razumovskaya, and A. V. Zalygin, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1283** (2019).
20. P. Apel, *Radiat. Measurements* **34**, 559 (2001).
21. S. A. Bedin, O. G. Rybalko, N. B. Polyakov, D. L. Zagorskii, I. V. Razumovskaya, G. G. Bondarenko, and V. A. Oleinikov, *Inorganic Mater.: Appl. Res.* **1**, 359 (2010).
22. Y. P. Zhao and J. G. Fan, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 103123 (2006).
23. A. A. Griffith, *Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A* **221**, 163 (1921).
24. В. Н. Гумирова, И. В. Разумовская, П. Ю. Апель, С. А. Бедин, С. Л. Баженов, Г. С. Абдурашидова, *Преподаватель XXI век* **2**, 207 (2013).
25. Я. И. Френкель, *ЖТФ* **22**, 1857 (1952).
26. И. Н. Снеддон, *Классическая теория упругости*, И. Н. Снеддон, Д. С. Берри, Вузовская книга, Москва (2008).
27. Г. М. Бартенев, И. В. Разумовская, П. А. Ребиндер, *Коллоид. ж.* **20**, 654 (1958).

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В НАНОПРОВОДЕ НА ОСНОВЕ КВАНТОВОЙ ЯМЫ В МАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ С АНИЗОТРОПНЫМ КОНФАЙНМЕНТОМ

*П. Калпана, К. Джаякумар**

*Nanostructure Lab, Department of Physics, The Gandhigram Rural Institute — Deemed to be University
Gandhigram-624 302, Tamilnadu, India*

Поступила в редакцию 7 марта 2020 г.,
после переработки 7 марта 2020 г.
Принята к публикации 20 апреля 2020 г.

(Перевод с английского)

IMPURITY STATES IN SEMIMAGNETIC QUANTUM WELL WIRE WITH ANISOTROPIC COFINEMENT ALONG IN-PLANE DIRECTIONS

P. Kalpana, K. Jayakumar

Используя приближение эффективной массы и вариационный метод огибающих функций, мы провели расчеты энергии связи тяжелых дырок, локализованных на акцепторных примесях, для изучения влияния формы потенциала конфинмента в двух разных направлениях в нанопроводе на основе квантовой ямы (НПЯМ). Сравниваются результаты решений уравнения Шредингера, в котором были использованы эффективные массы двух разных типов, изотропная эффективная масса и анизотропная, зависящая от направления. Это сделано для того, чтобы выяснить, как используемые параметры влияют на результат теоретических расчетов в структурах с квантовыми нанопроводами с учетом того, что подвижность носителей заряда зависит от эффективной массы. В теории среднего поля с использованием модифицированной функции Бриллюэна был рассчитан сдвиг поляронной энергии, который происходит вследствие обменного взаимодействия между спином носителя заряда и спином иона Mn^{2+} . Согласно полученным результатам, эффекты размерного квантования становятся существенны при размере нанопровода около 30 \AA , а энергия связи в случае изотропной эффективной массы имеет большее значение, чем в случае анизотропной эффективной массы. Магнитное поле меняет величину проникновения волновой функции дырки под потенциальный барьер, что приводит к уменьшению энергии связи. Обменное взаимодействие не приводит к существенному спин-поляронному сдвигу вследствие наличия конкуренции прямого и параболического потенциалов в НПЯМ с анизотропным конфинментом такого типа.

DOI: 10.31857/S0044451021050096

1. ВВЕДЕНИЕ

Нанопровода на основе квантовой ямы (НПЯМ) с квантованием в двух поперечных направлениях и неограниченным движением в одном продольном

направлении [1, 2] с носителями высокой подвижности могут найти применение в различных оптоэлектронных устройствах, таких как высокопроизводительные НПЯМ-лазеры [3, 4] и приборы спинтроники [5, 6]. Формирование НПЯМ в магнитных полупроводниках (МП) позволяет управлять разными физическими параметрами посредством магнитного поля, поскольку в МП, в отличие от других, немагнитных, полупроводников, присутствуют магнитные ионы. Спины магнитных ионов в ре-

* E-mail: kjkumar_gri@rediffmail.com

шетке магнитных полупроводников характеризуются сильным обменным $sp-d$ -взаимодействием со спинами свободных носителей, присутствующих в таких системах, что приводит к гигантскому зеемановскому расщеплению [7–9] уровней энергии и появлению связанного магнитного полярона [10, 11]. Использование этих эффектов в НПЯМ повышает возможность независимого контроля примесных состояний (электронов, тяжелых дырок, легких дырок) в присутствии внешнего магнитного поля и влияния на межподзонные оптические переходы. Пространственная локализация волновой функции в этих низкоразмерных системах зависит в основном от формы потенциала у границ гетероструктуры и от положения примеси. Примесные состояния в НПЯМ на основе магнитных и немагнитных полупроводников изучались в большом количестве экспериментальных [12–15] и теоретических работ [16–23]. Эффективная масса носителей играет важную роль в определении энергии связи и множества других параметров полупроводниковых систем, особенно если структура изготавливается на основе несхожих полупроводниковых материалов. В работе [24] доказано, что при решении уравнения Шредингера в системе с пониженной размерностью использование эффективных масс, соответствующих объемной зонной структуре, некорректно. Для согласования результатов эксперимента и теоретических моделей нужно использовать значения эффективных масс электронов, тяжелых и легких дырок (ТД и ЛД), зависящие от направления. Целью настоящей работы является определение энергии связи акцепторов, а также сдвига поляронной энергии вследствие обменного взаимодействия между спинами свободных носителей и спинами ионов Mn^{2+} в НПЯМ гетероструктур $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$. Конфайнмент носителей предполагается анизотропным, а именно, ограничивающий потенциал предполагается прямоугольным в направлении x и параболическим в направлении y в присутствии внешнего магнитного поля. Расчеты выполнялись в приближении эффективной массы с использованием вариационного метода для структур состава $x = 0.3$, содержащих ионы Mn^{2+} . Выполнены расчеты влияния зависящей от направления эффективной массы, вычисленной при помощи \mathbf{k} , \mathbf{p} -метода с использованием параметров Латтинжера, на энергию связи, а также спин-поляронного сдвига (СПС) тяжелых дырок, связанных на акцепторных примесях, и проведено сравнение с результатами, полученными для изотропной эффективной массы.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Гамильтониан водородоподобной акцепторной примеси в магнитном поле в анизотропной НПЯМ $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$ в приближении эффективной массы записывается в виде

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + V(y) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{e^2}{\epsilon r} + \frac{eB}{2m^*c} \mathbf{L}_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} \mathbf{L}^2, \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса ТД, удерживаемой в НПЯМ, а ϵ — диэлектрическая постоянная $CdTe$. \mathbf{L}_z и \mathbf{L}^2 — операторы, связанные с угловым моментом, создаваемым магнитным полем. В настоящей работе используются две разные эффективные массы. Значения эффективных масс тяжелых дырок (ТД) берутся в уравнении (1) постоянными по всем направлениям внутри НПЯМ (приближение изотропной эффективной массы, случай I) и зависящими от направления (приближение анизотропной эффективной массы, случай II). Последние получены из параметров Латтинжера в многозонной \mathbf{k} , \mathbf{p} -модели для тяжелых дырок и выражаются через эти параметры посредством соотношений [25] соответственно в направлении оси z и вдоль осей x , y :

$$\begin{aligned} m_{HH(z)}^* &= (\gamma_1 - 2\gamma_2)^{-1}, \\ m_{HH(x,y)}^* &= (\gamma_1 + \gamma_2)^{-1}, \end{aligned} \quad (2)$$

где γ_1 и γ_2 — параметры Латтинжера, значения которых взяты из работы [26]: $\gamma_1 = 4.14$, $\gamma_2 = 1.09$. Числовые значения эффективных масс, используемых в двух указанных выше приближениях для $CdTe$ и $Cd_{1-0.3}Mn_{0.3}Te$, записываются в случае I в виде

$$m_w^* = 0.60, \quad m_b^* = 0.67, \quad (3)$$

а в случае II в виде

$$\begin{aligned} m_{w,z}^* &= 0.51, \quad m_{b,z}^* = 0.586, \\ m_{w,xy}^* &= 0.1912, \quad m_{b,xy}^* = 0.2677. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь индексы « w », « b » обозначают соответственно квантовую яму $CdTe$ и барьер $Cd_{1-x}Mn_xTe$. Внешнее приложенное магнитное поле \mathbf{B} характеризуется параметром $\gamma = \hbar\omega_c/2R^*$ (ω_c — циклотронная частота), где $\gamma = 1$ соответствует приблизительно 1131 Тл в случае изотропной эффективной массы и приблизительно 865 Тл в случае анизотропной, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — среднее расстояние между атомом акцепторной примеси и связан-

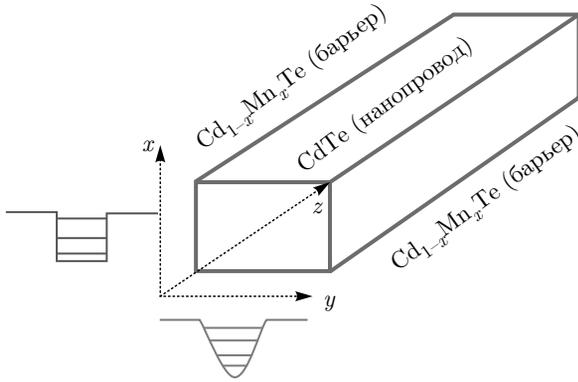


Рис. 1. Схематическое изображение профилей ограничивающего потенциала вдоль двух направлений в поперечном сечении нанопровода на основе квантовой ямы в магнитном полупроводнике (НПЯМ)

ной на нем дыркой, $V(x)$ и $V(y)$ — ограничивающие потенциалы в НПЯМ магнитного полупроводника CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe в направлениях соответственно x и y , профили которых изображены на рис. 1, $V(x)$ — прямоугольный потенциал высоты V_0 , а $V(y)$ — потенциал параболической ямы вида $\frac{1}{2} m_w^* \omega^2 y^2$. Эти потенциалы даются выражениями

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq L/2, \\ V_0, & |x| > L/2, \end{cases} \quad (5)$$

$$V(y) = \begin{cases} \frac{1}{2} m_w^* \omega^2 y^2, & |y| \leq L/2, \\ V_0, & |y| > L/2, \end{cases}$$

где L — размер в прямоугольном сечении НПЯМ, ω — частота осциллятора в параболическом потенциале, а скачок валентной зоны V_0 составляет 30% от величины ΔE_g^B , где ΔE_g^B — изменение ширины запрещенной зоны при включении магнитного поля, которое дается формулой [27]

$$\Delta E_g^B = \Delta E_g^0 \left[\frac{\eta \exp[\zeta \gamma] - 1}{-1} \right]. \quad (6)$$

Вследствие этого величина ограничивающего потенциала может быстро убывать, что проявляется в изменении электрических и оптических свойств. Здесь

$$\eta = \exp[\zeta \gamma_0],$$

где ζ является параметром ($\zeta = 0.5$), а γ_0 — нормированное значение критического магнитного поля, ΔE_g^B и ΔE_g^0 — ширины запрещенной зоны соответственно в магнитном поле и в его отсутствии. Ширина запрещенной зоны дается выражением

$$E_g(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}) = 1606 + 1587x \text{ мэВ}$$

(здесь x — концентрация ионов Mn^{2+}). Критическое магнитное поле γ_0 определяется содержанием магнитной примеси. При разных составах его можно вычислить по формуле

$$B_0 [\text{Тл}] = A_2 e^{n x},$$

где $A_2 = -0.57$ и $n = 16.706$, что наилучшим образом описывает доступные из экспериментальных данных значения критических полей, полученные с помощью экстраполяции [27]. Критическое магнитное поле, при котором потенциальный барьер в рассматриваемой системе исчезает, соответствует величине $\gamma_0 = 0.756$. Наши вычисления проводились для $\gamma = 0$, $\gamma = 0.03$ и $\gamma = 0.06$, что соответствует величинам магнитного поля, равным соответственно нулю, примерно 34 Тл и 68 Тл.

Затравочная волновая функция для нахождения основного состояния акцепторной примеси в НПЯМ с разного типа ограничивающими потенциалами вдоль двух направлений имеет вид

$$\Psi = N_{1s} \psi(x) \psi(y) \exp[-\lambda r], \quad (7)$$

где N_{1s} — нормировочная константа, а λ — вариационный параметр. Затравочные функции $\psi(x)$ и $\psi(y)$ вдоль направлений соответственно x и y выбираются в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} \cos[\alpha_s x], & |x| \leq L/2, \\ B_s \exp[-\beta_s x], & |x| > L/2, \end{cases} \quad (8)$$

$$\psi(y) = \begin{cases} \exp\left[-\frac{1}{2} \alpha_p y^2\right], & |y| \leq L/2, \\ B_p \exp[-\beta_p y], & |y| > L/2, \end{cases}$$

где

$$\alpha_s = (2m_w^* E_s / \hbar^2)^{1/2}, \quad \beta_s = (2m_b^* (V_0 - E_s) / \hbar^2)^{1/2},$$

$$\alpha_p = \frac{m_w^* \omega}{\hbar^2}, \quad \beta_p = (2m_b^* (V_0 - E_p) / \hbar^2)^{1/2}.$$

Коэффициенты B_s и B_p находятся после выбора подходящих граничных условий для НПЯМ. Величины E_s и E_p являются энергиями нижних подзон соответственно в прямоугольном и параболическом потенциалах. Энергию связи на акцепторной примеси E_B^{QWW} в присутствии внешнего магнитного поля найдем, решая уравнение Шредингера вариационным методом. Она дается выражением

$$E_B^{QWW} = E_s + E_p + \gamma - \langle H \rangle_{min}. \quad (9)$$

Обменное взаимодействие между спином дырки и ионом Mn^{2+} записывается в следующем виде [10]:

$$H_{exc} = - \sum_i J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathbf{s} \cdot \mathbf{S}_i, \quad (10)$$

где J — постоянная обменного взаимодействия дырки со спином s в положении \mathbf{r} и ионов Mn^{2+} со спинами \mathbf{S}_i в положениях \mathbf{R}_i .

В теории среднего поля с использованием модифицированных функций Бриллюэна спин-поляронный сдвиг вследствие обменного взаимодействия в присутствии внешнего магнитного поля \mathbf{B} дается следующими выражениями [10, 28]:

$$E_{exc} = \frac{\beta N_0}{2} \{ \langle \Psi | x_{in} S_0(x_m) B_s(y_1) | \Psi \rangle + \langle \Psi | x_{out} S_0(x) B_s(y_2) | \Psi \rangle \}, \quad (11)$$

$$B_s(y_j) = \frac{2S+1}{2S} \text{ctg} \frac{2S+1}{2S} y_j - \frac{1}{2S} \text{ctg} \frac{y_j}{2S}, \quad (12)$$

$$y_j = \frac{S\beta |\Psi_j|^2}{2k_B T_{eff}} + \frac{g\mu_B S B}{k_B T_{eff}},$$

где S — спин иона Mn^{2+} ($= 5/2$), $N_0 = = 2.94 \cdot 10^{22}$ ат./см³, а β — параметр обменного взаимодействия, значение которого вычисляется из экспериментального значения константы sp - d -взаимодействия $\beta N_0 = -880$ мэВ [28], x_{in} и x_{out} определяют количество ионов Mn^{2+} в нанопроводе и в барьерной области и удовлетворяют соотношению

$$x_{out} - x_{in} = x = 0.3.$$

Кроме того, в приведенных выше выражениях $g \approx 2$, μ_B — эффективный магнетон Бора, k_B — постоянная Больцмана, а $B_s(y)$ — модифицированная функция Бриллюэна. В случае МП с произвольным x приходится вводить феноменологические подгоночные параметры, значение насыщения S_0 и эффективную температуру $T_{eff} = T + T_0$, определяемую значением T_0 , числовые значения которых для разных концентраций ионов Mn^{2+} были взяты из работы [28].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В этом разделе обсуждаются результаты исследования энергии связи водородоподобной акцепторной примеси в НПЯМ с ограничивающим прямоугольным потенциалом в направлении x и параболическим потенциалом в направлении y в присутствии магнитного поля различных амплитуд ($\gamma = 0$, $\gamma = 0.03$ и $\gamma = 0.06$), направленного вдоль оси нанопровода z , для образцов с содержанием ионов Mn^{2+} , соответствующим $x = 0.3$. Зависимость энергии связи от размера НПЯМ CdTe , окруженного материалом барьера $\text{Cd}_{1-0.3}\text{Mn}_{0.3}\text{Te}$, представлена на

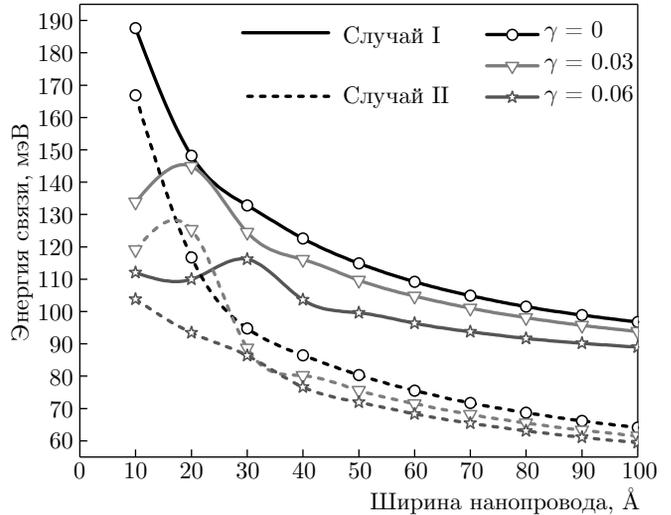


Рис. 2. Зависимость энергии связи на акцепторе от ширины нанопровода в различных магнитных полях для случаев I и II

рис. 2 для случаев изотропной эффективной массы (случай I) и анизотропной эффективной массы (случай II). Данные на рис. 2, показывающие существенное уменьшение энергии связи носителей, а также возникновение немонотонности на зависимости от размера нанопровода и ее смещение при приложении магнитного поля, согласуются с особенностями, ожидаемыми в низкоразмерных системах [10, 27, 29], что подтверждает правильность полученных нами результатов. Приложение магнитного поля изменяет электронные состояния пространственно-ограниченных носителей в НПЯМ по следующей причине: сильное обменное взаимодействие между спином носителя и спинами магнитных ионов Mn^{2+} изменяет скачок в валентной зоне в присутствии магнитного поля согласно уравнению (7). Изменение потенциального барьера для тяжелых дырок при помощи магнитного поля (для $\gamma = 0.03$ имеем $V_0 \approx 86$ мэВ, а для $\gamma = 0.06$ имеем $V_0 \approx 29$ мэВ) уменьшает пространственное ограничение, поскольку волновая функция дырок проникает под барьер $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, что приводит к уменьшению энергии связи и сдвигает положение ее пика в сторону больших размеров нанопровода.

Изменение энергии подзоны в присутствии магнитного поля как функция размера нанопровода для двух разных вариантов эффективных масс показано на рис. 3. На рисунке видно, что в случае $\gamma = 0$ подзона располагается глубже по энергии и становится более мелкой при $\gamma > 0$ из-за влияния магнитного поля на величину потенциального ба-

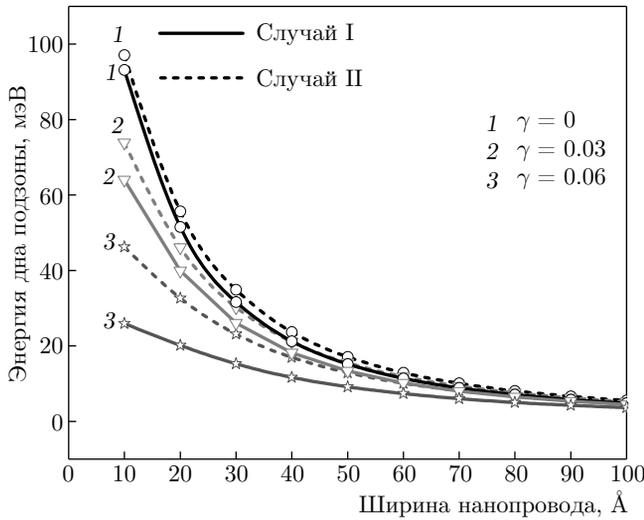


Рис. 3. Зависимость энергии дна подзоны, соответствующей скачку валентной зоны в НПЯМ CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, от ширины нанопровода в различных магнитных полях для случаев I и II

рьера, описанного ранее. Хорошо видно также, что при $\gamma = 0$ результаты, полученные для двух разных типов эффективных масс, мало отличаются друг от друга, но это различие увеличивается с ростом γ .

На том же рисунке видно, что энергия подзоны уменьшается с увеличением размера нанопровода и выходит в объемном пределе на общую линию независимо от типа эффективной массы, использованной в расчете, и величины внешнего магнитного поля (γ). Хотя энергии подзон, соответствующие анизотропной эффективной массе, получаются больше, чем энергии подзон в случае изотропной эффективной массы, вычисленные значения энергии связи демонстрируют противоположное поведение. Это связано с тем, что эффективная масса в изотропном случае в три раза больше массы $m_{w,xy}^*$ в анизотропном случае. Из-за малого значения эффективной массы вдоль направлений пространственного ограничения в случае II подвижность носителей внутри НПЯМ больше, что влечет уменьшение энергии связи носителей на акцепторах. Нам трудно судить о степени влияния анизотропии конфинмента на акцепторные состояния, поскольку не существует экспериментальных или теоретических работ, посвященных изучению акцепторов в НПЯМ магнитных полупроводников с изотропным прямоугольным/параболическим ограничивающим потенциалом в обоих направлениях ограничения. Однако мы полагаем, что при современном уровне развития технологии изложенные выше результаты могли бы быть проверены экспериментально.

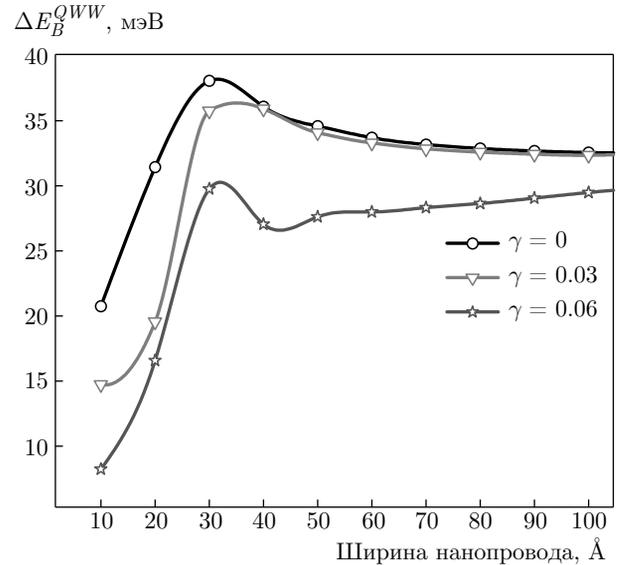


Рис. 4. Зависимость разности энергий связи на акцепторе для случаев I и II от ширины нанопровода в различных магнитных полях

На рис. 4 приведены зависимости разности между энергиями связи на акцепторе (ΔE_B^{QWW}) для случаев I и II от размера нанопровода в разных магнитных полях. На рисунке видно, что разность энергий связи (ΔE_B^{QWW}) максимальна для нанопровода толщиной порядка 30 Å независимо от величины внешнего магнитного поля, а в пределе больших толщин она насыщается. Это объясняется возникновением эффектов размерного квантования в квазиодномерном режиме при переходе системы от объемного режима к строго одномерному режиму, что проявляется в виде пика при толщине нанопровода порядка 30 Å, не зависящей от приложенного магнитного поля. Хотя, как отмечалось ранее, разница энергий подзон с магнитным полем увеличивается, на рис. 4 видно, что ΔE_B^{QWW} , наоборот, уменьшается. Такое поведение может быть связано с тем, что влияние магнитного поля γ на величину потенциального барьера приближает систему к объемному режиму, и этот эффект доминирует над всеми остальными эффектами.

На рис. 5 построена зависимость спин-поляронного сдвига от размера НПЯМ в CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe для эффективных масс двух разных типов и разных величин магнитных полей. Обменное взаимодействие между спинами ионов Mn²⁺ и спином носителя заряда не оказывает значительного влияния на примесные состояния, поскольку в НПЯМ с анизотропным конфинментом конкуренция между прямоугольным и параболическим ограничивающими

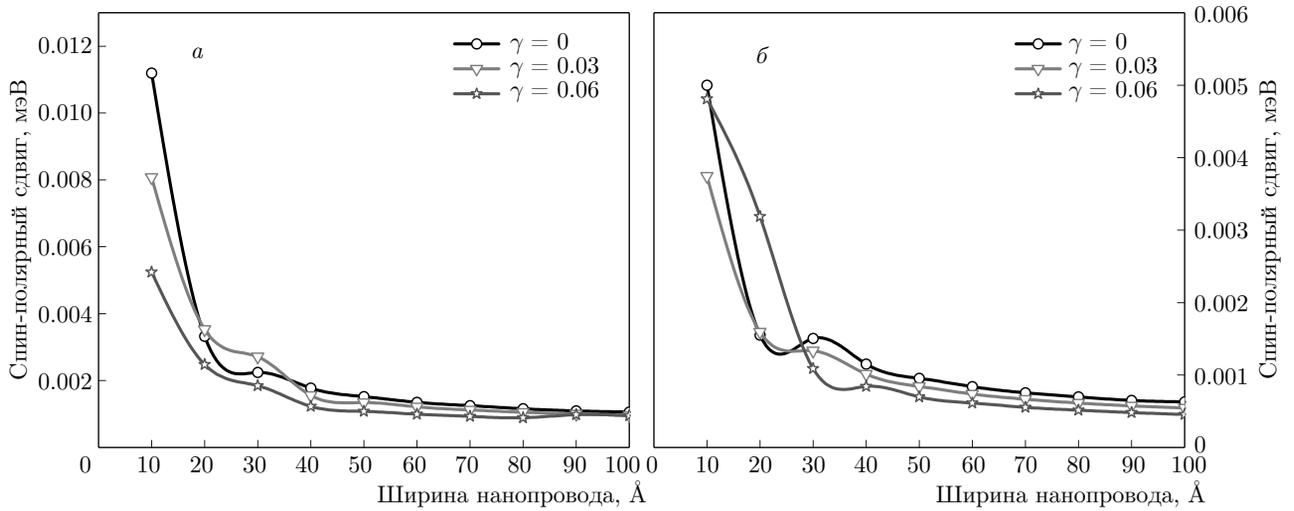


Рис. 5. Зависимость спин-поляронного сдвига от ширины НПЯМ CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe в различных магнитных полях для случаев I (а) и II (б)

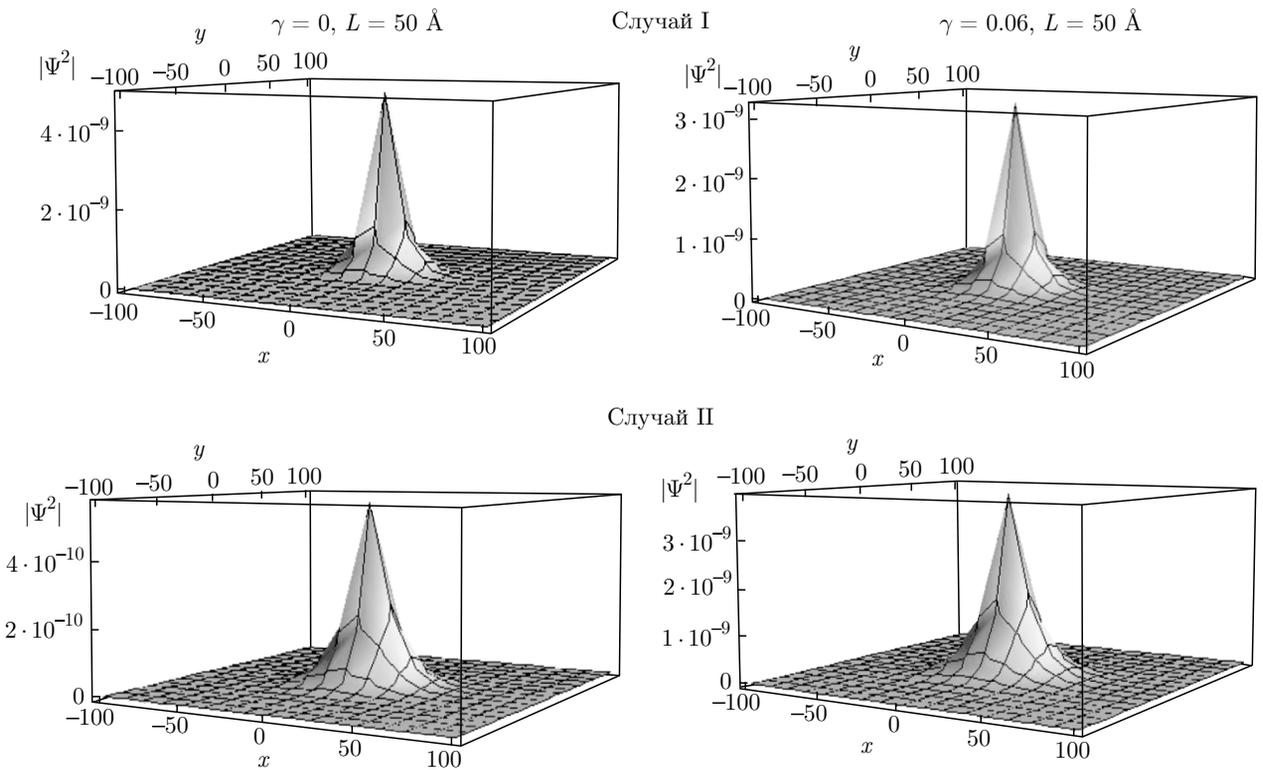


Рис. 6. Распределение плотности вероятности для тяжелой дырки, связанной на акцепторной примеси внутри НПЯМ шириной $L = 50$ Å, при $\gamma = 0$ (слева) и $\gamma = 0.06$ (справа) для случаев I и II

потенциалами приводит к подавлению этого взаимодействия. Сдвиг поляронной энергии вследствие обменного взаимодействия пренебрежимо мал, о чем свидетельствует порядок числовых значений, пред-

ставленных на рис. 5. Магнитное поле подавляет эффект обменного взаимодействия независимо от рассматриваемого случая эффективных масс разных типов. Поскольку ограничивающие потенциа-

лы в двух направлениях имеют сложный характер, трудно определить, какой из потенциалов, прямоугольный или параболический, имеет наибольшее влияние на эффекты обменного взаимодействия. Все приведенные выше результаты подтверждаются функциями распределения вероятности, показанными на рис. 6 для $\gamma = 0$ и $\gamma = 0.06$. На этом рисунке видно, что плотность вероятности $|\Psi^2|$ тяжелых дырок, ограниченных внутри нанопровода, больше по амплитуде в отсутствие магнитного поля и в случае изотропной эффективной массы, чем в магнитном поле и в случае анизотропной эффективной массы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе изучается влияние зависящей от направления эффективной массы, вычисленной из параметров Латтинжера, на энергию связи тяжелой дырки на акцепторной примеси. Полученные результаты сравниваются с результатами для изотропной эффективной массы. Они показывают, что форма ограничивающего потенциала вдоль каждого из направлений в НПЯМ оказывает существенное влияние на энергию связи носителей внутри НПЯМ. Следует заметить, что уменьшение параллельной (вдоль оси z) и поперечной (вдоль осей x и y) эффективных масс приводит к большей подвижности носителей заряда. В НПЯМ с анизотропным конфайнментом спин-поляронный сдвиг очень мал по порядку величины. Это означает, что влияние обменного взаимодействия на примесные акцепторные состояния не очень велико. Тем не менее уменьшение энергии связи в зависимости от магнитного поля происходит во многом благодаря как раз обменному взаимодействию, что подтверждает вклад ионов Mn^{2+} в величину энергии связи.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Funk, M. Royo, I. Zardo et al., *Nano Lett.* **13**, 6189 (2013).
2. S. K. Islam and F. C. Jain, *Sol. St. Electron* **39**, 615 (1996).
3. K. A. Atlasov, M. Calic, K. F. Karlsson, P. Gallo, A. Rudra, B. Dwir, and E. Kapon, *Opt. Express* **17**, 18178 (2009).
4. T. G. Kim, X.-L. Wang, R. Kaji, and M. Ogura, *Physica E* **7**, 508 (2000).
5. G. Liu and G. Zhou, *J. Appl. Phys.* **101**, 063704 (2007).
6. S. Gujarathi, K. M. Alam, and S. Pramanik, *Phys. Rev. B* **85**, 045413 (2012).
7. B. Mirek, M. Krol et al., *Phys. Rev. B* **95**, 085429 (2017).
8. Yuan-Hui Zhu and Jian-Bai Xia, *Phys. Rev. B* **75**, 205113 (2007).
9. J. P. Lascaray, D. Coquillat, J. Deportes and, A. Bhattacharjee, *Phys. Rev. B* **38**, 7602 (1988).
10. P. Kalpana and K. Jayakumar, *Physica E* **93**, 252 (2017).
11. Y. Harada, T. Kita, O. Wada, and H. Ando, *J. Appl. Phys.* **107**, 043521 (2010).
12. J. Sun, W. E. Buhro, L.-W. Wang, and J. Schrier, *Nano Lett.* **8**, 2913 (2008).
13. Z. Ma, M. E. Jamer, E. Panaitescu, D. Heiman, and L. Menon, *J. Magn. Magn. Mater.* **394**, 155 (2015).
14. H. C. Jeon, T. W. Kang, T. W. Kim, Y.-J. Yu, W. Jhe, and S. A. Song, *J. Appl. Phys.* **101**, 023508 (2007).
15. Z. H. Chen, M. C. Debnath, K. Shibata, T. Saitou, T. Sato, and Y. Oka, *J. Appl. Phys.* **89**, 6701 (2001).
16. V. V. Val'kov and S. V. Aksenov, *J. Magn. Magn. Mater.* **440**, 112 (2017).
17. R. Khordada and H. Bahramiyan, *J. Appl. Phys.* **115**, 124314 (2014).
18. F. V. Kyrychenko and J. Kossut, *Phys. Rev. B* **61**, 4449 (2000).
19. Kai Chang and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **68**, 205320 (2003).
20. R. Khordad, A. Gharaati, and M. Haghparast, *Current Appl. Phys.* **10**, 199 (2010).
21. S. Gangopadhyay and B. R. Nag, *J. Appl. Phys.* **81**, 7885 (1997).
22. C. Raja Mohan and K. Jayakumar, *J. Nano. Electron. Phys.* **3**, 1005 (2011).
23. P. Kalpana, A. Merwyn Jasper D. Reuben, P. Nithiananthi, and K. Jayakumar, *AIP Conf. Proc.* **1731**, 090027 (2016).
24. F. Long, W. E. Hagston, P. Harrison, and T. Stirner, *J. Appl. Phys.* **82**, 3414 (1997).
25. J. M. Luttinger, *Phys. Rev. B* **102**, 1030 (1956).

- 26.** T. Friedrich, J. Kraus, G. Schaack, and W. O. G. Schmitt, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 4307 (1994).
- 27.** Sr. Gerardin Jayam and K. Navaneethakrishnan, *Int. J. Mod. Physics B* **16**, 3737 (2002).
- 28.** J. A. Gaj and G. Fishman, *Sol. St. Commun.* **29**, 435 (1979).
- 29.** P. Kalpana and K. Jayakumar, *Superlattices. Microstruct.* **111**, 115 (2017).

МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ ЭФФЕКТЫ И ЭЛЕКТРОННОЕ ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В СУЛЬФИДАХ МАРГАНЦА С ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫМ ДОПИРОВАНИЕМ

О. Б. Романова^{a*}, С. С. Аплеснин^{a,b**}, М. Н. Ситников^b, Л. В. Удод^{a,b}

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

^b Сибирский государственный университет науки и технологий им. М. Ф. Решетнева
660037, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 2 октября 2020 г.,
после переработки 22 октября 2020 г.
Принята к публикации 27 октября 2020 г.

Исследуется влияние электронного и дырочного допирования с малой концентрацией замещения ($x = 0.01$) на магнитную и электронную подсистему в неупорядоченных полупроводниках $\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ ($\text{Me} = \text{Ag}$ и Tm) в широком диапазоне температур (77–1000 К) и магнитных полей до 12 кЭ. Из магнитных измерений установлены области образования ферронов (поляронов) в окрестности магнитного фазового перехода. Обнаружены магнитоимпеданс и магнитосопротивление, величина и знак которых зависят от электрического поля, температуры и типа замещающего элемента. Найдены температуры максимумов термоэдс, вызванные деформацией кристаллической структуры. Установлены фононный и магнитный вклады в релаксацию носителей тока методом импедансной спектроскопии и ян-теллеровская мода колебаний из ИК-спектров для системы с серебром. Найден диффузионный вклад в проводимость из годографа импеданса в полупроводниках $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$. Для описания экспериментальных результатов использованы модели суперпарамагнитных кластеров, ферроэлектрических областей и модель Дебая.

DOI: 10.31857/S0044451021050102

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время особое внимание уделяется исследованию халькогенидных систем в связи с обнаружением в них эффекта гигантского магнитосопротивления. Активно изучаются топологические изоляторы на основе Bi_2X_3 ($\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$) и влияние их размерности на величину магниторезистивного эффекта, который достигал порядка 600 % при переходе от объемных образцов к наноструктурированным пленкам [1, 2]. В немагнитных узкозонных полупроводниках Ag_2Se и Ag_2Te с неупорядоченной нестехиометрией образование уровней Ландау приводит к гигантскому по величине положительному магнитосопротивлению [3]. В работе [4] было сделано предположение, что неупорядоченность, индуцируемая нестехиометрией, может из-

менить электронную структуру в узкозонном полупроводнике и привести к бесщелевому состоянию с линейным спектром энергии в виде конуса Дирака в валентной зоне. Изменение знака магнитосопротивления в зависимости от температуры и магнитного поля достигается за счет анионного замещения в тройных узкозонных халькогенидах (на примере $n\text{-Ag}_4\text{SSe}$) в окрестности магнитного фазового перехода [5]. Представленные примеры показывают, что халькогениды формируют целый класс соединений, в которых высока вероятность обнаружения гигантского магнитосопротивления. В связи с этим представляется актуальным изучение этих систем с зарядовыми, орбитальными и спиновыми степенями свободы. Моносльфид марганца (MnS) и синтезированные на его основе твердые растворы ($\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$, где $\text{Me} = 3d$ - и $4f$ -элементы) являются полупроводниковыми соединениями, обладающими сильными электронными корреляциями с вырожденными электронными состояниями по орбитальному моменту, которые снимаются под дейст-

* E-mail: rob@iph.krasn.ru

** E-mail: apl@iph.krasn.ru

вием внешних воздействий, включая магнитное поле, что приводит к реализации новых фазовых переходов и магнитотранспортных эффектов [6–9]. С точки зрения практического применения, эти материалы являются перспективными в разработке и создании элементной базы оперативной компьютерной памяти и быстродействующих электрических систем обработки информации. α -MnS является антиферромагнетиком второго типа с $T_N = 150$ К и обладает ГЦК-структурой типа NaCl с параметром элементарной ячейки $a = 0.522$ нм [10]. Согласно данным структурных исследований [11–14] в диапазоне температур 125–165 К наблюдается сжатие решетки, которое сопровождается ромбоэдрическим искажением и низкочастотной оптической магнотной модой [15]. Обнаружена анизотропия электрических свойств в зависимости от кристаллографической ориентации [16]. Отрицательное магнитосопротивление (–12%) наблюдается в плоскости (111) α -MnS, в то время как для плоскости (100) преобладает положительное магнитосопротивление при $T > T_N$ в магнитном поле 10 кЭ [17]. Разница в знаках магнитосопротивления объясняется изменением ближнего магнитного порядка в области температуры Нееля, что приводит к положительному магнитосопротивлению для плоскости (100), а разрушение ближнего магнитного порядка при $T > 230$ К создает условия для отрицательного магнитосопротивления для (111).

В результате допирования халькогенидных систем редкоземельными элементами (гадолиний, церий, самарий и т. д.) возникает орбитально-неупорядоченное состояние с орбитальными поляронами, которое приводит к возникновению магнитотранспортных эффектов в отсутствие статических деформаций решетки [18–21]. В соединении $Tm_xMn_{1-x}S$ с концентрацией замещения $x \leq 0.15$ найдены температуры пиннингования решеточных поляронов (см. [22]), сопровождающиеся деформацией решетки, конденсацией ИК-мод и термоэлектронной эмиссией [23]. Сосуществование эффектов магнитосопротивления (–21%), магнитоимпеданса (–65%), магнитотермоэдс (–40%) и фотопроводимости были обнаружены в результате исследования сульфида марганца, допированного серебром с $x = 0.05$ в окрестности магнитного фазового перехода [24]. Обнаруженные эффекты объясняются в модели ферронов. Во всех выше представленных системах $Tm_xMn_{1-x}S$ и $Ag_xMn_{1-x}S$ концентрация замещения $x \geq 0.05$.

Выбранная нами концентрация замещения $x = 0.01$ является оптимальной, при которой система

обладает совокупностью свойств, а именно, сохраняет кристаллическую структуру ГЦК-типа NaCl, физические свойства и эффекты, характерные для исходной матрицы (MnS), и содержит ионы с орбитальным вырождением — ян-теллеровские (ЯТ) ионы. Для малых концентраций замещения возможно образование фазового расслоения, состоящего из ферромагнитных областей (ферронов, содержащих один электрон проводимости) в антиферромагнитной матрице, что может привести к максимумам в магнитосопротивлении, осцилляциям в термоэдс. При высокой концентрации неизовалентного замещения $x > 0.01$ возникает кооперативный ЯТ-эффект, а при легировании серебром и тулием с малой концентрацией $x = 0.01$ образуются локальные ЯТ-искажения. В этом случае ожидается качественное отличие влияния магнитного поля на транспортные характеристики легированного сульфида марганца.

В связи с этим цель данной работы заключается в изучении корреляции примесных состояний на магнитотранспортные эффекты вследствие электронного (Tm) и дырочного (Ag) допирования малой концентрацией замещения $x = 0.01$ на изменение магнитной и электронной структуры.

2. МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Изучение фазового состава и кристаллической структуры синтезированных образцов $Me_xMn_{1-x}S$ ($Me = Ag$ и Tm) проведено при комнатной температуре на рентгеновской установке ДРОН-3 с использованием K_α -излучения Cu в режиме набора информации «по точкам». Время набора информации в угловой 2θ -точке составляло от $t = 3$ с до $t = 5$ с; шаг по углу $\Delta 2\theta = 0.02^\circ$. Стехиометрический анализ синтезированных образцов проведен на электронном микроскопе (Hitachi HT7700). Проведены исследования магнитных свойств твердых растворов на вибрационном магнитометре в интервале температур 77–300 К в магнитных полях до 10 кЭ на образцах, охлажденных в нулевом магнитном поле (ZFC) и при наличии магнитного поля (FC), а также методом Фарадея в интервале температур 80–1000 К в магнитном поле 8.6 кЭ. Электрофизические измерения проведены на анализаторе компонентов АМ-3028 в частотном интервале $\omega = 100$ – 10^6 Гц при температурах 77–500 К, амплитуда переменного напряжения составляла 5 мВ. Данные частотной зависимости комплексного сопротивления представлены в координатах Найквиста $Z' - iZ''$, где $Z' -$

действительная компонента $\text{Re } Z$ (активное сопротивление), Z'' — мнимая компонента $\text{Im } Z$ (реактивное сопротивление). Для расчета спектров импеданса применялось программное обеспечение ZView (Scribner Associates Inc.). Удельное электросопротивление и термоэдс измерены в интервале температур 77–500 К в магнитных полях до 12 кЭ на образцах $\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ ($\text{Me} = \text{Ag}$ и Tm) в виде параллелепипедов с размерами $5.00 \times 3.00 \times 8.00$ мм³. Для исключения сопротивления контактов при измерениях электросопротивления применялся только четырехконтактный метод на постоянном токе. Использовались индиевые контакты, нанесенные в виде полосок на одну из поверхностей образца с расстоянием между ними 1 мм. Термоэдс измерена двухконтактным методом при разности температур 4–8 К между контактами. Коэффициент термоэдс рассчитывался по формуле $\alpha = U/\Delta T$ (где U — разность потенциалов между «горячими» и «холодными» концами образца).

Дополнительно была исследована и идентифицирована структура ИК-спектров твердых растворов $\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ ($\text{Me} = \text{Ag}$ и Tm), измеренных на фурье-спектрометре ФСМ2202 ИК-диапазона. Измерения проводились в оптическом криостате в интервале температур 77–500 К на прессованных таблетках $\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ в КВг диаметром 10–20 мм.

3. СИНТЕЗ, СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Поликристаллы $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ и $\text{Ag}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с малой концентрацией замещения ($x = 0.01$) выращены путем кристаллизации из расплава порошковых сульфидов в стеклоглеродных тиглях и кварцевом реакторе в атмосфере аргона протягиванием реактора через одновитковый индуктор ВЧ-установки [18, 23, 24]. Рентгенограммы синтезированных образцов представлены на рис. 1. Согласно данным рентгеноструктурного анализа синтезированные образцы $\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ ($\text{Me} = \text{Ag}$ и Tm) являются однофазными и имеют кубическую решетку типа NaCl, характерную для исходного MnS в α -модификации. Присутствие других рефлексов, характерных для отдельных элементов Ag и Tm, на рентгенограммах не наблюдалось. Стехиометрический анализ синтезированных соединений показал, что полученные кристаллы практически не содержат кислородных включений в пределах точности метода и наблюдается небольшая нестехиометрия

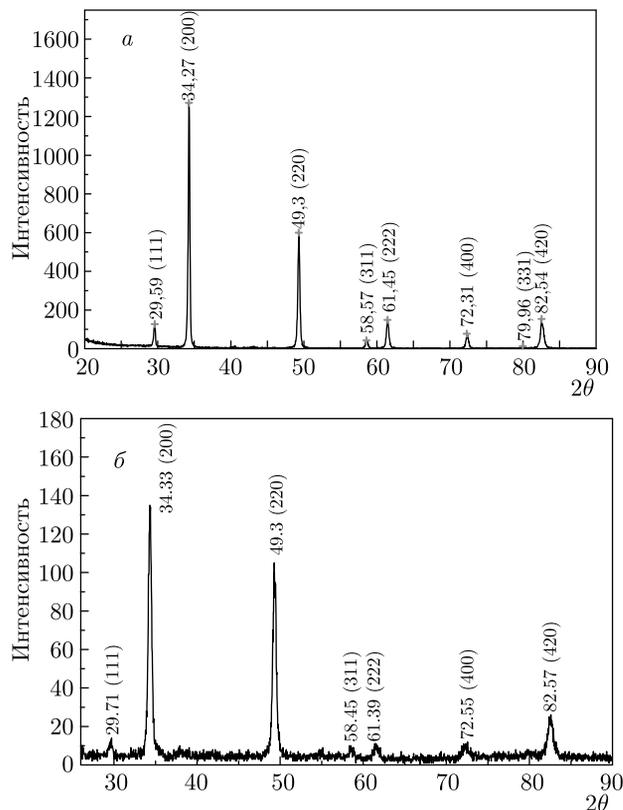


Рис. 1. Рентгенограммы твердых растворов $\text{Ag}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ (а) и $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ (б) при $T = 300$ К

по сере. Нестехиометричное замещение марганца одновалентным серебром и трехвалентным тулием в системе $\text{Me}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ приводит к анионным вакансиям в силу выполнения принципа электронейтральности.

Температурные зависимости намагниченности (σ) и магнитной восприимчивости (χ) образцов $\text{Ag}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ и $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ представлены на рис. 2. Кривые имеют вид, типичный для антиферромагнетиков. Максимум на зависимости $\sigma(T)$ и минимум на $\chi^{-1}(T)$ связаны с антиферромагнитным переходом при $T_N = 163$ К для $\text{Ag}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ и $T_N = 172$ К для $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$. Катионное замещение марганца серебром или тулием увеличивает температуру магнитного фазового перехода относительно $T_N = 150$ К для MnS, что косвенно свидетельствует о том, что эти элементы вошли в кристаллическую решетку. Это предположение подтверждается уменьшением парамагнитной температуры Кюри (Θ) по абсолютной величине, имеющей отрицательное значение $\Theta = -356$ К для $\text{Ag}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$; $\Theta = -418$ К для $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ по сравнению с $\Theta = -450$ К для MnS [25]. Парамагнитная

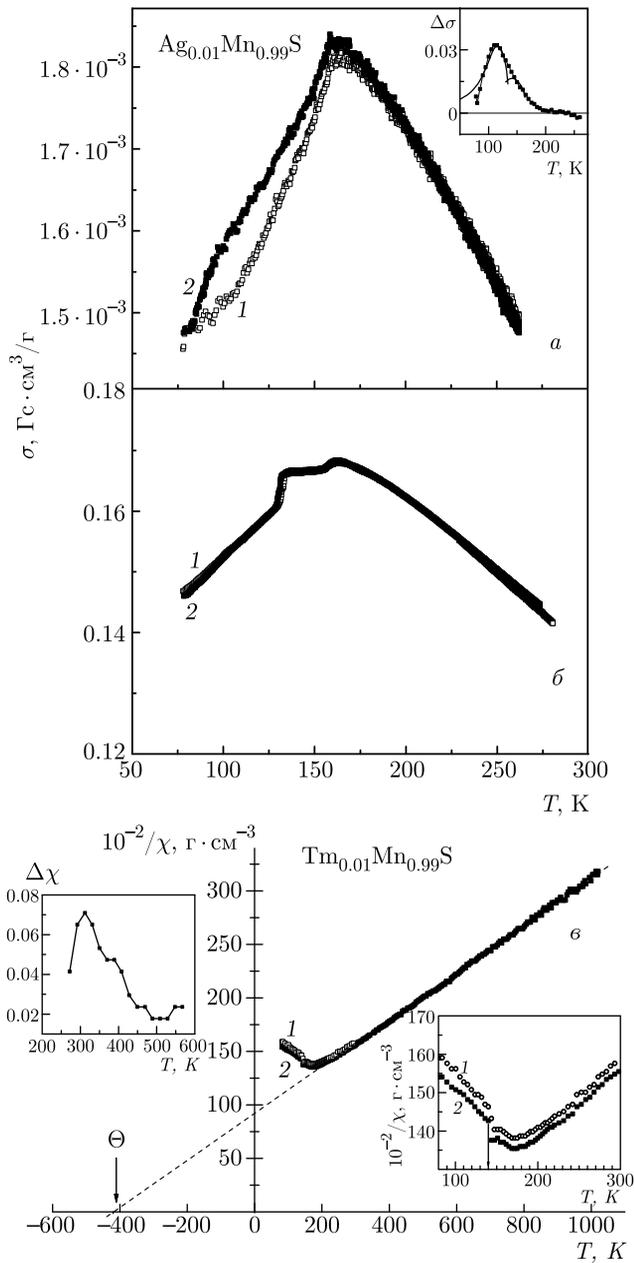


Рис. 2. Температурные зависимости намагниченности измеренные в режимах: *a* — при нагреве образца $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$ в магнитном поле $H_m = 100$ Э и охлаждение $H_{ZFC} = 0$ (1) и нагрев этого же образца в магнитном поле $H_m = 100$ Э и охлаждение $H_{FC} = 12$ кЭ (2); *b* — при охлаждении образца $H_{ZFC} = 0$ (1) и в магнитном поле $H_{FC} = 12$ кЭ (2); *в* — температурные зависимости обратной магнитной восприимчивости, измеренные при охлаждении образца $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$ при $H_{ZFC} = 0$ (1) и в магнитном поле $H_{FC} = 8.6$ кЭ (2). На вставке к рис. 2*a* — температурная зависимость относительного изменения намагниченности $\Delta\sigma = (\sigma_{FC} - \sigma_{ZFC})/\sigma_{FC}$ и теоретические расчеты по формуле (2) (сплошные линии) для $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$. На вставке к рис. 2*в* — температурные зависимости обратной восприимчивости для $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$ и температурная зависимость нормированной величины $\Delta\chi = (\chi_{heat} - \chi_{cooling})/\chi(T=500\text{ K})$ относительного изменения восприимчивости

Кюри и температура Нееля имеют вид

$$\theta = 2/3S(S + 1)(Z_1J_1 + Z_2J_2) = A(12J_1 + 6J_2),$$

$$T_N = 6J_2A,$$

где $J_{1,2}$ — обменное взаимодействие соответственно в первой и второй координационной сферах, а $Z_{1,2}$ — число ближайших соседей. Таким образом, катионное замещение серебром и титаном марганца приводит к увеличению J_2 [26].

Ниже температуры Нееля в образце $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$ обнаружены гистерезис намагниченности и влияние предыстории образца, охлажденного в нулевом поле (ZFC) и в магнитном поле 12 кЭ (FC), на магнитные характеристики рис. 2*a*. На вставке к рис. 2*a* представлена температурная зависимость относительного изменения намагниченности $\Delta\sigma = (\sigma_{FC} - \sigma_{ZFC})/\sigma_{FC}$ для образца $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$. На $\Delta\sigma(T)$ можно выделить две области вблизи температуры магнитного перехода, где $\Delta\sigma$ имеет аномальное поведение, которое можно описать в модели суперпарамагнитных кластеров со случайным распределением полей анизотропии [27]. Такое поведение намагниченности в низкотемпературной области вызвано образованием неоднородных магнитных состояний — ферронов. В модели суперпарамагнетика с полем анизотропии H_A во внешнем магнитном поле H оценим вклад в намагниченность, обусловленный образованием неоднородных состояний. Энергию суперпарамагнитного кластера представим в виде

$$W = M_F H \cos \theta + M_F H_A \cos(\gamma - \theta),$$

температура Кюри определена из температурной зависимости обратной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ в области высоких температур. Уменьшение ее значения свидетельствует о смене типа обменного взаимодействия между ближайшими соседями J_1 с антиферромагнитного на ферромагнитный. Моносульфид марганца и синтезированные на его основе соединения $Ag_xMn_{1-x}S$ и $Tm_xMn_{1-x}S$ являются антиферромагнетиками со вторым типом упорядочения, в которых парамагнитная температура

где угол θ указывает направление магнитного момента относительно приложенного внешнего магнитного поля, M_F — намагниченность ферромагнитного кластера, γ — угол между направлениями приложенного магнитного поля и поля анизотропии. Направление магнитного момента определяется

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{H_A \sin \gamma}{H + H_A \cos \gamma}.$$

Поперечная магнитная восприимчивость при $\gamma = \pi/2$ имеет вид

$$\chi^\perp = \frac{M_F}{H \sqrt{1 + (H_A/H)^2}}. \quad (1)$$

Намагниченность кластера в зависимости от температуры представим в виде степенной функции

$$M_F = m_{0F}(1 - T/T_{cF})^{1/2},$$

где T_{cF} — критическая температура кластера. Поле анизотропии в зависимости от температуры также имеет степенной вид:

$$H_A = K(1 - T/T_{cF})^n.$$

Экспериментальные данные хорошо описываются с показателем степени $n = 2$. Результирующая намагниченность состоит из однородной части

$$M = m_0(1 - T/T_c)^{1/2},$$

связанной с исходной антиферромагнитной матрицей моносульфида марганца и неоднородной части, обусловленной ферронами:

$$M_{res} = m_0 \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} + \frac{m_{0F} \sqrt{1 - T/T_{cF}}}{\sqrt{1 + K(1 - T/T_{cF})^2/H^2}}. \quad (2)$$

Результирующая намагниченность ферронов (2) определяется концентрацией носителей тока на намагниченность ферромагнитного кластера ($m_{0F} = Nm_{singl}$). Экспериментальные данные удовлетворительно описываются функцией (2) с критическими температурами $T_{cF} = 135$ К и 165 К образования магнитно-неоднородных состояний в твердом растворе $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ (вставка к рис. 2а (сплошные линии)). Радиус феррона определяется конкуренцией кинетической энергии носителей тока и обменной энергии локализованных спинов [28]:

$$R_{pol} = a \left(\frac{\pi t}{4J_{ff}S^2} \right)^{1/5}, \quad (3)$$

где a — период решетки, J_{ff} — обменный интеграл, t — интеграл перескока, который в случае замещения марганца серебром связан с e_g -орбиталями (σ — связь за счет перекрытия $d_{x^2-y^2}$ - и $P_{x,y}$ -орбиталей), а в случае с тулием с t_{2g} -орбиталями (π — связь при перекрывании $d_{xz,yz}$ - и P_z -орбиталей).

Типичное соотношение между ними $t(e_g)/t(t_{2g}) \sim 2$. Радиус феррона для параметров $a = 0.5$ нм, $t(e_g) = 0.4$ эВ, $J_{ff} = 0.002$ эВ в $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ $R_{pol} = 0.81$ нм, а в $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ имеем $R_{pol} = 0.68$ нм.

С увеличением магнитного поля температурный гистерезис исчезает, кривые намагниченности ZFC и FC совпадают рис. 2б. Для образцов с тулием влияние предыстории на магнитные свойства сохраняется в магнитном поле 8.6 кЭ (рис. 2б). Изменение магнитной восприимчивости

$$\Delta\chi = (\chi_{heat} - \chi_{cooling})/\chi(T=500 \text{ К}),$$

измеренное в режимах охлаждения и нагрева, в зависимости от температуры представлено на вставке к рис. 2б. Максимум изменения восприимчивости $\Delta\chi = 7\%$ наблюдается при температуре 310 К. Это вызвано диамагнитным вкладом электронов, локализованных в потенциальных ямах. Дальнейший рост температуры приводит к плавному уменьшению $\Delta\chi$ до 2% . В модели свободных частиц с квадратичным законом дисперсии получено уравнение диамагнитной восприимчивости с учетом разницы между эффективной массой носителя и массой электрона [29]:

$$\chi_L = \frac{-4}{3} \frac{\gamma(\hbar\omega_H)^2}{2H^2}, \quad \gamma = \frac{m\rho_F}{2\pi^2\hbar^3}, \quad (4)$$

где ω_H — расстояние между уровнями Ландау, а m — эффективная масса электрона (дырки). Уравнение (4) справедливо при высоких температурах ($T \gg \hbar\omega_H$). Восприимчивость Ландау пропорциональна плотности состояний на уровне Ферми. Типичная диамагнитная восприимчивость составляет 10^{-6} Гс · см³/моль [30]. Оценка диамагнитной восприимчивости для соединения $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ по температурному гистерезису дает 10^{-7} Гс · см³/моль, при том что эффективная масса электрона в 5 раз превышает массу свободного электрона. Уменьшение магнитной восприимчивости при охлаждении объясняется диамагнитным вкладом электронов, локализованных вблизи дефектов.

Еще одним доказательством образования магнитнеоднородных состояний является аномалия, обнаруженная в магнитных полях 10 кЭ и 8.6 кЭ на

кривых $\sigma(T)$ и $\chi^{-1}(T)$ в виде «ступеньки» в окрестности температур 134 К для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ и 140 К для $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ (рис. 2б и вставка к рис. 2б). Аномальное поведение температурных зависимостей намагниченности и магнитной восприимчивости твердых растворов в области температуры магнитного перехода является доказательством образования ферромагнитных капель (ферронов) в антиферромагнитной матрице [31]. Электроны проводимости замораживаются в антиферромагнитных подрешетках ниже T_N с образованием ферромагнитного упорядочения в локальной области. В магнитном поле магнитный момент ферромагнитной капли стремится выстроиться по полю, что приводит к увеличению намагниченности. Обменная энергия капли на границе с антиферромагнитной матрицей уменьшается при нагревании, и в сильном магнитном поле возможна переориентация магнитного момента капли, что вызывает скачок на $\sigma(T)$.

4. УДЕЛЬНОЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ

Важной особенностью халькогенидов и манганитов [28] является сильное взаимодействие электронной и решеточной подсистем в результате ЯТ-взаимодействия. В манганитах это связано с тем, что образованный в результате замещения ион Mn^{3+} является ян-теллеровским и поэтому всякое фазовое расслоение вызывает появление упругих деформаций решетки, которые можно обнаружить экспериментально. Предполагаем, что аналогичная ситуация наблюдается в системе при замещении марганца серебром. На рис. 3 представлены полупроводникового типа зависимости удельного сопротивления исследуемых систем, которые согласуются с поведением $\rho(T)$ для MnS [16, 32]. Величина удельного сопротивления зависит от типа замещающего элемента. При замещении марганца серебром значения ρ практически не отличаются от величины удельного сопротивления моносulfида марганца с $\rho = 10^8$ Ом·см в антиферромагнитной области с $\rho = 10^4$ Ом·см в парамагнитной области при $T = 300$ К. В $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ величина удельного сопротивления в антиферромагнитной области возрастает на два порядка по сравнению с $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$. На температурной зависимости $\ln \rho(1/T)$ обнаружены «ступеньки» для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ в парамагнитной области (250–270 К), а для $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ вблизи магнитного фазового перехода (135–150 К). Определена энергия актива-

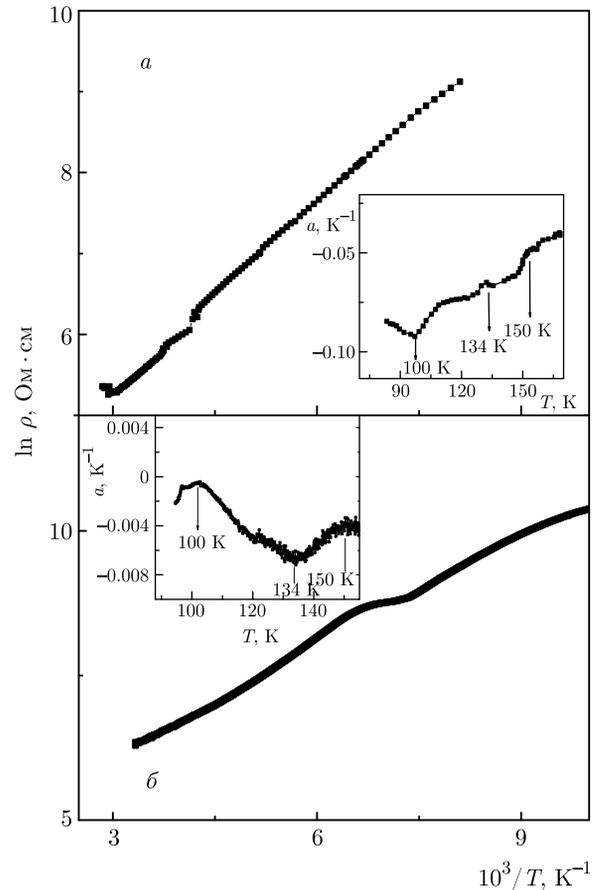


Рис. 3. Зависимость удельного сопротивления для образцов $\text{Ag}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ (а) и $\text{Tm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ (б) от обратной температуры. На вставках: температурные зависимости коэффициента сопротивления

ции проводимости E_a , которая для твердых растворов $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ с понижением температуры незначительно увеличивается от 0.13 до 0.14 эВ, а для $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ изменение E_a составляет от 0.15 до 0.11 эВ. В исходном MnS уменьшение E_a обнаружено вблизи температуры магнитного перехода до 0.02 эВ [32]. Изменение энергии активации с температурой связано со сдвигом химического потенциала от донорного уровня к акцепторному в результате изменения спектральной плотности состояний валентной зоны и зоны проводимости за счет ЯТ-искажения.

Существование поляронов подтверждается аномалиями, обнаруженными на температурной зависимости коэффициента сопротивления $a = (1/R)(\Delta R/\Delta T)$, представленной на вставках к рис. 3. Аномалии, обнаруженные на $a(T)$ при температурах около 100 К, 134 К, 150 К, коррелируют с температурами структурных искажений,

наблюдающихся в исходной матрице моносulfида марганца [33, 34]. Обнаружено влияние магнитного поля на величину удельного электросопротивления соединений $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ и $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$. Относительное изменение сопротивления ΔR в магнитном поле вычислено по формуле

$$\Delta R = R(H) - R(0)/R(0),$$

где $R(H)$ — электросопротивление в магнитном поле, а $R(0)$ — без поля, и представлено на рис. 4а,б. Обнаружена смена знака магнитосопротивления в магнитоупорядоченной области в результате электронного и дырочного допирования. В моносulfиде марганца в области температуры магнитного фазового перехода и ниже, где наблюдается ряд структурных искажений, преобладает положительное магнитосопротивление, а выше температуры 200 К знак магнитосопротивления меняется на отрицательный [16]. Наиболее ярко отрицательное магнитосопротивление проявлялось для плоскости (111) моносulfида марганца при $T = 230$ К. С увеличением магнитного поля величина отрицательного магнитосопротивления не меняется и смещается в область низких температур.

В твердых растворах $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ положительное магнитосопротивление $\Delta R = 0.05$ обнаружено при $T < 100$ К, $E = 20$ В/см, рис. 4а. С ростом температуры на зависимости $\Delta R(T)$ обнаружены два минимума при 120 К и 200 К, где магнитосопротивление принимает отрицательные значения $\Delta R = -0.05$ и -0.08 соответственно. Увеличение электрического поля до 120 В/см приводит к отрицательному магнитосопротивлению во всей области температур. Полевые зависимости $\Delta R(E)$, измеренные при фиксированных температурах 80 К, 140 К, 200 К, 280 К, 320 К, представлены на вставке к рис. 4а. Положительное магнитосопротивление может возникать в результате добавления недиагональной холловской компоненты проводимости дырочного типа по анионной подсистеме, а отрицательное магнитосопротивление за счет рассеяния носителей тока на электрически-поляризованных областях. Аномально большое положительное магнитосопротивление с линейной зависимостью от магнитного поля H в диапазоне температур от 4.5–300 К найдено в халькогенидах серебра, $\text{Ag}_{2+\delta}\text{Se}$ [35]. Линейное магнитосопротивление

$$\Delta R = R(H) - R(0) \propto H$$

объясняется в модели изотропной среды, содержащей электрически-неоднородные области с подвиж-

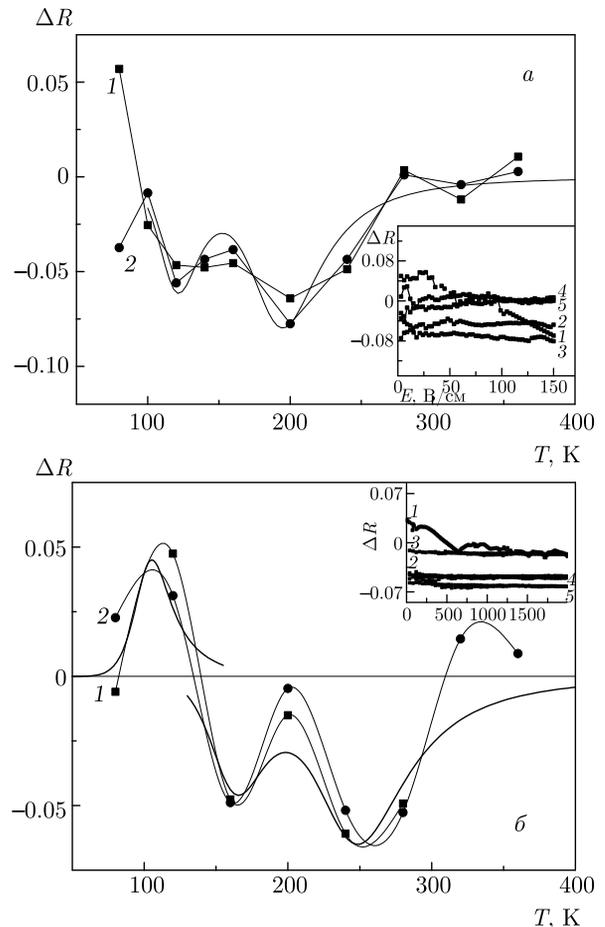


Рис. 4. Температурные зависимости магнитосопротивления $\Delta R = R(H) - R(0)/R(0)$, твердых растворов $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ (а), измеренные при $E = 20$ В/см (1), 120 В/см (2) и $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ (б), измеренные при $E = 200$ В/см (1), 1000 В/см (2). Подгоночная функция из уравнения (6) (сплошные линии). На вставках представлены зависимости магнитосопротивления от электрического поля E , измеренные для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ при температурах 80 К (1), 140 К (2), 200 К (3), 280 К (4), 320 К (5) и для системы $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ при температурах 80 К (1), 160 К (2), 200 К (3), 240 К (4), 280 К (5)

ностью носителей тока, превышающей подвижность в матрице [35].

Для системы, допированной тулием, положительное магнитосопротивление наблюдается в окрестности температур 105 К, и составляет $\Delta R = 0.04$ при $E = 200$ В/см (рис. 4б). Смена знака магнитосопротивления при $T = 140$ К совпадает с температурой образования ферронов (поляронов). Выше этой температуры наблюдаются отрицательные значения магнитосопротивления с двумя минимумами при $T = 160$ К и 240 К, при которых ΔR принимает значения -0.04 и -0.07 .

С ростом температуры для обеих систем значение ΔR уменьшается по абсолютному значению и выше температуры 300 К стремится к нулю. В отличие от образцов, допированных серебром, в $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ положительное магнитосопротивление исчезает в больших электрических полях. Смена знака магнитосопротивления по температуре и ее величина представлены на вставке к рис. 4б при фиксированных $T = 80$ К, 160 К, 200 К, 240 К, 280 К. Механизм магнитосопротивления при электронном и дырочном допировании объясняется ниже в рамках одной модели.

5. ТЕРМОЭДС

В полупроводниках с сильным электрон-фононным взаимодействием температуры максимумов коэффициента термоэдс α связаны с температурами структурных фазовых переходов и с температурой магнитного упорядочения при наличии магнитоупругого взаимодействия. Температурная зависимость α для двух систем $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ и $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ представлена на рис. 5.

На температурных зависимостях $\alpha(T)$ обнаружены небольшие максимумы для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ при температурах 180 К, 160 К, 140 К, 120 К и для $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ при температурах 160 К, 144 К, 125 К, 105 К. Для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ максимум при $T = 160$ К коррелирует с температурой Нееля, а в окрестности $T = 140$ К наблюдается образование поляронов (ферронов). С ростом температуры $T \geq 200$ К при замещении марганца серебром (рис. 5а) на $\alpha(T)$ обнаружены осцилляции, возникающие за счет эффекта Яна – Теллера. Возможно, в этой области температур возникает последовательность переходов с изменением волнового вектора структуры, связанная с поворотами октаэдров, наблюдаемых в перовскитоподобных соединениях [36]. Температуры максимумов $\alpha(T)$ в $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$, представленные на рис. 5б, коррелируют с температурами структурных переходов для моносульфида марганца. На вставке к рис. 5б приведена температурная зависимость коэффициента теплового расширения решетки MnS , имеющая ряд аномалий в области деформаций кристаллической решетки. Значительный рост α в магнитоупорядоченной области можно объяснить тем, что перенос энергии осуществляется электронами, увлеченными магнонами, что приводит к росту термоэдс. При приближении к температуре магнитного фазового перехода плотность магнонных возбуждений увеличивает-

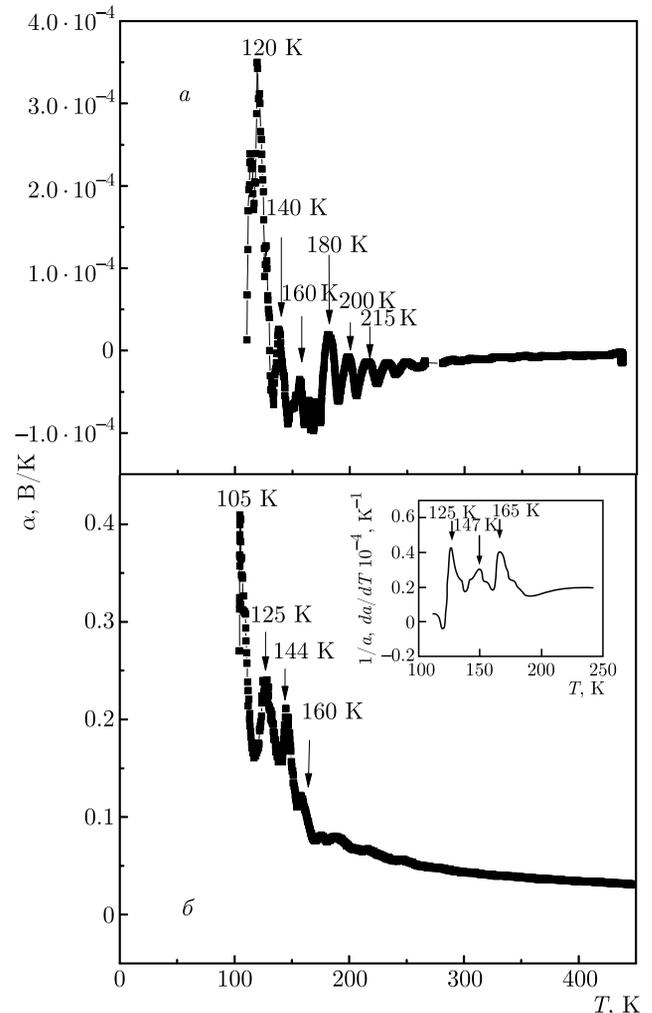


Рис. 5. Температурные зависимости коэффициента термоэдс (α) для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ (а) и $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ (б). На вставке температурная зависимость коэффициента теплового расширения решетки для монокристалла моносульфида марганца

ся [37] и в результате разности температур на концах образца возникает диффузия (поток) магновнов, которые увлекают электроны.

6. ИМПЕДАНС

Образование электронных неоднородных состояний можно установить методом импедансной спектроскопии, который позволяет в ряде случаев разделить и определить вклады в полную проводимость поликристаллического образца от различных элементов микроструктуры. На рис. 6 представлены частотные зависимости действительной части импеданса $\text{Re } Z$ и мнимой части импеданса $\text{Im } Z$, из-

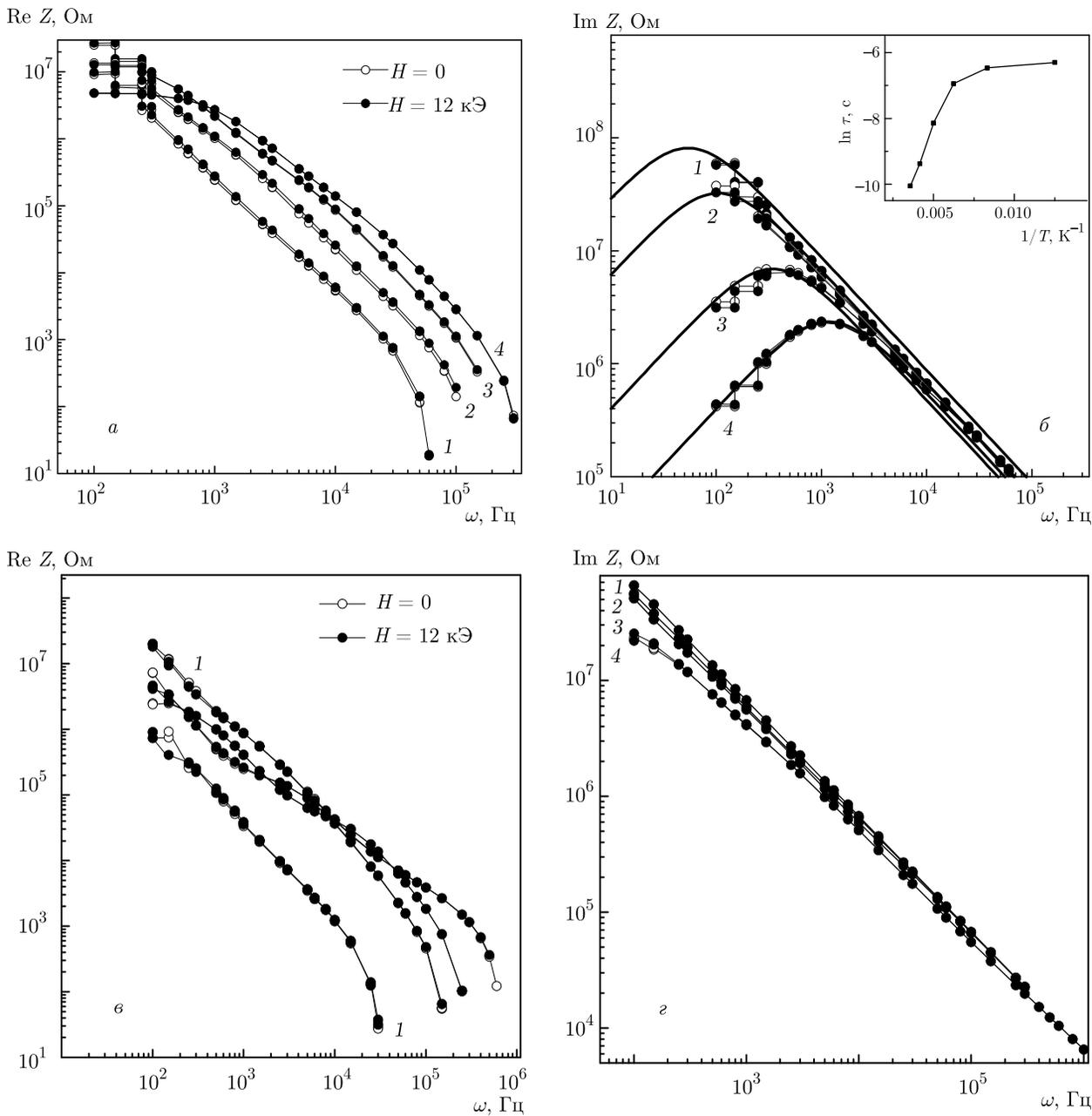


Рис. 6. Частотные зависимости действительной (а,е) и мнимой (б,з) частей импеданса для $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$ (а,б), измеренные при $T = 120$ К (1); 160 К (2); 200 К (3); 240 К (4) и $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$ (е,з) измеренные при $T = 120$ К (1); 200 К (2); 240 К (3); 360 К (4). На вставке температурная зависимость времени релаксации для $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$

меренные в диапазоне температур 80–360 К в нулевом поле и магнитном поле 12 кЭ. Для систем $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$ и $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$ повышение температуры приводит к увеличению значения действительной части импеданса и к уменьшению мнимой части по модулю. При замещении марганца серебром на кривой $Im Z(\omega)$ обнаружен максимум, который смещается в сторону низких частот при охлажде-

нии и в окрестности магнитного перехода переходит в область, лежащую за пределами измерительного диапазона (рис. 6б). В результате электронного допирования частотная зависимость мнимой части импеданса имеет линейный вид в логарифмических координатах (рис. 6з). Согласно выражению $X_C = 1/\omega C$ можно утверждать о преобладании емкостного вклада для системы $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$. Зави-

симось компонент импеданса $Z(\omega)$ (рис. 6а,б) образца $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ хорошо описывается в модели Дебая:

$$\text{Re } Z(\omega) = \frac{A}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad \text{Im } Z(\omega) = \frac{B\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad (5)$$

где τ — время релаксации носителей тока.

На вставке к рис. 6б время релаксации для системы $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ не меняется ниже $T = 120$ К и экспоненциально падает при нагревании с энергией активации 0.09 эВ, которая меньше энергии перехода электрона с примесного состояния в зону проводимости, определенного из $\rho(1/T)$ в этой области температур, рис. 3а. Возможно, время релаксации связано с передачей энергии электронов в фононную подсистему. Годографы импеданса, т. е. зависимости мнимой части импеданса от действительной в интервале температур 80–280 К для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ изображены на (рис. 7а,б,е) и 80–360 К для $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ на (рис. 7г,д,е). Экспериментальные данные хорошо описываются в модели эквивалентных схем одной полукружностью, что соответствует параллельному RC-контуре (вставка на рис. 7б). В системе $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ с ростом температуры протяженность дугообразных фрагментов сокращается и вблизи температуры магнитного фазового перехода годограф аппроксимируется лучом (рис. 7д). Наблюдаемый фрагмент годографа — луч описывается элементом Варбурга (Z_W) и интерпретируется как вклад диффузионного процесса. Температура образования диффузионного вклада коррелирует с температурой максимума отрицательного магнитосопротивления. При дальнейшем увеличении температуры высокочастотный фрагмент годографа модифицируется в полукружность, а линейная часть смещается в низкочастотную область (рис. 7е).

На вставках к рис. 7а,г представлены температурные зависимости магнитоимпеданса ΔZ , рассчитанного по формуле $\Delta Z = Z(H) - Z(0)/Z(0)$. Максимальное изменение импеданса в магнитном поле в системе $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$, наблюдается на частоте 10^4 Гц при температурах $T = 120$ К ($\Delta Z > 0$) и $T = 200$ К импеданс уменьшается в магнитном поле. В $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ магнитоимпеданс в низкочастотной области имеет два минимума при $T = 200$ К и $T = 360$ К (вставка к рис. 7г). Область обнаружения отрицательного значения магнитоимпеданса при температуре 200 К для двух систем коррелирует с температурой, при которой наблюдается минимум магнитосопротивления (рис. 4). С ростом частоты до 10^5 Гц значения ΔZ уменьшаются по аб-

солютному значению в соединениях $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ и $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$.

7. ИК-СПЕКТРЫ

Изменение электронного спектра, вызванные искажением кристаллической структуры, определены из ИК-спектроскопии. ИК-спектры твердых растворов $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ и $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ измерены в области температур 800–500 К (рис. 8а,е). В соединении $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ максимум поглощения в интервале частот 1240 см^{-1} – 1340 см^{-1} расщепляется на две линии, нормированная интенсивность которых $(I(T)/I(T = 80 \text{ К}))$ в зависимости от температуры представлена на рис. 8б. Интенсивность растет с ростом температуры и имеет широкий максимум в области $T = 200$ К, который коррелирует с температурной областью структурных деформаций, наблюдаемых в термоэдс. Замещение марганца ионами серебра образует дырки в e_g -подсистеме и приводит к вырождению электронных состояний, которые снимаются за счет ЯТ-эффекта. В соединении $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ ИК-поглощение в данной области частот очень слабое (рис. 8е).

8. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Электронное допирование ионами тулия приводит к увеличению электронной плотности в t_{2g} -оболочке сульфида марганца и к образованию электронного вырождения, которое может сниматься за счет спин-орбитального взаимодействия или по ЯТ-каналу. Замещение марганца ионами серебра образует дырки в e_g -подсистеме. В этом случае вырождение снимается за счет ЯТ-эффекта и образуется двойной обмен с ферромагнитным и антиферромагнитным упорядочением соответственно по продольным и по поперечным компонентам спина. В этом случае сильное электрон-решеточное взаимодействие приводит к вибранным модам колебаний с большой эффективной массой электрона. При охлаждении до $T = 500$ К примесный электрон локализуется и находится в связанном состоянии с примесным ионом. В результате в магнитном поле индуцируется орбитальный магнитный момент с диамагнитной вкладом в восприимчивость. Образование орбитального магнитного углового момента в магнитном поле приводит к дополнительному рассеянию носителей тока за счет спин-орбитального взаимодействия и к увеличению сопротивления в магнитном поле выше $T = 300$ К в $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$.

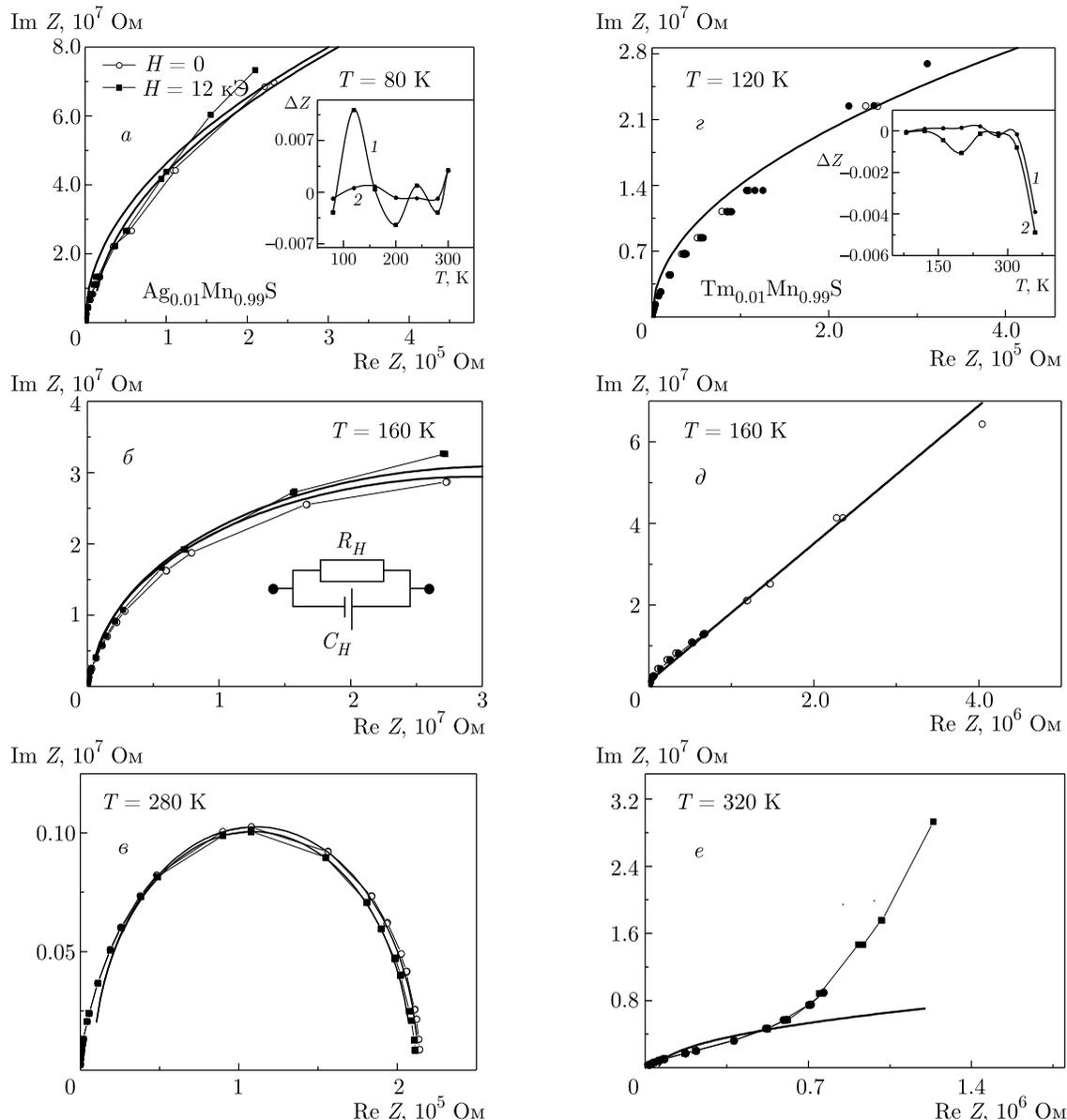


Рис. 7. Годографы твердых растворов $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$, измеренные при $T = 80$ К (а), 160 К (б), 280 К (е) и для $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$ при $T = 120$ К (z), 160 К (д), 320 К (е). На вставках к рис. 7а,з: температурные зависимости магнитоимпеданса $\Delta Z = Z(H) - Z(0)/Z(0)$, измеренные на частотах $\omega = 10^4$ (1) и 10^5 (2) Гц. На вставке к рис. 7б: эквивалентная схема с использованием R_H, C_H — высокочастотных сопротивлений и емкости

В системе $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$ дырка в совокупности с решеточными модами образует вибронное состояние и межцентровой орбитальный момент в этом интервале температур отсутствует. В области температур 150–270 К в $Tm_{0.01}Mn_{0.99}S$ и 120–260 К в $Ag_{0.01}Mn_{0.99}S$ индуцируется дипольный момент в электрическом поле в результате смещения локализованного электрона (дырки) в окрестности примес-

ного иона. Электрическое поле диполя $E \sim P/R^3$ создает потенциал $\phi \sim P/R^2$ рассеяния носителей тока в образце. В магнитном поле индуцированная электрическая поляризация P по направлению поля уменьшается. Предполагаем, что индуцированный заряд в электрически-неоднородных областях определяется экспоненциальной зависимостью, т. е. плотность тока

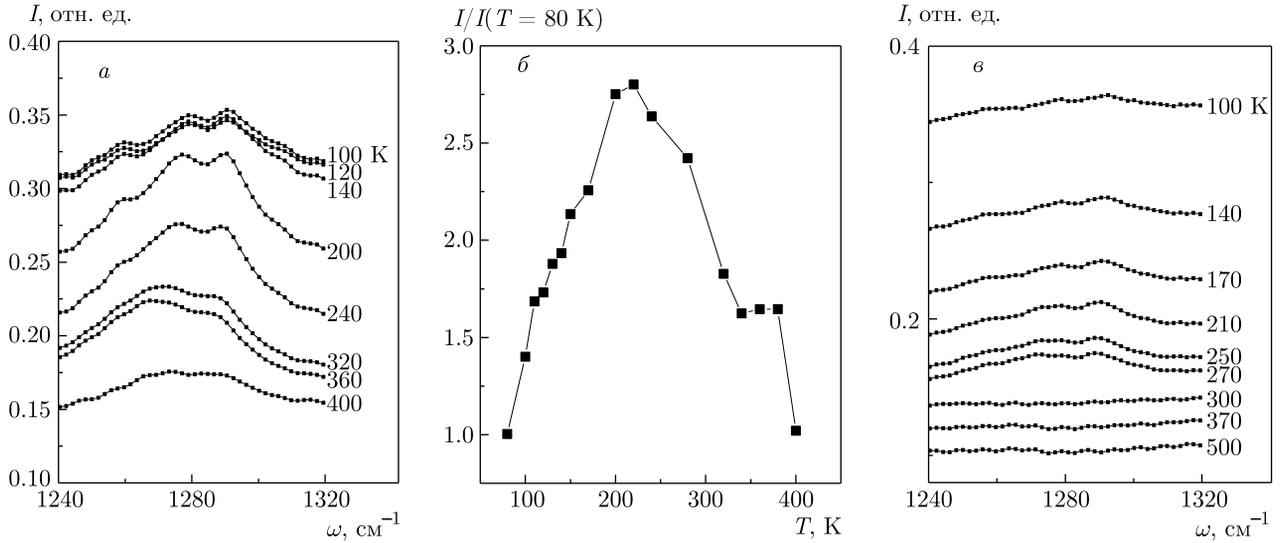


Рис. 8. ИК-спектры для образцов Ag_{0.01}Mn_{0.99}S (а) при T = 80–400 К и для Tm_{0.01}Mn_{0.99}S (с) при T = 80–500 К; б – температурная зависимость относительного изменения интенсивности поглощения в Ag_{0.01}Mn_{0.99}S

$$j = j_0(e^{t/\tau} - 1) \Rightarrow P = \int j dt \Rightarrow P = \tau j,$$

где τ – продольное время релаксации электронов. Изменение поляризации представим в виде

$$\Delta P = P(H) - P(0) = \tau(j(H) - j(0)),$$

где плотность тока в поле

$$j(H) = \sigma E / (1 + (\omega_c \tau)^2),$$

а в нулевом магнитном поле

$$j(0) = \sigma E,$$

тогда

$$\Delta j = j(H) - j(0) \Rightarrow -(\omega_c \tau)^2 / (1 + (\omega_c \tau)^2).$$

Отсюда изменение индуцированной электрической поляризации в магнитном поле имеет вид [38]

$$\Delta P = \int \Delta j dt \sim -\tau \frac{(\omega_c \tau)^2}{1 + (\omega_c \tau)^2}, \quad (6)$$

где ω_c – циклотронная частота для свободного электрона ω_c = eB/m (e – заряд электрона и m – масса электрона), τ – время релаксации в магнитном поле, которое подчиняется закону Аррениуса

$$\tau = \tau_0 \exp(\Delta E/kT)$$

и τ < τ_l. Время релаксации в Ag_{0.01}Mn_{0.99}S определено из подгонки экспериментальных результатов

согласно формуле (7) в области температур максимумов магнитосопротивления при T = 200 К, ΔE = 0.15 эВ, τ = 4 · 10⁻¹² с и при T = 120 К, ΔE = 0.09 эВ, τ = 6.5 · 10⁻¹¹ с. Для Tm_{0.01}Mn_{0.99}S время релаксации определено при T = 240 К, ΔE = 0.19 эВ, τ = 5 · 10⁻¹² с и T = 160 К, ΔE = 0.13 эВ, τ = 6 · 10⁻¹¹ с. Отрицательное магнитосопротивление твердых растворов Ag_{0.01}Mn_{0.99}S и Tm_{0.01}Mn_{0.99}S удовлетворительно описываются изменением диагональной компоненты поляризации в окрестности примесных катионов, когда постоянное магнитное поле направлено перпендикулярно току.

В магнитоупорядоченном состоянии в Me_xMn_{1-x}S (Me = Ag, Tm) образуются капли (области) с ферромагнитным упорядочением (ферроны). Магнитосопротивление в фазово-расслоенных магнетиках положительно и определяется отношением кулоновского взаимодействия двух электронов в капле A(H) ~ (e²/εR_{pol}(H)), к обменному взаимодействию (JS), R_{pol} – радиус феррона. При T < A магнитосопротивление определяется по формуле [29]

$$\Delta R = \exp\left(\frac{AbH}{2T}\right) - 1, \quad (7)$$

где b = (1/5)gμ_B/(J_{ff}S). Здесь не учитываются эффекты, связанные с зависимостью вероятности рассеяния от угла между спином электрона проводимости и магнитного момента капли, зависимость кулоновского взаимодействия между каплями и изменение топологии капли во внешнем электрическом

поле. Конкуренция между этими взаимодействиями может привести к смене знака магнитосопротивления от внешнего электрического поля.

9. ВЫВОДЫ

В результате электрон-дырочного допирования в окрестности магнитного фазового перехода установлено образование магнитно-неоднородных состояний ферронов (поляронов), существование которых подтверждается данными магнитных измерений. Относительное изменение намагниченности, полученной в результате охлаждения образца в нулевом поле и в сильном магнитном поле, для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$ описывается в модели суперпарамагнитных кластеров со случайным распределением полей анизотропии. Существование решеточных поляронов подтверждается максимумами на температурной зависимости коэффициента термоэдс в области структурных деформаций. Из спектров импеданса установлен диффузионный вклад в проводимость для $\text{Tm}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$. В модели Дебая найдено время релаксации носителей тока для $\text{Ag}_{0.01}\text{Mn}_{0.99}\text{S}$. В магнитоупорядоченной области замещение марганца серебром приводит к увеличению импеданса в магнитном поле. В парамагнитной области импеданс уменьшается в магнитном поле для двух соединений. Вырождение при дырочном допировании снимается по ян-теллеровскому каналу. В магнитоупорядоченной области обнаружено смена знака магнитосопротивления как по температуре, так и по напряжению при замещении марганца серебром, а при замещении титаном только по температуре. Найдено отрицательное магнитосопротивление в широкой области температур, которое объясняется в модели рассеяния носителей тока на электрически поляризованных областях.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-52-00005.

ЛИТЕРАТУРА

1. X. Wang, Y. Du, S. X. Dou et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 266806 (2012).
2. J.-S. Kang, E. Lee, S. Seong et al., *Philos. Mag. Lett.* **100**, 1258 (2020).
3. H. T. He, H. C. Liu, B. K. Li et al., *Appl. Phys. Lett.* **103**, 031606 (2013).
4. A. A. Abrikosov, *Phys. Rev. B* **58**, 2788 (1998).
5. Ш. М. Алекперова, И. А. Ахмедов, Г. С. Гаджиева и др., *ФТТ* **49**, 490 (2007).
6. С. С. Аплеснин, М. Н. Ситников, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 104 (2014).
7. С. С. Аплеснин, О. Б. Романова, О. Ф. Демиденко, К. И. Янушкевич, *Магнитные фазовые переходы и кинетические свойства халькогенидов 3d-металлов*, Сиб. Гос. Аэрокосмич. Ун-т, Красноярск (2017).
8. С. С. Аплеснин, Л. И. Рябинкина, О. Б. Романова и др., *ФТТ* **51**, 661 (2009).
9. O. B. Romanova, L. I. Ryabinkina, V. V. Sokolov et al., *Sol. State Commun.* **150**, 602 (2010).
10. Э. Л. Нагаев, *Физика магнитных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
11. H. H. Heikens, C. F. van Bruggen, and C. J. Haas, *Phys. Chem. Sol.* **39**, 833 (1972).
12. Д. Воган, Дж. Крейг *Химия сульфидных материалов*, Мир, Москва (1981).
13. Г. А. Петраковский, С. С. Аплеснин, Г. В. Лосева и др., *ФТТ* **33**, 406 (1991).
14. B. Morosin, *Phys. Rev. B* **1**, 236 (1970).
15. Yu. V. Gerasimova, G. M. Abramova, Z. V. Zhandun et al., *J. Raman Spectrosc.* **50**, 1572 (2019).
16. S. S. Aplesnin, G. A. Petrakovskii, L. I. Ryabinkina et al., *Sol. State Commun.* **129**, 195 (2004).
17. S. S. Aplesnin, L. I. Ryabinkina, G. M. Abramova et al., *Phys. Rev. B* **71**, 125204 (2005).
18. S. S. Aplesnin, M. N. Sitnikov, O. B. Romanova et al., *Phys. Stat. Sol. B* **253**, 1771 (2016).
19. S. S. Aplesnin, A. M. Kharkov, O. B. Romanova et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **352**, 1 (2014).
20. R. C. Vickery and H. M. Muir, *Adv. Energy Conv.* **1**, 179 (1961).
21. Wenhao Xing, Naizheng Wang, Yangwu Guo et al., *Dalton Transactions* **48**, 17620 (2019).
22. K. I. Kugel, A. L. Rakhmanov, A. O. Sboychakov et al., *Phys. Rev. B* **78**, 155113 (2008).
23. S. S. Aplesnin, M. N. Sitnikov, A. M. Kharkov et al., *Phys. Stat. Sol. B* **256**, 1900043 (2019).

24. O. V. Romanova, S. S. Aplesnin, L. V. Udod et al., *J. Appl. Phys.* **125**, 175706 (2019).
25. Г. А. Петраковский, Л. И. Рябинкина, Г. М. Абрамова и др., *ФТТ* **44**, 1836 (2002).
26. J. S. Smart, *J. Phys. and Chem.* **11**, 97 (1959).
27. S. Yunoki, J. Hu, A. L. Malvezzi et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 845 (1998).
28. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, *УФН* **171**, 577 (2001).
29. Э. Г. Бытыев, *УФН* **179**, 1333 (2009).
30. R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1983).
31. Э. Л. Нагаев, *УФН* **39**, 781 (1996).
32. H. H. Heikens, G. A. Wiegers, and C. F. van Bruggen, *Sol. State Comm.* **24**, 205 (1977).
33. С. С. Аплеснин *Магнитные и электрические свойства сильнокоррелированных магнитных полупроводников с четырехспиновом взаимодействии с орбитальным упорядочением*, Наука, Москва (2013).
34. А. В. Малаховский, Т. П. Морозова, В. Н. Заблуда и др., *ФТТ* **32**, 1012 (1990).
35. M. M. Parish and P. V. Littlewood, *Lett. Nature* **426**, 162 (2003).
36. В. И. Зиненко, Н. Г. Замкова и др., *ФТТ* **43**, 2194 (2001).
37. Md. Mobarak Hossain Polash, Farzad Mohaddes, Morteza Rasoulianboroujeni et al., *J. Mat. Chem. C* **8**, 4049 (2020).
38. Ч. Киттель *Элементарная статистическая физика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК КОГЕРЕНТНОГО СУБТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ПЕРЕХОДЕ ЛИФШИЦА В ДВУХСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ СО ЩЕЛЬЮ

*А. Г. Казарян**

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

Поступила в редакцию 17 ноября 2020 г.,

после переработки 7 января 2021 г.

Принята к публикации 8 января 2021 г.

При помощи микроскопической квантовой теории нелинейного взаимодействия сильного когерентного электромагнитного излучения с двухслойным графеном со щелью рассмотрена генерация высоких гармоник при низкоэнергетическом фотонном возбуждении при переходе Лифшица. Уравнение Лиувилля–фон Неймана для матрицы плотности решается численно в режиме неадиабатического многофотонного возбуждения. С помощью численных исследований определены вероятности генерации второй и третьей гармоник при аннигиляции пары частица–дырка при переходах Лифшица в линейно поляризованной когерентной электромагнитной волне. Полученные результаты показывают, что двухслойный графен со щелью может служить эффективной средой для генерации четных и нечетных высших гармоник в субтерагерцевой области частот.

DOI: 10.31857/S0044451021050114

1. ВВЕДЕНИЕ

Многие квантово-электродинамические нелинейные явления, индуцированные сильным лазерным излучением в конденсированном веществе, особенно в графене или других наноструктурах, вносят значительный вклад в физику низких энергий и нанооптоэлектронику и систематически исследовались в основном в случае однослойного графена [1], что обусловлено уникальными физическими свойствами такой двумерной (2D) наносистемы атомной толщины [1–3]. С другой стороны, для индуцированных электродинамических явлений в атомных наноструктурных 2D-системах двухслойный графен со структурой АВ представляет самостоятельный интерес, так как его электронные состояния значительно богаче, чем у однослойного графена. Известно также многофотонное резонансное возбуждение с генерацией высших гармоник (ГВГ) через нелинейные каналы в двухслойном графене [4–6]. Ранние исследования лазерно-индуцированного процесса ГВГ проводились в основном в газовых средах.

Однако в последнее десятилетие появилось гораздо больше исследований гармоник высокого порядка в объемных кристаллах [7–12]. Известно, что и в линейном приближении взаимодействие электромагнитной волны большой амплитуды с графеном может приводить к существенной эффективной перестройке энергетического спектра графена [13–15]. Также представляет интерес исследование ГВГ и связанных с ней процессов в низкоразмерных наноструктурах, таких как графен и его производные [13–34], гексагональный нитрид бора [35], монослойные дихалькогениды переходных металлов [36–38], топологические изоляторы [39, 40], монослойный черный фосфор [41], выпуклые гексагональные 2D-наноструктуры [42], твердые тела [43, 44] и другие 2D-системы [45–48]. Нелинейный когерентный отклик в двухслойном графене со структурой АВ под действием интенсивного электромагнитного излучения приводит к модификации квазиэнергетического спектра, индукции долинных поляризованных токов [49, 50], а также к нелинейным оптическим эффектам второго и третьего порядков [51–54]. Двухслойная графеновая система представляет собой уникальную систему, в которой на топологию зонной структуры можно влиять и

* E-mail: amarkos@ysu.am

выбирать ее. Двухслойный графен — это хорошо настраиваемый материал: энергию Ферми можно «настроить» не только с помощью стандартных способов, как в однослойном графене. Зонную структуру можно изменять также внешними возмущениями: поперечным электрическим полем или деформацией [55–61]. В частности, представляет интерес рассмотрение процесса ГВГ в режиме сильной связи между волной и двухслойным графеном с запрещенной зоной, индуцированной внешним постоянным электрическим полем [58, 62–64]. Более того, с помощью современных технологий [64, 65] в двухслойном графене со структурой АВ можно получить широкие щели, достаточные для создания полевых транзисторов с высоким коэффициентом входа-вывода не только при низких криогенных температурах, но и при комнатных [66, 67].

Известны фотодетекторы-счетчики на основе графена для подсчета низкоэнергетических фотонов для различных приложений в медицине, космических науках и для безопасности. Настраиваемая ширина запрещенной зоны в двухслойном графене в случае таких фотодетекторов может позволить варьировать разрешение и рабочие температуры, что в результате дает операционные преимущества. Обратим внимание на то, что широкая запрещенная зона также может сделать возможным процесс ГВГ при комнатной температуре [28], который подавляется в обычном двухслойном графене [16]. К сожалению, эффективные переходы Лифшица в поле волны накачки в двухслойном графене со структурой АВ со щелью менее изучены.

Процесс ГВГ в двухслойном графене со щелью в поле когерентного электромагнитного излучения при переходе Лифшица с энергией фотона, значительно меньшей так называемой энергии Лифшица $\mathcal{E}_L \sim 1$ мэВ, имеет некоторые особенности [68–75]. Две соприкасающиеся параболы поверхности Ферми разбиваются на четыре отдельных «кармана». В отличие от обычного графена, внешние возмущения, такие как деформация [76, 77] или электрическое поле [78], могут изменять топологию электронной дисперсии и энергию перехода Лифшица, который соединяет области с разными топологиями Ферми [79]. Из-за 2D-природы двухслойного графена его химический потенциал и топология могут быть настроены с помощью электростатической щели [1], что упрощает экспериментальное исследование перехода Лифшица. Кстати, в невозмущенном двухслойном графене это достигается при низких энергиях $\mathcal{E}_L = 1$ мэВ. Чтобы вызвать асимметрию, можно использовать химическое легирование

[55] или внешние возмущения [56]. Индуцированная асимметрия открывает запрещенную зону в энергетическом спектре графена [59, 71–75]. Как показано в работе [79], для индуцированной асимметрии и ширины щели $U = 100$ мэВ переход Лифшица происходит при более высокой энергии $\mathcal{E}_L = 1.6$ мэВ. Из оценки, приведенной в [79], можно заключить, что экспериментальное наблюдение перехода Лифшица обусловлено наличием запрещенной зоны, вызванной асимметрией слоев, и тем фактом, что чем шире щель, тем более заметен этот эффект.

При внутризонных переходах взаимодействие частицы с терагерцевыми (ТГц) или субТГц-фотонами низких энергий $\hbar\omega \ll \mathcal{E}_L$ характеризуется параметром эффективного взаимодействия χ [16]:

$$\chi = \frac{eE_0v_3}{\hbar\omega^2},$$

где E_0 — напряженность электрического поля, ω — частота волны, e — заряд электрона, $v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/2\hbar \approx v_F/8$ — эффективная скорость, определяемая амплитудой перескока $\gamma_3 = 0.32$ эВ между слоями ($a \approx 0.246$ нм — расстояние между ближайшими А-слоями), v_F — скорость Ферми в обычном графене. При наличии запрещенной зоны U межзонные переходы характеризуются так называемым параметром Келдыша [80, 81]

$$\gamma = \frac{\omega\sqrt{mU}}{eE_0} = \frac{v_3\sqrt{mU}}{\chi\hbar\omega}.$$

Здесь U — ширина запрещенной зоны, $m = \gamma_1/2v_F^2$ — эффективная масса, $\gamma_1 \approx 0.39$ эВ.

Для материалов со щелью параметр Келдыша определяет характер процесса ионизации, который с образованием электронно-дырочной пары является первым этапом ГВГ. В пределе $\gamma \gg 1$ доминирует многофотонная ионизация. В так называемом неадиабатическом режиме ($\gamma \sim 1$) могут иметь место как многофотонная, так и туннельная ионизация. В пределе $\gamma \ll 1$ преобладает туннельная ионизация. В рассматриваемом случае процесс ионизации сводится к переносу электрона из валентной зоны в зону проводимости, т.е. к созданию пары электрон-дырка. Поскольку при $\gamma \gg 1$ межзонными переходами можно пренебречь, волновое поле не может обеспечить достаточно энергии для создания пары электрон-дырка, и генерация гармоник подавляется. Таким образом, в неадиабатическом режиме из-за большой вероятности ионизации интенсивность гармоник может быть значительно увеличена по сравнению с туннельным переходом [28, 33]. Если

$\gamma \sim 1$ или $\gamma \ll 1$, то имеют место межзонные переходы. С этой точки зрения, материалы конденсированного состояния с двухслойным графеном предпочтительнее, благодаря настраиваемой запрещенной зоне с нетривиальной топологией.

В настоящей работе мы будем рассматривать неадиабатический режим ГВГ при $\gamma \sim 1$ и $\gamma \ll 1$, когда становятся существенными многофотонные процессы. Наше рассмотрение охватывает в основном фотоны низких энергий. Средняя интенсивность волны выражается через χ как

$$I_\chi = \chi^2 \cdot 1.96 \cdot 10^{13} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2} \left(\frac{\hbar\omega}{\text{эВ}} \right)^4,$$

и требуемая интенсивность I_χ для нелинейного режима строго зависит от энергии фотона. В частности, для фотонов с энергиями 0.4–0.9 мэВ режим многофотонного взаимодействия может быть реализован при интенсивностях $I_\chi = 1\text{--}10^2 \text{ Вт/см}^2$. Современные источники на основе фотонов в ТГц- и субТГц-диапазонах (с энергиями 0.4–1.24 мэВ) включают квантовые каскадные лазеры и могут достигать значительной выходной мощности (в основном при криогенных температурах), тогда как их использование в сочетании с нелинейными кристаллами позволяет получить перестраиваемую непрерывную ТГц-волну с энергией несколько микроватт при комнатной температуре [82]. Эффективность таких источников довольно высока, но, к сожалению, до сих пор они с трудом интегрируются в более крупные цифровые электронные системы, что, возможно, является самым большим недостатком таких систем связи [82, 83].

В настоящей статье с помощью микроскопической нелинейной квантовой теории численно исследовано взаимодействие двухслойного графена со структурой АВ с мощным лазерным излучением. Определены оптимальные значения основных параметров: ширины запрещенной зоны, интенсивности волны накачки, температуры графена для практически значимого случая ГВГ в низкоэнергетической области перехода Лифшица (разбиение односвязной линии Ферми на четыре отдельные части) [59, 68–70]. Уравнение Лиувилля–фон Неймана рассматривается численно для генерации высших (здесь второй и третьей) гармоник в режиме многофотонного возбуждения вблизи точек Дирака зоны Бриллюэна. Мы рассматриваем процесс генерации гармоник в неадиабатическом режиме взаимодействия, когда параметр Келдыша имеет порядок единицы. Выявлены также картина многофотонного возбуждения моря Ферми–Дирака и эффект тригонального ис-

кривления. Мы исследуем вероятности ГВГ при аннигиляции пары частица–дырка в сильном эффективном поле линейно-поляризованной электромагнитной волны для практически оптимальных параметров рассматриваемой системы. Полученные результаты показывают, что при специально выбранных значениях соответствующих характерных параметров этого процесса мы можем использовать двухслойный графен со щелью в качестве удобной нелинейной среды для ГВГ волны накачки с эффективным выходом в субТГц- и ТГц-областях спектра при температуре графена выше криогенной.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 формулируется и численно решается система уравнений для одночастичной матрицы плотности в режиме многофотонного взаимодействия. В разд. 3 рассматривается проблема генерации гармоник при низкоэнергетическом возбуждении двухслойного графена со щелью. Основные выводы приведены в разд. 4, а громоздкие формулы вынесены в Приложение.

2. ОСНОВНАЯ ТЕОРИЯ

В дальнейшем мы используем микроскопическую нелинейную квантовую теорию взаимодействия когерентного электромагнитного излучения с двухслойным графеном со щелью, которая развита в работах [28, 33]. Представим линейно поляризованную электромагнитную волну с несущей частотой ω и медленно меняющейся амплитудой $f(t)E_0$ электрического поля \mathbf{E} в плоскости xy слоя графена в виде

$$\mathbf{E}(t) = f(t) E_0 \mathbf{e} \cos \omega t, \quad (1)$$

где \mathbf{e} — единичный вектор поляризации. Медленно меняющуюся огибающую волны накачки представим формулой

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2(\pi t/T), & 0 \leq t \leq T, \\ 0, & t < 0, \quad t > T, \end{cases} \quad (2)$$

где T характеризует длительность импульса, $T = 10T_0$, $T_0 = 2\pi/\omega$.

Эффективный одночастичный гамильтониан [58–60] для низкочастотных переходов ($|\mathcal{E}_\sigma| < \gamma_1 \simeq 0.39 \text{ эВ}$) в двухслойном графене со структурой АВ со щелью вблизи дираковских точек K_ζ имеет вид

$$\hat{H}_\zeta = \begin{pmatrix} U/2 & q_\zeta^*(\mathbf{p}) \\ q_\zeta(\mathbf{p}) & -U/2 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = \{\hat{p}_x, \hat{p}_y\}$ — оператор импульса электрона, $\zeta = \pm 1$ — квантовое число долины, U — ширина щели и

$$q_\zeta(\mathbf{p}) = -\frac{1}{2m_*} (\zeta p_x + ip_y)^2 + v_3 (\zeta p_x - ip_y). \quad (4)$$

Первый член в формуле (4) связан с парой параболических зон $\mathcal{E} = \pm p^2/2m$.

Квантовые числа спина и долины сохраняются. Междолинных переходов нет, и индекс долины ζ можно рассматривать как параметр. Собственные состояния эффективного гамильтониана (3) есть спиноры

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} |\sigma, \mathbf{p}\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (5)$$

где

$$|\sigma, \mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \sqrt{\frac{\mathcal{E}_\sigma + U/2}{2\mathcal{E}_\sigma}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\mathcal{E}_\sigma + U/2} \Upsilon(\mathbf{p}) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$\Upsilon(\mathbf{p}) = -\frac{p^2}{2m} e^{2i\zeta\vartheta} + \zeta v_3 p e^{-i\zeta\vartheta}, \quad (7)$$

$\vartheta = \arctg(p_y/p_x)$, σ — индекс зоны ($\sigma = 1$ для валентной зоны и $\sigma = -1$ для зоны проводимости) и S — область квантования,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\sigma(\mathbf{p}) &= \\ &= \sigma \sqrt{\frac{U^2}{4} + (v_3 p)^2 - \zeta \frac{v_3 p^3}{m} \cos 3\vartheta + \left(\frac{p^2}{2m}\right)^2} \end{aligned} \quad (8)$$

— соответствующая энергия состояния.

Оператор поля Ферми–Дирака в виде разложения по свободным состояниям (5) может быть описан с использованием техники вторичного квантования:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}(t) \Psi_\sigma(\mathbf{r}), \quad (9)$$

где $\hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}(t)$ ($\hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger(t)$) — оператор уничтожения (рождения) электрона с импульсом \mathbf{p} , который удовлетворяет обычным правилам антикоммутируемости. Одночастичный гамильтониан при наличии однородного зависящего от времени электрического поля $\mathbf{E}(t)$ можно представить как

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_\zeta + \begin{pmatrix} \mathbf{e}\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) & 0 \\ 0 & \mathbf{e}\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где для гамильтониана взаимодействия мы использовали калибровку длины [84, 85]. Используя разложение (9), полный гамильтониан вторичного квантования можем записать в виде

$$\hat{H} = \sum_{\sigma, \mathbf{p}} \mathcal{E}_\sigma(\mathbf{p}) \hat{a}_{\sigma\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\sigma\mathbf{p}} + \hat{H}_{int}, \quad (11)$$

где взаимодействие излучения с веществом задано не зависящим от калибровки полем $\mathbf{E}(t)$ следующей формулой:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= ie \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \sigma} \delta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} \partial_{\mathbf{p}'} \mathbf{E}(t) \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}', \sigma'} + \\ &+ \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \mathbf{E}(t) (\mathbf{D}_t(\sigma, \mathbf{p}) \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}, -\sigma} + \\ &+ \mathbf{D}_m(\sigma, \mathbf{p}) \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь

$$\mathbf{D}_m(\sigma, \mathbf{p}) = \hbar e \langle \sigma, \mathbf{p} | i\partial_{\mathbf{p}} | \sigma, \mathbf{p} \rangle \quad (13)$$

— средний дипольный момент, или берри-связь,

$$\mathbf{D}_t(\sigma, \mathbf{p}) = \hbar e \langle \sigma, \mathbf{p} | i\partial_{\mathbf{p}} | -\sigma, \mathbf{p} \rangle \quad (14)$$

— дипольный момент перехода (оба даны в Приложении, см. также работу [28]).

Многофотонное взаимодействие двухслойного графена с сильным полем излучения описывается уравнением Лиувилля–фон Неймана для одночастичной матрицы плотности (см. уравнения (25), (26) Приложения). Мы предполагаем, что изначально идеальный ферми-газ находится в равновесии. Отметим, что мы включили релаксационные процессы в уравнение Лиувилля–фон Неймана при помощи неоднородной феноменологической вероятности затухания Γ , поскольку однородные релаксационные процессы медленнее неоднородных. Мы решим систему уравнений (27) и вытекающую из нее замкнутую систему дифференциальных уравнений (28), (29), приведенных в Приложении, для функций $N_v(\mathbf{p}, t)$, $N_c(\mathbf{p}, t)$, $P(\mathbf{p}, t)$ (определения функций см. в Приложении) с учетом следующих начальных условий ($P(\mathbf{p}, 0) = 0$):

$$N_c(\mathbf{p}, 0) = \frac{1}{1 + \exp[(\mathcal{E} - \mu)/T]}, \quad (15)$$

$$N_v(\mathbf{p}, 0) = 1 - N_c(\mathbf{p}, 0). \quad (16)$$

Здесь T и μ — соответственно температура и химический потенциал в единицах энергии.

Систему уравнений (28)–(30) не удастся решить аналитически в общем случае. При численном решении проведена замена переменных и преобразование уравнений с частными производными в обыкновенные. Новые переменные есть t и $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_E(t)$, где

$$\mathbf{p}_E(t) = -e \int_0^t \mathbf{E}(t') dt' \quad (17)$$

— переданный волновым полем классический импульс.

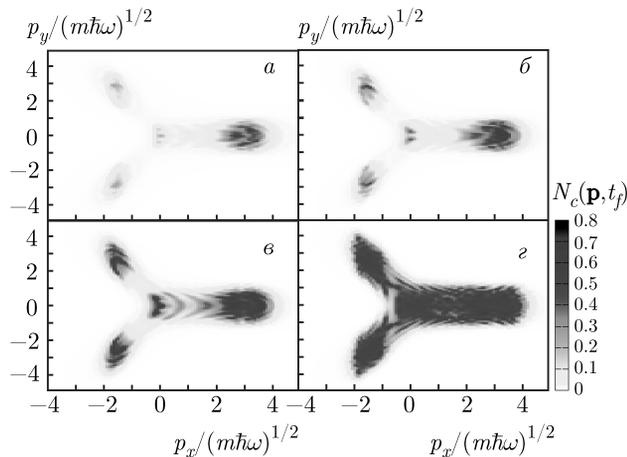


Рис. 1. (В цвете онлайн) Функция распределения частиц $N_c(\mathbf{p}, t_f)$ (в относительных единицах) после взаимодействия в момент $t_f = 10T_0$ в зависимости от безразмерных компонент импульса при ширинах щели $U = 5$ мэВ (а), 4 мэВ (б), 3 мэВ (в), 0.0008 мэВ (г). Волна накачки считается линейно поляризованной вдоль оси y . Демонстрируется многофотонное возбуждение с эффектом тригонального искривления для низкоэнергетических переходов Лифшица, индуцированных возбуждением фотонов при энергии $\hbar\omega = \mathcal{E}_L/1.1 \simeq 0.8$ мэВ, температуре $T/\hbar\omega = 0.4$ и безразмерном параметре интенсивности $\chi = 1$ для долины с индексом $\zeta = -1$

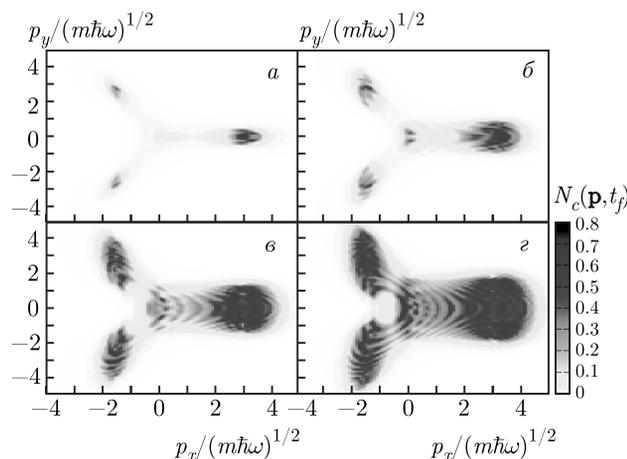


Рис. 2. (В цвете онлайн) Создание пары частица–дырка в двухслойном графене при многофотонном резонансном возбуждении. Функция распределения частиц $N_c(\mathbf{p}, t_f)$ (в относительных единицах) после взаимодействия в момент $t_f = 10T_0$ для $\chi = 0.5$ (а), $\chi = 1.0$ (б), $\chi = 1.5$ (в), $\chi = 2.0$ (г). Температура $T/\hbar\omega = 0.4$. Предполагается, что поле поляризовано линейно вдоль оси y с энергией фотона $\hbar\omega = \mathcal{E}_L/1.1 \simeq 0.8$ мэВ, а ширина щели $U = 2$ мэВ. Результаты приведены для долины с индексом $\zeta = -1$

Фотовозбуждения моря Ферми–Дирака, индуцированные переходами Лифшица, представлены на рис. 1, 2. Эффективная волна линейно поляризована по оси y . После соответствующих преобразований выполняется интегрирование уравнений (28)–(30) на однородной сетке из 10^4 точек $(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y)$. В качестве максимального импульса возьмем $\tilde{p}_{max}/\sqrt{m\hbar\omega} = 5$. Интегрирование по времени выполняется стандартным алгоритмом Рунге–Кутты четвертого порядка. Для вероятности затухания берем $\Gamma = t_0(\mu, T)\mathcal{T}^{-1}$.

Оценим время релаксации $t_0(\mu, T)$. Мы изучили когерентное взаимодействие двухслойного графена с волной накачки в режиме сверхбыстрого возбуждения, что верно только для времен $t < \tau_{min}$, где τ_{min} — наименьшее из всех релаксационных времен. Для возбуждений с энергиями $\mu \ll \gamma_1 = 0.39$ эВ доминирующим механизмом релаксации считается электрон-фононная связь между продольными акустическими фононами [86, 87]. Для низкотемпературного предела

$$T \ll 2 \frac{c_{ph}}{v_F} \sqrt{\mu\gamma_1},$$

где $c_{ph} \simeq 2 \cdot 10^6$ см/с — скорость продольного акустического фонона, время релаксации для уровня с энергией μ можно оценить как [87]

$$t_0(\mu, T) \simeq \left(\frac{\pi D^2 T^2}{8 \rho_m \hbar^3 c_{ph}^3 v_F} \sqrt{\frac{\gamma_1}{\mu}} \right)^{-1}. \quad (18)$$

Здесь $D \simeq 20$ эВ — константа электрон-фононного взаимодействия, а $\rho_m \simeq 15 \cdot 10^{-8}$ г/см² — массовая плотность двухслойного графена. Для $\mu \simeq 0.8$ мэВ при температуре $T = 0.4\hbar\omega$ из уравнения (18) получаем $\tau \simeq 60$ пс. Для энергий $\mu \ll \gamma_1$ можно когерентно управлять многофотонными переходами в двухслойном графене в диапазоне времени $t \lesssim 60$ пс, пренебрегая столкновениями частиц.

На рис. 1 представлен график плотности функции распределения частиц $N_c(\mathbf{p}, t_f)$ в зависимости от безразмерных компонент импульса после взаимодействия для различных значений ширины щели. Длительность импульса волны накачки $\mathcal{T} = 10T_0 \approx 50$ пс. Хорошо виден эффект тригонального искажения (warping) — отклонение возбужденных изоэнергетических контуров от кругов, которые размываются с увеличением ширины щели U . Во всех рассмотренных случаях две соприкасающиеся параболы превращаются в четыре отдельных «кармана». Заметим, что тригональное искривление имеет решающее значение для четного порядка нелинейности. Как видно на рис. 1, с ростом U наступает пертурбативный режим $\gamma > 1$, и возможны только слабые возбуждения моря Ферми–Дирака.

На рис. 2 показана зависимость фотовозбуждения от интенсивности волны накачки на фиксированной частоте субТГц-диапазона. Для больших значений χ , когда $\gamma = 1.1$, отчетливо видны многофотонные возбуждения. С увеличением интенсивности волны в ферми-дираковском море увеличивается число состояний с поглощением большого числа фотонов. При $\chi \gtrsim 1$, когда $\gamma \simeq 1$, происходит многофотонное возбуждение моря Ферми–Дирака по тригонально искривленным волновым полям изолиниям квазиэнергетического спектра. Таким образом, многофотонные вероятности рождения пар частица–дырка имеют максимальные значения для энергетических изолиний, определяемых резонансным условием

$$\mathcal{T}_0^{-1} \int_0^{\mathcal{T}_0} 2\mathcal{E}_1(\tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_E(t), t) dt = n\hbar\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Эти контуры также видны на рис. 1. Исследования температурной зависимости возбуждения ферми-дираковского моря показало, что для рассматриваемого случая оно слабо зависит от оптимальных температур: возбужденные изолинии слегка размываются с повышением температуры. Этот эффект невелик, поскольку $U \gg T$, и можно ожидать, что спектры гармоник будут устойчивы к изменению температуры в отличие от случая $U = 0$, когда излучение гармоник подавляется при повышении температуры [28, 33]. Таким образом, температурная зависимость отсутствует.

В следующем разделе мы исследуем нелинейный отклик двухслойного графена со щелью в процессе генерации второй и третьей гармоник под воздействием лазерного поля субТГц-частоты $\omega = 0.4\text{--}0.9$ мэВ/ \hbar в неадиабатическом режиме $\gamma \simeq 1$.

3. ГЕНЕРАЦИЯ ГАРМОНИК ПРИ ИНДУЦИРОВАННЫХ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДАХ В ДВУХСЛОЙНОММ ГРАФЕНЕ СО ЩЕЛЬЮ

Здесь мы исследуем нелинейный отклик двухслойного графена на процесс генерации гармоник в неадиабатическом режиме индуцированных переходов Лифшица, когда параметр Келдыша имеет порядок единицы. Для когерентной части спектра излучения введем среднее значение оператора плотности тока:

$$j_\zeta = -2e \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) | \hat{\mathbf{v}}_\zeta | \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (19)$$

Оператор скорости $\hat{\mathbf{v}}_\zeta = \partial \hat{H} / \partial \hat{\mathbf{p}}$ приводится в Приложении (см. уравнения (35), (36), а также работу [30]). Используя уравнения (19)–(36), формулу тока для долины ζ можно записать в виде

$$\mathbf{j}_\zeta(t) = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \times \int d\mathbf{p} \left\{ \mathbf{V}'(\mathbf{p}) (N_c(\mathbf{p}, t) - N_v(\mathbf{p}, t)) + \frac{2i}{\hbar} \mathcal{E}_1(\mathbf{p}) \times [\mathbf{D}_t(\mathbf{p}) P^*(\mathbf{p}, t) - \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) P(\mathbf{p}, t)] \right\}, \quad (20)$$

где $\mathbf{V}'(\mathbf{p})$ — внутризонная скорость (37). В уравнении (20) первый член — это внутризонный ток, который обусловлен независимым движением носителей в соответствующих зонах. Второй член в формуле (20) описывает высшие гармоники, возникающие в результате рекомбинации ускоренных электронно-дырочных пар. Поскольку мы изучаем неадиабатический режим, вклад обоих механизмов существен.

Нет вырождения по квантовому числу ζ -долины, поэтому полный ток может быть получен суммированием по ζ :

$$j_x = j_{1,x} + j_{-1,x}, \quad (21)$$

$$j_y = j_{1,y} + j_{-1,y}. \quad (22)$$

Компоненты плотности тока $j_{x,y}$ определены как

$$\frac{j_{x,y}}{j_0} = G_{x,y} \left(\omega t, \chi, \gamma, \frac{\mathcal{E}_L}{\hbar\omega}, \frac{T}{\hbar\omega}, \frac{U}{\hbar\omega} \right). \quad (23)$$

Здесь

$$j_0 = \frac{e\omega}{\pi^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad (24)$$

G_x и G_y — безразмерные периодические (при монохроматической волне) функции, которые зависят от параметров взаимодействия χ , γ , энергии Лифшица и температуры. Таким образом, используя решения уравнений (28)–(30) и проводя интегрирование в уравнении (20), можно вычислить спектры излучения гармоник с помощью фурье-преобразования функций $G_{x,y}(t)$. Вероятность испускания n -й гармоники пропорциональна $n^2 |j_n|^2$, где $|j_n|^2 = |j_{xn}|^2 + |j_{yn}|^2$, j_{xn} и j_{yn} являются n -ми компонентами Фурье полного тока, индуцированного полем. Для нахождения j_n использован алгоритм быстрого преобразования Фурье. Для построения графиков мы используем формулу для нормированной плотности тока (23).

Отметим, что при сравнении с обычным однослойным графеном [14, 15] значение j_0 для двухслойного графена больше в $\sqrt{\gamma_1/2\hbar\omega}$ раз. Кроме того, предел обрезания гармоник больше, чем в случае

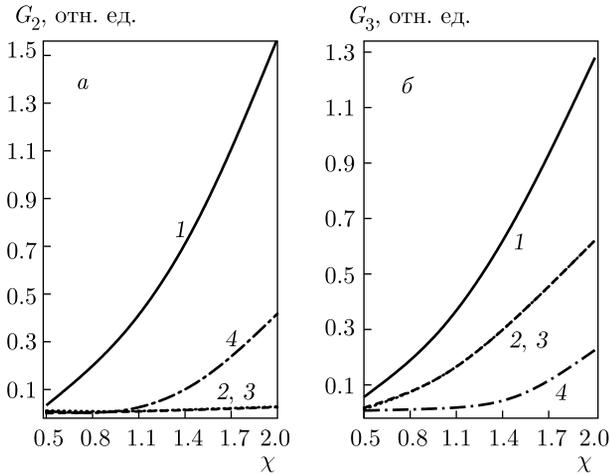


Рис. 3. Вероятности испускания гармоник второго G_2 (а) и третьего G_3 (б) порядков в двухслойном графене при переходе Лифшица в зависимости от параметра интенсивности χ для значений ширины щели $U = 3$ мэВ (кривая 1), 4 мэВ (кривая 2), 5 мэВ (кривая 3), 6 мэВ (кривая 4). Температура принята равной $T/\hbar\omega = 0.4$. Предполагается, что волна с частотой $\omega = 0.8$ мэВ/ \hbar поляризована линейно

монослойного графена [14], что является результатом сильной нелинейности, вызванной тригональным искажением. Следовательно, для рассматриваемого случая $\hbar\omega \ll \gamma_1$ интенсивность излучения гармоник как минимум на порядок больше, чем в монослойном графене.

Для исследования генерации гармоник за счет многофотонного резонансного возбуждения и аннигиляции пары частица–дырка из когерентных состояний суперпозиции при $\gamma \simeq 1$ сначала исследуем вероятности генерации второй и третьей гармоник. Эти вероятности в зависимости от мощности волны накачки, определяемой параметром χ на одной и той же частоте, показана на рис. 3 для различных значений ширины щели.

На рис. 3 графики для $U = 4$ мэВ и $U = 5$ мэВ совпадают. Как видно на рисунке, для параметров интенсивности $\chi \gtrsim 1$ при рассматриваемых значениях ширины щели U мы имеем сильное отклонение от степенного закона для скоростей излучения второй и третьей гармоник, которые, в соответствии с теорией возмущений, пропорциональны соответственно χ^2 и χ^3 . На рис. 4 вероятности генерации второй и третьей гармоник показаны как функции ширины щели при различных интенсивностях, определяемых параметром χ на одной и той же частоте. Как видно на рис. 4, все графики имеют максимальные значения при $U \simeq 2$ мэВ. В результате находим оптимальные параметры, и интенсивность излучения

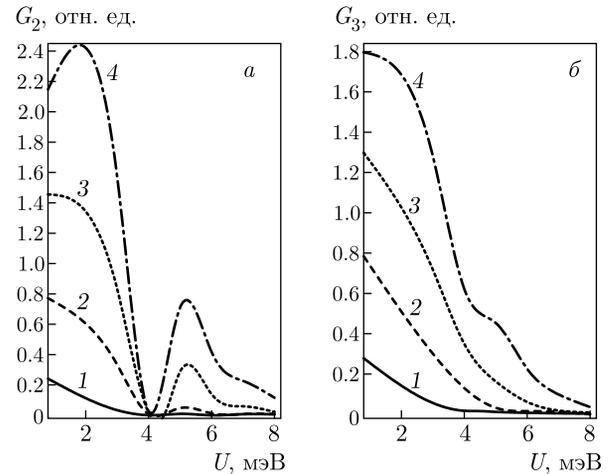


Рис. 4. Вероятности испускания второй G_2 (а) и третьей G_3 (б) гармоник в зависимости от ширины запрещенной зоны U для $\chi = 0.5$ (кривая 1), 1.0 (2), 1.5 (3), 2.0 (4). Другие параметры, как на рис. 3

гармоник тем больше, чем выше интенсивность волны накачки.

Итак, в соответствии с результатами рис. 3 и 4, интенсивное излучение второй и третьей гармоник при индуцированных волной накачки ускорении и аннигиляции частицы или дырки в графене со щелью может быть получено, когда частота волны накачки находится в субТГц-области. Как и в случае аналогичных расчетов для интенсивной волны накачки при большой ширине запрещенной зоны U ($U \gg T$), скорость излучения слабо зависит от температуры.

На рис. 5 показаны зависимости вероятностей генерации второй и третьей гармоник для двухслойного графена со щелью в зависимости от частоты накачки для различных параметрах взаимодействия при $U = 2$ мэВ. Показаны максимумы скорости излучения при различных энергиях фотонов. Для генерации третьей гармоники максимальное значение достигается на частоте $\omega \simeq 0.8$ мэВ/ \hbar . Что касается ГВГ вплоть до дальнего инфракрасного диапазона, как показано в работе [33], она может быть получена с помощью квантовых каскадных лазеров с высокой мощностью.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью микроскопической нелинейной теории представлено взаимодействие двухслойного графена со щелью и сильного когерентного поля излучения при низкоэнергетическом переходе Лифшица

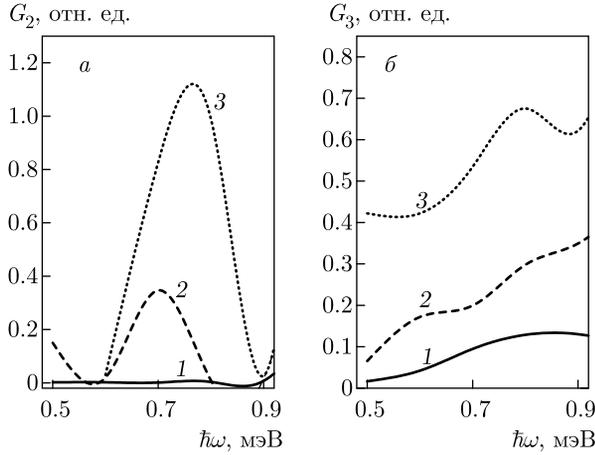


Рис. 5. Вероятности испускания второй G_2 (а) и третьей G_3 (б) гармоник для двухслойного графена в зависимости от энергии фотона $\hbar\omega$ для $\chi = 1.0$ (кривая 1), 1.5 (2), 2.0 (3). Температура принята равной $T/\hbar\omega = 0.4$, а ширина щели $U = 2$ мэВ. Предполагается, что поле линейно поляризовано вдоль оси y

ца. Замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности решается численно для двухслойного графена в приближении дираковского конуса в поле линейно поляризованной электромагнитной волны субТГц-частоты. Мы рассмотрели неадиабатические волновые переходы Лифшица для моря Ферми–Дирака, включая процессы ГВГ. Показано, что роль щели в нелинейно-оптическом отклике двухслойного графена весьма значительна. В частности, присутствуют нелинейные процессы четного порядка, обрезание гармоник увеличивается, а процессы излучения гармоник становятся устойчивыми к повышению температуры. Полученные результаты показывают, что двухслойный графен со щелью может служить эффективной средой для генерации четных и нечетных высших гармоник в ТГц- и субТГц-областях частот, что важно для разработки систем новой высокоскоростной беспроводной связи [82, 83]. Полученные результаты свидетельствуют о том, что процесс ГВГ для субТГц-фотонов (с длинами волн от 0.3 до 1 мм) может наблюдаться уже при интенсивностях $I_\chi = 1\text{--}10^3$ Вт/см² при температуре образца $T < \hbar\omega$.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Уравнение Лиувилля–фон Неймана для одночастичной матрицы плотности можно представить в виде

$$\rho_{\alpha,\beta}(\mathbf{p}, t) = \langle \hat{a}_{\mathbf{p},\beta}^\dagger(t) \hat{a}_{\mathbf{p},\alpha}(t) \rangle, \quad (25)$$

где $\hat{a}_{\mathbf{p},\alpha}(t)$ удовлетворяет уравнению Гейзенберга

$$i\hbar \frac{\partial \hat{a}_{\mathbf{p},\alpha}(t)}{\partial t} = [\hat{a}_{\mathbf{p},\alpha}(t), \hat{H}]. \quad (26)$$

Из-за однородности задачи нам нужны только диагональные \mathbf{p} -элементы матрицы плотности. С учетом формул (11)–(26) эволюционное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{\alpha,\beta}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e\mathbf{E}(t) \frac{\partial \rho_{\alpha,\beta}(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = \\ = (\mathcal{E}_\alpha(\mathbf{p}) - \mathcal{E}_\beta(\mathbf{p}) - i\hbar\Gamma(1 - \delta_{\alpha\beta})) \rho_{\alpha,\beta}(\mathbf{p}, t) + \\ + \mathbf{E}(t) (\mathbf{D}_m(\alpha, \mathbf{p}) - \mathbf{D}_m(\beta, \mathbf{p})) \rho_{\alpha,\beta}(\mathbf{p}, t) + \\ + \mathbf{E}(t) [\mathbf{D}_t(\alpha, \mathbf{p}) \rho_{-\alpha,\beta}(\mathbf{p}, t) - \\ - \mathbf{D}_t(-\beta, \mathbf{p}) \rho_{\alpha,-\beta}(\mathbf{p}, t)], \quad (27) \end{aligned}$$

где Γ — скорость затухания. В уравнении (27) недиагональными элементами являются межзонная поляризация $\rho_{1,-1}(\mathbf{p}, t) = P(\mathbf{p}, t)$ и ее комплексно-сопряженная величина $\rho_{-1,1}(\mathbf{p}, t) = P^*(\mathbf{p}, t)$, а диагональными — функции распределения частиц для зоны проводимости, $N_c(\mathbf{p}, t) = \rho_{1,1}(\mathbf{p}, t)$, и валентной зоны, $N_v(\mathbf{p}, t) = \rho_{-1,-1}(\mathbf{p}, t)$. Необходимо решить систему дифференциальных уравнений для этих функций:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial N_c(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e\mathbf{E}(t) \frac{\partial N_c(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = \\ = \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) P^*(\mathbf{p}, t) - \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) P(\mathbf{p}, t), \quad (28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial N_v(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e\mathbf{E}(t) \frac{\partial N_v(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = \\ = -\mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) P^*(\mathbf{p}, t) + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) P(\mathbf{p}, t), \quad (29) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial P(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e\mathbf{E}(t) \frac{\partial P(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = \\ = [2\mathcal{E}_1(\mathbf{p}) + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_m(\mathbf{p}) - i\hbar\Gamma] P(\mathbf{p}, t) + \\ + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) [N_v(\mathbf{p}, t) - N_c(\mathbf{p}, t)]. \quad (30) \end{aligned}$$

Полные средние дипольные моменты есть

$$\begin{aligned} D_{xm}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar U}{2\mathcal{E}_1(\mathbf{p}) (\mathcal{E}_1^2(\mathbf{p}) - U^2/4)} \times \\ \times \left[\left(\frac{p^2}{2m} - mv_3^2 \right) \frac{\zeta p_y}{m} + \frac{v_3}{m} p_x p_y \right], \quad (31) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{ym}(\mathbf{p}) = \frac{e\hbar U}{2\mathcal{E}_1(\mathbf{p}) (\mathcal{E}_1^2(\mathbf{p}) - U^2/4)} \times \\ \times \left[\left(-\frac{p^2}{2m} + mv_3^2 \right) \frac{\zeta p_x}{m} + \frac{v_3}{2m} (p_x^2 - p_y^2) \right]. \quad (32) \end{aligned}$$

Компоненты дипольных моментов перехода рассчитываются по формуле (14) с помощью спинорных волновых функций (6) (см. также [30, 33]):

$$D_{tx}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar}{2\mathcal{E}_1(\mathbf{p})\sqrt{\mathcal{E}_1^2(\mathbf{p}) - U^2/4}} \times \left(\left[\left(\frac{p^2}{2m} - mv_3^2 \right) \frac{\zeta p_y}{m} + \frac{v_3}{m} p_x p_y \right] - i \frac{U}{2\mathcal{E}_1} \left\{ \left(\frac{p^2}{2m} + mv_3^2 \right) \frac{p_x}{m} - \frac{3\zeta v_3}{2m} (p_x^2 - p_y^2) \right\} \right), \quad (33)$$

$$D_{ty}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar}{2\mathcal{E}_1(\mathbf{p})\sqrt{\mathcal{E}_1^2(\mathbf{p}) - U^2/4}} \times \left(\left[\left(-\frac{p^2}{2m} + mv_3^2 \right) \frac{\zeta p_x}{m} + \frac{v_3}{2m} (p_x^2 - p_y^2) \right] - i \frac{U}{2\mathcal{E}_1} \left\{ \left(\frac{p^2}{2m} + mv_3^2 \right) \frac{p_y}{m} + \frac{3\zeta v_3}{m} p_x p_y \right\} \right). \quad (34)$$

Компоненты оператора скорости, определяемого соотношением $\hat{v}_\zeta = \partial \hat{H} / \partial \hat{\mathbf{p}}$ для эффективного 2×2 -гамильтониана (3), можно представить следующими формулами:

$$\hat{v}_{\zeta x} = \zeta \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x - i \hat{p}_y) + v_3 \\ -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x + i \hat{p}_y) + v_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (35)$$

$$\hat{v}_{\zeta y} = i \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x - i \hat{p}_y) + v_3 \\ -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x + i \hat{p}_y) - v_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Внутризонная скорость $\mathbf{V}'(\mathbf{p})$ при ГВГ в двухслойном графене со структурой АВ определяется формулой

$$\mathbf{V}'(\mathbf{p}) = \left[v_3 \mathbf{p} - 3\zeta \frac{v_3 p}{2m} \mathbf{p} \cos 3\vartheta + 3\zeta \frac{v_3 p^3}{2m} \sin 3\vartheta \frac{\partial \vartheta}{\partial \mathbf{p}} + 2 \frac{\mathbf{p}^3}{(2m)^2} \right] \mathcal{E}_1^{-1}(\mathbf{p}). \quad (37)$$

Благодарности. Хочу выразить признательность Г. К. Аветисяну за многочисленные обсуждения и постоянное внимание к работе.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке Министерства образования, науки, культуры и спорта Республики Армения.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
2. A. K. Geim, *Science* **324**, 1530 (2009).
3. A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and Franco Nori, *Phys. Rep.* **648**, 1 (2016).
4. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
5. T. Brabec and F. Krausz, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 545 (2000).
6. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics, The QED Vacuum and Matter in Super-Strong Radiation Fields*, Springer (2016).
7. Sh. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk et al., *Nature* **7**, 138 (2011).
8. O. Schubert, M. Hohenleutner, F. Langer et al., *Nature Photon.* **8**, 119 (2014).
9. G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thirat et al., *Nature* **522**, 462 (2015).
10. G. Ndabashimiye, S. Ghimire, M. Wu et al., *Nature* **534**, 520 (2016).
11. Y. S. You, D. A. Reis, S. Ghimire, *Nature Phys.* **13**, 345 (2017).
12. H. Liu, C. Guo, G. Vampa et al., *Nature Phys.* **14**, 1006 (2018).
13. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 384204 (2008).
14. S. V. Syzranov, Ya. I. Rodionov, K. I. Kugel, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **88**, 241112(R) (2013).
15. Ya. I. Rodionov, K. I. Kugel, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **94**, 195108 (2016).

16. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov et al., *Phys. Rev. B* **88**, 165411 (2013).
17. P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann et al., *Phys. Rev. B* **89**, 041408 (2014).
18. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, *New J. Phys.* **17**, 113018 (2015).
19. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **94**, 075412 (2016).
20. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **94**, 045419 (2016).
21. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian et al., *J. Nanophoton.* **11**, 016004 (2017).
22. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, G. F. Mkrtchian et al., *J. Nanophoton.* **14**, 026018 (2020).
23. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **95**, 085436 (2017).
24. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 035405 (2017).
25. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, *Science* **356**, 736 (2017).
26. A. Golub, R. Egger, C. Muller et al., *Phys. Rev. Lett.* **124**, 110403 (2020).
27. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **97**, 115454 (2018).
28. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 036010 (2019).
29. A. G. Ghazaryan and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 046004 (2019).
30. A. G. Ghazaryan and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 046008 (2019).
31. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, K. V. Sedrakian et al., *J. Nanophoton.* **11**, 036004 (2017).
32. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, K. V. Sedrakian et al., *J. Nanophoton.* **12**, 016006 (2018).
33. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan et al., *J. Nanophoton.* **14**, 026004 (2020).
34. Yu. Bludov, N. Peres, and M. Vasilevskiy, *Phys. Rev. B* **101**, 075415 (2020).
35. G. L. Breton, A. Rubio, and N. Tancogne-Dejean, *Phys. Rev. B* **98**, 165308 (2018).
36. H. Liu, Y. Li, Y. S. You et al., *Nature Phys.* **13**, 262 (2017).
37. G. F. Mkrtchian, A. Knorr, and M. Selig, *Phys. Rev. B* **100**, 125401 (2020).
38. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and K. Z. Hatsagortsyan, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023072 (2020).
39. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 185302 (2018).
40. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan et al., *Phys. Rev. B* **100**, 035434 (2019).
41. T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 235419 (2017).
42. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **99**, 085432 (2019).
43. S. Almalki, A. M. Parks, G. Bart et al., *Phys. Rev. B* **98**, 144307 (2018).
44. B. Cheng, N. Kanda, T. N. Ikeda et al., *Rev. Lett.* **124**, 117402 (2020).
45. T. Cao, Z. Li, and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 236602 (2015).
46. L. Seixas, A. S. Rodin, A. Carvalho et al., *Phys. Rev. Lett.* **116**, 206803 (2016).
47. H. Sevinzli, *Nano Lett.* **17**, 2589 (2017).
48. J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco et al., *Science* **264**, 553 (1994).
49. D. S. L. Abergel and T. Chakraborty, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 062107 (2009).
50. E. Suarez Morell and L. E. F. Foa Torres, *Phys. Rev. B* **86**, 125449 (2012).
51. J. J. Dean and H. M. van Driel, *Phys. Rev. B* **82**, 125411 (2010).
52. S. Wu, L. Mao, A. M. Jones et al., *Nano Lett.* **12**, 2032 (2012).
53. Y. S. Ang, S. Sultan, and C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 243110 (2010).
54. N. Kumar, J. Kumar, C. Gerstenkornet et al., *Phys. Rev. B* **87**, 121406 (2013).
55. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
56. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu et al., *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
57. Y. B. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit et al., *Nature* **459**, 820 (2009).
58. F. Guinea, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **73**, 245426 (2006).
59. E. McCann and V. I. Falko, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).

60. M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **73**, 245403 (2006).
61. A. Varleta, M. Mucha-Kruczynski, D. Bischoff et al., *Synth. Met.* **210**, 19 (2015).
62. M. Aoki and H. Amawashi, *Sol. St. Comm.* **142**, 123 (2007).
63. L. A. Falkovsky, *ЖЭТФ* **137**, 319 (2010) [*JETP* **110**, 319 (2010)].
64. K. Tang, R. Qin, J. Zhou et al., *J. Phys. Chem. C* **115**, 9458(2011).
65. D. Xiao, M. C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
66. L. Vicarelli, M. S Vitiello, D. Coquillat et al., *Nature Mater.* **11**, 865 (2012).
67. K. Wang, M. M. Elahi, L. Wang et al., *Proc. Nat. Acad. Sci.* **116**, 201816119 (2019).
68. I. M. Lifshitz, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960) [*JETP* **11**, 1130 (1960)].
69. J. L. Manes, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B* **75**, 155424 (2007).
70. G. P. Mikitik and Yu. V. Sharlai, *Phys. Rev. B* **77** 113407 (2008).
71. E. McCann, *Phys. Rev. B* **74**, 161403 (2006).
72. H. Min, B. Sahu, S. Banerjee, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **75**, 155115 (2007).
73. E. McCann, D. Abergel, and V. Falko, *Sol. St. Comm.* **143** 110 (2007).
74. M. Mucha-Kruczynski, E. McCann, and V. I. Falko, *Sol. St. Comm.* **149**, 1111 (2009).
75. D. Suszalski, G. Rut, and A. Rycerz, *Phys. Rev. B* **97**, 125403 (2018).
76. M. Mucha-Kruczynski, I. L. Aleiner, and V. I. Falko, *Phys. Rev. B* **84**, 041404 (2011).
77. M. Mucha-Kruczynski, I. L. Aleiner, and V. I. Falko, *Sol. St. Comm.* **151**, 1088 (2011).
78. A. Varlet, D. Bischo, P. Simonet et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 116602 (2014).
79. A. Varlet, M. Mucha-Kruczynski, D. Bischo et al., *Synth. Met.* **210**, 19 (2015).
80. L. V. Keldysh, *ЖЭТФ* **34**, 1138 (1958) [*JETP* **7**, 788 (1958)].
81. L. V. Keldysh, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964) [*JETP* **20**, 1307 (1965)].
82. I. F. Akyildiz, J. M. Jornet, and C. Han, *Phys. Comm.* **12**, 16 (2014).
83. H. Vettikalladi, W. T. Sethi, A. F. Bin Abas et al., *Int. J. Anten. Propagat.* **2019**, 9573647:1 (2019).
84. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49** 2117 (1994).
85. C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, *Photons and Atoms. Introduction to Quantum Electrodynamics*, Wiley, New York (1989).
86. E. H. Hwang and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **77**, 115449 (2008).
87. J. K. Viljas and T. T. Heikkila, *Phys. Rev. B* **81**, 245404 (2010).

РЕЗКОЕ ИЗМЕНЕНИЕ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ И СИММЕТРИИ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ПРИ ДОПОРОГОВОМ КОЛИЧЕСТВЕ МЕЖСЛОЙНОЙ МЕДИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ NiFe/Cu/IrMn

М. В. Бахметьев^а, А. Д. Таланцев^{а,б}, Р. Б. Моргунов^{а,с*}

^а Институт проблем химической физики
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^б Department of Emerging Materials Science, DGIST, Daegu
42988, Republic of Korea

^с Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 ноября 2020 г.,
после переработки 12 декабря 2020 г.
Принята к публикации 17 декабря 2021 г.

В гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn с варьируемым количеством межслойных атомов Cu наблюдается резкое изменение поля обменного смещения, коэрцитивной силы и поля однонаправленной анизотропии при эффективной толщине прослойки меди $t_{Cu} \approx 0.5$ нм, соответствующей неполному покрытию интерфейса, т. е. островковому напылению. Симметрия угловой зависимости ферромагнитного резонанса резко изменяется при неполном покрытии интерфейса при $t_{Cu} = 0.5$ нм, что отвечает смене изолированных островков на магнитную фрактальную структуру. Это явление, которое можно назвать «магнитным» порогом перколяции, не связано с электрическим сопротивлением гетероструктуры, резкое уменьшение которого наблюдается лишь при значительно большей эффективной пороговой толщине прослойки меди $t_{Cu} = 1.3$ нм при сплошном покрытии интерфейса.

DOI: 10.31857/S0044451021050126

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитные структуры ферромагнетик–антиферромагнетик (ФМ–АФМ) широко используются в датчиках Холла [1] и устройствах магнитной памяти [2], поскольку обменное смещение в них устанавливает технически востребованный интервал полей, в которых переключаются эти устройства. Обменное взаимодействие между ФМ- и АФМ-слоями смещает центр петли магнитного гистерезиса вдоль оси поля [3], что создает постоянную стабильную и одинаковую намагниченность в исходном состоянии в нулевом магнитном поле. Это делает систему независимой от магнитной предыстории [4, 5]. Варьируя материалы и толщину слоев ФМ и АФМ [6–8], можно создавать гетероструктуры, в которых

величина обменного смещения H_b даже выше, чем коэрцитивная сила H_c [9]. Магнитное поле, приложенное в плоскости пленки перпендикулярно ее легкой оси, вызывает перемагничивание слоя ФМ путем когерентного вращения намагниченности без образования доменов [10, 11]. Самое большое соотношение H_b/H_c наблюдается в гетероструктурах NiFe/IrMn [12].

Эффективным способом регулировки обменного смещения в магнитных структурах ФМ/АФМ является введение диамагнитного разделяющего слоя (ДРС) [13–16], что позволяет увеличивать чувствительность датчиков Холла в заданном рабочем интервале полей [13]. Процесс напыления ДРС проходит через несколько промежуточных стадий, прежде чем возникнет сплошной ДРС [17]. Начальная стадия соответствует островковой структуре, в которой отдельные островки меди не контактируют между собой, заполняя сначала неоднородности

* E-mail: morgunov2005@yandex.ru

слоя NiFe. По мере увеличения времени напыления, а следовательно, и эффективной толщины напыленного ДРС, островки растут в трех измерениях, соприкасаются между собой и все больше покрывают напыляемую площадь. При этом областей прямого контакта между ФМ- и АФМ-слоями становится меньше, что приводит к уменьшению поля обменного смещения [13–16]. Дальнейшее увеличение эффективной толщины ДРС приводит к образованию двумерной структуры, состоящей из контактирующих между собой островков (бесконечный фрактал) [18]. Затем ДРС полностью покрывает интерфейс ФМ/АФМ, разрывая при этом прямое обменное взаимодействие между ФМ- и АФМ-слоями во всех точках интерфейса. Даже при сплошном покрытии интерфейса обменное смещение не становится равным нулю и обнаруживается при низких температурах [19–21]. Например, в [19] в гетероструктуре NiFe/Ta/IrMn обменное смещение при комнатной температуре резко уменьшается при эффективной толщине слоя тантала $t_{\text{Ta}} = 0.2$ нм (один атомный монослой по количеству напыленного вещества). Однако при низкой температуре обменное смещение все еще обнаруживается. Хотя описанные выше стадии и сценарий модификации обменно-смещенных структур при напылении ДРС в целом понятны, в литературе сообщается о множестве необычных явлений, происходящих при количествах материала ДРС на интерфейсе, меньшем порогового значения (т.е. до полного покрытия интерфейса). В работе [20] в гетероструктурах NiFe/Cu/CoO медь полностью покрывала интерфейс при толщине медной прослойки 1.2 нм (6 атомных монослоев), а в [21] прослойка золота покрывала интерфейс в гетероструктурах CoO/Au/Co при толщине 2.5 нм. Однако в обоих упомянутых случаях резкие изменения в магнитных характеристиках наблюдались при несколько меньших толщинах эффективного слоя соответственно $t_{\text{Cu}} \sim 0.8\text{--}1.1$ нм и $t_{\text{Au}} \sim 1.5\text{--}2$ нм. Причина резкого допорогового изменения магнитных свойств в гетероструктурах NiFe/Cu/CoO и CoO/Au/Co осталась необъясненной. В упомянутых работах доля интерфейса ФМ/АФМ, покрытого ДРС, при которой блокируется обменная связь между ФМ и АФМ, зависит от материала ДРС и различается в пять раз. Эта неопределенность может быть связана с разной эффективностью косвенного обмена в ДРС разных типов, с различными коэффициентами адгезии и диффузии, приводящими к разной эффективности образования островков и другими причинами, на выяснение которых направлена наша работа.

Резкое изменение свойств материалов по мере увеличения концентрации добавляемого в них вещества рассматривается в теории протекания и называется порогом перколяции, за который отвечает особого рода фазовый переход [18]. Имеются многочисленные теоретические модели для объяснения образования скачка электрической проводимости и возникновения бесконечного фрактала в композитах проводник–изолятор [22]. Поведение проводимости в композитных коллоидах, суспензиях и эмульсиях является сложной функцией концентрации частиц, их размера, формы и геометрического расположения, степени агрегации, температуры и многих других факторов [23]. Для анализа концентрационной зависимости электрической проводимости используется эмпирическая модель, основанная на комбинации теории среднего поля и теории перколяций, которая успешно применяется для композитных коллоидных и ячеистых систем [24], в которых зерна большого диаметра покрыты проводящим порошком меньшего размера, а также в смесях порошков разной проводимости [25]. Этот же подход может быть применен для описания электрической проводимости островковой структуры ДРС в наших образцах. Согласно теории протекания, в структурах, исследуемых в нашей работе, электрическую проводимость в окрестности порога перколяции p_c можно рассматривать как функцию p доли поверхности, покрытой ДРС [24, 26]:

$$\sigma_{eff} = \sigma_m \left(\frac{p - p_c}{p_c} \right)^{-s}, \quad p_c > p, \quad (1)$$

$$\sigma_{eff} = \sigma_p \left(\frac{p - p_c}{1 - p_c} \right)^t, \quad p_c < p, \quad (2)$$

где σ_{eff} — эффективное значение проводимости; σ_m — проводимость участков ФМ/АФМ; σ_p — проводимость участков ФМ/ДРС/АФМ; s, t — универсальные критические показатели. Для двумерной системы универсальные критические показатели соответствуют $s = t \approx 4/3$ [24], для трехмерной системы $s \approx 0.73$ [24], $s \approx 0.87$ [26], $t \approx 2$ [24, 26]. Этот подход применяется прямо к исследованию электрической проводимости, однако его применение к обсуждению магнитных характеристик выглядит феноменологическим и требует обоснований и экспериментальных подтверждений. Короткодействующее обменное взаимодействие, реализуемое протеканием волновых функций электронов или протеканием самих электронов при косвенном взаимодействии Рудермана–Касуи–Киттеля–Йошиды (РККИ), кажется сходным с протека-

нием электрического тока. Одна из целей нашей работы заключается в проверке того, может ли теория перколяций быть применена к ферромагнитным системам для описания «протекания» короткодействующего обменного взаимодействия в системе случайных островков, обеспечивающих илирывающих обменный контакт ФМ/АФМ. Применение формул (1) и (2) к магнитным характеристикам (обменное смещение, обменное взаимодействие и др.) может быть ограничено короткодействующим характером обменного взаимодействия и быть искаженным дальнедействующим магнитным дипольным взаимодействием между островками ферромагнитного материала. Хорошо известно, что взаимодействие между структурными единицами, образующими бесконечный фрактал, влияет на значение порога перколяции p_c , а дальнедействующие корреляции между структурными единицами приводят к потере универсальности критических показателей s и t [27, 28].

Эффективным методом измерения обменного смещения и магнитокристаллической анизотропии является ферромагнитный резонанс (ФМР), который используется в нашей работе для определения симметрии угловой зависимости резонансного поля до и после порога перколяции. Изменение симметрии угловой зависимости резонансного поля ФМР по мере увеличения толщины слоя меди было обнаружено в гетероструктурах IrMn/Cu/Co [29], где островки Cu сменялись на сплошное покрытие медью. В работах [30, 31] в гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn изменение симметрии угловых зависимостей, вызванное ростом эффективной толщины слоя меди, объяснялось наличием прямого контакта слоев NiFe и IrMn. Таким образом, ФМР представляет собой методику, чувствительную к смене локальных ферромагнитных островков на бесконечный фрактал или сплошную пленку, ослабляющую обменное взаимодействие между ФМ- и АФМ-слоями. В нашей работе ФМР позволяет установить эффективную толщину ДРС, при которой происходит резкое изменение магнитной анизотропии и обменного взаимодействия, а также смену симметрии угловой зависимости резонансного поля ФМР. При этом до полного покрытия интерфейса еще далеко.

В практическом отношении важно, что небольшие толщины ДРС и связанные с ними перколяционные явления создают проблемы с воспроизводимостью свойств гетероструктур, предсказуемостью полученного результата. Это связано, скорее, с принципиально неустранимой стохастичностью начальных стадий напыления, чем с качеством на-

пыления. Поскольку введение ДРС в магнитную структуру ФМ/АФМ используется для регулировки обменного смещения в датчиках, понимание физического механизма зависимости обменного смещения от толщины ДРС и особенности формирования обменной связи ФМ-АФМ через ДРС чрезвычайно важны, хотя и остаются не до конца понятными.

Целью данной работы является анализ обменных параметров, электрического сопротивления и резонансного поля в интервале эффективных толщин прослойки Cu, обеспечивающей последовательное формирование отдельных островков, затем бесконечного фрактала и, наконец, полностью покрытого медью интерфейса ФМ/АФМ в гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА

В опытах использовали контрольный образец без медной прослойки Ta(5 нм)/NiFe(10 нм)/IrMn(10 нм)/ Ta(5 нм) и серию образцов с медной прослойкой Ta(5 нм)/NiFe(10 нм)/ Cu(t_{Cu})/IrMn(10 нм)/Ta(5 нм) площадью 3×3 мм² и 5×5 мм². Эффективная толщина медной прослойки t_{Cu} определяется по длительности напыления и варьируется в диапазоне от 0.08 нм до 5 нм, что соответствует времени магнетронного напыления 2–120 с. Гетероструктуры были напылены на подложках Si/SiO₂ методом магнетронного напыления на постоянном токе. Скорость осаждения слоя меди 0.043 нм/с поддерживалась одинаковой во всех образцах. Методика изготовления исследуемых гетероструктур описана в работе [32]. Сначала слой NiFe напылялся на Ta, который был необходим для буферизации дефектов и усиления текстуры (111) слоев NiFe. Далее напылялась медь и IrMn, и затем напылялся еще один покровный слой Ta, который служил для предотвращения окисления и коррозии магнитных слоев.

Спектры рентгеновской дифракции были получены с помощью дифрактометра ДРОН-ЗМ с использованием медной трубки ($K_{\alpha 1}$ — рентгеновские лучи с длиной волны 1.54 Å), работающей при напряжении 35 кВ и токе 25 мА со стабильностью 0.01%/8 ч. Измерения были выполнены в диапазоне углов $2\theta = 35\text{--}50^\circ$ с шагом 0.2° . Нормированные по амплитуде спектры рентгеновской дифракции образцов NiFe/Cu/IrMn при $t_{Cu} = 0, 0.08$ нм, 1.04 нм, 2.5 нм показаны соответственно на рис. 1а–г. Слои IrMn и NiFe имеют кубическую (111) структуру. Пи-

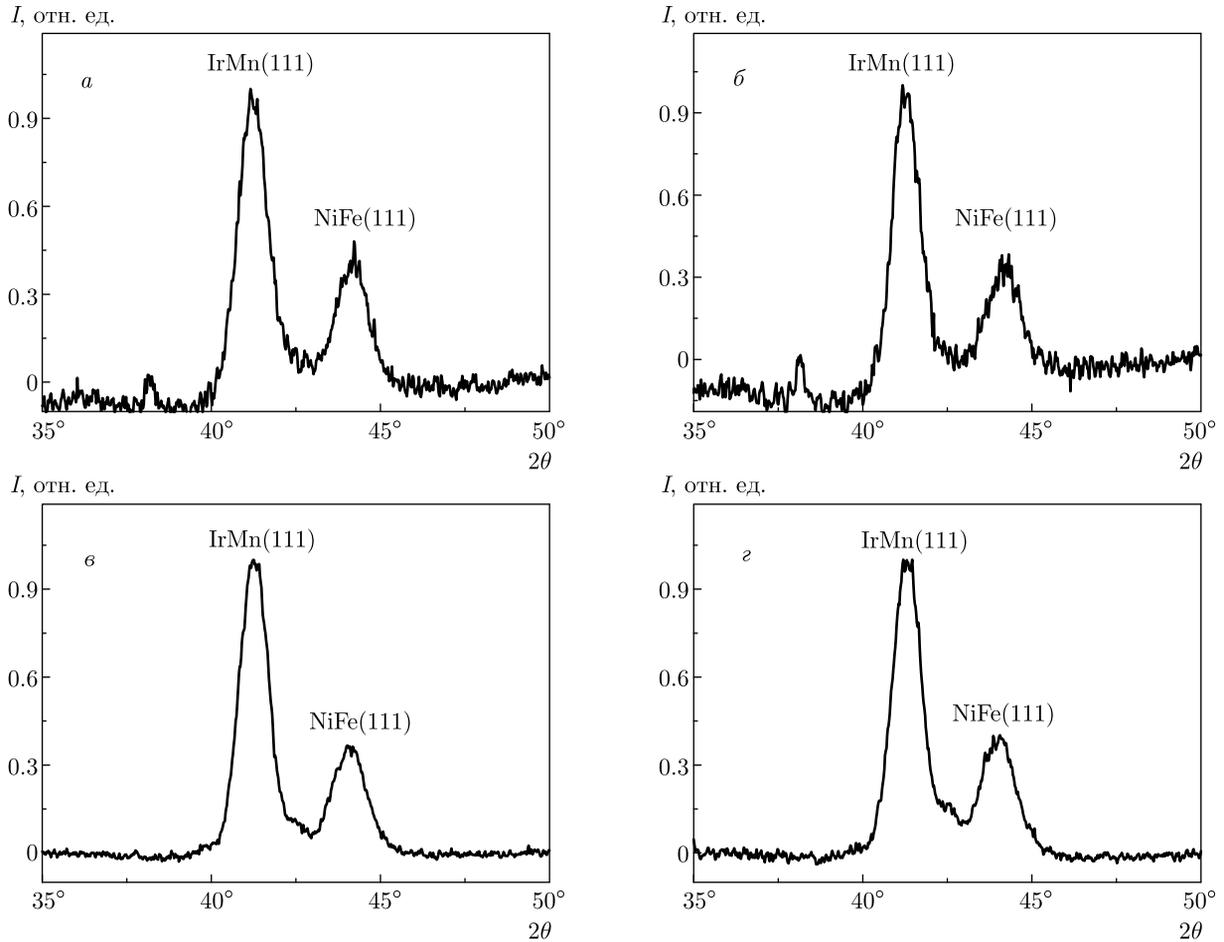


Рис. 1. Нормированные по амплитуде рентгеновские дифракционные спектры образцов $t_{Cu} = 0$ (а), 0.08 нм (б), 1.04 нм (в), 2.5 нм (г)

ки IrMn соответствуют $2\theta = 41.3^\circ$, пики NiFe соответствуют $2\theta = 44.2^\circ$. Добавление и рост прослойки Cu не изменяет спектры рентгеновской дифракции, это значит, что кристаллическое качество слоев IrMn и NiFe оставалось одинаковым при вариациях эффективной толщины слоя меди. Другими словами, напыление меди не приводит к качественным изменениям структуры ФМ- и АФМ-слоев, которое могло бы стать причиной допороговых переходов.

Процесс напыления меди моделировался методом Монте-Карло, подробный алгоритм расчета программы представлен в работе [33]. Результат моделирования распределения кластеров Cu с параметром отношения коэффициентов адгезии $r = 2500$ для адгезии атомов Cu на уже образованные островки Cu и адгезии атомов Cu на поверхность NiFe показан на рис. 2а–з. Это отношение было подобрано в [33] так, чтобы правильно описывалась экспериментальная зависимость поля обменного смещения от

эффективной толщины меди. Двумерные распределения прослойки Cu на слое NiFe при эффективных толщинах $t_{Cu} = 0.08$ нм (а), 0.25 нм (б), 0.5 нм (в), 0.58 нм (г), 0.75 нм (д), 0.83 нм (е) представлены на рис. 2а–е. Соответствующие профили прослойки Cu на интерфейсе NiFe/Cu/IrMn при эффективных толщинах $t_{Cu} = 0.08$ нм и $t_{Cu} = 0.41$ нм представлены на рис. 2ж,з. На рис. 2и представлена зависимость расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью S_{Cu}/S_{NiFe} от эффективной толщины медной прослойки t_{Cu} . Модель предсказывает полное покрытие медью интерфейса NiFe/Cu/IrMn при пороговой эффективной толщине слоя меди $t_{Cu} = 1.3$ нм. Из дальнейшего видно, что это значение прекрасно согласуется с экспериментально определенным пороговым изменением электрического сопротивления, что подтверждает правильность определения критической эффективной толщины меди, при которой возникает полное покрытие интерфейса.

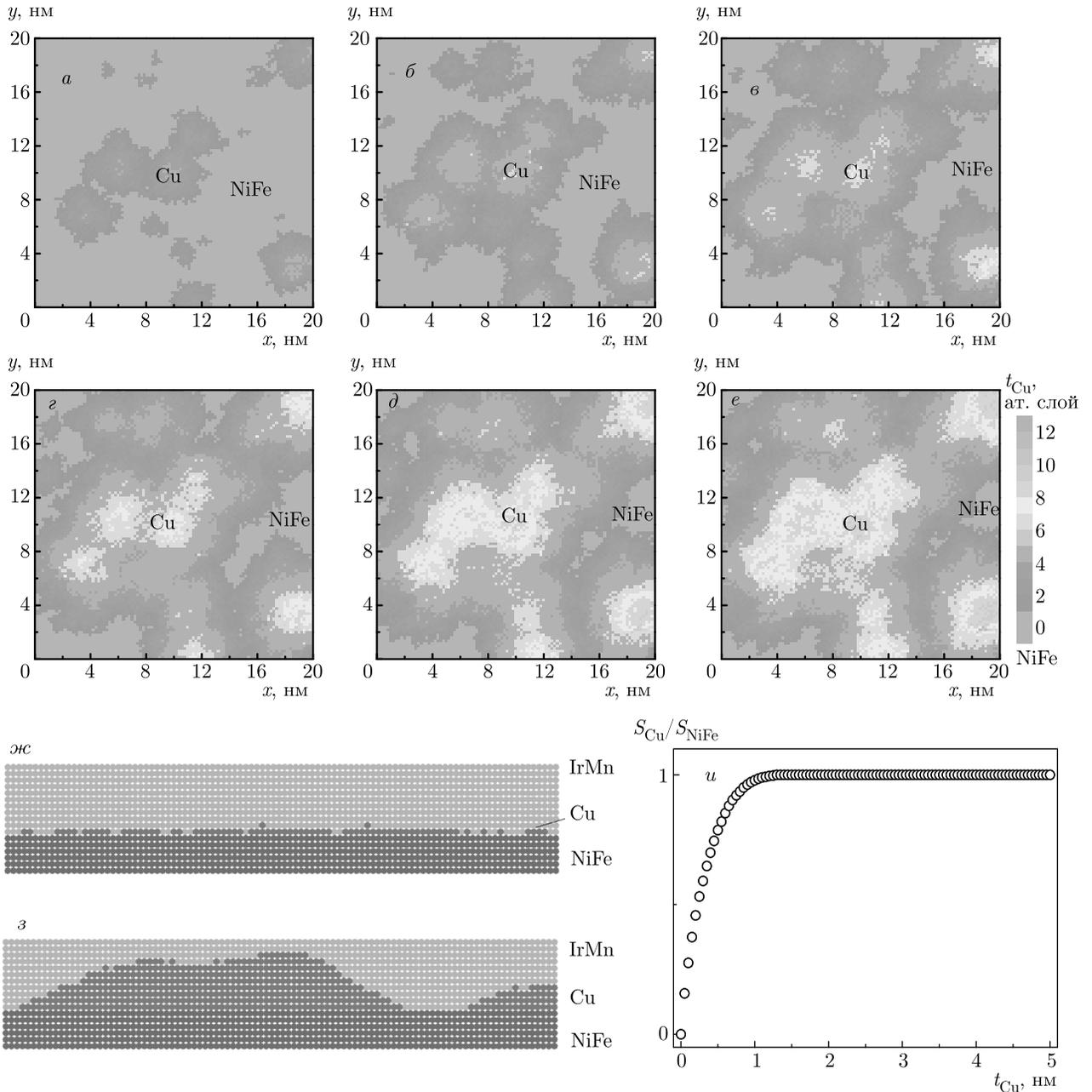


Рис. 2. Двумерные распределения кластеров Cu на поверхности NiFe при эффективных толщинах медной прослойки $t_{Cu} = 0.08$ нм (а), 0.25 нм (б), 0.5 нм (в), 0.58 нм (г), 0.75 нм (д), 0.83 нм (е). Профили медной прослойки Cu на интерфейсе NiFe/Cu/IrMn при эффективных толщинах $t_{Cu} = 0.08$ нм (ж), 0.41 нм (з). Зависимость расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью от эффективной толщины медной прослойки (u)

Измерения зависимостей магнитного момента от магнитного поля и от температуры были проведены на СКВИД-магнитометре MPMS 5XL Quantum Design на образцах размерами 5×5 мм², в магнитных полях $H = -2-2$ кЭ и при температурах $T = 2-300$ К. Диамагнитный вклад подложки был вычтен.

Электрическое сопротивление образцов получено с помощью метода Ван дер Пау. Измерения проводились при комнатной температуре на образцах размерами 5×5 мм² при токе $I = 1$ мА, напряжение было получено с помощью нановольтметра Keithley 2182.

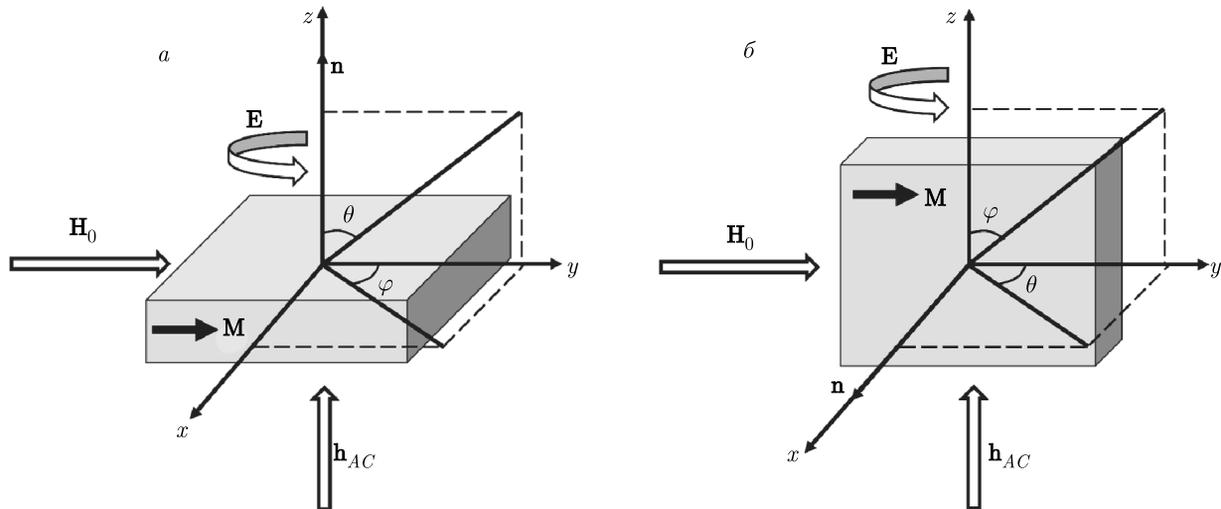


Рис. 3. Направления внешнего магнитного поля развертки спектрометра H_0 , вихревого электрического поля E , переменного магнитного поля h_{AC} и магнитного момента M образца при записи зависимостей параметров спектров ФМР от азимутального угла φ (а) и полярного угла θ (б)

Измерения ФМР проводились при комнатной температуре на спектрометре EPR10-MINI на образцах размерами $3 \times 3 \text{ мм}^2$ и $5 \times 5 \text{ мм}^2$. Частота микроволнового поля составляла около 9.5 ГГц, мощность 5 мВт, амплитуда модуляции была 10 Э. При измерении зависимостей от азимутального угла φ направление нормали к пленке оставалось перпендикулярным внешнему магнитному полю H_0 . При измерении зависимостей от полярного угла θ направление нормали менялось относительно направления внешнего магнитного поля H_0 . Направление внешнего магнитного поля развертки H_0 , вихревого электрического поля E и переменного магнитного поля h_{AC} относительно направления магнитного момента M и плоскости пленки показано на рис. 3 при измерениях азимутальной и полярной угловых зависимостей.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 4 показаны петли магнитного гистерезиса образца без медной прослойки $t_{Cu} = 0$ (1) и образцов с эффективными толщинами меди $t_{Cu} = 0.5 \text{ нм}$ (2), $t_{Cu} = 5 \text{ нм}$ (3) при температурах соответственно 300 К и 2 К. Добавление и увеличение эффективной толщины прослойки Cu приводит к сдвигу центра петли гистерезиса в нулевые магнитные поля относительно эталонного образца $t_{Cu} = 0$, имеющего значение поля обменного смещения $H_b = 119.4 \text{ Э}$

и коэрцитивную силу $H_c = 2.3 \text{ Э}$ при температуре 300 К. Аналогичные петли магнитного гистерезиса были получены для всех образцов серии с разными t_{Cu} в диапазоне 2–300 К, и из них были определены зависимости поля обменного смещения H_b и коэрцитивной силы H_c от эффективной толщины прослойки Cu. На рис. 5 представлены зависимости $H_b(t_{Cu})$ и $H_c(t_{Cu})$ при $T = 300 \text{ К}$ (1) и 2 К (2). Обменное смещение уменьшается с ростом t_{Cu} при всех температурах от 2 до 300 К, а коэрцитивная сила зависит от t_{Cu} немонотонно, демонстрируя максимум при $t_{Cu} = 0.16 \text{ нм}$ и дальнейшее уменьшение с ростом t_{Cu} как при $T = 2 \text{ К}$, так и при $T = 300 \text{ К}$.

Обменное смещение и коэрцитивная сила определяются обменным взаимодействием, возникающим на интерфейсе NiFe/IrMn и NiFe/Cu/IrMn и зависящим от проникновения волновых функций электронов или обмена электронами (при косвенном взаимодействии) из одного материала в другой. Поскольку это проникновение обменного взаимодействия ограничивается островками меди, естественно анализировать исследуемую систему в рамках теории перколяций. Для определения порога перколяции p_c были построены зависимости поля обменного смещения и коэрцитивной силы от S_{Cu}/S_{NiFe} в двойных логарифмических координатах (см. врезки на рис. 5), из которых виден резкий скачок обменного смещения и коэрцитивной силы при $S_{Cu}/S_{NiFe} \approx 0.78$ ($t_{Cu} \approx 0.5 \text{ нм}$). Порог перколяции для H_b и H_c на всем диапазоне температур составляет $p_c \approx$

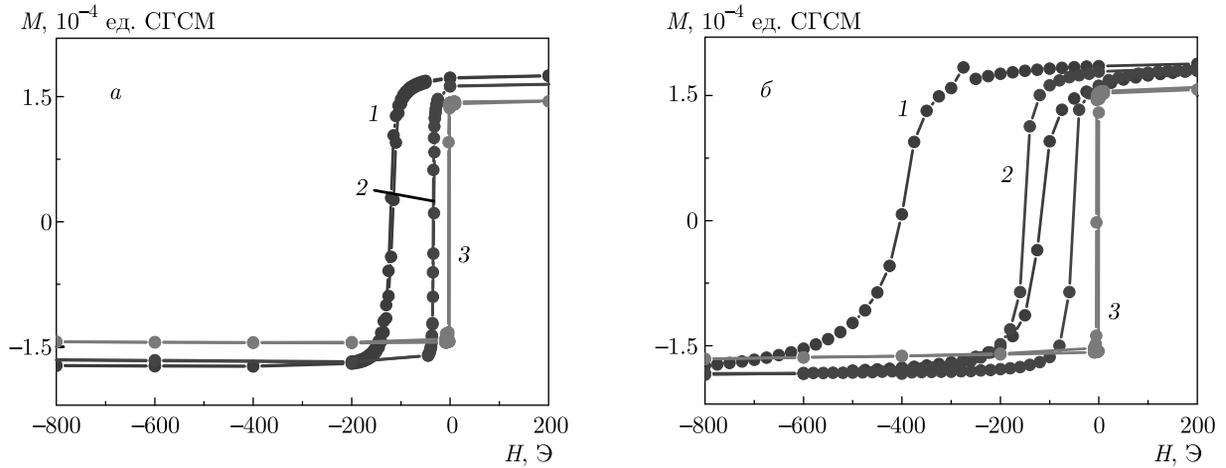


Рис. 4. Петли магнитного гистерезиса образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0,5 нм (2), 5 нм (3) при температурах $T = 300$ К (а) и $T = 2$ К (б)

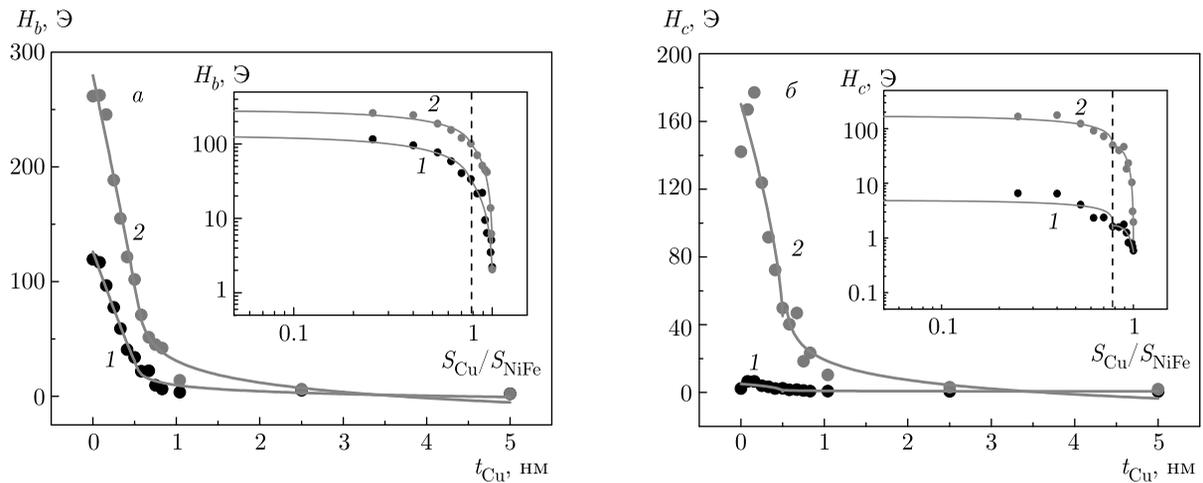


Рис. 5. Зависимости поля обменного смещения (а) и коэрцитивной силы (б) от эффективной толщины медной прослойки при температурах $T = 300$ К (1) и $T = 2$ К (2). На врезках представлены зависимости поля обменного смещения и коэрцитивной силы от расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью в двойных логарифмических координатах для определения порога перколяции (пунктирная линия). Линиями показана аппроксимация выражением (1) для левой части зависимостей и выражением (2) для правой части зависимостей

$\approx 0.78 \pm 0.1$. Это значит, что эффективной толщины медной прослойки $t_{Cu} \approx 0.5$ нм достаточно для того, чтобы возник хотя бы один непрерывный путь через островки меди от одного до противоположного края образца (рис. 2в) для образования бесконечного фрактала. Образование бесконечного фрактала приводит к резкому уменьшению вышеупомянутых характеристик во всем диапазоне температур. Для определения универсальных критических показателей s и t зависимости $H_b(S_{Cu}/S_{NiFe})$ и $H_c(S_{Cu}/S_{NiFe})$ при $T = 300$ К и 2 К были апрокс-

симированы выражением (1) при $S_{Cu}/S_{NiFe} < p_c$ и выражением (2) при $S_{Cu}/S_{NiFe} > p_c$. Результаты аппроксимации представлены в таблице. Для допорогового случая $S_{Cu}/S_{NiFe} < p_c$ универсальный критический показатель s для поля обменного смещения H_b составляет $s \approx 0.65 \pm 0.05$, а для коэрцитивной силы H_c составляет $s \approx 0.37 \pm 0.07$ во всем диапазоне температур, что соответствует трехмерной фрактальной структуре [24, 26]. Для H_b критический показатель t для случая $S_{Cu}/S_{NiFe} > p_c$ составляет $t \approx 0.98 \pm 0.12$, что соответствует двумер-

Таблица. Значения порога перколяции p_c и полученные универсальные критические показатели s , t из аппроксимации выражениями (1) и (2) зависимостей поля обменного смещения H_b , коэрцитивной силы H_c при температурах $T = 300$ К и $T = 2$ К, поля однонаправленной анизотропии H_{ex} от расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью S_{Cu}/S_{NiFe}

	p_c	s	t
$H_b, T = 300$ К	0.78 ± 0.1	0.7	0.86
$H_b, T = 2$ К	0.78 ± 0.1	0.6	1.1
$H_c, T = 300$ К	0.78 ± 0.1	0.3	2.18
$H_c, T = 2$ К	0.78 ± 0.1	0.44	1.84
H_{ex}	0.78 ± 0.1	0.83	1.06

ной структуре [24], а для H_c критический показатель t составляет $t \approx 2.01 \pm 0.17$, что говорит о трехмерной структуре [24, 26]. Таким образом, для H_b ниже порога перколяции наблюдается зависимость, характерная для трехмерных структур, а выше порога перколяции — для двумерных. Для H_c независимо от толщины слоя меди наблюдается зависимость, характерная для трехмерных структур.

На рис. 6 представлены зависимости поля обменного смещения H_b от коэрцитивной силы H_c для $T = 300$ К (а) и $T = 2$ К (б). Направления изменения эффективной толщины прослойки Cu показаны стрелками. Видно, что при температуре 300 К с уменьшением прослойки Cu, поле обменного смещения и коэрцитивная сила связаны линейной зависимостью. Это является вполне ожидаемым результатом, поскольку попытки исследования динамики перемангничивания микроскопом Керра не выявили доменов или зародышей намагниченности при $T = 300$ К, а процесс перемангничивания происходит когерентным вращением всех спинов образца. Следовательно, обменное взаимодействие в одинаковой степени определяет как коэрцитивную силу, так и поле обменного смещения. Отметим, что при температурах 2 К и 300 К связь между H_b и H_c становится нелинейной в области малых толщин эффективного слоя меди 0.16 нм, заметно меньших толщины перколяционного перехода 0.5 нм (рис. 6). Это происходит из-за максимума на зависимости $H_c(t_{Cu})$ (рис. 5б). Можно предполагать, что в части образцов с малой толщиной слоя меди механизм перемангничивания изменился. Однако этот факт не влия-

ет на анализ перколяционного перехода и дальнейшие выводы, относящиеся к резкому изменению параметров гетероструктур при значительно больших значениях t_{Cu} .

На рис. 7 показана зависимость расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью (линия 1), и экспериментально определенного электрического сопротивления R (линия 2) от эффективной толщины медной прослойки. Электрическое сопротивление эталонного образца $t_{Cu} = 0$ без меди составляет $R = 6.3$ Ом. В диапазоне толщин меди $t_{Cu} = 0.08\text{--}1.2$ нм электрическое сопротивление не изменяется ($R \approx 6.9 \pm 0.1$ Ом) и соответствует усредненному по всем проводящим слоям значению $\rho \approx 95 \pm 2$ мкОм·см в расчете на полную толщину всех проводящих слоев образца. Если принять, что сопротивление всей гетероструктуры описывается параллельным соединением отдельных слоев, то можно рассчитать сопротивление медной прослойки и NiFe по отдельности, зная толщины всех слоев. В результате расчета получились значения удельного сопротивления медной прослойки $\rho_{Cu} \approx 2.5 \pm 1$ мкОм·см и $\rho_{NiFe} \approx 31 \pm 1$ мкОм·см, близкие к значениям $\rho_{Cu} = 2$ мкОм·см и $\rho_{NiFe} = 28\text{--}60$ мкОм·см, известным для этих материалов в литературе [34, 35].

Постоянство удельного сопротивления в диапазоне толщин $t_{Cu} = 0.08\text{--}1.2$ нм (до порога полного покрытия) говорит о хорошей воспроизводимости образцов при их многократном изготовлении и исключает случайные вариации на зависимости $R(t_{Cu})$, которые в ряде работ могли быть вызваны неодинаковыми условиями напыления образца. Превышение эффективной толщины медной прослойки величины $t_{Cu} \approx 1.3$ нм вызывает уменьшение электрического сопротивления, которое при $t_{Cu} = 5$ нм падает до 0.4 Ом. Расчетная толщина $t_{Cu} = 1.3$ нм, при которой происходит формирование сплошной пленки меди, совпадает с толщиной $t_{Cu} \approx 1.3$ нм, выявленной экспериментально по уменьшению электрического сопротивления образца (штриховая линия на рис. 7). Отметим, что в отличие от обменного смещения и коэрцитивной силы, электрическое сопротивление не меняется при перколяционном пороге 0.5 нм. Это исключает из рассмотрения косвенное обменное взаимодействие, которое могло передаваться электронами проводимости (РККИ). Электроны проводимости не влияют на величину обменного взаимодействия. С другой стороны, бесконечный магнитный фрактал оказывается не эквивалентным бесконечному фракталу, приводящему к скачку электрической проводимости.

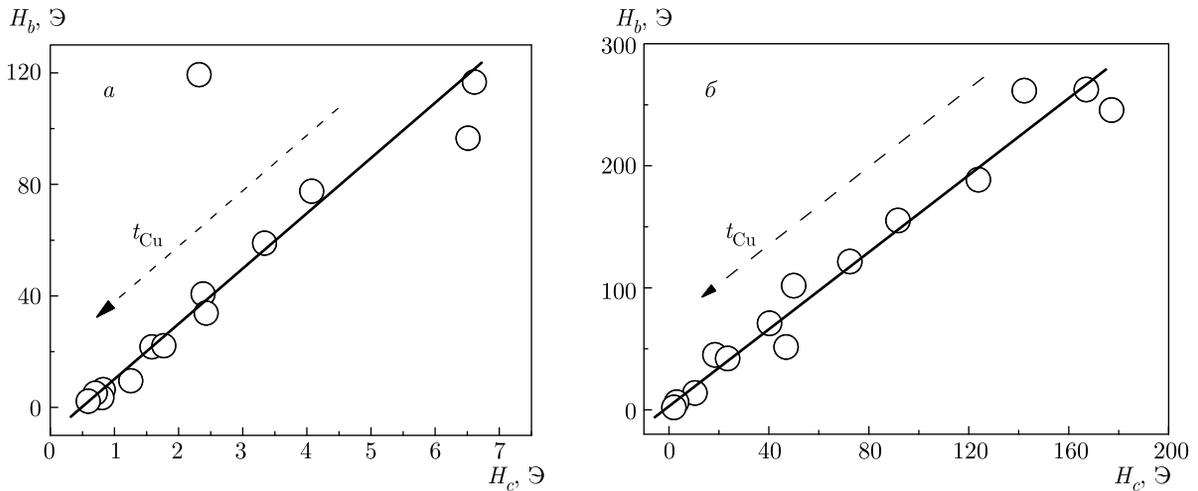


Рис. 6. Зависимости поля обменного смещения H_b от коэрцитивной силы H_c для $T = 300$ К (а) и $T = 2$ К (б)

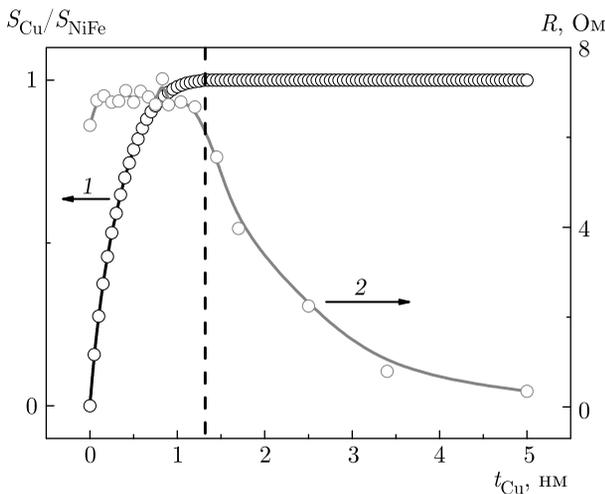


Рис. 7. Зависимость расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью (линия 1) и экспериментально определенного электрического сопротивления R (линия 2) от эффективной толщины медной прослойки. Штриховая линия соответствует эффективной толщине медной прослойки $t_{Cu} = 1.3$ нм

мости, который мог бы возникать (но не возникает в нашей серии образцов). Это говорит о том, что обменный контакт островков в бесконечном магнитном фрактале реализуется механизмом, не включающим электрическую проводимость. Для магнитных свойств таким механизмом является перекрытие волновых функций островков без вклада электронов проводимости.

Динамические магнитные свойства гетероструктур были исследованы с помощью ферромагнитного резонанса, который позволяет определить поля

анизотропии и изменение симметрии угловой зависимости резонансного поля ФМР при перколяционном переходе. На рис. 8а показано изменение спектра ФМР с толщиной прослойки меди для серии образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0.08 нм (2), 0.16 нм (3), 0.5 нм (4), 0.75 нм (5) и 0.83 нм (6). Все эти спектры записаны при фиксированных азимутальном $\varphi = 180^\circ$ и полярном $\theta = 0$ углах. На спектрах у образцов $t_{Cu} = 0, 0.08$ нм и 0.16 нм присутствовали две линии. Одна из них имеет резонансное поле, близкое к нулю, а другая линия характеризуется резонансным полем, близким к 1 кЭ. Линия 1 смещалась в нулевые поля по мере увеличения толщины слоя меди и уже не наблюдалась для образцов с высокими эффективными толщинами $t_{Cu} > 0.16$ нм. Эта линия наблюдалась в диапазоне углов $\varphi = 150^\circ - 210^\circ$, для остальных углов φ этой линии в спектре ФМР не наблюдалось. Резонансное поле линии 1 близко к полю обменного смещения H_b . Поэтому линия 1, возможно, соответствует сигналу магнитного резонанса от той части слоя NiFe, которая близка к интерфейсу, где поле обменного смещения значительно изменяет магнитную анизотропию системы. Поскольку регулярных угловых зависимостей и зависимостей резонансного поля этой линии от толщины слоя меди получить не удастся, в дальнейшем мы исключили ее из рассмотрения и анализировали только линию 2, которая характеризует ФМР во всей пленке NiFe. На спектрах ФМР видно, что линия 2 асимметричная (рис. 8а), для таких линий характерна линия Дайсона [36]. Поскольку вихревое электрическое поле лежит в плоскости образца, электроны проводимости в объеме образца будут двигаться по за-

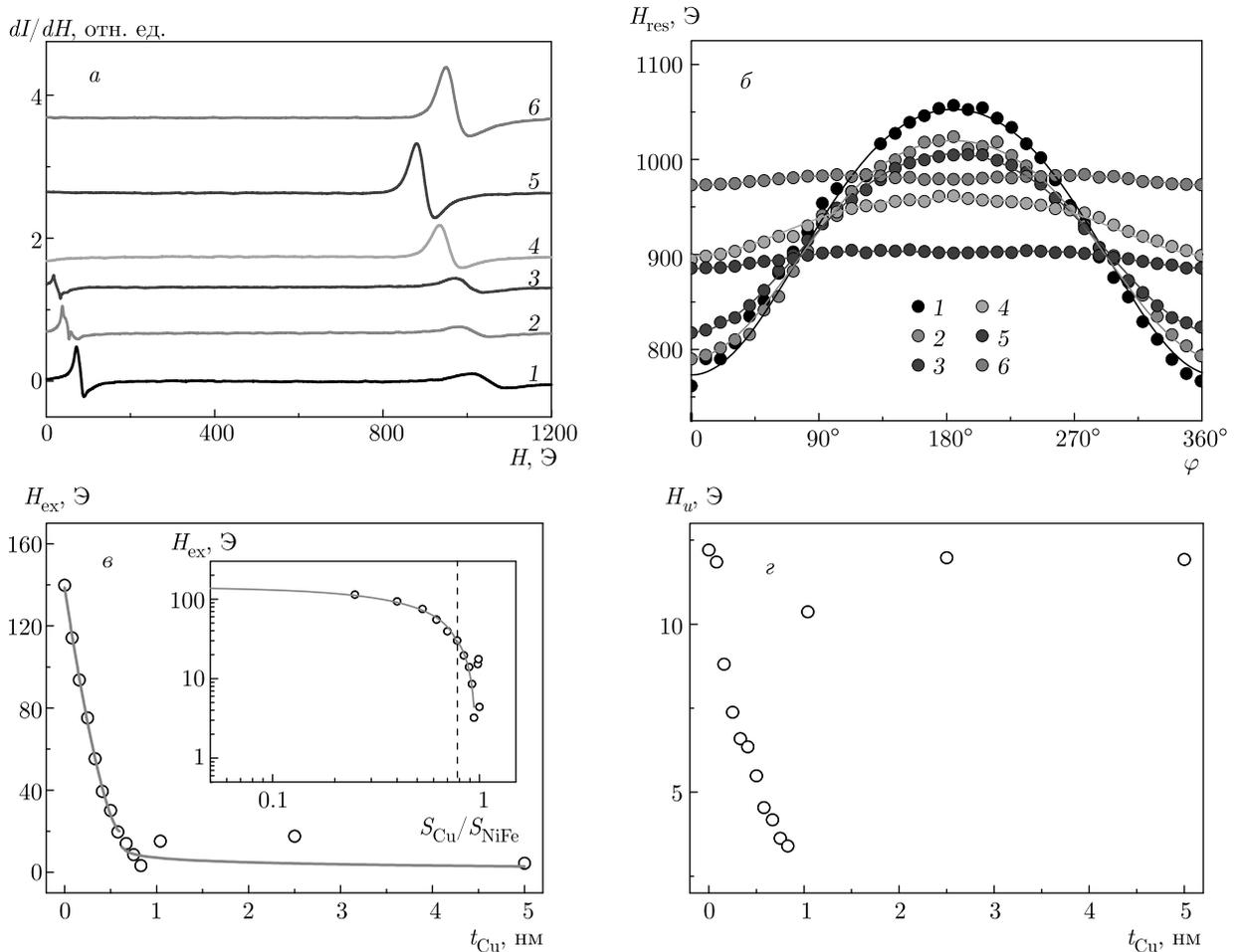


Рис. 8. *а*) Спектры ФМР образцов NiFe/Cu/IrMn для разных толщин прослойки меди в серии образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0.08 нм (2), 0.16 нм (3), 0.5 нм (4), 0.75 нм (5), 0.83 нм (6) при фиксированных азимутальном $\varphi = 180^\circ$ и полярном $\theta = 0$ углах. *б*) Зависимости резонансного поля H_{res} от азимутального угла для образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0.08 нм (2), 0.16 нм (3), 0.5 нм (4), 0.75 нм (5), 0.83 нм (6). Линиями показаны аппроксимации выражением (3). *в*) Зависимость поля однонаправленной анизотропии H_{ex} от эффективной толщины медной прослойки. На врезке представлена зависимость поля однонаправленной анизотропии от расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью, в двойных логарифмических координатах для определения порога перколяции (штриховая линия). Сплошными линиями на врезке показана аппроксимация выражением (1) для левой части зависимости и выражением (2) для правой части зависимости. *г*) Зависимость поля одноосной анизотропии H_u от эффективной толщины медной прослойки

мкнутому контуру по направлению вихревого электрического поля. Образование скин-слоя изменяет форму линии ФМР системы NiFe/Cu/IrMn, приводя к асимметрии линий (рис. 8а). Отметим, что в случае, когда вихревое электрическое поле было направлено перпендикулярно образцу и, следовательно, протекание тока в перпендикулярном слою направлении ограничено, линии спектров ФМР становились симметричными и приобретали форму Лоренца (рис. 9а). Из этих данных следует, что искажение формы линии ФМР вызвано проводимостью образца.

На рис. 8б представлены зависимости резонансного поля линии 2 от азимутального угла для образцов с разной толщиной прослойки меди. Эти зависимости при малых толщинах t_{Cu} имеют один максимум при 180° , а при превышении порога перколяции 0.5 нм характеризуются двумя максимумами при 90° и 270° (рис. 8б), что соответствует симметрии угловой зависимости резонансного поля ФМР, характерной для сплошной пленки NiFe [31]. Смена симметрии зависимости $H_{res}(\varphi)$ из-за перколяционного перехода показывает, что эффективной толщины меди $t_{Cu} = 0.58$ нм достаточно для того, чтобы

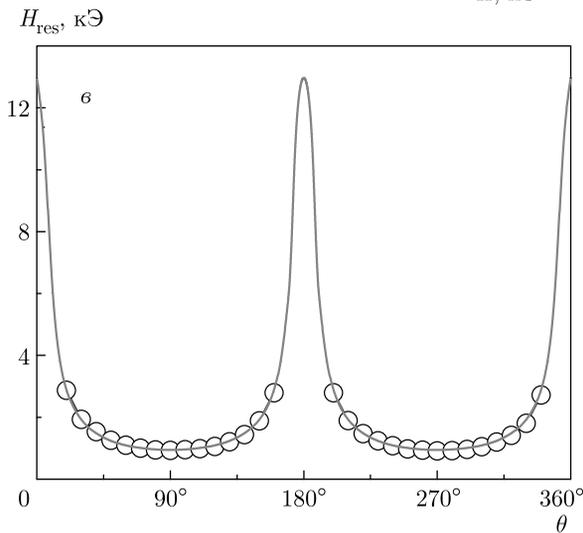
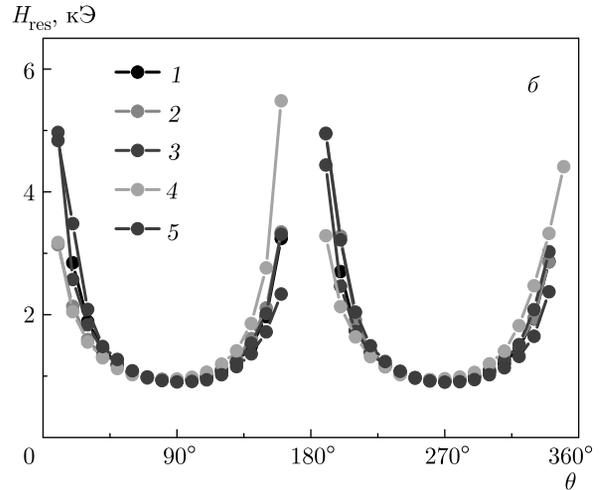
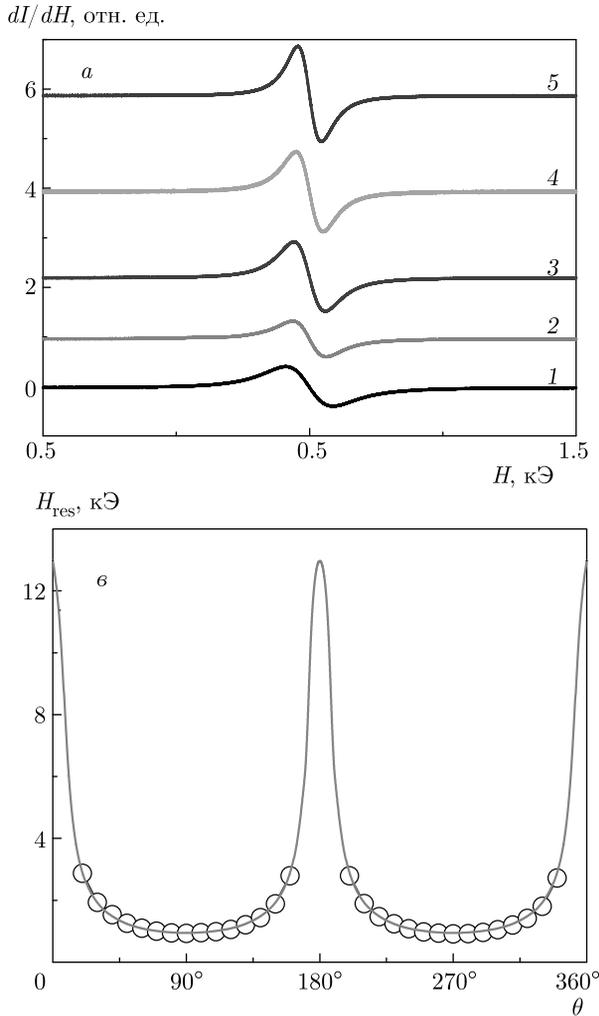


Рис. 9. Спектры ФМР образцов NiFe/Cu/IrMn для разных толщин прослойки меди в серии образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0.25 нм (2), 0.33 нм (3), 0.5 нм (4), 0.75 нм (5) при фиксированных азимутальном $\varphi = 180^\circ$ и полярном $\theta = 90^\circ$ углах (а). Зависимость резонансного поля H_{res} от полярного угла (б) для образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0.25 нм (2), 0.33 нм (3), 0.5 нм (4), 0.75 нм (5). Зависимость резонансного поля H_{res} от полярного угла образца $t_{Cu} = 0.16$ нм (в), линией показана аппроксимация выражениями (4) и (5)

островковой структурой интерфейса NiFe/Cu/IrMn можно было пренебрегать. Следовательно, перколяционный переход при допороговой эффективной толщине меди обнаруживается также по различию симметрии угловой зависимости резонансного поля ФМР для островков интерфейса и для условно сплошного эквивалента тонкой пленки, достигаемого путем возникновения бесконечного магнитного фрактала.

Зависимости резонансного поля от азимутального угла были аппроксимированы феноменологическим выражением для трех первых членов разложения в ряд по косинусам [31]:

$$H_{res}(\varphi) = H_{res0} - H_{ex} \cos \varphi - H_u \cos 2\varphi, \quad (3)$$

где φ — угол между направлением приложенного поля и легкой осью ФМ-слоя, H_{res0} — среднее резонансное поле, не зависящее от угла, которое имеет вид

$$H_{res0} = (w/\gamma)^2(1/4\pi M_S),$$

где w — угловая частота, γ — гиромагнитное отношение, M_S — намагниченность насыщения, H_{ex} — поле однонаправленной анизотропии, пропорциональное полю обменного смещения, H_u — поле одноосной анизотропии, пропорциональное коэрцитивной силе. Зависимости резонансного поля от азимутального угла удовлетворительно описываются выражением (3) для разных толщин t_{Cu} (сплошные линии на рис. 8б). Поэтому угловые зависимости были экспериментально получены при разных толщинах прослойки меди, и из них путем аппроксимации формулой (3) для каждой толщины были извлечены параметры H_{ex} и H_u . Зависимости найденных параметров H_{ex} и H_u от эффективной толщины медной прослойки представлены на рис. 8в,г. С ростом толщины меди H_{ex} и H_u сначала уменьшаются, достигая минимума при $t_{Cu} = 0.83$ нм, а при толщине меди $t_{Cu} > 0.83$ нм значения H_{ex} и H_u возрастают, и насыщаются при $t_{Cu} \geq 1.3$ нм, когда происходит полное покрытие поверхности слоем меди. Умень-

шение поля одноосной анизотропии в области толщин медной прослойки $0.08 < t_{Cu} < 1.04$ нм указывает на то, что чем толще становится слой Cu, тем меньше становится доля прямого обменного контакта между NiFe и IrMn. Увеличение и насыщение значений H_u при сплошном покрытии медной прослойки говорит о разрыве обменной связи между NiFe и IrMn, при котором H_u определяется только ферромагнитной пленкой NiFe.

Так как поле однонаправленной анизотропии H_{ex} характеризует обменное взаимодействие между NiFe и IrMn, представления о проникновении волновых функций через слой меди можно использовать для анализа поля анизотропии. Для H_{ex} был найден порог перколяции, который составил $p_c = 0.78 \pm 0.1$ (см. врезку на рис. 8б). Это значение совпадает с перколяционным порогом, определенным для коэрцитивной силы и поля обменного смещения (см. врезку на рис. 5). В окрестности порога перколяции зависимость $H_{ex}(S_{Cu}/S_{NiFe})$ была аппроксимирована выражением (1) и (2) для нахождения универсальных критических показателей s и t (таблица). Для допорогового случая $S_{Cu}/S_{NiFe} < p_c$ универсальный критический показатель s для поля однонаправленной анизотропии H_{ex} составляет $s = 0.83$, что соответствует трехмерной системе [24, 26], а для случая $S_{Cu}/S_{NiFe} > p_c$ универсальный критический показатель t составляет $t = 1.06$, что соответствует двумерной системе [24].

На рис. 9а показано изменение спектра ФМР с толщиной прослойки меди для серии образцов $t_{Cu} = 0$ (1), 0.25 нм (2), 0.33 нм (3), 0.5 нм (4), 0.75 нм (5) при фиксированном азимутальном $\varphi = 180^\circ$ и полярном $\theta = 90^\circ$ углах. На спектрах у всех образцов наблюдалась одна симметричная линия с резонансным полем, близким к 1 кЭ. Зависимости резонансного поля от полярного угла при толщинах $t_{Cu} = 0.08-0.75$ нм показаны на рис. 9б. Увеличение эффективной толщины медной прослойки не изменяет симметрию зависимостей резонансного поля от полярного угла. Поскольку у спектрометра поле развертки не превышало 7 кЭ, точки при $\theta = 0, 180^\circ$ и 360° не были определены.

Для определения эффективной намагниченности и эффективной константы анизотропии зависимости резонансного поля от полярного угла были аппроксимированы системой из двух уравнений [37, 38]:

$$H \cos(\theta - \theta_H) = 4\pi M_{eff} \sin \theta \cos \theta, \quad (4)$$

$$(w/\gamma)^2 = [H \cos(\theta - \theta_H) - 4\pi M_{eff} \cos^2 \theta] \times [H \cos(\theta - \theta_H) - 4\pi M_{eff} \cos 2\theta], \quad (5)$$

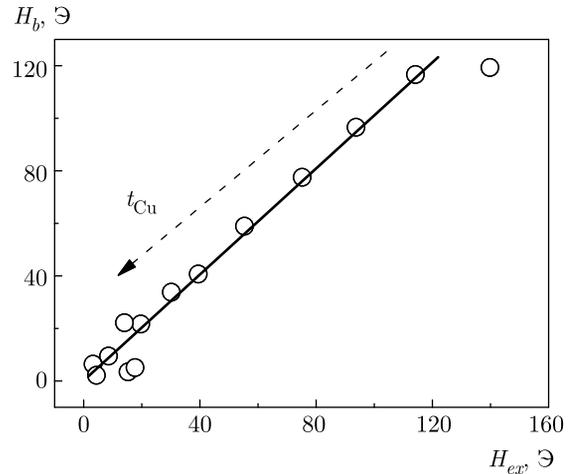


Рис. 10. Зависимость поля обменного смещения H_b , определенная методом СКВИД, от поля однонаправленной анизотропии H_{ex} , определенная методом ФМР при температуре $T = 300$ К

где θ_H и θ — углы, которые составляет поле H и вектор намагниченности, соответственно, с нормалью к пленке, w — угловая частота микроволнового поля, γ — гиромагнитное отношение для электрона, величина $4\pi M_{eff} = 2K/M_S - 4\pi M_S$ определяется полем размагничивания бесконечной пластинки $4\pi M_S$ и полем анизотропии $H_k = 2K/M_S$.

На рис. 9б показан результат аппроксимации зависимости резонансного поля от полярного угла выражениями (4) и (5) для образца $t_{Cu} = 0.16$ нм. Путем подгонки экспериментальных данных были определены эффективные намагниченности и эффективные константы анизотропии. Значения g и M_S были зафиксированы при $g = 2.12$ [37], $M_S = 800$ ед. СГСМ/см³ в соответствии с литературными данными для пермаллоя [37, 38]. Для образца $t_{Cu} = 0.16$ нм аппроксимация дает:

$$4\pi M_{eff} = -9.8 \text{ кЭ}, \quad K = 1.0 \cdot 10^5 \text{ эрг/см}^3.$$

Для других эффективных толщин прослойки Cu аппроксимация дает такие же значения $4\pi M_{eff}$ и K с точностью 2%.

На рис. 10 показана зависимость поля обменного смещения H_b , определенного с помощью СКВИД-магнитометра, от поля однонаправленной анизотропии H_{ex} , определенного с помощью ФМР. Направление изменения эффективной толщины медной прослойки показано стрелкой. Во всем диапазоне толщин слоя меди, за исключением точки, соответствующей эталонному образцу без меди, наблюдается приближенное равенство этих величин $H_b \approx H_{ex}$. Неравенство величин H_b

и H_{ex} соответствовало бы сложной зависимости $H_b(H_{ex})$ и наличию доменной структуры, нелинейным спиновым возбуждениям и магнитным дефектам, вызванным неоднородным покрытием слоя меди интерфейса NiFe/Cu/IrMn или вкладу вращающейся магнитной анизотропии [39] в величину магнитной анизотропии образцов. Линейность зависимости $H_b(H_{ex})$ означает, что перечисленных эффектов нет, а H_{ex} однозначно связано с величиной обменного взаимодействия во всем диапазоне эффективных толщин меди $0.08 < t_{Cu} < 5$ нм при комнатной температуре.

Таким образом, неизменность электрического сопротивления в области толщин $t_{Cu} = 0.08\text{--}1.3$ нм говорит о том, что электрическая проводимость зависит от двумерной системы островков меди в плоскости структуры NiFe/Cu/IrMn, так как изменяется только при сплошном покрытии меди. Однако «магнитная» перколяция, напротив, зависит от трехмерной системы островков меди. «Магнитная» перколяция происходит за счет образования «магнитных перемычек» между слоями NiFe и IrMn в поперечном направлении по мере увеличения слоя меди. В идеальной системе с ровным интерфейсом можно бы было ожидать показателей степени в выражении для перколяционного перехода, соответствующих двумерной системе, поскольку «магнитная» перколяция реализуется в направлении, перпендикулярном пленке за счет обменного сцепления ферро- и антиферромагнитных слоев. Однако из экспериментов следует, что для обменного смещения и для коэрцитивной силы в основном наблюдаются показатели степени, отвечающие трехмерному фракталу (см. таблицу). Это может быть связано с тем, что поверхности ферро- и антиферромагнетика и в отсутствие меди не являются равными. Поэтому «магнитное протекание» может реализовываться отчасти также в продольном направлении между ферромагнитными островками, возникшими при неоднородном напылении NiFe. Заполнение промежутков между островками медью способно влиять на продольное протекание, приводя к трехмерному характеру магнитного фрактала. Можно представить два пути влияния островкового характера пленки NiFe и заполнения промежутков между островками медью на магнитную фрактальную размерность. Островки NiFe могут в принципе взаимодействовать путем косвенного обменного взаимодействия через электроны проводимости, а магнитное дипольное взаимодействие между островками NiFe может также приводить к коллективному перемагничиванию, подобно системе суперпа-

рамагнитных частиц. Поскольку электрическое сопротивление исследуемой структуры не изменяется при возникновении «магнитной» перколяции, магнитное дипольное взаимодействие между неровностями пленки NiFe является разумным объяснением трехмерного характера магнитного фрактала.

4. ВЫВОДЫ

1. Постепенное заполнение интерфейса NiFe/Cu/IrMn атомами меди приводит к резкому уменьшению поля обменного смещения H_b , коэрцитивной силы H_c и поля однонаправленной анизотропии H_{ex} при эффективной толщине медной прослойки $t_{Cu} \approx 0.5$ нм или при отношении расчетной доли поверхности NiFe, покрытой медью, $S_{Cu}/S_{NiFe} \approx 0.78 \pm 0.1$. Моделирование, учитывающее коэффициенты адгезии меди, показывает, что эта толщина $t_{Cu} \approx 0.5$ нм соответствует образованию бесконечного фрактала при слиянии островков меди. Пороговое значение $t_{Cu} \approx 0.5$ нм значительно меньше толщины 1.3 нм, при котором происходит полное покрытие интерфейса медью. Для H_b и H_{ex} ниже порога перколяции наблюдается зависимость от количества напыленной меди, характерная для трехмерных структур, а выше порога перколяции — зависимость, типичная для двумерных структур. Для H_c наблюдается зависимость, характерная для трехмерных структур ниже и выше порога перколяции.

2. Образование бесконечного фрактала не влияет на электрическое сопротивление образцов, т. е. в области исследованных эффективных толщин $0.08 < t_{Cu} < 1.3$ нм электрическое сопротивление одинаково и составляет $R \approx 6.9 \pm 0.1$ Ом. Расчетная эффективная толщина слоя меди, необходимая для полного покрытия интерфейса NiFe/Cu/IrMn, $t_{Cu} = 1.3$ нм, совпадает с экспериментально определенной толщиной слоя меди 1.3 нм, при которой возникает резкое изменение электрического сопротивления гетероструктур. При увеличении эффективной толщины меди выше 1.3 нм электрическое сопротивление падает в соответствии с нарастающим объемом напыленной меди.

3. Переход в точке перколяции $t_{Cu} \approx 0.5$ нм изменяет симметрию зависимости резонансного поля ФМР от азимутального угла, и при эффективных толщинах медной прослойки $t_{Cu} > 0.5$ нм симметрия зависимости резонансного поля от азимутального угла соответствует симметрии сплошной пленки NiFe. Зависимости резонансного

поля от полярного угла не чувствительны к добавлению меди и степени заполнения интерфейса NiFe/Cu/IrMn медной прослойкой во всем диапазоне эффективной толщины $t_{\text{Cu}} = 0.08\text{--}5$ нм.

Благодарности. Авторы выражают благодарность профессору Чеолги Ким (Институт науки и технологий Дэгу Кёнбук, Южная Корея) за образцы, предоставленные для исследований.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке гранта НШ-2644.2020.2 Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ и в рамках программы ИПХФ РАН АААА-А19-119092390079-8.

Разработка программного обеспечения для моделирования напыления нанослоев методом Монте-Карло поддержана Национальным Исследовательским Фондом Республики Корея (NRF), грант правительства Республики Корея (MSIT) (№ NRF-2018R1A5A1025511).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
2. J. Y. Son, C. H. Kim, J. H. Cho, Y. H. Shin, and H. M. Jang, *ACS Nano* **4**, 3288 (2010).
3. J. McCord, R. Mattheis, and D. Elefant, *Phys. Rev. B* **70**, 094420 (2004).
4. R. Stamps, *J. Phys. D* **33**, R247 (2000).
5. P. K. Manna and S. M. Yusuf, *Phys. Rep.* **535**, 61 (2014).
6. Y. Hu, X. Li, X. Chi, A. Du, and F. Shi, *J. Phys. D* **51**, 055001 (2018).
7. T. R. Gao, Z. Shi, S. M. Zhou, R. Chantrell, P. Aselin, X. J. Bai, J. Du, and Z. Z. Zhang, *J. Appl. Phys.* **105**, 053913 (2009).
8. H. S. Jung, O. Traistaru, and H. Fujiwara, *J. Appl. Phys.* **95**, 6849 (2004).
9. H. Sang, Y. W. Du, and C. L. Chien, *J. Appl. Phys.* **85**, 4931 (1999).
10. J. Camarero, J. Sort, A. Hoffmann, J. M. Garcia-Martin, B. Dieny, R. Miranda, and J. Nogues, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 057204 (2005).
11. S. H. Chung, A. Hoffmann, and M. Grimsditch, *Phys. Rev. B* **71**, 214430 (2005).
12. J. P. King, J. N. Chapman, M. F. Gillies, and J. C. S. Kools, *J. Phys. D* **34**, 528 (2001).
13. T. Q. Hung, S. Oh, B. Sinha, J. R. Jeong, D. Y. Kim, and C. Kim, *J. Appl. Phys.* **107**, 09E715 (2010).
14. L. Thomas, A. J. Kellock, and S. S. P. Parkin, *J. Appl. Phys.* **87**, 5061 (2000).
15. S. Nicolodi, L. C. C. M. Nagamine, A. D. C. Viegas, J. E. Schmidt, L. G. Pereira, C. Deranlot, F. Petroff, and J. Geshev, *J. Magn. Magn. Mater.* **316**, e97 (2007).
16. J. Sort, F. Garcia, B. Rodmacq, S. Auffret, and B. Dieny, *J. Magn. Magn. Mater.* **272**, 355 (2004).
17. Л. Н. Маскаева, Е. А. Федорова, В. Ф. Марков, *Технология тонких пленок и покрытий*, Изд. Уральского университета, Екатеринбург (2019).
18. C. W. Nan, Y. Shen, and J. Ma, *Ann. Rev. Mater. Res.* **40**, 131 (2010).
19. K. Li, Z. Guo, G. Han, J. Qiu, and Y. Wu, *J. Appl. Phys.* **93**, 6614 (2003).
20. N. J. Gokemeijer, T. Ambrose, and C. Chien, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4270 (1997).
21. M. Gruyters, M. Gierlings, and D. Riegel, *Phys. Rev. B* **64**, 132401 (2001).
22. I. J. Youngs, *J. Phys. D* **35**, 3127 (2002).
23. Q. Li, T. Li, and J. Wu, *J. Colloid Interface Sci.* **239**, 522 (2001).
24. N. I. Lebovka, S. Tarafdar, and N. V. Vygornitskii, *Phys. Rev. E* **73**, 031402 (2006).
25. D. S. McLachlan, C. Chiteme, W. D. Heiss, and J. Wu, *Physica B* **338**, 261 (2003).
26. W. Z. Cai, S. T. Tu, and J. M. Gong, *J. Comp. Mater.* **40**, 2131 (2006).
27. D. S. McLachlan, K. Cai, and G. Sauti, *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **19**, 437 (2001).
28. M. Sahimi, *Phys. Rep.* **306**, 213 (1998).
29. J. Geshev, S. Nicolodi, L. G. Pereira, L. C. C. M. Nagamine, and J. E. Schmidt, *Phys. Rev. B* **75**, 214402 (2007).
30. Y. G. Yoo, M. C. Paek, S. G. Min, and S. C. Yu, *J. Magn. Magn. Mater.* **290**, 198 (2005).
31. Y. G. Yoo, S. G. Min, and S. C. Yu, *J. Magn. Magn. Mater.* **304**, e718 (2006).

- 32.** A. Elzawawy, A. Talantsev, and C. Kim, *J. Magn. Magn. Mat.* **458**, 292 (2018).
- 33.** Р. Б. Моргунов, М. В. Бахметьев, А. Д. Таланцев, *ФТТ* **62**, 1774 (2020).
- 34.** T. R. McGuire and R. I. Potter, *IEEE Transactions on Magnetism* **11**, 1018 (1975).
- 35.** P. P. Shinde, P. Tagade, S. P. Adiga, A. Konar, S. Pandian, and K. S. Maurya, *Phys. Rev. B* **102**, 165102 (2020).
- 36.** Р. Б. Моргунов, А. И. Дмитриев, Y. Tanimoto, J. S. Kulkarni, J. D. Holmes, O. L. Kazakova, *ФТТ* **50**, 1058 (2008).
- 37.** W. Alayo, F. Pelegriani, and E. Baggio-Saitovitch, *J. Magn. Magn. Mater.* **377**, 104 (2015).
- 38.** J. Lindner and K. Baberschke, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, R193 (2003).
- 39.** В. Г. Мягков, Л. Е. Быкова, В. Ю. Яковчук, А. А. Мацынин, Д. А. Великанов, Г. С. Патрин, Г. Ю. Юркин, Г. Н. Бондаренко, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 610 (2017).

ЗАКОНЫ ПОДОБИЯ ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА НЕСТАЦИОНАРНОГО СУПЕРДИФФУЗИОННОГО ПЕРЕНОСА: ПРОГУЛКИ ЛЕВИ И ПОЛЕТЫ ЛЕВИ

А. Б. Кужушкин^{a,b,c}, А. А. Куличенко^{a**}, А. В. Соколов^{d***}*

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

^b *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

^c *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

^d *Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича Российской академии наук
127051, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 января 2021 г.,
после переработки 29 января 2021 г.
Принята к публикации 29 января 2021 г.

Получено аналитическое описание распространения фронта возмущения среды при нестационарном супердиффузионном (нелокальном) переносе в случае конечной фиксированной скорости движения переносчиков возмущения (так называемые «прогулки Леви с остановками»). Данная проблема охватывает такие задачи, как перенос резонансного излучения в астрофизических газах и плазме, биологическую миграцию, перенос энергии волнами в плазме. В этом подходе результат, полученный интегрированием точного решения кинетического уравнения для функции Грина, не зависит от мерности координатного пространства. Проведено сравнение с другим, более точным методом определения фронта и численными расчетами статистики траекторий методом Монте-Карло. Сравнение показало применимость полученных результатов в широком диапазоне параметров задачи. Предложено единое описание динамики фронта возмущения среды при произвольной, включая бесконечную, фиксированной скорости переносчиков возмущения. Это соответствует объединению формул для фронта при переносе полетами Леви и прогулками Леви. Обсуждаются критерии перехода между указанными режимами супердиффузионного переноса, что, в частности, соответствует условию учета конечной скорости света в переносе резонансного излучения в газах и плазме. Для прогулок Леви найдена связь интегральных характеристик возмущения среды и его переносчиков.

DOI: 10.31857/S0044451021050138

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа является развитием работ [1–3], где были получены общее и приближенное атомодельное решения для функции Грина широкого класса интегродифференциальных уравнений одномерного [1, 3], двумерного и трехмерного [2] (по пространственным координатам) нестационарного су-

пердиффузионного переноса возмущения однородной среды для конечной фиксированной скорости переносчиков. Основной целью этой работы является, во-первых, получение аналитического описания динамики эффективного фронта возмущения среды в случае конечной фиксированной скорости движения переносчиков возмущения (так называемые «прогулки Леви с остановками», см. [4–7] и рис. 1 в [5]) и, во-вторых, объединение этих формул с аналогичной формулой для полетов Леви, чему соответствует предел бесконечной скорости переносчиков (эта формула в частных случаях и общем виде в теории переноса резонансного излучения в модели

* E-mail: kukushkin_ab@nrcki.ru

** E-mail: kulichenko_aa@nrcki.ru

*** E-mail: alexander.v.sokolov@gmail.com

Бибермана – Холстейна [8–10] получена и проанализирована в [11–18]).

Напомним, что в случае нормальной (или обыкновенной) диффузии, определяемой как броуновское движение, описываемое дифференциальным уравнением фоккер-планковского типа, функция Грина является гауссианом, чей аргумент определяет закон распространения фронта $r_{fr}(t) \sim (Dt)^\beta$, где $\beta = 1/2$, D – коэффициент диффузии. Этот закон нарушается в широком классе явлений, где длина свободного пробега (длина шага) дается медленно, по степенному закону убывающей функцией распределения переносчиков по длине их свободного пробега (ФРСП). Это приводит к расходимости коэффициента диффузии, формально определяемого из дисперсии ФРСП, и к показателю степени $\beta > 1/2$ в законе подобия $r_{fr}(t) \sim (Dt)^\beta$, что и называется супердиффузионным переносом.

Супердиффузионный перенос и связанная с ним концепция полетов Леви, введенная Мандельбротом [19, 20] (см. с. IX в [20] и, например, [21–23]), охватывает широкий круг явлений в физике и других дисциплинах. Модель «прогулок Леви с остановками» актуальна для таких задач как перенос резонансного излучения в астрофизических газах и плазме [24–26], биологическая миграция (разд. 6 в [5]), перенос энергии волнами в плазме [27]. В отличие от задач стационарного нелокального переноса, где аналитические методы хорошо развиты, как, например, в уже упомянутой теории переноса резонансного излучения при полном перераспределении по частоте в акте поглощения и излучения фотона атомом или ионом в газе или плазме [10, 12–14, 28–33], для задач нестационарного нелокального переноса с учетом конечной скорости света простых формул для практически интересующих характеристик, прежде всего динамики фронта распространения возмущения среды от мгновенного точечного источника, пока получено не было.

В разд. 2 представлены уравнения, описывающие нелокальный (супердиффузионный) перенос в случае конечной фиксированной скорости движения переносчиков возмущения («прогулки Леви с остановками»). В разд. 3 представлен универсальный, не зависящий от мерности координатного пространства метод определения закона распространения фронта возмущения среды (или фронта плотности стоящих мигрантов) при переносе прогулками Леви. Для фронта и других характеристик возмущения среды получены аналитические выражения. В разд. 4 представлен вывод характеристик возмущения переносчиков, показана их связь с характери-

стиками возмущения среды. В разд. 5 дано описание моделирования прогулок Леви методом Монте-Карло. В разд. 6 проведено сравнение результатов для числа стоящих и бегущих мигрантов для прогулок Леви, приведены результаты моделирования траекторий мигрантов методом Монте-Карло. В разд. 7 представлена единая формула фронта возмущения среды для прогулок Леви и полетов Леви, проведено сравнение разных подходов к определению фронта возмущения среды, в том числе проведено сравнение с более точным законом определения фронта и результатами моделирования траекторий методом Монте-Карло.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим задачу супердиффузионного переноса, который является либо переносом возмущения неподвижной однородной среды некими переносчиками, не принадлежащими среде (примером такого процесса является перенос возбуждения атомов или ионов путем испускания и поглощения резонансных фотонов), либо эволюцией ансамбля объектов или субъектов, которые движутся (мигрируют) в однородном пространстве с одинаковой постоянной скоростью между точками остановки при заданном среднем времени пребывания в этих точках. В этом случае уравнение для функции Грина плотности возмущения среды или плотности стоящих мигрантов, $f(\mathbf{r}, t)$, в точке \mathbf{r} в момент времени t имеет вид (вывод этого уравнения можно найти, например, в разд. 2 в [3]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & - \left(\frac{1}{\tau} + \sigma \right) f(\mathbf{r}, t) + \\ & + \frac{1}{\tau} \int d\mathbf{r}_1 W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) \theta \left(t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|}{c} \right) \times \\ & \times f \left(\mathbf{r}_1, t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|}{c} \right) + \delta(\mathbf{r})\delta(t), \quad (2.1) \end{aligned}$$

где $W(\rho)$ – вероятность поглощения переносчика возмущения средой (или вероятность остановки мигранта) на расстоянии ρ от точки его последнего старта. Условие нормировки вероятности имеет стандартный вид:

$$\int_0^\infty W(\rho) S(\rho) d\rho = 1. \quad (2.2)$$

Здесь $S(\rho)d\rho$ есть элемент объема в пространстве ($\rho \geq 0$): в одномерном случае $S(\rho) = 2$, в двумер-

ном — $S(\rho) = 2\pi\rho$, в трехмерном — $S(\rho) = 4\pi\rho^2$. При этом функция

$$W_{step}(\rho) \equiv W(\rho)S(\rho) \tag{2.3}$$

есть ФРСП переносчиков возмущения среды или бегущих мигрантов; τ — среднее время нахождения мигранта в точке остановки или среднее время жизни элементарного возмущения среды (например, среднее время между поглощением и последующим испусканием резонансного фотона атомом или ионом); c — постоянная скорость движения переносчиков (или бегущих мигрантов) между точками остановки; σ — среднее обратное время исчезновения («тушения») переносчиков (для переноса резонансного излучения это относится к нерадиационному девозбуждению среды); $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда; $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. В трехмерном случае, когда переносчиками возмущения среды (а именно, возбуждения атомов или ионов) являются резонансные фотоны в среде, W и W_{step} имеют вид (ср., например, разд. 1 в [13])

$$W(\rho) = -\frac{1}{4\pi\rho^2} \frac{dT(\rho)}{d\rho} \equiv \frac{1}{4\pi\rho^2} W_{step}(\rho), \tag{2.4}$$

$$T(\rho) = \int d\omega e_\omega \exp(-\kappa_\omega\rho),$$

где e_ω — спектральное распределение вероятности испускания фотона с частотой ω ; κ_ω — коэффициент поглощения средой фотона с частотой ω (т.е. обратная длина свободного пробега такого фотона).

Для реализации супердиффузионного переноса ФРСП должна быть медленно спадающей функцией расстояния ρ , т.е. степенной:

$$W_{step}(\rho) = \frac{\gamma\kappa_0}{(1 + \kappa_0\rho)^{\gamma+1}}, \tag{2.5}$$

$$0 < \gamma < 2,$$

где $1/\kappa_0$ является характерной длиной, что в случае переноса возбуждения резонансными фотонами соответствует значению коэффициента поглощения в центре спектральной линии κ_0 . Для такого модельного вида ФРСП ранее было получено выражение для функции Грина плотности возмущения среды (или плотности стоящих мигрантов) $f(\mathbf{r}, t)$: в случае переноса, одномерного по пространственной координате — в [3], а для двумерного и трехмерного — в [2]. Также в [2] (формула (3.12)) было получено аналитическое выражение для полного (т.е. интегрального по пространству) количества возбужденных частиц (или стоящих мигрантов) в среде $N(t)$ — без «тушения» переносчиков — при временах, много

больших среднего времени нахождения переносчика в точке остановки, $t \gg \tau$. Отметим, что этот же результат можно получить путем прямого интегрирования функции Грина.

3. АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ ФРОНТА ВОЗМУЩЕНИЯ СРЕДЫ В СЛУЧАЕ ПРОГУЛОК ЛЕВИ

Определим эффективный фронт распространения возмущения в среде (или эффективный фронт для плотности стоящих мигрантов) от точечного мгновенного источника в следующем виде:

$$r_{rest}(t) = \sqrt{\frac{M_{rest}(t)}{N_{rest}(t)}}. \tag{3.1}$$

Здесь

$$N_{rest}(t) = \int f_{rest}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

является полным количеством возбужденных частиц в среде в задаче переноса возбуждения однородной среды или полным количеством стоящих мигрантов в задаче миграции в однородной среде. Отметим, что $N_{rest}(0) = 1$ (это следует из определения источника в исходном уравнении для функции Грина (2.1)), поэтому $N_{rest}(t)$ является долей возбужденных частиц среды в полном числе частиц или долей стоящих мигрантов в полном числе мигрантов;

$$M_{rest}(t) = \int r^2 f_{rest}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r},$$

— второй момент функции Грина.

Далее будем работать в безразмерных переменных: длину будем измерять в единицах $1/\kappa_0$, время — в единицах τ , и будем искать выражение для фронта при временах, много больших характерного времени нахождения переносчика в точке остановки, $t \gg 1$ (в безразмерных переменных) (для всех нетривиальных задач переноса, с множественными актами поглощения и переизлучения переносчиков, интересны именно такие времена).

В случае однородного трехмерного (3d) координатного пространства рассчитаем $M_{rest}(t)$:

$$M_{rest}(t) = 4\pi \int_0^{+\infty} f_{rest}(r, t) r^4 dr. \tag{3.2}$$

С учетом выражения для функции Грина плотности возмущения среды (плотности стоящих мигрантов) $f_{rest}(r, t)$, (2.20) в [2], получим

$$M_{rest}(t) = \frac{1}{2\pi^2 i} \int_{-\infty}^{+\infty} dp p \int_0^{+\infty} dr r^3 \sin(pr) \times \int_{+0-i\infty}^{+0+i\infty} e^{st} ds \left\{ s + 1 + \sigma\tau - \gamma \int_0^{+\infty} \frac{du}{(1+u)^{\gamma+1}} \frac{\sin(pu)}{pu} \exp\left(-\frac{su}{R_c}\right) \right\}^{-1}, \quad (3.3)$$

— отношение среднего времени жизни возбужденного состояния частиц среды к среднему времени свободного пролета переносчика (фотона) (или отношение средних времен нахождения мигранта в состояниях покоя и движения). Интеграл по переменной r можно представить в виде

$$\int_0^{+\infty} dr r^3 \sin(pr) = \pi \delta'''(p). \quad (3.5)$$

где введен безразмерный параметр

$$R_c = c\tau\kappa_0 \quad (3.4)$$

С учетом (3.5) уравнение (3.3) примет вид

$$M_{rest}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{+0-i\infty}^{+0+i\infty} ds e^{st} \gamma \int_0^{+\infty} \frac{du_1 u_1^2 e^{-su_1/R_c}}{(1+u_1)^{\gamma+1}} \left\{ s + 1 + \sigma\tau - \gamma \int_0^{+\infty} \frac{du e^{-su/R_c}}{(1+u)^{\gamma+1}} \right\}^{-2}. \quad (3.6)$$

Формула (3.6) не зависит от мерности координатного пространства и справедлива для случаев одномерного, двумерного и трехмерного переноса. Нетрудно видеть, что данное выражение представляет собой обратное преобразование Лапласа от функции

$$\hat{M}_{rest}(s) = \gamma \int_0^{+\infty} \frac{du_1 u_1^2 e^{-su_1/R_c}}{(1+u_1)^{\gamma+1}} \left\{ s + 1 + \sigma\tau - \gamma \int_0^{+\infty} \frac{du e^{-su/R_c}}{(1+u)^{\gamma+1}} \right\}^{-2}, \quad (3.7)$$

т. е. $M_{rest}(t) \doteq \hat{M}_{rest}(s)$. Отметим, что интеграл в числителе сходится, так как $\text{Re}(s) > 0$. Внутренние интегралы в (3.7) можно рассчитать:

$$\int_0^{+\infty} \frac{du e^{-su/R_c}}{(1+u)^{\gamma+1}} = \begin{cases} e^{s/R_c} \left(\frac{s}{R_c}\right)^\gamma \Gamma\left(-\gamma, \frac{s}{R_c}\right), & \gamma \neq 1, \\ 1 - e^{s/R_c} \frac{s}{R_c} \Gamma\left(0, \frac{s}{R_c}\right), & \gamma = 1, \end{cases}$$

$$\int_0^{+\infty} \frac{du_1 u_1^2 e^{-su_1/R_c}}{(1+u_1)^{\gamma+1}} =$$

$$= \begin{cases} e^{s/R_c} \left(\frac{s}{R_c}\right)^\gamma \left\{ \Gamma\left(-\gamma, \frac{s}{R_c}\right) - \frac{2R_c}{s} \Gamma\left(1-\gamma, \frac{s}{R_c}\right) + \left(\frac{R_c}{s}\right)^2 \Gamma\left(2-\gamma, \frac{s}{R_c}\right) \right\}, & \gamma \neq 1, \\ 1 + \frac{R_c}{s} + e^{s/R_c} \left(2 + \frac{s}{R_c}\right) \left[\text{Chi}\left(\frac{s}{R_c}\right) - \text{Shi}\left(\frac{s}{R_c}\right) \right], & \gamma = 1, \end{cases} \quad (3.8)$$

где

$$\Gamma(\alpha, z) = \int_z^\infty x^{\alpha-1} e^{-x} dx$$

— неполная гамма-функция,

$$\text{Chi}(z) = \gamma_e + \ln(z) + \int_0^z \frac{\text{ch}(x) - 1}{x} dx,$$

$$\text{Shi}(z) = \int_0^z \frac{\text{sh}(x)}{x} dx$$

— интегральные гиперболические косинус и синус соответственно, $\gamma_e = 0.577216\dots$ — постоянная Эйлера, $\text{ch}(x)$ и $\text{sh}(x)$ — гиперболические косинус и синус соответственно.

Условию $t \gg 1$ соответствует $s \ll 1$, поэтому будем использовать соответствующее разложение

неполной гамма-функции. Далее будем всегда рассматривать случай сохранения полного числа мигрантов (или суммы количества возбужденных ато-

мов и фотонов), т. е. $\sigma = 0$. После преобразования (3.7) с учетом (3.8) получаем

$$\hat{M}_{rest}(s) = \begin{cases} -\frac{1-\gamma}{\Gamma(-\gamma)} \left(\frac{R_c}{s}\right)^{2+\gamma}, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{1}{\ln^2(R_c/s)} \left(\frac{R_c}{s}\right)^3, & \gamma = 1, \\ \frac{\gamma(\gamma-1)^2 \Gamma(2-\gamma)}{(1/R_c + \gamma - 1)^2} \frac{R_c^{2-\gamma}}{s^{4-\gamma}}, & 1 < \gamma < 2. \end{cases} \quad (3.9)$$

Обратное преобразование Лапласа дает следующий результат:

$$M_{rest}(t) = \begin{cases} \frac{1-\gamma}{1+\gamma} \frac{\sin(\pi\gamma)}{\pi} R_c (tR_c)^{1+\gamma}, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{R_c t^2}{2[1 + \ln(tR_c)/R_c]^2}, & \gamma = 1, \\ \frac{\gamma(\gamma-1)^2}{(2-\gamma)(3-\gamma)} \frac{(tR_c)^{3-\gamma}}{R_c(1/R_c + \gamma - 1)^2}, & 1 < \gamma < 2. \end{cases} \quad (3.10)$$

Для полного количества возбужденных частиц в среде (или стоящих мигрантов) используем формулу (3.12) из [2] и дополним ее формулой для $\gamma = 1$, что дает

$$N_{rest}(t) = \begin{cases} \frac{\sin(\pi\gamma)}{\pi} \frac{R_c^\gamma}{t^{1-\gamma}}, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{1}{1 + \ln(tR_c)/R_c}, & \gamma = 1, \\ \frac{\gamma-1}{1/R_c + \gamma - 1} \left(1 + \frac{1}{1/R_c + \gamma - 1} \frac{1}{R_c^\gamma t^{\gamma-1}}\right), & 1 < \gamma < 2. \end{cases} \quad (3.11)$$

С учетом (3.10) и (3.11) закон движения фронта (3.1) при $t \gg 1$ принимает следующий вид:

$$r_{rest}(t) = \begin{cases} tR_c \sqrt{\frac{1-\gamma}{1+\gamma}}, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{tR_c}{\sqrt{2(R_c + \ln(tR_c))}}, & \gamma = 1, \\ (tR_c)^{(3-\gamma)/2} \left[\frac{\gamma(\gamma-1)}{(2-\gamma)(3-\gamma)} \frac{1}{1 + R_c(\gamma-1)} \right]^{1/2}, & 1 < \gamma < 2. \end{cases} \quad (3.12)$$

Однако в окрестности точки $\gamma = 1$ формулу (3.12) необходимо интерполировать, поскольку формулы при $\gamma < 1$ и $\gamma > 1$ при приближении к $\gamma = 1$, в соответствии с условиями их получения, неприменимы:

$$r_{rest}(t, R_c, \gamma) = \begin{cases} tR_c \sqrt{\frac{1-\gamma}{1+\gamma}}, & 0 < \gamma \leq 1 - \epsilon_{rest}^{(L)}(t, R_c), \\ \frac{tR_c}{\sqrt{2(R_c + \ln(tR_c))}}, & 1 - \epsilon_{rest}^{(L)}(t, R_c) < \gamma \leq 1 + \epsilon_{rest}^{(U)}(t, R_c), \\ (tR_c)^{(3-\gamma)/2} \left[\frac{\gamma(\gamma-1)}{(2-\gamma)(3-\gamma)} \frac{1}{1 + R_c(\gamma-1)} \right]^{1/2}, & 1 + \epsilon_{rest}^{(U)}(t, R_c) < \gamma < 2, \end{cases} \quad (3.13)$$

где

$$\epsilon_{rest}^{(L)}(t, R_c) = \frac{1}{R_c + \ln(tR_c) + 0.5} \quad (3.14)$$

(здесь индекс «L» происходит от англ. lower, что означает область $\gamma < 1$). Граница области вблизи $\gamma = 1$ задается из условия непрерывности при сшивке значения функции (3.13) $\gamma = 1$ с функцией при $\gamma < 1$. Аналогичная попытка «сшивки» при $\gamma > 1$ дает функцию $\epsilon_{rest}^{(U)}(t, R_c)$ (индекс «U» происходит от англ. upper, что означает область $\gamma > 1$) (индекс «rest» в записи опустим):

$$\left[\frac{\epsilon_U(1 + \epsilon_U)}{(1 - \epsilon_U)(2 - \epsilon_U)} \frac{1}{1 + R_c \epsilon_U} \right]^{1/2} = \frac{(tR_c)^{\epsilon_U/2}}{\sqrt{2(R_c + \ln(tR_c))}}. \quad (3.15)$$

Однако решения этого уравнения, допускающие непрерывность перехода во всей области параметров, отсутствуют: при малых R_c непрерывная сшивка невозможна. Но все же при больших значениях R_c уравнение (3.15) удастся решить с использованием теории возмущений. При этом получаем, что

$$\epsilon_{rest}^{(U)}(t, R_c) \approx \epsilon_{rest}^{(L)}(t, R_c) \approx \epsilon(t, R_c),$$

где

$$\epsilon(t, R_c) = \frac{1}{R_c + \ln(tR_c)}. \quad (3.16)$$

Анализ точности (3.13) проведен ниже, в разд. 7.

4. АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ ФРОНТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЕРЕНОСЧИКОВ В СЛУЧАЕ ПРОГУЛОК ЛЕВИ

Рассмотрим систему уравнений (2.4) в [2], описывающую перенос в двумерном (2d) случае, и решим ее относительно интенсивности переносчиков $I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t)$ при заданной плотности возмущения среды $f(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{rest}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= - \left(\frac{1}{\tau} + \sigma \right) f_{rest}(\mathbf{r}, t) + \int d\omega \frac{\kappa_\omega}{\hbar\omega} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi(\mathbf{n}) I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) + \delta(\mathbf{r})\delta(t), \\ \frac{1}{c} \frac{\partial I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t)}{\partial t} + (\mathbf{n}, \nabla) I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) &= \\ = \frac{\hbar\omega}{\tau} \frac{1}{2\pi} e_\omega f_{rest}(\mathbf{r}, t) - \kappa_\omega I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Проинтегрируем по углам второе уравнение с учетом соотношения

$$\int_0^{2\pi} d\varphi(\mathbf{n})(\mathbf{n}, \nabla) = \int_0^{2\pi} d\varphi \cos(\varphi) \frac{d}{ds} = 0$$

и введем усреднение по углам:

$$\bar{I}_\omega(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi(\mathbf{n}') I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{n}', t).$$

Тогда

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \bar{I}_\omega(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hbar\omega}{\tau} e_\omega f_{rest}(\mathbf{r}, t) - \kappa_\omega \bar{I}_\omega(\mathbf{r}, t). \quad (4.2)$$

Решение указанного уравнения с начальным условием $\bar{I}_\omega(\mathbf{r}, t = 0) = 0$ имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{I}_\omega(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar\omega}{\tau} c e_\omega \times \\ &\times \int_0^t dt' \exp(-c(t-t')\kappa_\omega) f_{rest}(\mathbf{r}, t'). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Введем следующее определение для плотности переносчиков:

$$f_{mov}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \int d\omega \frac{\bar{I}_\omega(\mathbf{r}, t)}{\hbar\omega}. \quad (4.4)$$

Тогда с учетом того, что

$$T(\rho) = \int d\omega e_\omega \exp(-\kappa_\omega \rho),$$

из (4.3) и (4.4) имеем

$$f_{mov}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} \int_0^t dt' f_{rest}(\mathbf{r}, t') T(c(t-t')). \quad (4.5)$$

Уравнение (4.5), полученное путем решения задачи о переносе возбуждения среды фотонами в спектральной линии атомов или ионов, описывает также и связь плотностей стоящих и бегущих мигрантов.

В случае модельного вида ядра (2.4), которому соответствует ФРСП (2.5), после перехода к безразмерным переменным (длина — в единицах $1/\kappa_0$, время — в единицах τ) с учетом (3.4) получим

$$f_{mov}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \frac{dt' f_{rest}(\mathbf{r}, t')}{(1 + R_c(t-t'))^\gamma}. \quad (4.6)$$

Отсюда можно легко получить связь интегральных характеристик возмущения среды и его переносчиков (или, соответственно, стоящих и бегущих мигрантов):

$$\begin{aligned}
 N_{mov}(t) &= \int_0^t \frac{dt' N_{rest}(t')}{(1 + R_c(t - t'))^\gamma}, \\
 M_{mov}(t) &= \int_0^t \frac{dt' M_{rest}(t')}{(1 + R_c(t - t'))^\gamma}.
 \end{aligned}
 \tag{4.7}$$

Основной вклад в интегралы (4.6), (4.7) дает область моментов времени t' вблизи t . При $t \gg 1$ выражения (4.7) можно рассчитать в явном виде. Количество переносчиков (бегущих мигрантов) при этом описывается законом

$$N_{mov}(t) = \begin{cases} 1 - \frac{\sin(\pi\gamma) R_c^\gamma}{\pi t^{1-\gamma}}, & 0 < \gamma < 1, \\ 1 - \frac{1}{1 + \ln(tR_c)/R_c}, & \gamma = 1, \\ 1 - \frac{\gamma - 1}{1/R_c + \gamma - 1} \left(1 + \frac{1}{1/R_c + \gamma - 1} \frac{1}{R_c^\gamma t^{\gamma-1}} \right), & 1 < \gamma < 2. \end{cases}
 \tag{4.8}$$

Напомним, что $N_{rest}(0) = 1$ (это следует из определения источника в исходном уравнении для функции Грина (2.1)), отсюда $N_{mov}(t)$, как и $N_{rest}(t)$, см. (3.1), является отношением числа переносчиков к начальному числу возбужденных частиц среды или долей бегущих мигрантов в полном числе мигрантов $N_{rest}(0)$. Второй момент функции Грина записывается как

$$M_{mov}(t) = \begin{cases} \frac{\gamma(1-\gamma)}{2} (R_c t)^2, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{t^2}{2} \frac{\ln(tR_c) - 3/2}{(1 + \ln(tR_c)/R_c)^2}, & \gamma = 1, \\ \frac{\gamma(\gamma-1)}{(2-\gamma)(3-\gamma)} \frac{(R_c t)^{3-\gamma}}{(1 + R_c(\gamma-1))^2}, & 1 < \gamma < 2. \end{cases}
 \tag{4.9}$$

Согласно определению закона фронта для возмущения среды (стоящих мигрантов) (3.1) уместно ввести аналогичное определение для переносчиков (бегущих мигрантов):

$$\begin{aligned}
 r_{mov}(t) &= \sqrt{\frac{M_{mov}(t)}{N_{mov}(t)}}, \\
 M_{mov}(t) &= \int r^2 f_{mov}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \\
 N_{mov}(t) &= \int f_{mov}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}.
 \end{aligned}
 \tag{4.10}$$

Тогда для безразмерного времени $t \gg 1$ получим аналитическое выражение для фронта (4.10):

$$r_{mov}(t) = \begin{cases} tR_c \sqrt{\gamma(1-\gamma)/2}, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{tR_c}{\sqrt{2(R_c + \ln(tR_c))}}, & \gamma = 1, \\ (tR_c)^{(3-\gamma)/2} \left[\frac{\gamma(\gamma-1)}{(2-\gamma)(3-\gamma)} \frac{1}{1 + R_c(\gamma-1)} \right]^{1/2}, & 1 < \gamma < 2. \end{cases}
 \tag{4.11}$$

Данную формулу так же, как и (3.12), необходимо интерполировать в окрестности точки $\gamma = 1$:

$$\begin{aligned}
 r_{mov}(t \geq t_{min}) &= \\
 &= \begin{cases} tR_c \sqrt{\gamma(1-\gamma)/2}, & 0 < \gamma \leq 1 - \epsilon_{mov}^{(L)}(t, R_c), \\ \frac{tR_c}{\sqrt{2(R_c + \ln(tR_c))}}, & 1 - \epsilon_{mov}^{(L)}(t, R_c) < \gamma \leq 1 + \epsilon_{mov}^{(U)}(t, R_c), \\ (tR_c)^{(3-\gamma)/2} \left[\frac{\gamma(\gamma-1)}{(2-\gamma)(3-\gamma)} \frac{1}{1 + R_c(\gamma-1)} \right]^{1/2}, & 1 + \epsilon_{mov}^{(U)}(t, R_c) < \gamma < 2, \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{4.12}$$

где $\ln(t_{min} R_c) = 4 - R_c$. Здесь верхние индексы («L» и «U») имеют тот же смысл, что и в (3.13),

$$\epsilon_{mov}^{(L)}(t, R_c) = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4}{R_c + \ln(t R_c)}} \right), \quad (4.13)$$

а $\epsilon_{mov}^{(U)}(t, R_c) = \epsilon_{rest}^{(U)}(t, R_c)$ и задается уравнением (3.15), как и в случае стоящих переносчиков. Непрерывная спивка в этой области оказывается, как можно было ожидать, такой же, как и для стоящих мигрантов: она возможна только при больших R_c . В этом случае имеем $t_{min} \rightarrow 0$, что дает

$$\epsilon_{mov}^{(U)}(t, R_c) \approx \epsilon_{mov}^{(L)}(t, R_c) \approx \epsilon(t, R_c),$$

где $\epsilon(t, R_c)$ определено в (3.16) и является универсальной величиной для фронта возмущения среды и фронта переносчиков.

Результаты сравнения аналитического описания динамических характеристик с результатами численных расчетов, полученных путем интегрирования (3.1) общего решения кинетического уравнения (2.1) и путем моделирования траекторий методом Монте-Карло, представлены ниже, в разд. 6.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОГУЛОК ЛЕВИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Уравнению (2.1) соответствует следующий тип траекторий мигрантов. В заданной точке (возьмем ее за начало координат) один мигрант находится (стоит) в течение времени t . Время стоянки мигранта (которое в литературе называют «временем ожидания», «waiting time») является случайной величиной и описывается распределением $U(t)$:

$$U(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (5.1)$$

$$\int_0^{\infty} U(t) dt = 1,$$

где τ — среднее время нахождения в точке остановки (в задаче переноса резонансного излучения этому времени соответствует радиационное время жизни возбужденного атома или иона). В указанный момент времени мигрант начинает двигаться с равной вероятностью в любом направлении (т. е. однородно по всем направлениям в координатном пространстве) по прямой траектории с постоянной скоростью c . Вдоль этой прямой мигрант проходит путь, длина которого является случайной величиной, определяемой распределением по длине свободного пробега

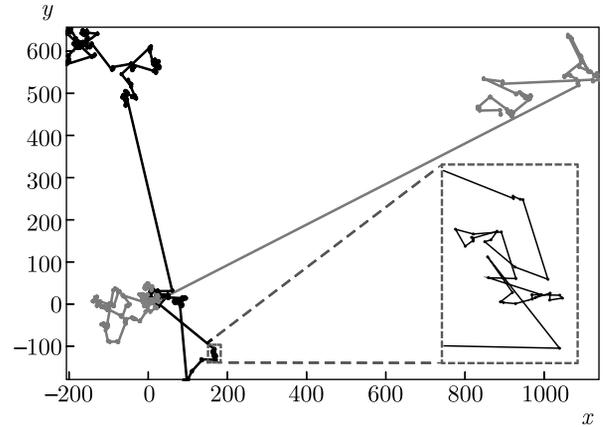


Рис. 1. Типичные траектории мигрантов (красная и черная кривые), стоявших в начале координат в нулевой момент времени, для $\gamma = 1, \kappa_0 = 1, \tau = 1, c = 10$ за период времени 1000 в зависимости от безразмерных координат (т. е. умноженных на κ_0). Моменты остановки показаны точками. Крупно показан фрагмент, соответствующий синему пунктирному прямоугольнику

$W_{step}(\rho)$ в (2.5). В точке остановки мигрант находится время t , определяемое распределением (5.1), и далее снова движется равномерно по всем направлениям, уходя на расстояние, которое определяется распределением $W_{step}(\rho)$ в (2.5). Такой процесс повторяется снова и снова.

На рис. 1 приведены в качестве примера в двумерном пространстве (x, y) две искусственные траектории указанного типа, полученные для $\gamma = 1, \kappa_0 = 1, \tau = 1, c = 10$ (что соответствует в безразмерных переменных случаю $R_c = 10$) с использованием датчика псевдослучайных чисел. Видна характерная структура траекторий с длинными пробегами (полетами Леви), которые соединяют участки с преимущественно многократными короткими пробегами, формирующими блуждание, близкое к броуновскому (см. вставку на рис. 1).

Другое представление типичных траекторий мигрантов приведено на рис. 2: зависимость безразмерного расстояния $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ относительно начала координат от времени t (для $\gamma = 1, \kappa_0 = 1, \tau = 1, c = 10$). Приведенные семь траекторий иллюстрируют факт существенно неравномерного заполнения пространства: в соответствии с описанным законом поведения основная часть мигрантов не уходит далеко от начала координат.

Такое неравномерное заполнение пространства приводит к трудностям при использовании метода Монте-Карло для оценки функции $f(r, t)$ и ее моментов: чтобы удовлетворительно заполнить про-

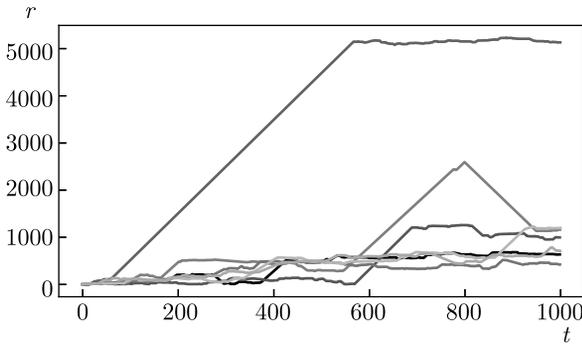


Рис. 2. Типичные траектории мигрантов, стоявших в начале координат в нулевой момент времени, зависимость безразмерного расстояния r относительно начала координат от времени t для $\gamma = 1, \kappa_0 = 1, \tau = 1, c = 10$

странство $r \times t$ мигрантами требуется сгенерировать массив данных, содержащий от 10 до 500 тысяч траекторий. Но даже в этом случае для удовлетворительного заполнения пространства задачи, при котором можно найти искомую функцию Грина и ее моменты, во избежание значительного роста времени численного моделирования требуется использовать процедуру оптимизации. Здесь мы используем метод, которой разработан в [34, 35]. Опишем получение оценки функции $f(r, t)$ (и ее моментов, входящих в (3.1)) для мигрантов, находящихся в покое (оценка для движущихся получается аналогично). Для этого рассмотрим функцию распределения, связанную с функцией $f(r, t)$ соотношением

$$F(r, t) = 2\pi \int_0^r f(r', t) r' dr'. \quad (5.2)$$

Преобразуем сгенерированный массив траекторий в набор данных, содержащий значения функции распределения:

$$\Omega : \{F_{i,j}, r_i, t_j\}, \quad i \in R_j, \\ R = 1 \dots r^{max}, \quad j \in 1 \dots t^{max}, \quad (5.3)$$

где $F_{i,j}$ — количество частиц, находящихся в покое в момент времени t_j и отстоящих от начала координат (точки старта) не более, чем на $r_i: r \leq r_i$.

Задача состоит в поиске функций $F(r, t)$ и $f(r, t)$, соответствующих набору данных Ω . Очевидно, что такая задача является некорректной. Для ее регуляризации рассмотрим критерий

$$Q(F, f, \Omega, \alpha) = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{j \in T} \sum_{i \in R} (F_{i,j} - F(r_i, t_j))^2 + \\ + \int_0^{t^{max}} dt' \int_0^{r^{max}} dr' \left[\alpha_1^2 \left(\frac{d^2 f}{dr^2} \right)^2 + \right. \\ \left. + \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{d^2 f}{dr dt} \right)^2 + \alpha_2^2 \left(\frac{d^2 f}{dt^2} \right)^2 \right] \rightarrow \min_{F, f}, \quad (5.4)$$

где первое слагаемое представляет собой меру близости решения к набору данных Ω , а второе — регуляризующая добавка, или мера кривизны функции $f(r, t)$, или мера сложности рассматриваемой математической модели (5.1). Мы не приводим технические подробности поиска решения (5.2)–(5.4), так как подробное описание используемой для этого технологии сбалансированной идентификации можно найти в [34, 35].

6. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ДЛЯ ЧИСЛА СТОЯЩИХ И БЕГУЩИХ МИГРАНТОВ ДЛЯ ПРОГУЛОК ЛЕВИ

На рис. 3–5 представлено сравнение полного количества стоящих мигрантов N в (3.1) (возбужденных частиц среды) для $\gamma = 0.5$ (рис. 3), $\gamma = 1$ (рис. 4) и $\gamma = 1.5$ (рис. 5).

7. ЕДИНАЯ ФОРМУЛА ФРОНТА ВОЗМУЩЕНИЯ СРЕДЫ ДЛЯ ПРОГУЛОК ЛЕВИ И ПОЛЕТОВ ЛЕВИ. СРАВНЕНИЕ РАЗНЫХ ПОДХОДОВ

Определение фронта возмущения среды (3.1) отличается от ранее рассмотренных нами в [15–17] и [1, 2, 18]. Так, в работах [15–17] для случая полетов Леви (Lévy flight), чему соответствует условие $R_c = \infty$, дефиниция фронта $r_f(t)$ (здесь индекс « f » происходит от англ. flight) имела следующий вид (в размерных единицах):

$$\left(\frac{t}{\tau} + 1 \right) T(r_f(t)) = 1, \quad (7.1)$$

где $T(\rho)$ определено в (2.4). Решение этого уравнения для модельного ядра (2.5) имеет вид [15] (в безразмерных координатах и времени)

$$r_f(t, \gamma) = (t + 1)^{1/\gamma} - 1 \approx t^{1/\gamma}. \quad (7.2)$$

Массовые численные расчеты точного решения (2.1) в одномерном случае с приближенным автомодельным решением [15] при условиях

$$t \gg \tau, \quad \kappa_0 r \gg 1 \quad (7.3)$$

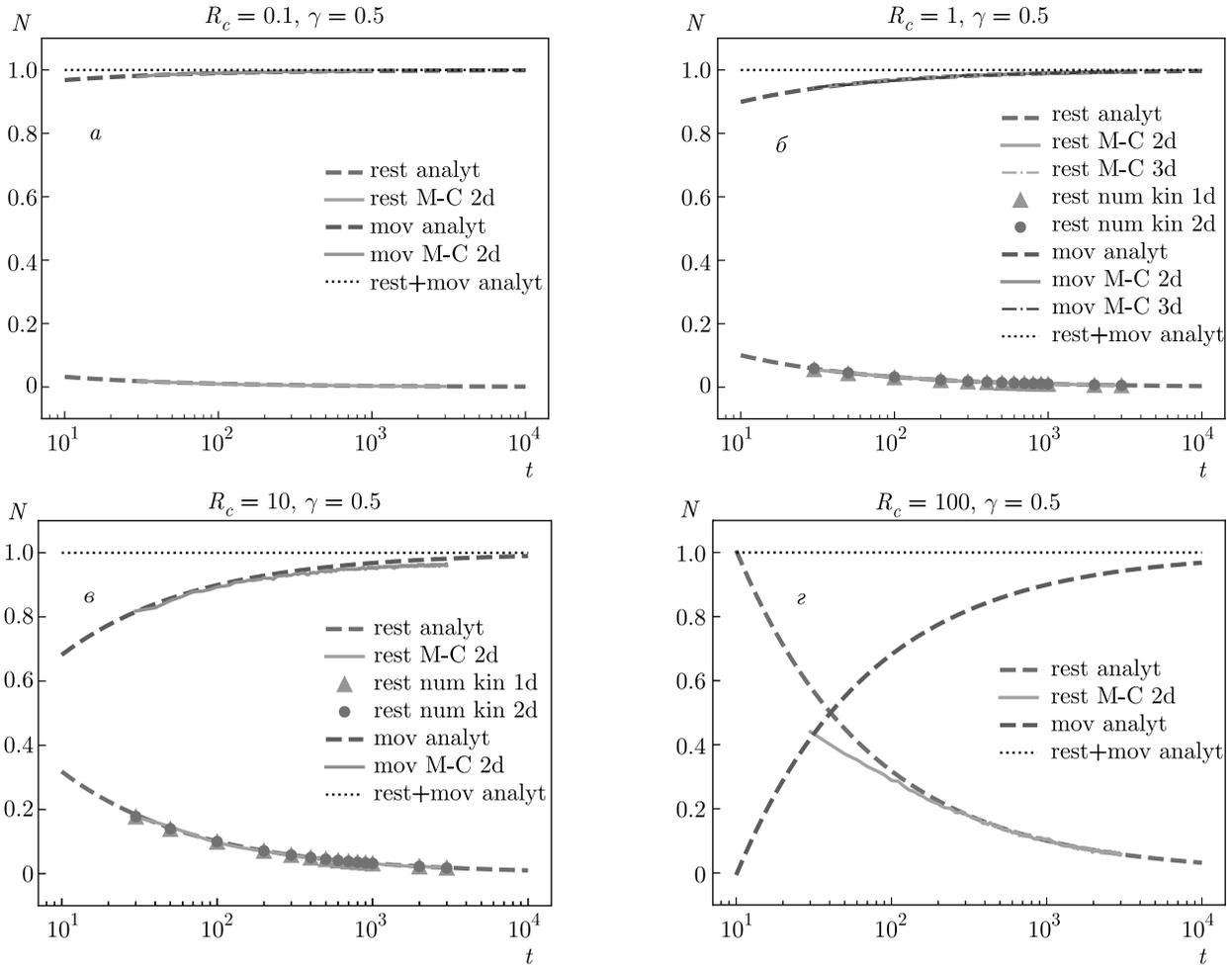


Рис. 3. Зависимости полного числа стоящих мигрантов N_{rest} в (3.1) от безразмерного времени: аналитический расчет (3.11) (синие штриховые кривые); расчет методом Монте-Карло (оранжевые (2d) и зеленая штрихпунктирная (3d) кривые); расчет для точной функции Грина (4) в [1] (зеленые треугольники (1d), красные круги (2d)). Зависимости полного числа бегущих мигрантов N_{mov} в (4.10) от времени: аналитический расчет (4.8) (коричневые штриховые кривые); расчет методом Монте-Карло (сиреневые (2d) и темно-синяя штрихпунктирная (3d) кривые). Сумма аналитических результатов для числа стоящих и бегущих мигрантов (черные пунктирные кривые). Сравнение представлено для $\gamma = 0.5$ и значений параметра $R_c = 0.1$ (а), 1 (б), 10 (в), 100 (г)

показали в [17] высокую точность этого автомодельного решения в широком диапазоне значений r , t и γ . В работе [18] для улучшения точности автомодельных решений было предложено другое определение фронта. Это оказалось необходимым в том случае, когда ядро W в (2.1) имеет более сложный вид, а именно, является сверткой степенных ядер с разными показателями степени γ . Конкретно, в [18] это касалось задачи переноса резонансного излучения в случае фойгтовского контура спектральной линии, который является сверткой доплеровского ($\gamma \approx 1$) и лоренцевского ($\gamma = 0.5$) контуров линии. Более точная версия формулы фронта для полетов Леви имеет вид [18]

$$f_{exact}(0, t) = \frac{t}{\tau} W(r_f(t)), \tag{7.4}$$

где $f_{exact}(r, t)$ — точное решение уравнения (2.1).

Для случая учета конечной скорости (прогулки Леви) в [1] предложено обобщение дефиниции фронта (7.4) с учетом эффекта запаздывания вследствие конечной скорости переносчиков, имеющее вид (в безразмерных единицах)

$$\left(t - \frac{r_w}{R_c}\right) W(r_w) \theta\left(t - \frac{r_w}{R_c}\right) = f_{exact}(0, t, R_c), \tag{7.5}$$

где $r_w(t, R_c, \gamma)$ обозначает фронт плотности возбуждения среды (или плотности стоящих мигрантов) для прогулок Леви (индекс «w» происходит от англ.

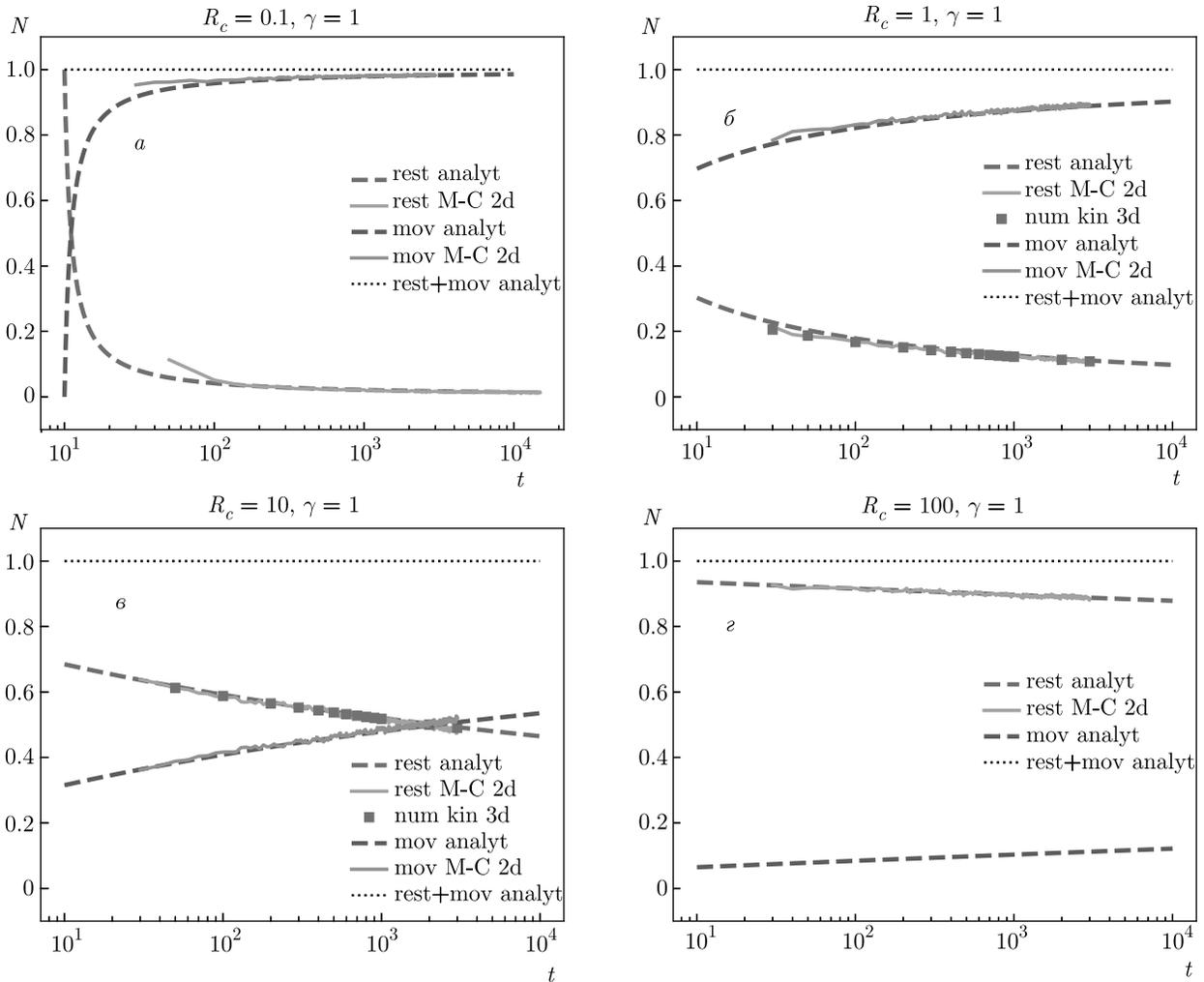


Рис. 4. То же, что на рис. 3, но для $\gamma = 1$

walks [4, 5]). Нахождение фронта (7.5) необходимо для построения приближенного автомодельного решения, точность которого для модельного ядра при разных значениях параметра γ проанализирована в одномерном (1d) случае в [1], а в 2d- и 3d-случаях — в [2].

Выше получено аналитическое выражение для $r_{rest}(t, R_c, \gamma)$ (3.13) для фронта возмущения среды от точечного мгновенного источника при условии $t \gg \tau$ (в размерных единицах). Напомним, что для $0 < \gamma < 1$ и $1 < \gamma < 2$ функция (3.12) имеет разные аналитические представления, причем в них при $\gamma = 1$ имеется особенность, которую мы удалили в (3.13) путем интерполяции. Предварительное сравнение (3.13) со значениями фронта, рассчитанными в [1,2], показало, что различие имеется, но оно заведомо в пределах порядка величины, что для по-

строения единого скейлинга в широком диапазоне параметров вполне приемлемо.

Для $0 < \gamma < 1$ можно показать, что выражения (7.2) и (3.13) являются пределами более общей формулы, интерполирующей случаи предельно больших и умеренно больших значений времени. Этим двум пределам соответствуют предельные значения относительного числа возмущений среды (т.е. возбужденных атомов или ионов, или стоящих мигрантов) во всем объеме от точечного мгновенного источника (здесь относительность означает, например, долю возбужденных атомов по отношению к их числу в начальный момент). Эта интегральная по объему характеристика описывается формулой (3.11) (см. также (3.12) в [2]):

$$N(t, R_c, \gamma) \equiv \int f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \sim \frac{R_c^\gamma}{t^{1-\gamma}} \leq 1. \quad (7.6)$$

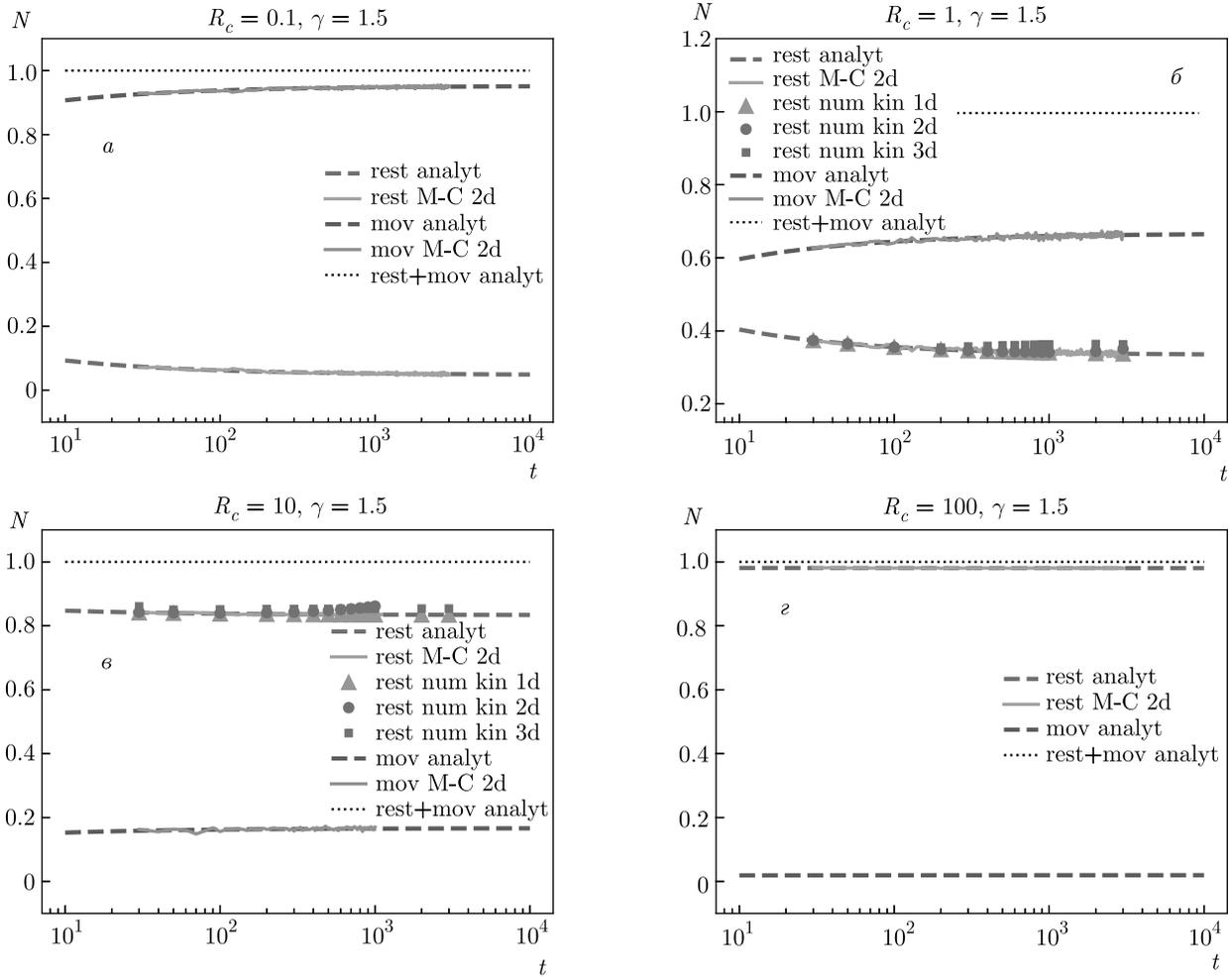


Рис. 5. То же, что на рис. 3, 4, но для $\gamma = 1.5$

Сначала, при $N \sim 1$, имеем перенос в режиме полетов Леви (например, в виде (7.2)), а при $N \ll 1$ и накоплении эффекта запаздывания имеем выход на режим прогулок Леви (например, в виде (3.13)). Простейшая интерполяция имеет вид (с точностью до коэффициентов порядка единицы, зависящих от γ)

$$r_{f+w}^{rest}(t, R_c, \gamma) \sim \frac{t^{1/\gamma}}{1 + \sim 1/N^{1/\gamma}}, \quad 0 < \gamma < 1. \quad (7.7)$$

Например, при $\gamma = 2/3$ имеем следующую формулу, обеспечивающую выход на оба известных предела:

$$r_{f+w}^{rest}(t, R_c, 2/3) = \frac{t^{3/2}}{1 + \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{t}}{R_c}}. \quad (7.8)$$

Для лучшей аппроксимации результатов численных расчетов можно оптимизировать вид функции, обес-

печивающей должные пределы (7.2) и (3.13). Однако для интересующего нас построения формулы с точностью до порядка величины и проверки этой точности путем сравнения с точными численными расчетами по формулам (3.1) и (7.5) вполне можно ограничиться (7.7) или близкой формулой.

Можно ожидать, что при $1 < \gamma < 2$ формула, аналогичная (7.7), будет применима, поскольку в этом диапазоне и $N \sim 1$ (если только R_c не очень мало, но мы исключаем этот случай из нашего рассмотрения по причине неприменимости концепции «потери памяти» и, соответственно, самого феномена полетов Леви при малом среднем времени ожидания при остановке). Легко видеть, что при $1 < \gamma < 2$ в законах фронта (7.2) и (3.13) показатели степени у параметра t численно весьма близки (для $\gamma = 3/2$ разность показателей составляет величину $1/12$). Поэтому можно представить закон фронта

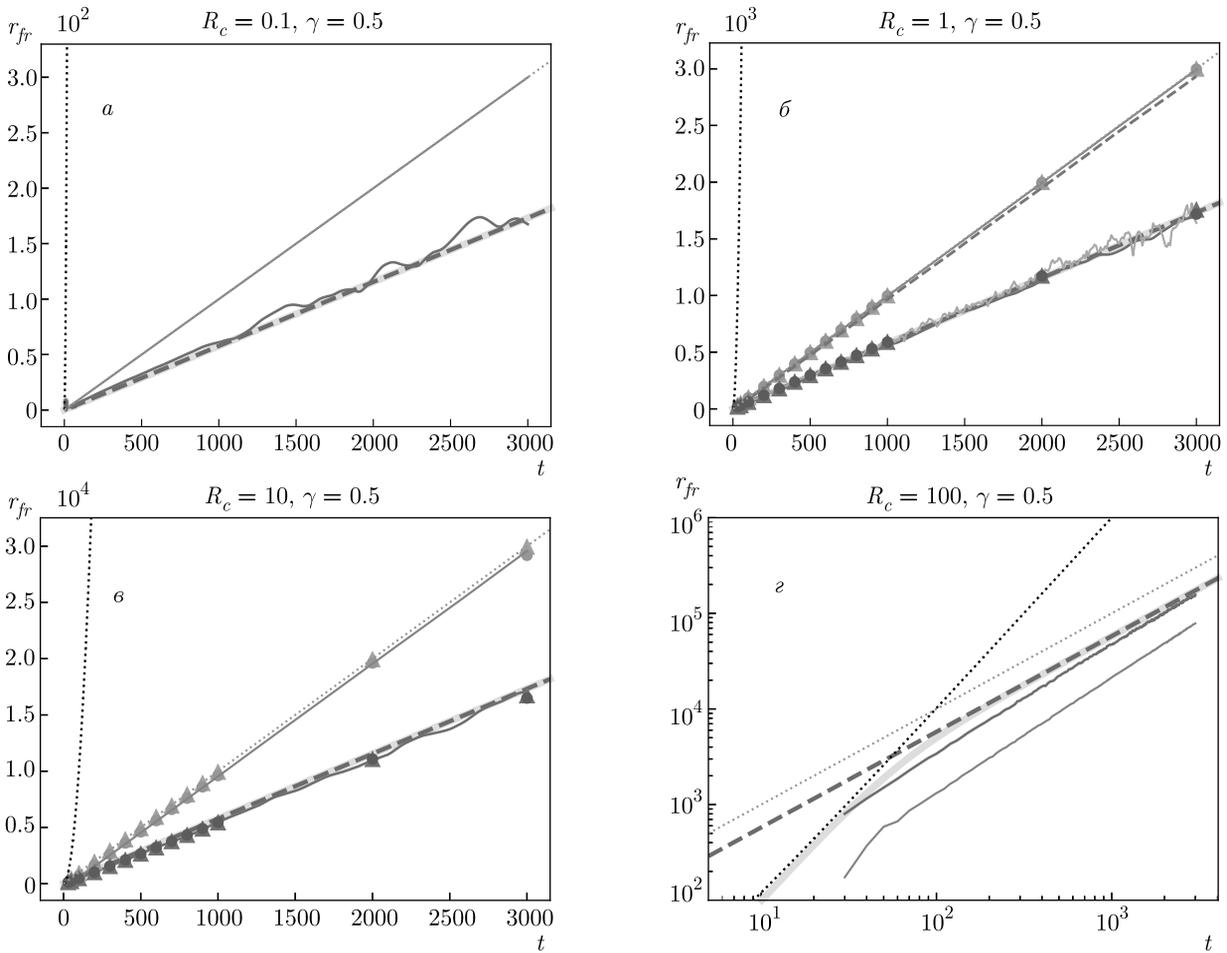


Рис. 6. Аналитический фронт (3.13) для прогулок Леви, полученный расчетом формулы (3.1) для общего аналитического решения кинетического уравнения (2.1) (сиреневая штриховая кривая); расчет фронта (3.1) для прогулок Леви, использующий результаты расчета статистики траекторий методом Монте-Карло (разд. 5) (темно-синяя (2d) и голубая (3d) кривые); численный расчет фронта (3.1) для прогулок Леви, использующий численный расчет общего аналитического решения кинетического уравнения (2.1) (фиолетовые треугольники (1d), коричневые круги (2d) и розовые квадраты (3d)); фронт (7.5) для прогулок Леви, использующий численный расчет общего аналитического решения кинетического уравнения (2.1) (оранжевые треугольники (1d), зеленые круги (2d) и красные квадраты (3d)); фронт (7.5) для прогулок Леви, использующий результаты расчета статистики траекторий методом Монте-Карло (красные (2d) и светло-коричневая штриховая (3d) кривые); фронт (7.2) для полетов Леви (черные пунктирные кривые); аналитическое представление (7.10) обобщенного фронта (желтая кривая); баллистический фронт (розовые пунктирные кривые). Сравнение представлено для $\gamma = 0.5$ и значений параметра $R_c = 0.1$ (а), 1 (б), 10 (в), 100 (г)

единой формулой:

$$r_{f+w}^{rest}(t, R_c, \gamma) = \frac{r_f(t, \gamma)}{1 + \frac{r_f(t, \gamma)}{r_w(t, R_c, \gamma)}} = \frac{r_f(t, \gamma)}{1 + \frac{B_N(R_c, \gamma)}{N(t, R_c, \gamma)^{1/\gamma}}}, \quad 0 < \gamma < 2, \quad (7.9)$$

где функция $B_N(R_c, \gamma)$ соответствует известному пределу (3.13) с учетом (3.11). Ниже мы примем сле-

дующую простую формулу:

$$r_{f+w}^{rest}(t, R_c, \gamma) = \frac{1}{\sqrt{1/r_w^2(t, R_c, \gamma) + 1/r_f^2(t, \gamma)}}, \quad 0 \leq \gamma \leq 1.5, \quad (7.10)$$

где

$$r_w(t, R_c, \gamma) \equiv r_{rest}(t, R_c, \gamma),$$

задается формулой (3.13).

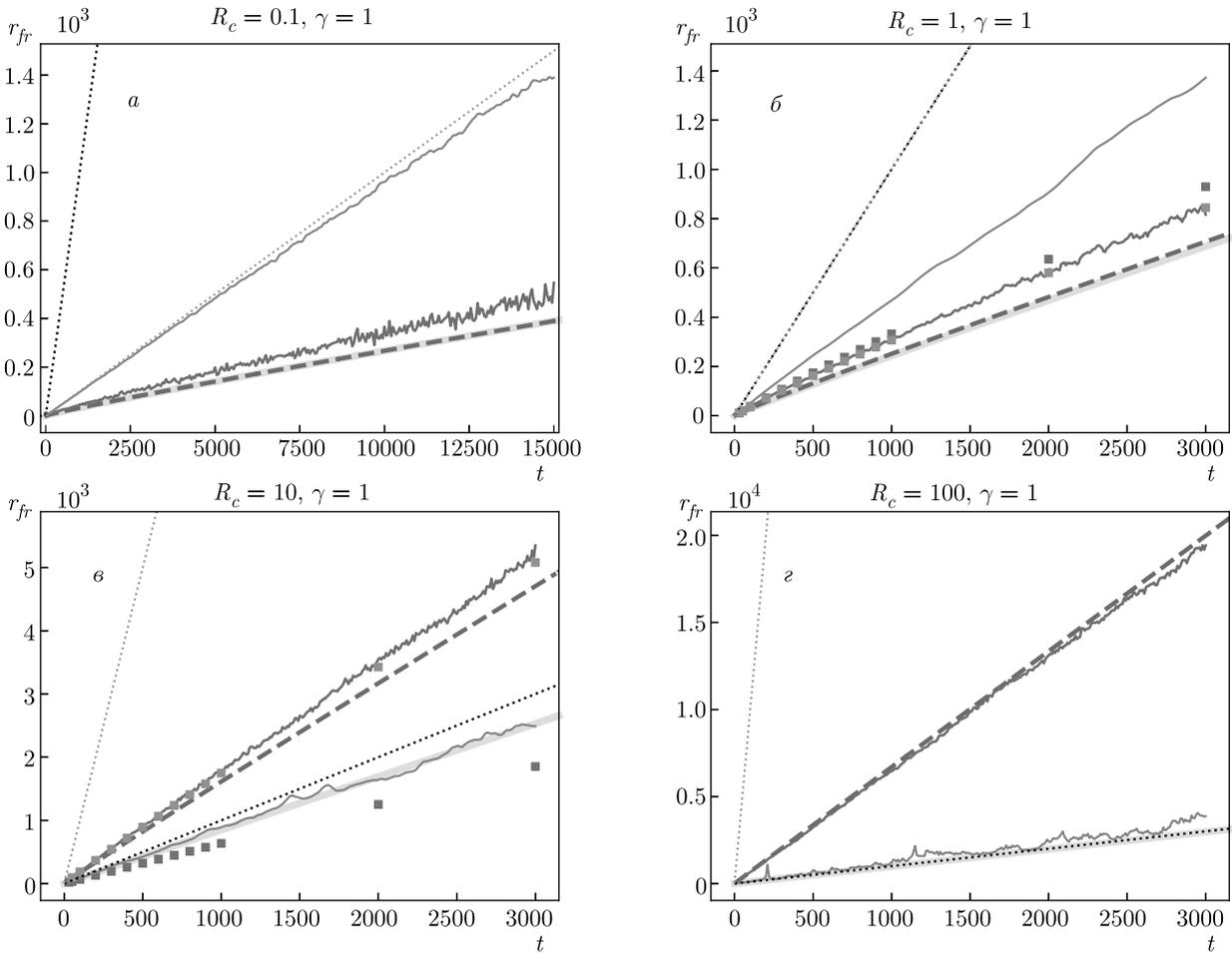


Рис. 7. То же, что на рис. 6, но для $\gamma = 1$

Ниже представлено сравнение результатов различных подходов к оценке фронта распространения возбуждения среды (или фронта плотности стоящих мигрантов), включая

- 1) аналитический расчет фронта (3.13) для прогулок Леви, полученный расчетом формулы (3.1) для общего аналитического решения кинетического уравнения (2.1);
- 2) расчет фронта (3.1) для прогулок Леви, использующий результаты расчета статистики траекторий методом Монте-Карло (разд. 5);
- 3) численный расчет фронта (3.1) для прогулок Леви, использующий численный расчет общего аналитического решения кинетического уравнения (2.1);
- 4) фронт (7.5) для прогулок Леви, использующий численный расчет общего аналитического решения кинетического уравнения (2.1);

5) фронт (7.5) для прогулок Леви, использующий результаты расчета статистики траекторий методом Монте-Карло;

6) фронт (7.2) для полетов Леви (бесконечная скорость переносчиков);

7) аналитическое представление (7.10) обобщенного фронта;

8) баллистический фронт tR_c .

Сравнения представлены для $\gamma = 0.5, 1, 1.5$ и значений параметра $R_c = 0.1, 1, 10, 100$ (рис. 6–8). Для проверки интерполяции вблизи $\gamma = 1$ в формуле (3.13) также представлены сравнения для $R_c = 10$ и $\gamma = 0.9, 0.99, 1.01, 1.1$ (рис. 9).

Хотя все сравниваемые результаты для фронта на рис. 6 довольно близки в рамках того, что сама дефиниция фронта является условной, имеющей смысл оценки (см. кривые для $\gamma = 0.5$ на рис. 1 в [2] для $R_c = 10$), можно сделать вывод о том, что на рис. 6г виден переход между двумя режимами пере-

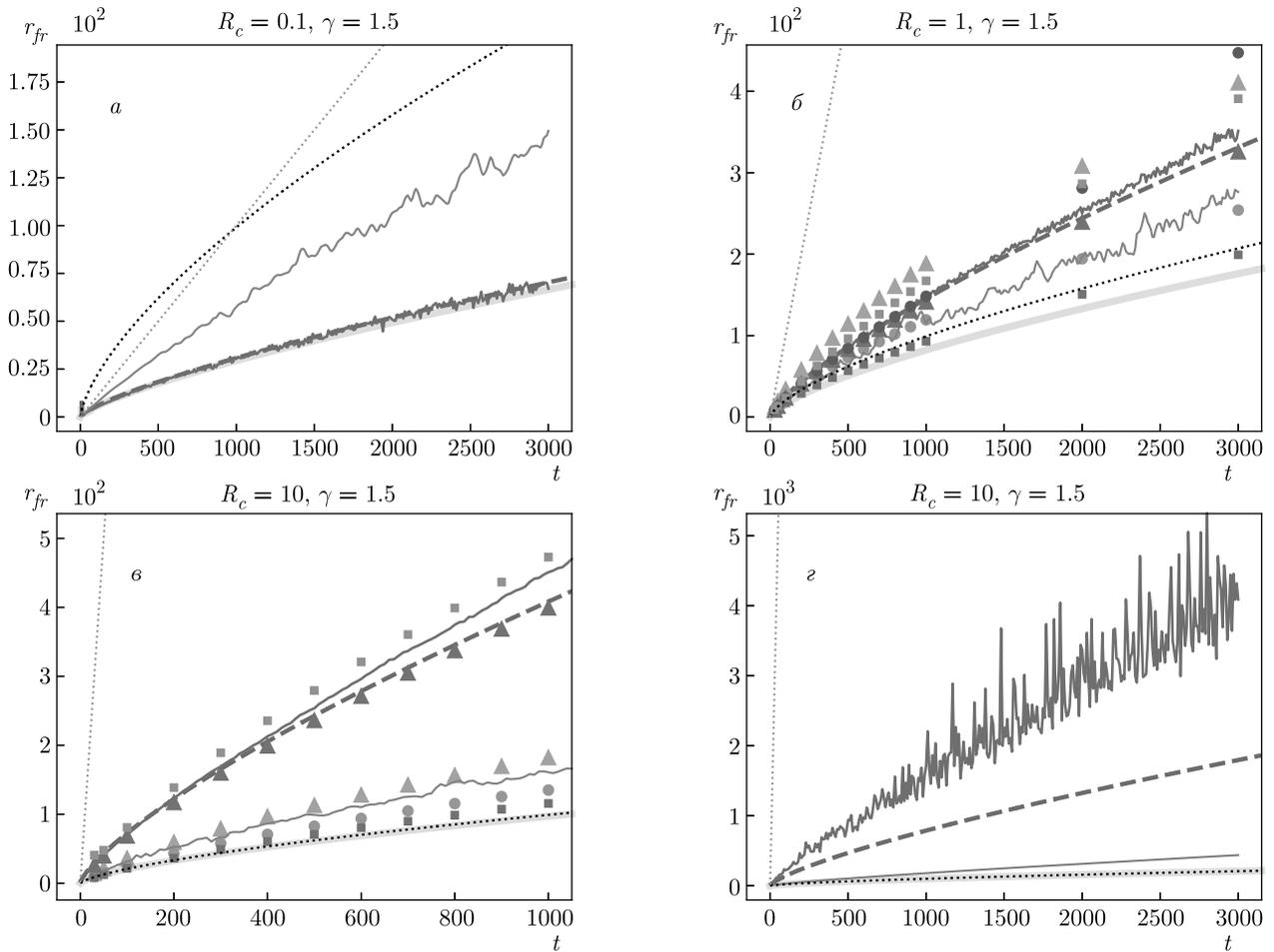


Рис. 8. То же, что на рис. 6, 7, но для $\gamma = 1.5$

носа: полетами и прогулками Леви. При относительно малых временах (но при безразмерном времени $t \gg 1$) доминируют полеты Леви (черный пунктир), а с увеличением времени доминирует режим прогулок Леви и нужен учет эффекта запаздывания даже при весьма больших значениях параметра R_c : в момент перехода виден излом на кривой для динамики фронта при его наиболее точном представлении, а именно, на красной кривой, рассчитанной по (7.5) с использованием расчетов методом Монте-Карло значений точной функции Грина в начале координат.

Рисунок 7 показывает, что с уменьшением нелокальности (т. е. при переходе к большим значениям параметра γ по сравнению с рис. 6) и увеличением R_c дефиниция (3.1) при $\gamma = 1$ оказывается менее адекватной, поскольку второй момент оказывается достаточно сильно зависим от значений функции Грина при таких больших значениях расстоя-

ния, где довольно мало возбужденных атомов или стоящих мигрантов (рис. 7з).

На рис. 8 тенденция потери адекватности дефиниции фронта (3.1) с ростом γ и R_c усиливается: на рис. 8г можно видеть достаточно большое ($\sim 100\%$) различие результатов аналитического расчета (3.1) и расчета с использованием численного моделирования методом Монте-Карло. Хотя для задач нелокального переноса это все еще вполне высокая точность, видна тенденция потери адекватности дефиниции фронта (3.1).

В связи с уже обсужденным на рис. 6 переходом между двумя режимами переноса — полетами Леви и прогулками Леви — уместно получить его количественное описание. Определим момент такого перехода как момент времени $t^*(R_c, \gamma)$, при котором фронт r_w для прогулок Леви равен фронту r_f для полетов Леви:

$$r_w(t^*, R_c, \gamma) = r_f(t^*, \gamma). \quad (7.11)$$

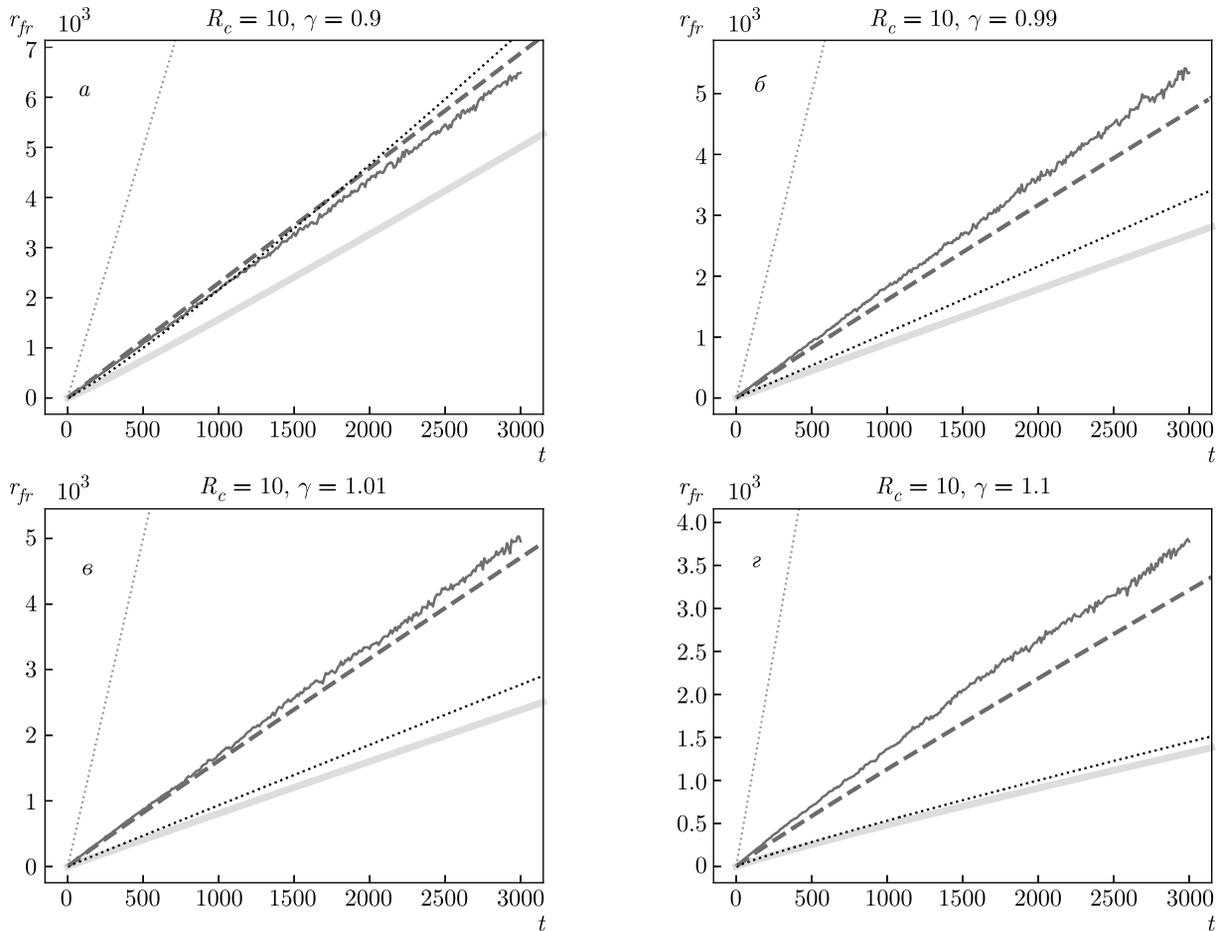


Рис. 9. То же, что на рис. 6–8, но для $R_c = 1$, $\gamma = 0.9$ (а), 0.99 (б), 1.01 (в), 1.1 (г)

Тогда для $t^*(R_c, \gamma)$ можно получить следующее выражение:

$$t^*(R_c, \gamma) = \begin{cases} \left[R_c \sqrt{\frac{1-\gamma}{1+\gamma}} \right]^{\gamma/(1-\gamma)}, & 0 < \gamma < 1, \\ \frac{\exp(R_c^2/2 - R_c)}{R_c}, & \gamma = 1, \\ \left[\frac{(2-\gamma)(3-\gamma)}{\gamma(\gamma-1)} \times \frac{1+R_c(\gamma-1)}{R_c^{3-\gamma}} \right]^{1/(3-\gamma-2/\gamma)}, & 1 < \gamma < 2. \end{cases} \quad (7.12)$$

Результаты расчета (7.12) для трех значений γ приведены на рис. 10.

Прежде всего отметим, что формула (7.12) хорошо описывает переход между режимами переноса

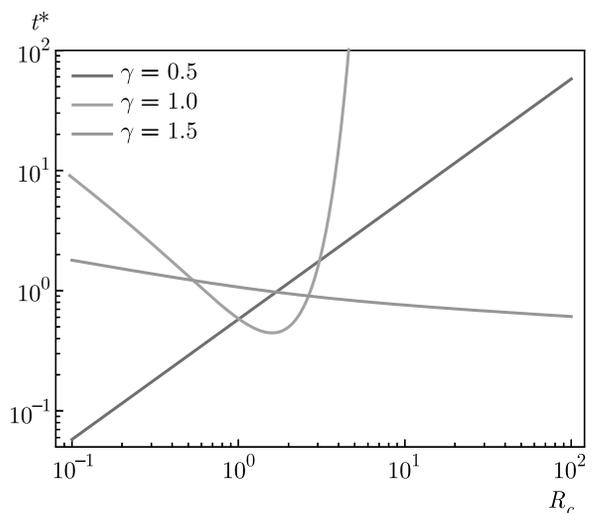


Рис. 10. Зависимости характерного времени (7.12) от параметра R_c при $\gamma = 0.5, 1.0, 1.5$

лишь при $0 < \gamma < 1$ (см. рис. 6з), когда степень нелокальности (супердиффузионности) процесса переноса особенно высока. При этом всегда имеем смену режима переноса полетами Леви на режим переноса прогулками Леви, поэтому для моментов времени $t > t^*$ следует учитывать эффекты запаздывания при описании такого процесса.

Важно отметить, что область $0 < \gamma < 1$ охватывает, в частности, перенос резонансного излучения при лоренцевском контуре спектральных линий атомов и ионов в газах и плазме. Отмеченная выше необходимость учета запаздывания касается задач нестационарного переноса излучения при сильно локализованном (во времени и в координатном пространстве) источнике возбуждения. В случае слабой локализации такого источника основной вклад в плотность возбужденных атомов будет вносит область, не столь удаленная от наблюдаемой точки, и потому учет запаздывания, вызванного конечной скоростью света, будет мал, что вполне оправдывает пренебрежение этим эффектом во многих практических задачах с слабой локализацией источника возбуждения атомов или ионов. Однако для задач с сильной локализацией, прежде всего во вспышечных явлениях в астрофизической плазме, полученные нами результаты весьма актуальны.

Поскольку для задач переноса интересны большие безразмерные времена, для случая $\gamma = 1$ актуальна только часть кривой, уходящая резко вверх. Видно, что в этом случае переход от полетов к прогулкам происходит при столь больших (экспоненциально больших) значениях времени, что, с учетом сказанного выше о связи характерных времен и характерных расстояний, вклад запаздывания актуален только при небольших значениях R_c .

С увеличением γ точность оценки фронта по (3.1), как было отмечено выше, уменьшается, но тем не менее результат использования аналитической формулы фронта при $1 < \gamma < 2$ для оценки области актуальности прогулок Леви согласуется с ожиданием того, что с ростом γ и R_c вклад эффекта запаздывания из-за конечной фиксированной скорости переносчиков возмущения среды или мигрантов (и, соответственно, вклад переноса в режиме прогулок Леви) уменьшается.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в работе результаты по ряду аспектов завершают цикл работ [1–3, 15–18], нацеленных на создание нового метода в теории нестационарного нелокального (так называемого супердиффузионного, выходящего за рамки стандартной, броуновской диффузии) переноса. Этот метод уместно назвать методом интерполируемой автоматичности. В основе метода лежит алгоритм получения приближенного автоматического решения для функции Грина широкого класса интегродифференциальных уравнений нестационарного переноса, охватывающего явления переноса с доминирующим вкладом переносчиков с большой длиной свободного пробега: «полетов Леви» [20–23], включая задачу нестационарного переноса резонансного излучения в модели Бибермана – Холстейна [8–14, 28–33], или, в случае учета конечной скорости переносчиков, «прогулок Леви» [4–7], точнее, «прогулок Леви с остановками» (см. рис. 1 в обзоре [5]), что охватывает такие задачи как перенос резонансного излучения в астрофизических газах и плазме, биологическую миграцию, перенос энергии волнами в плазме. В основе метода лежит интерполяция законов автоматичности для асимптотик далеко впереди и далеко позади эффективного фронта волны возмущения, требующая прямого решения задачи (численного расчета функции Грина) только в относительно небольшой области переменных задачи (вблизи фронта) (см. обсуждение вопроса об экономии расчетного времени в работе [17]).

В развитие ранее полученных общих и приближенных автоматических решений для функции Грина широкого класса интегродифференциальных уравнений одномерного [1, 3], двумерного и трехмерного [2] (по пространственным координатам) нестационарного супердиффузионного переноса возмущения однородной среды для конечной фиксированной скорости переносчиков в настоящей работе получено простое аналитическое описание распространения фронта возмущения среды при нестационарном супердиффузионном (нелокальном) переносе в режиме «прогулок Леви с остановками». Для используемой нами дефиниции фронта (3.1) результат, как показало интегрирование точного решения кинетического уравнения для функции Грина, не зависит от мерности координатного пространства. Сравнение результатов для фронта (3.1) с другим, более точным методом определения фронта из [1–3, 18] и проведенными в этой работе численными расчетами статистики траекторий методом Монте-Карло показало применимость полученных аналитических выражений в широком диапазоне параметров задачи. Для прогулок Леви найдена связь интегральных характеристик стоящих и бегущих мигрантов, позволявшая получить простое аналитическое описание

ционарного нелокального (так называемого супердиффузионного, выходящего за рамки стандартной, броуновской диффузии) переноса. Этот метод уместно назвать методом интерполируемой автоматичности. В основе метода лежит алгоритм получения приближенного автоматического решения для функции Грина широкого класса интегродифференциальных уравнений нестационарного переноса, охватывающего явления переноса с доминирующим вкладом переносчиков с большой длиной свободного пробега: «полетов Леви» [20–23], включая задачу нестационарного переноса резонансного излучения в модели Бибермана – Холстейна [8–14, 28–33], или, в случае учета конечной скорости переносчиков, «прогулок Леви» [4–7], точнее, «прогулок Леви с остановками» (см. рис. 1 в обзоре [5]), что охватывает такие задачи как перенос резонансного излучения в астрофизических газах и плазме, биологическую миграцию, перенос энергии волнами в плазме. В основе метода лежит интерполяция законов автоматичности для асимптотик далеко впереди и далеко позади эффективного фронта волны возмущения, требующая прямого решения задачи (численного расчета функции Грина) только в относительно небольшой области переменных задачи (вблизи фронта) (см. обсуждение вопроса об экономии расчетного времени в работе [17]).

для фронта переносчиков или бегущих мигрантов в дополнение к фронту возбуждения среды (возбужденных атомов или ионов) или стоящих мигрантов.

Достигнутый прогресс в описании фронта для прогулок Леви позволил предложить единое описание динамики фронта возмущения среды при произвольной, включая бесконечную, фиксированной скорости переносчиков. Это соответствует объединению формул для фронта при переносе полетами Леви и прогулками Леви. Полученный критерий перехода между указанными режимами супердиффузионного переноса для сильной нелокальности функции распределения по длине свободного пробега хорошо согласуется с результатами численного расчета (см. рис. 6z). Этот критерий, в частности, определяет область параметров, в которой необходимо учитывать конечную скорость света в переносе резонансного излучения в газах и плазме в случае сильной нелокальности (сюда относится нестационарный перенос в случае лоренцевского контура спектральной линии атомов или ионов в газах и плазме).

Благодарности. Авторы благодарны К. В. Чукбару за обсуждение работ [6, 7].

Финансирование. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 18-07-01269-а, 19-32-90281), а также в рамках программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ.

Работа выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. B. Kukushkin and A. A. Kulichenko, *Phys. Scripta* **94**, 115009 (2019).
2. A. A. Куличенко, А. Б. Кукушкин *ЖЭТФ* **157**, 1036 (2020).
3. A. A. Kulichenko and A. B. Kukushkin, *Int. Rev. Atom. Mol. Phys.* **8**(1), 5 (2017).
4. M. F. Shlesinger, J. Klafter, and J. Wong, *J. Stat. Phys.* **27**, 499 (1982).
5. V. Zaburdaev, S. Denisov, and J. Klafter, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 483 (2015).
6. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **121**, 299 (2002).
7. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 654 (2003).
8. Л. М. Биберман, *ЖЭТФ* **17**, 416 (1947).
9. T. Holstein, *Phys. Rev.* **72**, 1212 (1947).
10. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, Наука, Москва (1982).
11. Б. А. Векленко, *ЖЭТФ* **36**, 204 (1959).
12. V. I. Kogan, in *Proc. 8th Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases ICPIG*, IAEA, Vienna (1968), p. 583.
13. В. А. Абрамов, В. И. Коган, В. С. Лисица, в сб. *Вопросы теории плазмы*, под ред. М. А. Леонтовича, Б. Б. Кадомцева, Энергоатомиздат, Москва (1982), вып. 12, с. 114.
14. В. И. Коган, *Запирание излучения в плазме*, Энциклопедия низкотемпературной плазмы, под ред. В. Е. Фортова, Наука, Москва (2000), т. 1, с. 481.
15. A. B. Kukushkin and P. A. Sdvizhenskii, *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 255002 (2016).
16. A. B. Kukushkin and P. A. Sdvizhenskii, *J. Phys.: Conf. Ser.* **941**, 012050 (2017).
17. A. B. Kukushkin, V. S. Neverov, P. A. Sdvizhenskii, and V. V. Voloshinov, *Int. J. Open Inform. Technol.* **6**, 38 (2018).
18. A. B. Kukushkin, V. S. Neverov, P. A. Sdvizhenskii, and V. V. Voloshinov, *Atoms* **6**, 43 (2018).
19. B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, New York (1982).
20. M. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, and U. Frisch, *Lévy Flights and Related Topics in Physics*, Springer, New York (1995).
21. A. A. Dubkov, B. Spagnolo, and V. V. Uchaikin, *Int. J. Bifurcation Chaos* **18**, 2649 (2008).
22. J. Klafter and I. M. Sokolov, *Phys. World* **18**, 29 (2005).
23. I. I. Eliazar and M. F. Shlesinger, *Phys. Rep.* **527**, 101 (2013).
24. В. В. Иванов, *Перенос излучения и спектры небесных тел*, Наука, Москва (1969).
25. И. Н. Минин, *Теория переноса излучения в атмосферах планет*, Наука, Москва (1988).
26. *Radiation Mechanisms of Astrophysical Objects: Classics Today (in honor of V. V. Sobolev)*, ed. by V. Grinin et al., St. Petersburg (2015).

27. А. Б. Кукушкин, В. С. Лисица, Ю. А. Савельев, Письма в ЖЭТФ **46**, 356 (1987).
28. Л. М. Биберман, ДАН СССР **49**, 659 (1948).
29. *Methods in Radiative Transfer*, ed. by W. Kalkofen, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1984).
30. G. B. Rybicki, in *Methods in Radiative Transfer*, ed. by W. Kalkofen, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1984), Ch. 1.
31. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, А. Н. Лагарьков, Опт. и спектр. **19**, 326 (1965).
32. А. П. Напартович, ТВТ **9**, 26 (1971).
33. А. Н. Старостин, *Перенос резонансного излучения*, Энциклопедия низкотемпературной плазмы, под ред. В. Е. Фортова, Наука, Москва (2000), т. 1, с. 471.
34. A. V. Sokolov and V. V. Voloshinov, Int. J. Open Inform. Technol. **6**(9), 33 (2018).
35. A. V. Sokolov and V. V. Voloshinov, Open Comp. Sci. **10**, 283 (2020).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам **ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ**) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

- а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;
- б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);
- в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате \LaTeX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
 9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, condmat/0404452.
7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
 9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

Главный редактор *А. Ф. АНДРЕЕВ*

Редколлегия:

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

Редакционный совет:

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

Зав. редакцией *Н. Г. Церевитинова*
Редакторы: *Л. Б. Кульчицкая*, *Т. Г. Орехова*, *Т. Н. Смирнова*