

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

П И С Ь М А
В
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 115

Выпуск 7

10 апреля 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

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

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2022

π^0 - η - η' смешивание в теории с четырехкварковыми взаимодействиями

А. А. Осипов¹⁾

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 27 февраля 2022 г.

После переработки 27 февраля 2022 г.

Принята к публикации 10 марта 2022 г.

Массовые формулы, углы смешивания и константы распада псевдоскалярных π^0 , η и η' мезонов получены в теории с четырехкварковыми взаимодействиями с точностью до членов $\mathcal{O}(1/N_c^2)$ включительно. В отличие от стандартной модели Намбу–Иона–Лазинио, при получении мезонного лагранжиана используется ряд Вольтерры, что ведет к более детальному описанию эффектов, вызванных неравенством кварковых масс. Проводится сравнение с результатами аналогичных вычислений в $1/N_c$ киральной теории возмущений. Вычислены первые поправки к взаимодействию, нарушающему правило Цвейга, и показана их важность в описании спектра η - η' мезонов.

DOI: 10.31857/S1234567822070011, EDN: fksjyj

1. Введение. В работах [1, 2] для изучения свойств псевдоскалярного нонета мезонов использовался лагранжиан, эффективные вершины которого классифицируются по степеням импульсов, масс легких кварков и обратному числу цветовых степеней свободы $1/N_c$. Метод, получивший название $1/N_c$ киральной теории возмущений [3], позволил вычислить первую поправку к основному результату алгебры токов для массовых формул заряженных и обладающих ненулевой странностью псевдоскалярных мезонов, показать, что поправка мала (в то время имелись противоречия в описании распада $\eta \rightarrow 3\pi$), и установить ограничения на массы легких кварков. Позднее метод был распространен на состояния со спином единица [4]. В качестве свежих результатов, полученных на основе данного эффективного лагранжиана, отметим анализ двухфотонных распадов π^0 , η и η' мезонов, учитывающий поправки как первого, так и второго порядка по $1/N_c$ [5].

Недавно было показано [6], что теория с четырехкварковыми взаимодействиями типа Намбу–Иона–Лазинио (НИЛ) [7, 8] приводит к тем же массовым формулам для псевдоскалярных π^\pm , K^\pm , K^0 и \bar{K}^0 мезонов, что и [1]. При этом удается связать параметры эффективной теории Лойтвиллера с параметрами динамической модели НИЛ. Достигается это путем замены ряда Тейлора (по степеням собственного времени) на ряд Вольтерры при разложении эффективного действия модели НИЛ по обратным степеням масс конституентных кварков [9–11]. Дополнительно

используется гипотеза Лойтвиллера о поведении масс легких кварков m_i ($i = u, d, s$) в пределе больших значений N_c , а именно, $m_i = \mathcal{O}(1/N_c)$.

Целью настоящей статьи является изучение физических характеристик оставшихся членов нонета: π^0 , η , η' -мезонов, для которых мы вычисляем, с точностью до первой поправки по $1/N_c$ включительно, массы, углы смешивания, оцениваем константу аномального нарушения $U(1)_A$ симметрии, а также степень нарушения правила Окубо–Цвейга–Иизуки (ОЦИ). Последние два вопроса представляют особый интерес в связи с изучением глюонной структуры η и η' мезонов, которая активно исследуется в настоящее время с различных точек зрения (см., например, [12], где применяется дисперсионный подход к изучению аксиальной аномалии). Используемый нами формализм остается тем же, что и в работе [6]. Это, в частности, касается и численных значений параметров модели, зафиксированных в [6].

2. Модифицированная модель НИЛ. Исходный четырехкварковый лагранжиан, используемый нами, ничем не отличается от стандартной кварковой версии модели НИЛ [13–16]

$$\mathcal{L} = \bar{q}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)q + \mathcal{L}_{\text{int}}. \quad (1)$$

Здесь γ^μ – матрицы Дирака, q – кварковые поля, а m – диагональная матрица $m = \text{diag}(m_u, m_d, m_s)$, содержащая токовые массы u , d и s кварков. Плотность Лагранжа имеет вид $\mathcal{L}_{\text{int}} = \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)}$, где сумма включает $U(3)_L \times U(3)_R$ кирально симметричные комбинации, описывающие четырехкварковые взаимодействия со спином ноль и единица

¹⁾e-mail: aaosipov@jinr.ru

$$\mathcal{L}^{(0)} = \frac{G_S}{2} [(\bar{q}\lambda_a q)^2 + (\bar{q}i\gamma_5\lambda_a q)^2], \quad (2)$$

$$\mathcal{L}^{(1)} = -\frac{G_V}{2} [(\bar{q}\gamma^\mu\lambda_a q)^2 + (\bar{q}\gamma^\mu\gamma_5\lambda_a q)^2], \quad (3)$$

где матрица $\lambda_0 = \sqrt{2/3}$, а λ_i – матрицы Гелл-Манна. Константы G_S и G_V при $N_c \rightarrow \infty$ имеют порядок $\mathcal{O}(1/N_c)$. Их численные значения были установлены в работе [6]: $G_S = 6.6 \text{ ГэВ}^{-2}$, $G_V = 6.8 \text{ ГэВ}^{-2}$.

Метод функционального интеграла позволяет преобразовать лагранжеву плотность (1) к виду

$$\mathcal{L}' = \bar{Q}(i\gamma^\mu d_\mu - M + \sigma)Q + \frac{1}{4G_V} \text{tr}(V_\mu^2 + A_\mu^2) - \frac{1}{4G_S} \text{tr}(\sigma^2 - \{\sigma, M\} + (\sigma - M)\Sigma), \quad (4)$$

где мы воспользовались функциональной свободой выбора динамических переменных в пользу нелинейной реализации киральной симметрии. При этом векторные, аксиально-векторные, скалярные и псевдоскалярные поля описываются эрмитовыми матрицами $V_\mu = V_\mu^a \lambda_a$, $A_\mu = A_\mu^a \lambda_a$, $\sigma = \sigma_a \lambda_a$, $\phi = \phi_a \lambda_a$, а кварковые поля $Q = (\xi P_R + \xi^\dagger P_L)q$, где $P_{L,R} = (1 \mp \gamma_5)/2$, принадлежат фундаментальному представлению. Остальные обозначения имеют вид

$$d_\mu = \partial_\mu - i \left[\xi_\mu^{(+)} + V_\mu + \gamma_5 \left(\xi_\mu^{(-)} + A_\mu \right) \right], \quad (5)$$

$$\xi_\mu^{(\pm)} = \frac{i}{2} (\xi \partial_\mu \xi^\dagger \pm \xi^\dagger \partial_\mu \xi), \quad (6)$$

$$\Sigma = \xi m \xi + \xi^\dagger m \xi^\dagger, \quad \xi = \exp\left(\frac{i}{2} \phi\right). \quad (7)$$

Псевдоскалярное поле ϕ безразмерно, позднее, при переходе к полевым функциям физических состояний, оно приобретет необходимую размерность массы. Элементами матрицы $M = \text{diag}(M_u, M_d, M_s)$ являются массы конститuentных кварков Q . Эти массы возникают в результате динамического нарушения симметрии и связаны с массами легких кварков уравнением щели

$$M_i \left(1 - \frac{N_c G_S}{2\pi^2} J_0(M_i) \right) = m_i \quad (i = u, d, s), \quad (8)$$

где

$$J_0(M_i) = \Lambda^2 - M_i^2 \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{M_i^2} \right). \quad (9)$$

Параметр обрезания Λ характеризует масштаб, на котором изучается рассматриваемая эффективная теория. В данном случае это масштаб адронных масс, который приблизительно равен $\Lambda = 1.1 \text{ ГэВ}$.

Математически уравнение щели является условием минимума эффективного потенциала, который,

как и кинетическая часть эффективного действия, получаются в результате интегрирования по кварковым полям Q . Последнее дает кварковый детерминант, локальная часть которого описывается первыми членами его асимптотического разложения в ряд по степеням собственного времени. Неравенство кварковых масс приводит к проблеме, связанной с учетом разностных эффектов $M_i - M_j$. Для решения этой задачи было предложено асимптотическое разложение по обратным степеням тяжелых масс, которое основывается на ряде Вольтерры [11]. Именно в этом месте наши вычисления расходятся со стандартным подходом, традиционно использующим ряд Тейлора. Разница существенная, поскольку ряд Вольтерры содержит большое число конечных (при $\Lambda \rightarrow \infty$) вершин, обращающихся в нуль в пределе равных кварковых масс. Эти вершины содержат важную дополнительную информацию о нарушениях изоспиновой и флейворной симметрии, отсутствующую в стандартном мезонном лагранжиане модели НИЛ.

Если кварки массивны, то возникает смешивание псевдоскалярных полей с аксиально-векторными. Для устранения смешивания необходимо переопределить аксиально-векторные поля [17]

$$A_\mu = A'_\mu - \kappa_A \circ \xi_\mu^{(-)}, \quad (10)$$

где κ_A – матрица, а символ \circ означает адамаровское произведение матриц [18], которое определяется почленным умножением соответствующих элементов матриц $(A \circ B)_{ij} = A_{ij} B_{ij}$ без суммирования по повторяющимся индексам.

Нам здесь потребуются только диагональные элементы матрицы κ_A , которые имеют вид

$$(\kappa_A)_{ii}^{-1} = 1 + \frac{\pi^2}{N_c G_V M_i^2 J_1(M_i)}, \quad (11)$$

где

$$J_1(M) = \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{M^2} \right) - \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + M^2}. \quad (12)$$

Кварковый детерминант содержит кинетические члены лагранжиана свободных мезонных полей. Они примут канонический вид после соответствующего переопределения переменных

$$\phi_i = f_i^{-1} \phi_i^R \quad (i = u, d, s), \quad (13)$$

где связь компонент $\phi_{u,d,s}$ с компонентами $\phi_{0,3,8}$, так же как и связь между компонентами $\phi_{u,d,s}^R$ и $\phi_{0,3,8}^R$, стандартна. Новые полевые переменные отмечены

индексом R и, как легко видеть, имеют размерность массы, поскольку константы $f_i \sim \mathcal{O}(\sqrt{N_c})$ равны

$$f_i = \sqrt{\frac{(\kappa_A)_{ii}}{4G_V}}. \quad (14)$$

В результате получаем

$$\mathcal{L}_{\text{kin}} = \frac{1}{4} \sum_{i=u,d,s} (\partial_\mu \phi_i^R)^2 = \frac{1}{2} \sum_{a=0,3,8} (\partial_\mu \phi_a^R)^2. \quad (15)$$

Массовая часть лагранжиана (4) диагональна, если используется флейворный базис

$$\mathcal{L}_{\phi^2} = -\frac{G_V}{G_S} \sum_{i=u,d,s} \frac{M_i m_i}{(\kappa_A)_{ii}} (\phi_i^R)^2. \quad (16)$$

Однако, физические π^0 , η и η' мезоны не являются чистыми флейворными состояниями. Поэтому удобно перейти к синглет-октетным компонентам 0, 3, 8. В этом базисе недиагональные элементы массовой матрицы равны нулю только в случае точной $SU(3)_f$ симметрии. Итак, находим

$$\mathcal{L}_{\phi^2} = -\frac{1}{2} \sum_{a=0,3,8} \phi_a^R m_{ab}^2 \phi_b^R, \quad (17)$$

где элементы симметричной матрицы m_{ab}^2 имеют вид

$$\begin{aligned} m_{00}^2 &= \frac{4G_V}{3G_S} \sum_{i=u,d,s} \frac{M_i m_i}{(\kappa_A)_{ii}}, \\ m_{88}^2 &= \frac{2G_V}{3G_S} \left(\frac{M_u m_u}{(\kappa_A)_{uu}} + \frac{M_d m_d}{(\kappa_A)_{dd}} + 4 \frac{M_s m_s}{(\kappa_A)_{ss}} \right), \\ m_{33}^2 &= \frac{2G_V}{G_S} \left(\frac{M_u m_u}{(\kappa_A)_{uu}} + \frac{M_d m_d}{(\kappa_A)_{dd}} \right), \\ m_{08}^2 &= \frac{2\sqrt{2}G_V}{3G_S} \left(\frac{M_u m_u}{(\kappa_A)_{uu}} + \frac{M_d m_d}{(\kappa_A)_{dd}} - 2 \frac{M_s m_s}{(\kappa_A)_{ss}} \right), \\ m_{03}^2 &= \frac{2\sqrt{2}G_V}{\sqrt{3}G_S} \left(\frac{M_u m_u}{(\kappa_A)_{uu}} - \frac{M_d m_d}{(\kappa_A)_{dd}} \right), \\ m_{38}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} m_{03}^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь необходимо учесть два важных обстоятельства: $U(1)_A$ аномалию и нарушение правила ОЦИ. Оба феномена объясняются в рамках $1/N_c$ разложения [19–21]. Их лидирующий вклад имеет порядок $\mathcal{O}(1/N_c)$, т.е., тот же самый порядок, что и лидирующий вклад в (18), где $m_i \sim \mathcal{O}(1/N_c)$. Лагранжианы, отвечающие этим процессам, имеют вид произведения двух шпуров. На кварк-глюонном уровне такой вклад возникает от диаграмм с кварковыми петлями, связанными посредством глюонного обмена.

Лагранжиан, нарушающий $U(1)_A$ симметрию, был получен в работе [22] (см. также [23]). Мы воспользуемся этим результатом, положив

$$\mathcal{L}_V = \frac{\lambda_V}{48} [\text{tr}(\ln \xi \xi - \ln \xi^\dagger \xi^\dagger)]^2 = -\frac{\lambda_V}{2F^2} (\phi_0^R)^2. \quad (19)$$

Размерная константа λ_V фиксируется, исходя из физических масс псевдоскалярных мезонов и в пределе $N_c \rightarrow \infty$, не изменяется $\lambda_V = \mathcal{O}(N_c^0)$.

За нарушение правила ОЦИ отвечает лагранжиан [1]

$$\mathcal{L}_Z = \frac{i\lambda_Z}{\sqrt{6}} \text{tr}(\phi) \text{tr}[\chi(\xi^\dagger \xi^\dagger - \xi \xi)], \quad (20)$$

где $\lambda_Z = \mathcal{O}(N_c)$ – размерная константа, а матрица $\chi = 2Bm$ имеет вид

$$\chi = \frac{4G_V}{G_S} \text{diag} \left(\frac{M_u m_u}{(\kappa_A)_{uu}}, \frac{M_d m_d}{(\kappa_A)_{dd}}, \frac{M_s m_s}{(\kappa_A)_{ss}} \right). \quad (21)$$

Его квадратичная часть ведет к смешиванию

$$\mathcal{L}_Z \rightarrow 8\lambda_Z \frac{G_V}{G_S} \phi_0 \sum_{i=u,d,s} \frac{M_i m_i}{(\kappa_A)_{ii}} \phi_i. \quad (22)$$

Нефизические поля ϕ_0 и ϕ_i необходимо заменить на физические (13). Так для поля ϕ_0 находим

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \frac{\phi_0^R}{3} \left(\frac{1}{f_u} + \frac{1}{f_d} + \frac{1}{f_s} \right) + \frac{\phi_3^R}{\sqrt{6}} \left(\frac{1}{f_u} - \frac{1}{f_d} \right) + \\ &+ \frac{\phi_8^R}{3\sqrt{2}} \left(\frac{1}{f_u} + \frac{1}{f_d} - \frac{2}{f_s} \right) = \frac{\phi_0^R}{F} + \mathcal{O}(N_c^{-\frac{3}{2}}). \end{aligned} \quad (23)$$

Отсюда следует, что выход за рамки лидирующего приближения в (22) влечет дополнительное смешивание между нейтральными компонентами, индуцированное нарушениями изоспиновой и $SU(3)_f$ симметрий.

Далее мы выделим из полученных выше формул первые члены в их разложении в ряд по $1/N_c$. Здесь мы сделаем только два первых шага, а именно представим элементы массовой матрицы физических состояний в виде лидирующего вклада (LO), который имеет порядок $\mathcal{O}(1/N_c)$ и первой поправки (NLO) к нему $\mathcal{O}(1/N_c^2)$. Вычисление второй поправки (NNLO) требует дополнительного рассмотрения мезонных однопетлевых вкладов, что выходит за рамки данной работы.

3. $1/N_c$ разложение. Шесть параметров модели Λ , G_S , G_V , m_i удовлетворяют следующим правилам счета: $\Lambda \sim \mathcal{O}(1)$, $G_S, G_V, m_i \sim \mathcal{O}(1/N_c)$. Первый из них определяет характерный энергетический масштаб, остальные малы по сравнению с ним. Это позволяет осуществить систематическое разложение эффективной теории по степеням $1/N_c$.

Начнем с уравнения щели (8), решение которого будем искать в виде

$$M_i(m_i) = M_0 + M'(0) m_i + \mathcal{O}(m_i^2), \quad (24)$$

где M_0 – решение уравнения при больших значениях N_c . Тогда находим

$$M'(0) = \frac{\pi^2}{N_c G_S M_0^2 J_1^0} = \frac{G_V}{G_S} (\kappa_{A0}^{-1} - 1) \equiv a. \quad (25)$$

Здесь и далее индекс 0 у знака функции, зависящей от кварковых масс m_i , означает, что данная функция вычисляется в пределе $m_i \rightarrow 0$. Так $J_1^0 = J_1(M_0)$, а $\kappa_{A0}^{-1} = \lim_{m_i \rightarrow 0} (\kappa_A)_{ii}^{-1}$.

Для констант (14), в свою очередь, получаем

$$f_i = F \left[1 + \frac{m_i}{2M_0} (a - \delta_M) \right], \quad F = \sqrt{\frac{\kappa_{A0}}{4G_V}}, \quad (26)$$

где

$$\delta_M = a \left\{ 1 - 2(1 - \kappa_{A0}) \left[1 - \frac{\Lambda^4}{J_1^0 (\Lambda^2 + M_0^2)^2} \right] \right\}. \quad (27)$$

Элементы массовой матрицы m_{ab}^2 , с учетом всех рассмотренных выше вкладов, могут быть представлены в виде суммы $m_{ab}^2 \rightarrow M_{ab}^2 = M_{ab}^2 + \Delta M_{ab}^2$, где первое слагаемое есть лидирующий вклад, а второе – первая поправка к нему. Основной вклад имеет порядок $\mathcal{O}(1/N_c)$ и описывается формулами

$$\begin{aligned} M_{00}^2 &= \frac{2}{3} B_0 (m_u + m_d + m_s) (1 - 2\Delta_N) + \lambda_\eta^2, \\ M_{88}^2 &= \frac{1}{3} B_0 (m_u + m_d + 4m_s), \\ M_{08}^2 &= \frac{\sqrt{2}}{3} B_0 (m_u + m_d - 2m_s) (1 - \Delta_N), \\ M_{03}^2 &= \sqrt{\frac{2}{3}} B_0 (m_u - m_d) (1 - \Delta_N), \\ M_{38}^2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} B_0 (m_u - m_d), \\ M_{33}^2 &= B_0 (m_u + m_d), \end{aligned} \quad (28)$$

где мы ввели следующие обозначения:

$$\Delta_N = 2\sqrt{6} \frac{\lambda_Z}{F^2}, \quad \lambda_\eta^2 = \frac{\lambda_V}{F^2}, \quad (29)$$

$$B_0 = -\frac{\langle \bar{q}q \rangle_0}{F^2} = \frac{2G_V M_0}{G_S \kappa_{A0}} = \frac{M_0}{2G_S F^2}. \quad (30)$$

Этот результат совпадает с известными формулами, установленными Лойтвиллером [1], с той лишь разницей, что в рассматриваемом здесь случае все параметры, кроме Δ_N и λ_η^2 , связаны с основными константами четырехкварковой динамики.

Смешивание ϕ_3^R с ϕ_0^R и ϕ_8^R происходит за счет нарушения изоспиновой симметрии. В первом порядке по разности масс $m_d - m_u$ оно устраняется поворотом на малые углы ϵ' и ϵ соответственно. Смешивание компонент ϕ_0^R и ϕ_8^R – результат нарушения $SU(3)_f$ симметрии. Для его устранения необходимо осуществить поворот на угол θ . С точностью до первого порядка по нарушению изотопической симметрии преобразование нейтральных компонент к физическим состояниям π^0 , η и η' имеет вид

$$\begin{aligned} \phi_3^R &= \pi^0 - \epsilon\eta - \epsilon'\eta', \\ \phi_8^R &= (\epsilon \cos \theta + \epsilon' \sin \theta) \pi^0 + \cos \theta \eta + \sin \theta \eta', \\ \phi_0^R &= (\epsilon' \cos \theta - \epsilon \sin \theta) \pi^0 - \sin \theta \eta + \cos \theta \eta'. \end{aligned} \quad (31)$$

Данное ортогональное преобразование диагонализует массовую матрицу M_{ab}^2 , если углы смешивания удовлетворяют требованиям

$$\begin{aligned} \tan 2\theta &= \frac{2M_{08}^2}{M_{00}^2 - M_{88}^2}, \quad \epsilon = \frac{\sin \theta M_{03}^2 - \cos \theta M_{38}^2}{m_\eta^2 - m_{\pi^0}^2}, \\ \epsilon' &= -\frac{\cos \theta M_{03}^2 + \sin \theta M_{38}^2}{m_{\eta'}^2 - m_{\pi^0}^2}, \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} m_{\eta, \eta'}^2 &= \frac{1}{2} \left[M_{00}^2 + M_{88}^2 \mp \sqrt{(M_{00}^2 - M_{88}^2)^2 + 4M_{08}^4} \right], \\ m_{\pi^0}^2 &= M_{33}^2. \end{aligned} \quad (33)$$

Поскольку формулы (28) содержат только два неизвестных параметра Δ_N и λ_η^2 , их можно определить, исходя из известных масс η и η' мезонов. Для этого сначала найдем массы кварков, воспользовавшись физическими массами π^+ , K^+ и K^0 мезонов, которые в данном приближении определяются формулами алгебры токов: $\bar{\mu}_{\pi^+}^2 = B_0(m_u + m_d)$, $\bar{\mu}_{K^+}^2 = B_0(m_u + m_s)$, $\bar{\mu}_{K^0}^2 = B_0(m_d + m_s)$. Черта над символом массы указывает на то, что данное выражение получено без учета электромагнитных взаимодействий. Если же их учесть, то массы заряженных состояний вырастают:

$$\begin{aligned} \mu_{\pi^+}^2 &= \bar{\mu}_{\pi^+}^2 + \Delta_{el}^2, \quad \mu_{\pi^0}^2 = \bar{\mu}_{\pi^+}^2 = \bar{\mu}_{\pi^0}^2, \\ \mu_{K^+}^2 &= \bar{\mu}_{K^+}^2 + \tilde{\Delta}_{el}^2, \quad \mu_{K^0}^2 = \bar{\mu}_{K^0}^2. \end{aligned} \quad (34)$$

Известно, что разница масс заряженного и нейтрального пионов обусловлена в основном электромагнитным взаимодействием. Вклад сильных взаимодействий пропорционален $(m_d - m_u)^2$, и поэтому пренебрежимо мал. Если воспользоваться теоремой Дашена $\Delta_{el}^2 = \tilde{\Delta}_{el}^2$ [24], то из приведенных массовых формул находим $m_u = 2.6$ МэВ, $m_d = 4.7$ МэВ, и

$m_s = 95$ МэВ. Затем из системы двух уравнений на массы η и η' мезонов определяем параметры $\lambda_\eta^2 = 0.891$ ГэВ² и $\Delta_N = 0.48$. Углы смешивания оказываются равными $\epsilon = 0.014$, $\epsilon' = 0.0037$, $\theta = -10.5^\circ$.

Приведенные выше оценки показывают, что в лидирующем приближении правило Цвейга сильно нарушено, что также отмечалось в [1, 25]. Только такой ценой можно добиться удовлетворительного описания спектра η - η' мезонов. В отсутствие лагранжиана (20) масса η мезона оказывается значительно ниже своего феноменологического значения, а угол $\theta = -18.3^\circ$. Взаимодействие, нарушающее правило Цвейга, успешно решает спектральную задачу, но ведет к уменьшению абсолютной величины угла θ . Заметим, что этот результат близок к величине $\theta = -12.3^\circ$ [26], и в точности совпадает с результатом работы [27], полученным однако уже с учетом первой поправки в $1/N_c$ киральной теории возмущений.

Сделаем следующий шаг и вычислим первую поправку ΔM_{ab} к основному результату. Вклад в нее дают как формулы (18), так и формулы (22). В итоге получаем

$$\begin{aligned} \Delta M_{00}^2 &= \frac{2B_0}{3M_0} \left\{ (m_u^2 + m_d^2 + m_s^2) [(a - 3\delta_M)\Delta_N + \delta_M] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3}(m_u + m_d + m_s)^2(a - \delta_M) \right\}, \\ \Delta M_{88}^2 &= \frac{B_0}{3M_0} [(m_u^2 + m_d^2 + 4m_s^2)\delta_M + \\ &\quad + \frac{1}{3}(2m_s - m_u - m_d)^2\Delta_N], \\ \Delta M_{08}^2 &= \frac{\sqrt{2}B_0}{3M_0} \left\{ (2m_s^2 - m_u^2 - m_d^2) \left[\frac{3\delta_M - a}{2}\Delta_N - \delta_M \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta_N}{3}(2m_s - m_u - m_d)(m_u + m_d + m_s)(\delta_M - a) \right\}, \\ \Delta M_{03}^2 &= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{B_0}{M_0} \left\{ (m_d^2 - m_u^2) \left[\frac{3\delta_M - a}{2}\Delta_N - \delta_M \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3}\Delta_N(m_d - m_u)(m_u + m_d + m_s)(\delta_M - a) \right\}, \\ \Delta M_{38}^2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{B_0}{M_0} (m_d - m_u) \left[(2m_s - m_u - m_d) \frac{a - \delta_M}{3}\Delta_N - \right. \\ &\quad \left. - (m_d + m_u)\delta_M \right], \\ \Delta M_{33}^2 &= \frac{B_0}{M_0} (m_u^2 + m_d^2)\delta_M. \end{aligned} \quad (35)$$

Поправки, индуцированные формулой (18), с точностью до общего множителя совпадают с результатом $1/N_c$ киральной теории возмущений [27]. Соответствие между множителями имеет вид

$$\frac{\delta_M}{M_0} \rightarrow 16 \frac{B_0}{F_0^2} (2L_8 - L_5). \quad (36)$$

Поправки $\sim \Delta_N$ в [27] не рассматривались.

При получении (35) мы, как и ранее, пренебрегли членами второго порядка по нарушению изотопической симметрии. Напомним, что в этом приближении массовая матрица \mathcal{M}_{ab}^2 по-прежнему диагонализуется ортогональным преобразованием (31).

Чтобы получить численные значения, во-первых, необходимо определить величины масс легких кварков. Для этого будем использовать массовые формулы π^\pm , K^\pm и K^0 мезонов, в которых также учтена первая поправка к результату алгебры токов, а именно

$$\bar{m}_{\pi^+}^2 = \bar{\mu}_{\pi^+}^2 \left(1 + \frac{m_u + m_d}{2M_0} \delta_M \right), \quad (37)$$

$$\bar{m}_{K^+}^2 = \bar{\mu}_{K^+}^2 \left(1 + \frac{m_u + m_s}{2M_0} \delta_M \right), \quad (38)$$

$$\bar{m}_{K^0}^2 = \bar{\mu}_{K^0}^2 \left(1 + \frac{m_d + m_s}{2M_0} \delta_M \right). \quad (39)$$

Во-вторых, необходимо также учесть, что теорема Дашена справедлива только в лидирующем приближении кирального разложения. При выходе за его рамки следует принять во внимание возможное отклонение от нее, т.е., считать, что $\tilde{\Delta}_{el}^2 \neq \Delta_{el}^2 = m_{\pi^+}^2 - m_{\pi^0}^2$. В результате массовые формулы (37)–(39) приобретают дополнительную зависимость от параметра $\tilde{\Delta}_{el}$, область изменения которого можно зафиксировать из наблюдаемой ширины распада $\eta \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ [1]. Это позволяет установить следующий интервал для величины $\tilde{\Delta}_{el} = (44.8 \pm 4.5)$ МэВ, и как следствие зафиксировать кварковые массы: $m_u = (2.65 \pm 0.07)$ МэВ, $m_d = (4.63 \pm 0.07)$ МэВ, $m_s = (85.94 \pm 0.07)$ МэВ. Теперь, как и раньше, исходя из феноменологических значений η и η' масс, определим параметры Δ_N и λ_η^2 . В результате находим, что $\theta = -20.4^\circ$,

$$\begin{aligned} \epsilon &= 0.013 \pm 0.001, \quad \epsilon' = 0.0039 \pm 0.0003, \\ \Delta_N &= 0.38, \quad \lambda_\eta^2 = (0.730 \pm 0.001) \text{ ГэВ}^2. \end{aligned} \quad (40)$$

Интересно отметить, что учет NLO поправок практически не отразился на значениях углов ϵ и ϵ' , которые согласуются с феноменологическими оценками $\epsilon = 0.014$, $\epsilon' = 0.0037$ [28], а вот абсолютная величина угла θ заметно выросла и находится в согласии с результатом киральной теории возмущений $\theta = -20^\circ \pm 4^\circ$ [29], но несколько превышает результат аномальных правил сумм $\theta = -14.2^\circ \pm 0.7^\circ$ [30]. Параметр Δ_N , характеризующий степень нарушения правила Цвейга, уменьшился. Величина константы

λ_η^2 тоже уменьшилась и практически совпала с оценкой $\lambda_\eta^2 = 0.726 \text{ ГэВ}^2$, сделанной в работе [20].

Из формул (14) получаем величины констант $f_u = 92.7 \text{ МэВ}$, $f_d = 93.7 \text{ МэВ}$ и $f_s = 132.8 \text{ МэВ}$. Зная, что для константы слабого распада пиона модель дает значение $f_\pi = 93.2 \text{ МэВ}$, находим, что отношение $f_s/f_\pi = 1.42$. Эта величина находится в согласии с оценкой аномальных правил сумм $f_s/f_\pi = 1.65 \pm 0.25$ [30] и близка к феноменологической оценке $f_s/f_\pi = 1.34 \pm 0.06$, приведенной в работе [31].

4. Выводы. В работе вычислены основные характеристики π^0 - η - η' системы в модели с четырехкварковыми взаимодействиями. При бозонизации кварковых вершин использован новый метод для низкоэнергетического разложения кваркового детерминанта с виртуальными частицами неравной массы. Предположив, что массы легких кварков обращаются в нуль в пределе $N_c \rightarrow \infty$, мы получили массовые формулы и константы распада данных псевдоскалярных состояний в виде двух первых членов их разложения в ряд по $1/N_c$. В результате удалось описать спектр масс η - η' мезонов и исследовать вопрос о степени нарушения правила Цвейга. Полученная здесь оценка $\Delta_N = 0.38$ указывает на умеренное нарушение правила ОЦИ. Подчеркнем, что рассмотренные здесь $\mathcal{O}(1/N_c^2)$ поправки к взаимодействию, нарушающему правило Цвейга, ранее в литературе не изучались. Например, в работе [32] эффективный лагранжиан, хотя и содержит взаимодействия, нарушающие правило Цвейга, но только в лидирующем порядке по $1/N_c$.

1. H. Leutwyler, Phys. Lett. B **374**, 163 (1996).
2. H. Leutwyler, Phys. Lett. B **374**, 181 (1996).
3. R. Kaiser and H. Leutwyler, Eur. Phys. J. C **17**, 623 (2000).
4. P. Herrera-Siklody, J.I. Latorre, P. Pascual, and J. Taron, Nucl. Phys. B **497**, 345 (1997).
5. P. Bickert and S. Scherer, Phys. Rev. D **102**, 074019 (2020).
6. A. A. Osipov, JETP Lett. **115**(6), 339 (2022).
7. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
8. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **124**, 246 (1961).
9. A. A. Osipov, JETP Lett. **113**(6), 413 (2021).
10. A. A. Osipov, Phys. Lett. B **817**, 136300 (2021).
11. A. A. Osipov, Phys. Rev. D **104**(10), 105019 (2021).
12. S. Khlebtsov, Y. Klopot, A. Oganesian, and O. Teryaev, Phys. Rev. D **104**, 016011 (2021).
13. M. K. Volkov, Ann. of Phys. **157**, 282 (1984).
14. A. Dhar, R. Shankar, and S.R. Wadia, Phys. Rev. D **31**, 3256 (1985).
15. M. K. Volkov, ЭЧАЯ **17**, 432 (1986).
16. D. Ebert and H. Reinhardt, Nucl. Phys. B **271**, 188 (1986).
17. J. Morais, B. Hiller, and A. A. Osipov, Phys. Lett. B **773**, 277 (2017).
18. G.P. H. Styan, Linear. Algebra and its Appl. **6**, 217 (1973).
19. E. Witten, Nucl. Phys. B **156**, 269 (1979).
20. G. Veneziano, Nucl. Phys. B **159**, 213 (1979).
21. E. Witten, Nucl. Phys. B **160**, 57 (1979).
22. P. Di Vecchia and G. Veneziano, Nucl. Phys. B **171**, 253 (1980).
23. C. Rosenzweig, J. Schechter, and G. Trahern, Phys. Rev. D **21**, 3388 (1980).
24. R. Dashen, Phys. Rev. **183**, 1245 (1969).
25. А.И. Вайнштейн, В.И. Захаров, В.А. Новиков, М.А. Шифман, Физика элементарных частиц и атомного ядра **13**(3), 542 (1982).
26. Th. Feldmann and P. Kroll, Phys. Rev. D **58**, 114006 (1986).
27. J.L. Goity, A.M. Bernstein, and B.R. Holstein, Phys. Rev. D **66**, 076014 (2002).
28. T. Feldman, Int. J. Mod. Phys. A **15**(02), 159 (2000).
29. J. Gasser and H. Leutwyler, Nucl. Phys. B **250**, 465 (1985).
30. Y. Klopot, A. Oganesian, and O. Teryaev, Phys. Rev. D **87**, 036013 (2013).
31. P. Kroll, Mod. Phys. Lett. A **20**, 2667 (2005).
32. A. A. Osipov, B. Hiller, and A.H. Blin, Phys. Rev. D **93**, 116005 (2016).

Статический казимировский конденсат биспинорного поля во вселенной Фрийдмана

А. Б. Арбузов^{+*1)}, С. М. Гайдар[×], А. Е. Павлов[×]

⁺Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

^{*}Государственный университет “Дубна”, 141982 Дубна, Россия

[×]Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К. А. Тимирязева, Институт механики и энергетики, 127434 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 февраля 2022 г.

После переработки 3 марта 2022 г.

Принята к публикации 3 марта 2022 г.

Квантовый казимировский конденсат массивного биспинорного в компактной вселенной Фрийдмана вычислен в статическом приближении. Для ренормировки расходящихся рядов использована формула Абеля–Плана.

DOI: 10.31857/S1234567822070023, EDN: fktmny

1. Введение. Квантовый конденсатный механизм происхождения массы бозона Хиггса без явного нарушения конформной симметрии был предложен в статье [1]. В этой конструкции конденсат топ-кварков заменяет тахионный массовый член в феноменологическом потенциале Хиггса. Значение кваркового конденсата не может быть напрямую вычислено в рамках КХД, поскольку соответствующие ему интегралы расходятся и требуют перенормировки с привлечением каких-либо дополнительных условий, например, экспериментальных данных. Нетривиальность топологии пространства может задать требуемое нам условие перенормировки в расчетах. Существуют различные эффективные методы регуляризации и перенормировки ультрафиолетовых расходимостей [2]. Первый такой последовательный метод был разработан в статье Я. Б. Зельдовича и А. А. Старобинского [3] в более общем случае анизотропной космологической модели типа I по Бианки, который совпадает с методом, позднее предложенным в статье [4]. Для случая топологического эффекта Казимира извлечение конечного значения фермионного конденсата можно достичь вычитанием из расходящейся суммы, определенной в пространстве-времени Фрийдмана соответствующего расходящегося интеграла, определенного в касательном пространстве Минковского. С этой целью применяется формула Абеля–Плана из теории аналитических функций, примененная впервые в космологическом контексте в работе [5], см. также книгу [6]. Конденсат

Казимира конформного массивного скалярного поля в компактной фрийдмановской вселенной в статическом приближении был ранее вычислен в работе [7].

2. Конформное массивное биспинорное поле. Конформная метрика пространства-времени вселенной Фрийдмана $\mathcal{M} = \mathbb{R}^1 \times S^3$ имеет вид

$$ds^2 = a^2(\eta) (-d\eta^2 + d\chi^2 + \sin^2 \chi (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2)), \quad (1)$$

где η – конформное время; $a(\eta)$ – конформный масштабный фактор, имеющий смысл радиуса трехмерной сферы S^3 ; χ , θ и ϕ – угловые координаты сферы. Выполним преобразование к конформной метрике $\tilde{g}_{\mu\nu}(x)$ и конформному биспинорному полю $\tilde{\psi}(x)$ согласно их конформным весам:

$$g_{\mu\nu}(x) = (a(\eta)/a_0)^2 \tilde{g}_{\mu\nu}(x), \quad \psi(x) = (a_0/a(\eta))^{3/2} \tilde{\psi}(x). \quad (2)$$

Канонический гамильтониан частиц с растущей массой в статическом пространстве приводит к конечным значениям плотности создаваемых частиц [8]. Современная диаграмма Хаббла интерпретируется в конформных переменных без введения так называемой темной энергии [9, 10]. Статический пространственно-временной интервал отвечает вселенной с современным радиусом a_0

$$d\tilde{s}^2 = a_0^2 (-d\eta^2 + d\chi^2 + \sin^2 \chi (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2)) \quad (3)$$

с кривизной $\tilde{R} = 6/a_0^2$. Переход к конформным переменным приводит к наблюдаемым величинам с регулярным поведением при $a = 0$. Теперь задача формулируется для биспинорного поля с массой (ma) в

¹⁾e-mail: arbuzov@theor.jinr.ru

статической вселенной Эйнштейна $\mathbb{R}^1 \times S^3$, где S^3 – сфера радиуса a_0 .

Уравнение Дирака для массивного биспинорного поля $\psi(x)$ в пространстве-времени Фридмана [2] имеет вид

$$\begin{aligned} \gamma^0 \left(\frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{3a'}{2a} \right) \psi(x) + \gamma^1 \left(\frac{\partial}{\partial \chi} + \cot \chi \right) \psi(x) + \\ + \gamma^2 \frac{1}{\sin \chi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cot \theta \right) \psi(x) + \\ + \gamma^3 \frac{1}{\sin \chi \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(x) + iam \psi(x) = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где используются матрицы Дирака в стандартном представлении. Штрих означает дифференцирование по конформному времени η . Для разделения переменных возьмем анзац [6]

$$\tilde{\psi}_J(x) = \begin{pmatrix} f_{\lambda+}(\eta)I & 0 \\ 0 & f_{\lambda-}(\eta)I \end{pmatrix} N_J(\chi, \theta, \phi), \quad (5)$$

где I – единичная матрица (2×2); $N_J(\chi, \theta, \phi) = (N_1, N_2, N_3, N_4)^T$ – биспинор с комбинированным индексом $J \equiv \{\lambda, j, l, M\}$:

$$\begin{aligned} \lambda = 3/2, 5/2, \dots; \quad j = 1/2, 3/2, \dots, \\ \lambda - 1; \quad l = j \pm 1/2; \quad -j \leq M \leq j. \end{aligned} \quad (6)$$

Переменные $f_{\lambda+}$ и $f_{\lambda-}$ как функции конформного времени подчиняются осцилляторным уравнениям второго порядка

$$\begin{aligned} f''_{\lambda\pm} + (\omega_\lambda^2(\eta) \pm ima'(\eta)) f_{\lambda\pm} = 0, \\ \omega^2(\eta) \equiv \lambda^2 + m^2 a^2(\eta). \end{aligned} \quad (7)$$

После подстановки (5) уравнение Дирака (4) принимает вид

$$\begin{aligned} -i\lambda \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} N_J + \\ + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial \chi} + \cot \chi \right) N_J + \\ + \frac{1}{\sin \chi} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cot \theta \right) N_J + \\ + \frac{1}{\sin \chi \sin \theta} \begin{pmatrix} 0\sigma_3 & \\ -\sigma_3 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial N_J}{\partial \phi} = 0, \end{aligned}$$

где были использованы матрицы Паули σ_i .

3. Казимировский конденсат массивного биспинорного поля. Чтобы оценить вакуумное

среднее фермионного поля (его конденсат), разложим оператор поля в виде полного набора собственных спиноров с положительной и отрицательной частотой. Затем оператор квантового поля комбинируется как сумма

$$\tilde{\psi}(x) = \sum_J \left(\tilde{\psi}_J^{(+)}(x) \hat{a}_J + \tilde{\psi}_J^{(-)}(x) \hat{b}_J^+ \right). \quad (8)$$

Здесь \hat{a}_J – оператор уничтожения частиц и \hat{b}_J^+ – оператор рождения античастиц. Мы определяем квантовый конденсат Казимира как вакуумное среднее значение двух операторов в одной точке. После использования стандартных антикоммутиационных соотношений мы получаем следующую формулу суммы мод:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \tilde{\psi}(x) \tilde{\psi}(x) | 0 \rangle &= \sum_J \bar{\tilde{\psi}}_J^{(-)}(x) \tilde{\psi}_J^{(-)}(x) = \\ &= \sum_J \psi_J^{(-)+}(x) \gamma^0 \psi_J^{(-)}(x), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\bar{\psi} \equiv \psi^+ \gamma^0$. Согласно (9) можно заключить, что казимировский конденсат образован виртуальными античастицами. Представим сумму (9) в матричном виде

$$\begin{aligned} \sum_J N_J^+(\chi, \theta, \phi) \begin{pmatrix} f_{\lambda+}^{(-)}(\eta)I & 0 \\ 0 & f_{\lambda-}^{(-)}(\eta)I \end{pmatrix} \gamma^0 \times \\ \times \begin{pmatrix} f_{\lambda+}^{(-)}(\eta)I & 0 \\ 0 & f_{\lambda-}^{(-)}(\eta)I \end{pmatrix} N_J(\chi, \theta, \phi). \end{aligned} \quad (10)$$

Ограничим наше внимание чисто статическим вкладом в квантовый конденсат и рассмотрим случай квазистатического состояния ($a' = 0$) [2]. Решения с положительной и отрицательной частотой следующие:

$$\begin{aligned} f_{\lambda\pm}^{(+)}(\eta) &= \pm \sqrt{\frac{\omega \mp ma}{\omega}} e^{i\omega\eta}, \\ f_{\lambda\pm}^{(-)}(\eta) &= \sqrt{\frac{\omega \pm ma}{\omega}} e^{-i\omega\eta}. \end{aligned} \quad (11)$$

Отрицательно-частотные решения (11) удовлетворяют равенству

$$|f_{\lambda+}^{(-)}|^2 - |f_{\lambda-}^{(-)}|^2 = 2ma/\omega. \quad (12)$$

Применим формулу суммирования по квантовым числам для дальнейших расчетов квантового конденсата:

$$\sum_{j,l,M} \psi_J^{(\pm)+}(x) \psi_J^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\pi^2 a^3} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right). \quad (13)$$

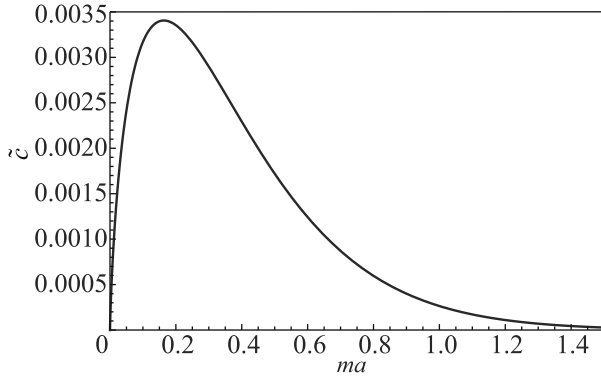


Рис. 1. (Цветной онлайн) Казимировский конденсат массивного фермионного поля как функция переменной массы частицы ma

Суммируя по квантовым числам, получаем расходящийся ряд

$$\langle 0 | \bar{\psi}(x) \psi(x) | 0 \rangle = \frac{ma}{\pi^2} \sum_{\lambda=3/2, 5/2, \dots}^{\infty} \frac{\lambda^2 - 1/4}{\sqrt{\lambda^2 + m^2 a^2}}. \quad (14)$$

Формула Абеля–Плана для перенормировки аналитической функции [2]

$$\begin{aligned} \text{ren} \sum_{\lambda=0}^{\infty} F(\lambda + 1/2) &\equiv \sum_{\lambda=0}^{\infty} F(\lambda + 1/2) - \\ &- \int_0^{\infty} dt F(t) = -i \int_0^{\infty} dt \frac{F(it) - F(-it)}{\exp(2\pi t) + 1} \end{aligned} \quad (15)$$

применяется в случае суммирования с полуцелыми числами. В случае трехмерного евклидова пространства, касательного к S^3 , мы имеем топологический эффект Казимира, который приводит к перенормированному результату в виде следующего сходящегося интеграла:

$$\begin{aligned} \tilde{c} &:= \langle 0 | \bar{\psi}(x) \psi(x) | 0 \rangle^{\text{ren}} = \\ &= 2 \frac{ma}{\pi^2} \int_{ma}^{\infty} \frac{d\lambda (\lambda^2 + 1/4)}{\sqrt{\lambda^2 - m^2 a^2} (\exp(2\pi\lambda) + 1)}. \end{aligned} \quad (16)$$

В нижнем пределе интегрирования (16) стоит зависящая от масштабного фактора безразмерная масса фермиона ma . Зависимость от этой массы конформного конденсата Казимира $\tilde{c} = \tilde{c}(ma)$ показана на рис. 1.

4. Заключение. Таким образом, мы вычислили конденсат биспинорного поля во фридмановской вселенной как функцию масштабного фактора. Топологические условия Казимира в выбранной нами метрике позволили перенормировать расходящийся ряд и получить конечный конкретный ответ для искомой величины. Проведенные вычисления выполнены с использованием методов, описанных в книге [6], и дополняют представленные там результаты. Полученный нами результат будет использован для описания эволюции полей в ранней вселенной. Прямое использование нашего результата для вычисления кварковых конденсатов в КХД невозможно в силу необходимости учета там динамики сильных взаимодействий и нарушения конформной инвариантности.

1. A. B. Arbuzov, R. G. Nazmitdinov, A. E. Pavlov, V. N. Pervushin, and A. F. Zakharov, *EPL* **113**, 31001 (2016).
2. В. М. Мостепаненко, Н. Н. Трунов, *Эффект Казимира и его приложения*, Энергоатомиздат, М. (1990).
3. Я. Б. Зельдович, А. А. Старобинский, *ЖЭТФ* **61**, 2161 (1971).
4. L. Parker and S. A. Fulling, *Phys. Rev. D* **9**, 341 (1974).
5. С. Г. Мамаев, В. М. Мостепаненко, А. А. Старобинский, *ЖЭТФ* **70**, 1577 (1976).
6. А. А. Гриб, С. Г. Мамаев, В. М. Мостепаненко, *Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях*, Энергоатомиздат, М. (1988).
7. A. B. Arbuzov and A. E. Pavlov *Mod. Phys. Lett. A* **33**, 1850162 (2018).
8. A. A. Grib and Yu. V. Pavlov, *Grav. Cosmol.* **22**, 107 (2016).
9. A. F. Zakharov and V. N. Pervushin, *Int. J. Mod. Phys. D* **19**, 1875 (2010).
10. A. E. Pavlov, *RUDN J. Math. Inform. Sc. Phys.* **25**, 390 (2017).

К теории оптического диода на ионах железа в $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$

К. В. Васин, М. В. Еремин¹⁾, А. Р. Нурмухаметов

Институт физики Казанского (Приволжского) федерального университета, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 2 февраля 2022 г.

После переработки 27 февраля 2022 г.

Принята к публикации 1 марта 2022 г.

Рассчитаны параметры взаимодействия состояний $3d$ -электрона с электромагнитной волной и вероятности магнитных и электрических дипольных переходов между состояниями основного терма иона железа, расщепленного под действием кристаллического поля, обменного и спин-орбитального взаимодействий. Построены графики зависимости линий поглощения от величины и направления приложенного магнитного поля. Показано, что эффект оптического диода, обнаруженный в работе [Sh. Yu, B. Gao, J. W. Kim, S.-W. Cheong, M. K. L. Man, J. Madeo, K. M. Dani, and D. Talbayev, Phys. Rev. Lett. **120**, 037601 (2018)], может быть объяснен интерференцией магнитных и электрических дипольных переходов.

DOI: 10.31857/S1234567822070035, EDN: fkujxo

1. Введение. В работе [1] обнаружен интересный эффект: в терагерцевом спектре поглощения ферромагнетика $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$ интенсивность света, передаваемого в одном направлении, более чем в 100 раз превышает интенсивность света, передаваемого в противоположном направлении. Авторы предположили, что этот эффект связан либо с некими, пока не известными, тороидальными моментами, либо с динамической магнитоэлектрической связью. В настоящей работе приводятся результаты микроскопического расчета уровней энергии, волновых функций и вероятностей переходов от суммы операторов взаимодействия электронов с магнитной и электрической компонентой электромагнитной волны при различных поляризациях. Полученные результаты дают основание заключить, что эффект оптического диода, обнаруженный в работе [1], объясняется интерференцией магнитных и электрических переходов между состояниями ионов железа основной конфигурации в октаэдрически координированных позициях из ионов кислорода. Согласно выводам работ [2, 3] тетраэдрические позиции Fe^{2+} в $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$ преимущественно заняты немагнитными ионами Zn. К такому же выводу можно прийти, сравнив спектры отражения для кристаллов $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ и $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$, приведенные в [4] на Fig. 9. Переход с энергией 3500 см^{-1} , характерный для иона железа в тетраэдрической позиции, едва заметен в $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$.

2. Энергетическая схема уровней. Расчет энергетической схемы уровней низколежащих состояний иона Fe^{2+} в октаэдрических позициях прово-

дился в рамках стандартной теории кристаллического поля [5] с учетом обменного (молекулярного) поля, действующего со стороны окружающих магнитных ионов. Оператор энергии записывался в виде:

$$H = \sum_{\substack{k=2,4, \\ q=0,\pm 3}} B_q^{(k)} C_q^{(k)} + \lambda \mathbf{LS} + \mu_B \mathbf{H}(g_e \mathbf{S} + \mathbf{L}) + \mu_B g_e B_{\text{mol}} S_z. \quad (1)$$

Параметры оператора кристаллического поля $B_q^{(k)}$ рассчитывались по структурным данным [4] с учетом эффектов ковалентной связи с соседними ионами кислорода, как это делалось для иона Fe^{2+} в FeCr_2O_4 [6]. В процессе расчета величины параметров $B_0^{(4)}$ и $B_3^{(4)}$ получились равными (в см^{-1}) -9369 и -9828 соответственно. Значение $B_0^{(2)} \simeq 550\text{ см}^{-1}$ определяется суммой почти одинаковых вкладов от зарядов удаленных лигандов и полей ближайшего окружения, но с противоположными знаками, что приводит к большой погрешности в его теоретической оценке. Величина $B_0^{(2)}$ уточнялась по значению магнитного момента основного состояния $3.9\mu_B/\text{f.u.}$, который был измерен в работе [7] методами мёссбауэровской спектроскопии. Параметр спин-орбитальной связи принимался равным $\lambda = -95\text{ см}^{-1}$ [5]. Последние два слагаемых в (1) учитывают внешнее магнитное (\mathbf{H}) и суперобменное (молекулярное B_{mol}) поля. Ось квантования z выбрана вдоль оси c кристалла, а направления осей x и y – так, чтобы величина $\text{Im} B_3^{(4)}$ оказалась равной нулю. В соответствии с имеющимися экспериментальными данными [7] предполагалось, что в магнитно-упорядоченном состоянии спины направлены вдоль оси c . Результат расчета частот переходов приведен на рис. 1.

¹⁾e-mail: meremin@kpfu.ru

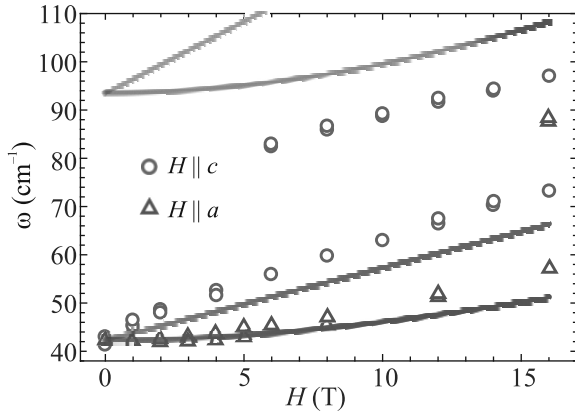


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рассчитанные зависимости положения линий поглощения при различных значениях напряженности и ориентациях магнитного поля H . Символами изображены экспериментальные данные из работы [1]. Яркость рассчитанных нами линий пропорциональна вероятностям соответствующих переходов

Волновые функции низколежащих уровней энергии в нулевом магнитном поле имеют вид (в базисе $|M_L M_S\rangle$) и с энергией в аргументе в cm^{-1}):

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}(0) &\approx 0.65|2, 2\rangle - 0.60|0, 1\rangle - 0.4|-1, 2\rangle, \\ \psi_0(42.4) &\approx -0.72|0, 0\rangle + 0.46|2, 1\rangle - 0.34|-2, -1\rangle, \\ &\quad - 0.32|-1, 1\rangle - 0.24|1, -1\rangle, \\ \psi_{\downarrow}(93.6) &\approx -0.69|0, -1\rangle - 0.51|-2, -2\rangle, \\ &\quad - 0.33|1, -2\rangle + 0.31|2, 0\rangle - 0.23|-1, 0\rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Величина обменного поля считалась равной $B_{mol} \sim -36.5$ Тл. Для предварительной оценки этого значения использовалась информация об обменных интегралах, полученная по температурным зависимостям магнитной восприимчивости в работе [2]. Параметры оператора кристаллического поля, как и величина обменного поля, затем уточнялись по положению терагерцовой линии поглощения 42 см^{-1} в нулевом магнитном поле и в поле 12 Тл [1].

Наша модель отличается от предложенной в работе [1]. Используемая авторами модель одиночного центра с эффективным спином $S = 2$ ограничена в своем применении, так как не учитывает обменной связи между ионами железа, а также орбитальные степени свободы. Экспериментальные данные (кружки и треугольники), приведенные на рис. 1, получены при $T = 4\text{ К}$, что ниже температуры Кюри, которая по данным работы [7] равна 12 К.

Как видно из рис. 1, наш расчет верно передает тенденцию изменения частот переходов $\psi_{\uparrow} \rightarrow \psi_0$ при увеличении магнитного поля до 15 Тл. Рассчитанные вероятности переходов на состояние ψ_{\downarrow} , изображен-

ные бледными линиями в области 100 см^{-1} , относительно малы, но растут с увеличением магнитного поля. Поэтому это состояние в эксперименте наблюдается только в поле порядка 16 Тл.

3. Эффект оптического диода как следствие интерференции магнитных и электрических дипольных переходов. Эффективный оператор взаимодействия $3d$ -электрона с электрическим полем, в общем случае, имеет вид [8, 9]:

$$H_E = \sum_{p t k} \left\{ E^{(1)} U^{(k)} \right\}_t^{(p)} D_t^{(1k)p}, \quad (3)$$

где фигурные скобки обозначают прямое произведение сферических компонент вектора электрического поля и единичного неприводимого тензорного оператора. Индекс p принимают нечетные значения 1, 3 и 5, а индекс k – только четные 2 и 4. Так как позиция иона железа имеет тригональную симметрию, индекс t принимает значения $+3, -3$ и 0 . Октаэдрическое окружение Fe^{2+} из ионов кислорода искажено – центр инверсии отсутствует [2], поэтому запрет на электрические-дипольные переходы по четности снимается из-за примеси возбужденных конфигураций противоположной четности. Величины параметров оператора (3) были рассчитаны на хартри-фоковских волновых функциях с учетом смешивания состояний основной электронной конфигурации $3d^6$ с возбужденной $3d^5 4p$ из-за нечетного кристаллического поля на позициях Fe^{2+} , а также с состояниями с переносом заряда: когда электроны из внешних электронных оболочек ионов кислорода перескакивают в $3d$ -оболочку железа. В результате расчета получены следующие значения (в дебаях):

$$\begin{aligned} D_0^{(12)1} &= -2.16, \quad D_0^{(12)3} = 1.04, \\ D_0^{(14)3} &= -3.30, \quad D_0^{(14)5} = -0.05, \\ D_3^{(12)3} &= 0.91, \quad D_0^{(14)3} = -2.39, \\ D_3^{(14)5} &= 0.29. \end{aligned} \quad (4)$$

Оператор взаимодействия с компонентой магнитного поля электромагнитной волны записывался в стандартном виде:

$$H_M = \mu_B n (\mathbf{L} + g_e \mathbf{S}) \mathbf{H}^\omega, \quad (5)$$

где n – коэффициент преломления, равный $n = 3.3$ [1]. Коэффициент поглощения пропорционален квадрату модуля от суммы операторов (3) и (5)

$$\alpha \propto |\langle f | H_E + H_M | 0 \rangle|^2. \quad (6)$$

Из (6) видно, что если одновременно разрешены как электрические, так и магнитные дипольные пе-

переходы, то в вероятности суммарного перехода появляются слагаемые, пропорциональные произведению компонент магнитного и электрического полей, т.е. – это динамический магнитоэлектрический эффект. Интенсивность света, прошедшего через пластинку образца, при сохранении поляризации электрической компоненты изменяется также при изменении направления волнового вектора, так как при этом направление магнитной компоненты света изменяется на противоположное. В терминах магнитооптики можно говорить об эффекте невзаимности, обусловленной интерференцией магнитных и электрических дипольных переходов. Интересно отметить, что в этом случае видна интерференция взаимно ортогональных электрической и магнитной компонент в одной и той же световой волне. При этом, в отличие от статического магнитоэлектрического эффекта, наличие постоянного внешнего магнитного поля необязательно.

Для контроля правильности наших представлений о происхождении спектров возбуждения (в принципе они могли бы быть связаны с коллективными возбуждениями типа магнонов) для начала мы рассчитали относительные интенсивности переходов при различных поляризациях электромагнитной волны. Результаты нашего расчета для переходов в нулевом поле приведены на рис. 2. Как вид-

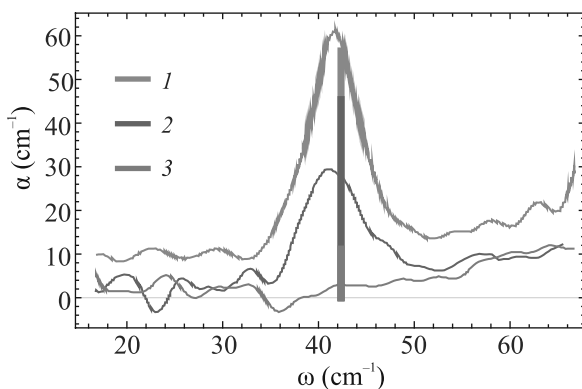


Рис. 2. (Цветной онлайн) Рассчитанные интенсивности поглощения при различных поляризациях падающего света изображены вертикальными отрезками. 1 – $E^\omega \perp c, H^\omega \perp c$; 2 – $E^\omega \parallel c, H^\omega \perp c$; 3 – $E^\omega \perp c, H^\omega \parallel c$. Подразумевается, что высота 1 равна сумме всех трех, а высота 2 – сумме двух нижних отрезков. Сплошными контурами изображены формы спектров поглощения из работы [1] при $T = 12\text{--}14\text{ K}$

но из рис. 1, 2, предложенная модель воспроизводит частоту и относительные интенсивности переходов в пределах низко лежащих состояний ионов железа в слабых магнитных полях. Таким образом, наблюда-

емое в [1] поглощение на частоте 42 cm^{-1} мы интерпретируем как переход между состояниями ψ_\uparrow и ψ_0 .

Результаты расчетов вероятностей переходов при наложении внешнего магнитного поля представлены на рис. 3. Из-за примерного равенства матрич-

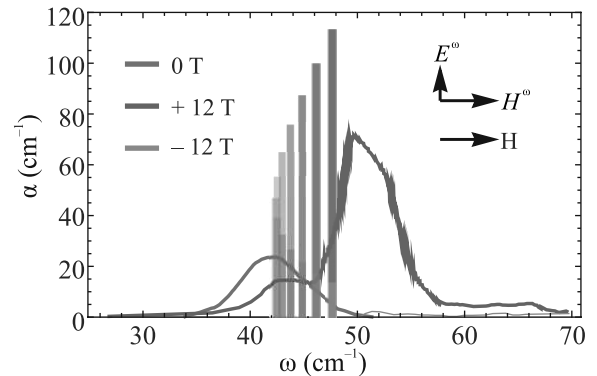


Рис. 3. (Цветной онлайн) Интенсивности поглощения при изменении направления внешнего магнитного поля в конфигурации $E^\omega \parallel c, H^\omega \perp c$, рассчитанные по формуле (6) с шагом 2 Тл. Смысл вертикальных отрезков тот же, что и на рис. 2. Сплошными контурами изображены формы спектров поглощения [1] при $T = 4\text{ K}$

ных элементов от операторов магнитных и электрических дипольных переходов возник эффект оптического диода. Особенно ярко эффект интерференции проявляется на переходе $\psi_\uparrow \rightarrow \psi_0$. Сплошным контуром изображена форма спектра поглощения в магнитных полях 0 (зеленый) и ± 12 Тл (красный, бирюзовый) из [1]. Первая слева вертикальная линия – расчет по формуле (6) в нулевом внешнем магнитном поле. Как видно из рис. 1, 3, рассчитанный нами сдвиг частоты перехода при увеличении магнитного поля несколько отстает от того, который зарегистрирован экспериментально. Однако тенденция увеличения эффекта оптического диода соответствует эксперименту. На рисунке 3 видно, что рассчитанные коэффициенты поглощения при переключении направления внешнего магнитного поля 12 Тл действительно отличаются на два порядка величины, как об этом сообщалось в работе [1].

На рисунке 4 приведены рассчитанные нами зависимости интегральной интенсивности поглощения при изменении величины и направления внешнего магнитного поля, нормированные на их значения в нулевых магнитных полях.

Интересно отметить, что по нашим расчетам эффект оптического диода должен также наблюдаться и в конфигурациях (геометриях) $E^\omega \parallel H \perp c, H^\omega \parallel c$ и $E^\omega \parallel c, H \perp H^\omega \perp c$. Этот вывод интересно было бы проверить экспериментально.

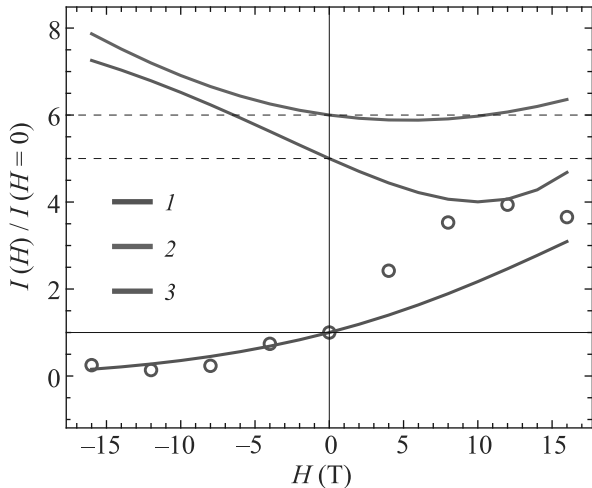


Рис. 4. (Цветной онлайн) Относительная интенсивность поглощения на переходе $\psi_{\uparrow} \rightarrow \psi_0$ при различных ориентациях компонент падающего света при постоянном направлении волнового вектора \mathbf{k} , нормированная на величину поглощения в нулевом магнитном поле. 1 – $E^{\omega} \| c \ H \| H^{\omega} \perp c$; 2 – $E^{\omega} \| c \ H \perp H^{\omega} \perp c$; 3 – $E^{\omega} \| H \perp c \ H^{\omega} \| c$. Кружками представлены относительные интенсивности, оцененные по площадям (интегральная интенсивность) под контурами поглощения $I = \int_{\omega} \alpha d\omega$ из работы [1]

Отклонение расчетной линии от экспериментальных точек (отмеченных кружками) в области положительных значений H , возможно, связано с наличием сателлита, неизвестного пока происхождения, в высокополевом крыле линии.

4. Заключение. Рассчитаны матричные элементы магнитных и электрических дипольных переходов между подуровнями тонкой структуры термина Fe^{2+} (5D) в октаэдрических позициях кристалла $FeZnMo_3O_8$. Найдено, что они одного порядка

величины, поэтому возможна интерференция электрических и магнитных дипольных переходов, из-за которой и возникает явление невзаимности. Полевая зависимость и правила отбора в терагерцевом спектре поглощения успешно воспроизводятся разработанной микроскопической моделью. Предложенная теория эффекта оптического диода может быть использована для предсказаний этого эффекта на различных переходах, как в терагерцевом, так и в оптическом диапазонах частот в различных соединениях с незаполненными $3d$ -оболочками.

Авторы благодарны доктору МВ Иохиму Дейзенхоферу за обсуждение особенностей терагерцевой спектроскопии кристаллов $Fe_{(1-x)}Zn_xMo_3O_8$ и стимулирующие замечания.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. Sh. Yu, B. Gao, J. W. Kim, S.-W. Cheong, M. K. L. Man, J. Madeo, K. M. Dani, and D. Talbayev, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 037601 (2018).
2. D. Bertrand and H. Kerner-Czeskleba, *Le J. Phys. Colloq.* **36**, 379 (1975).
3. S. V. Streltsov, D.-J. Huang, I. V. Solovyev, and D. I. Khomskii, *JETP Lett.* **109**, 786 (2019).
4. S. Reschke, A. A. Tsirlin, N. Khan, L. Prodan, V. Tsurkan, I. Kézsmárki, and J. Deisenhofer, *Phys. Rev. B* **102**, 094307 (2020).
5. A. Abragam and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Oxford University Press, Oxford (2012).
6. K. V. Vasin and M. V. Eremin, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 225501 (2021).
7. F. Varret, H. Czeskleba, F. Hartmann-Boutron, and P. Imbert, *J. Phys.* **33**, 549 (1972).

Режим сильной связи и осцилляции Раби в GaAs/AlGaAs гетероструктурах как следствие конденсации электронно-дырочных пар при комнатной температуре

П. П. Васильев¹⁾

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

Поступила в редакцию 22 февраля 2022 г.

После переработки 9 марта 2022 г.

Принята к публикации 9 марта 2022 г.

Приведены результаты экспериментов по исследованию когерентных осцилляций оптического поля в диапазоне ТГц, наблюдавшихся в GaAs/AlGaAs объемных гетероструктурах при генерации импульсов сверхизлучения. Обнаружены оптические спектры в виде дублетов, характерных для осцилляций Раби с расщеплением в диапазоне 1.3–4.4 мэВ на длине волны 860–890 нм и соответствующие когерентные колебания поля во временной области. Эффект возникал только в режиме сильной связи оптического поля с электронно-дырочной системой. Продемонстрировано, что режим сильной связи в условиях эксперимента возможен только при условии конденсации электронно-дырочных пар в фазовом пространстве. Результаты экспериментов являются еще одним убедительным доказательством конденсации электронов и дырок в объемном GaAs при комнатной температуре, обсуждавшейся в наших работах ранее.

DOI: 10.31857/S1234567822070047, EDN: fkvuxh

Исследование резонансного взаимодействия электромагнитного поля с квантовыми системами различной природы является важной частью современной квантовой оптики и квантовых информационных технологий [1]. Одним из основных фундаментальных эффектов такого взаимодействия являются осцилляции Раби, представляющих собой периодический обмен энергией между полем и квантовой средой. В последние годы осцилляции Раби интенсивно исследовались в широком спектре квантовых систем, включая ультрахолодные газы, квантовые точки, отдельные спины, сверхпроводящие кубиты, экситонные поляритоны в микрорезонаторах, и др. [2–5]. Возникновение осцилляций Раби характерно не только для взаимодействия поля с одиночными квантовыми излучателями, но также наблюдалось в экспериментах с ансамблями осцилляторов, включая режимы коллективного спонтанного распада (сверхизлучения) [6].

В настоящее время общепризнано, что для возникновения осцилляций Раби необходим режим сильной связи между электромагнитным полем и квантовым излучателем [1, 7, 8]. Количественной величиной этой связи является параметр $g_0 = \mu\sqrt{\hbar\omega/2\varepsilon V}$, где μ есть матричный элемент перехода, $\hbar\omega$ – энергия кванта, ε – диэлектрическая

проницаемость среды, а V – объем, занимаемый оптической модой в среде. Очевидно, что для увеличения параметра связи разумно использовать микрорезонаторы различного типа с малой величиной V . Экспериментально и теоретически показано, что увеличение числа N взаимодействующих с полем излучателей приводит к росту параметра связи по формуле $g(N) = g_0\sqrt{N}$ [6, 9, 10]. Необходимым условием возникновения осцилляций Раби является выполнение соотношения

$$2g > (\kappa + \gamma)/2, \quad (1)$$

где κ – величина, обратная времени жизни фотонов в резонаторе, а γ – скорость спонтанной рекомбинации [1]. Это соотношение демонстрирует преимущества использования высокодобротных резонаторов с малой величиной κ [5, 11–13].

Квантовые точки и экситоны-поляритоны в квантовых ямах, помещенные в микрорезонаторы, являются основными полупроводниковыми объектами для исследований в области резонаторной квантовой электродинамики [14–16]. В таких устройствах при определенных условиях возможно наблюдение Бозе конденсации экситон-поляритонов при криогенных температурах [17]. Однако широко распространенные лазерные гетероструктуры с типичными длинами резонаторов 100–500 микрон никогда ранее не рассматривались в качестве кандидатов для исследо-

¹⁾e-mail: peter@lebedev.ru

ваний режимов сильной связи и наблюдения осцилляций Раби. Действительно, при характерных значениях параметров μ , ε и V величина $g_0/2\pi \sim 10^8$ Гц или 0.4 мкэВ, что на несколько порядков меньше типичных значений $(\kappa + \gamma)$ [18], делает невозможным наблюдение этих эффектов в таких структурах.

Однако, как было указано выше, эффективным методом увеличения связи поля со средой является увеличение числа излучателей, взаимодействующих с одной и той же модой поля. В наших предыдущих работах [19–22] был экспериментально обнаружен факт возникновения сверхизлучающего фазового перехода в лазерных гетероструктурах при комнатной температуре. При этом оказалось, что, электронно-дырочный ансамбль обладает дальним порядком [23], когерентность сверхизлучения превосходит когерентность лазерного излучения, наблюдавшегося в этих же образцах, а распространение импульсов в среде имеет сверхсветовую природу [23, 24]. Кроме того, сверхизлучение имеет суперпуассоновую статистику, а функции Вигнера излучения имеют обширные области отрицательных значений, что говорит о квантовой природе импульсов сверхизлучения [25]. В данной работе экспериментально продемонстрировано, что конденсация электронов и дырок на дно зон, происходящая при посредничестве резонансных фотонов поля при сверхизлучающем квантовом переходе, позволяет осуществить режим сильной связи поля и среды и наблюдать осцилляции Раби.

В экспериментах использовались модифицированные лазерные гетероструктуры на основе GaAs/AlGaAs. Активная область состояла из собственного GaAs толщиной 0.2 микрона. Длина образцов варьировалась от 100 до 450 микрон, ширина излучающей области была в пределах 6–7 микрон. Коэффициент отражения от граней образцов равен 0.32. Вдоль оси резонатора формировались три области с целью реализации режима сверхизлучения [20, 22]. Фото двух образцов представлено на рис. 1. Две области, прилегающие к краям структуры, накачивались импульсами тока с амплитудой, в несколько раз превосходящей порог лазерной генерации.

Для предотвращения возникновения лазерного излучения на центральную часть образцов подавалось постоянное запирающее напряжение в диапазоне – (1–10) В. Это позволяло получать концентрации электронно-дырочных пар более $6 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, достичь выполнения критерия квантового вырождения [26] и наступления режима нестационарной конденсации в фазовом пространстве и сверхизлучаю-

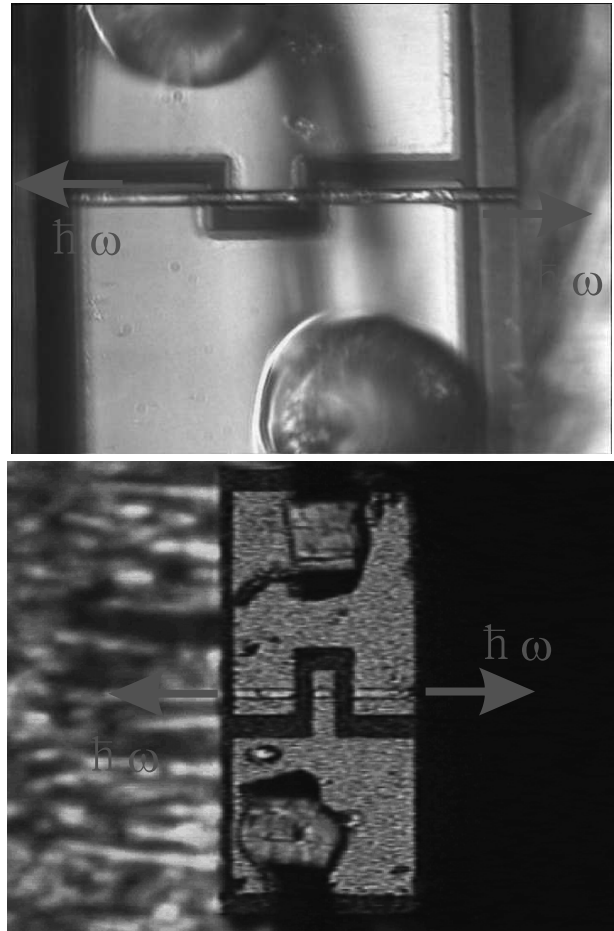


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фотографии (вид сверху) двух гетероструктур с длиной 350 (вверху) и 100 (внизу) микрон. Горизонтальная линия соответствует активной области шириной 5–6 микрон. Стрелками показаны направления генерируемого излучения

щего фазового перехода [21]. При малых токах накачки и отсутствии запирающего напряжения все образцы генерировали стандартное лазерное излучение, спектр которого состоял из одной или нескольких продольных мод резонатора. В режиме сверхизлучения образцы излучали фемтосекундные импульсы с энергией в диапазоне 10–30 пДж, и в определенных диапазонах накачки оптический спектр состоял из дублетов.

На рисунке 2 представлены типичные дублетные спектры сверхизлучения, генерируемого разными образцами. Все спектры смещены в длинноволновую область на более, чем 10 нм по сравнению с соответствующими лазерными спектрами. Спектральное расщепление между компонентами составляло от 0.49 до 2.61 нм в зависимости от параметров структур и параметров накачки.

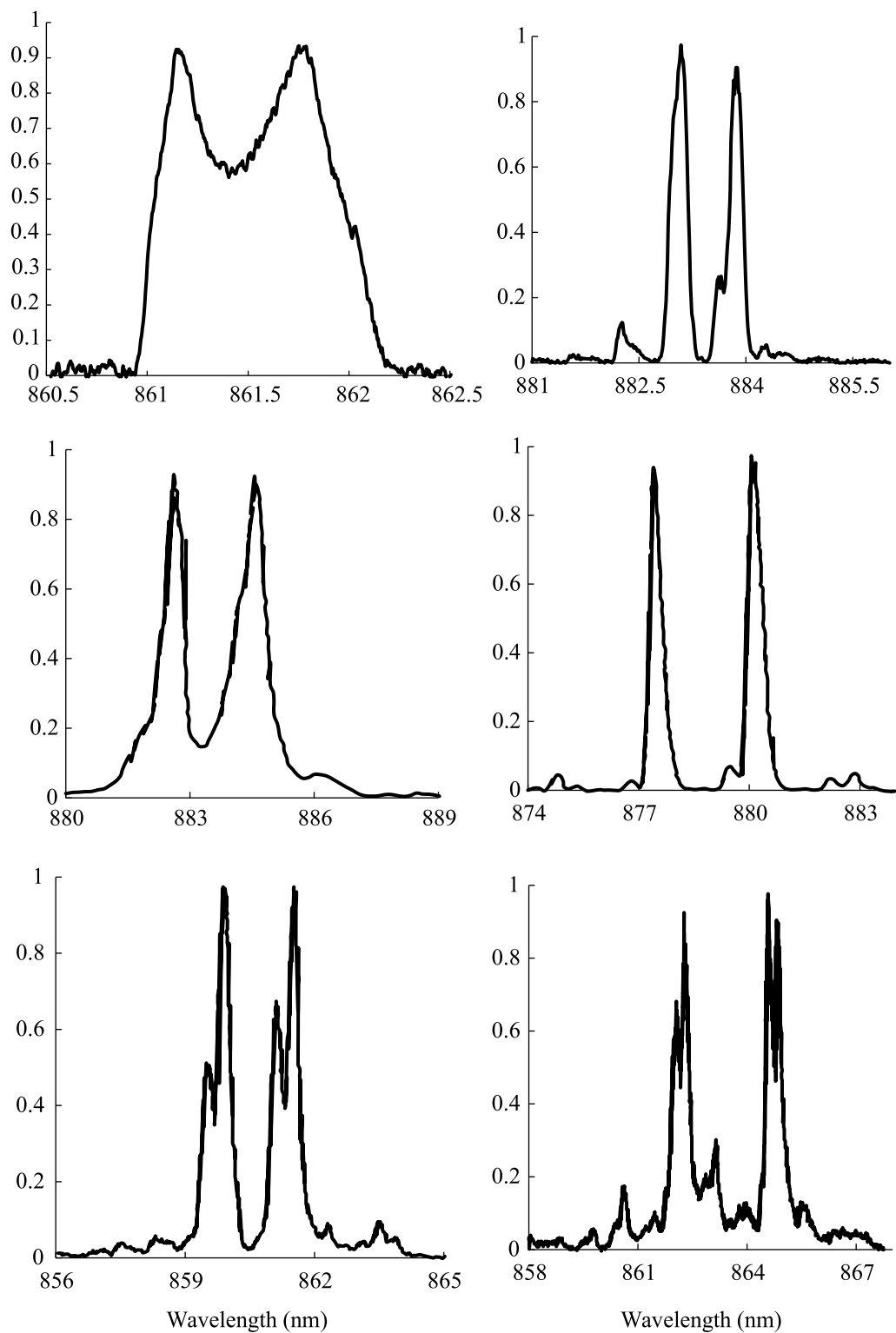


Рис. 2. Оптические спектры 6 образцов в режиме сверхизлучения

Одновременно с измерениями в спектральной области регистрировались автокорреляционные функции интенсивности излучения при генерации второй

гармоники в сканирующем интерферометре Майкельсона. Эта методика позволяет с фемтосекундной точностью измерить когерентность и параметры

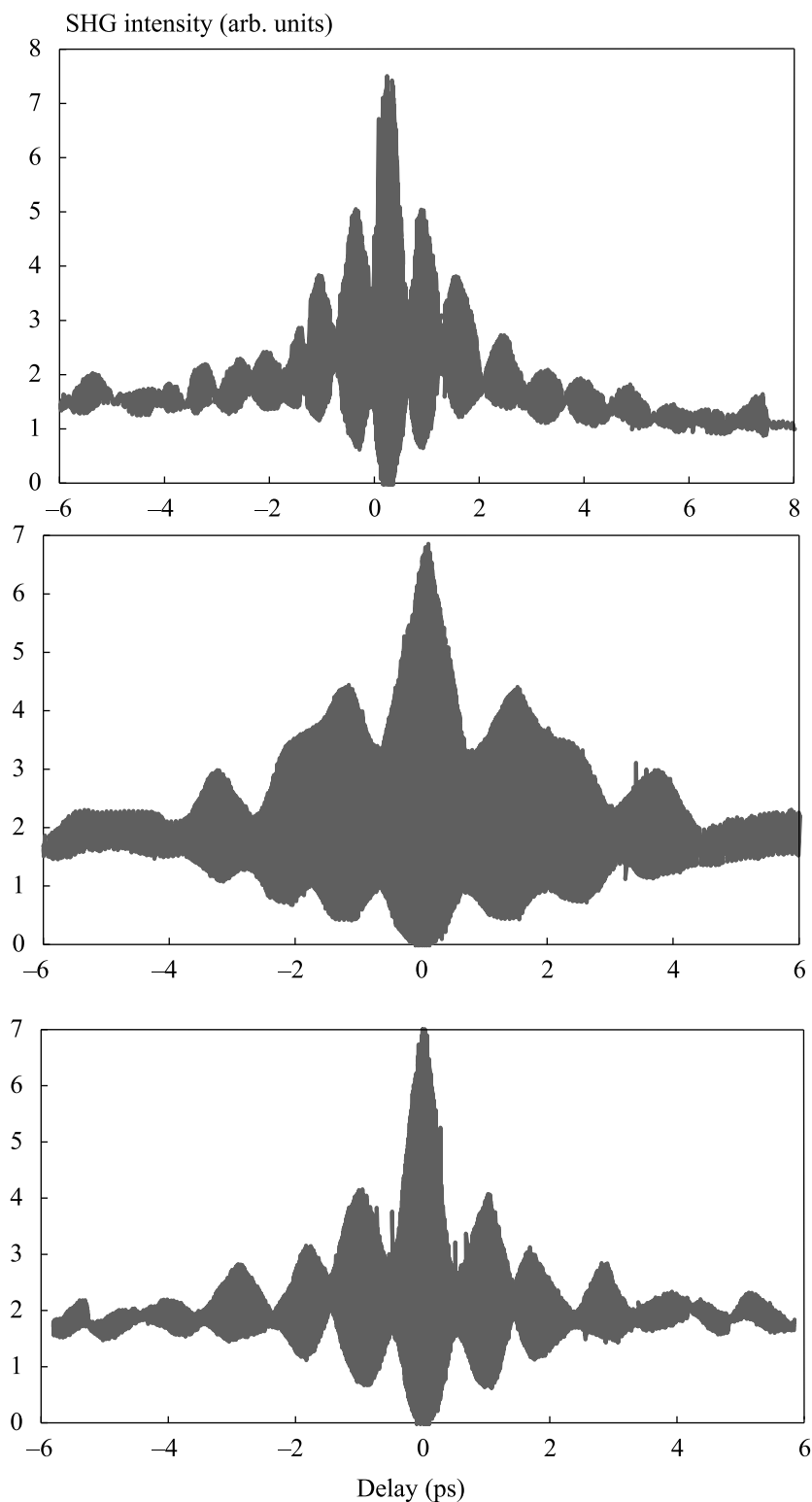


Рис. 3. Автокорреляционные функции 2-го порядка сверхизлучения для образцов S03 при двух значениях запирающего напряжения (вверху) и H16 (внизу)

осцилляций оптического поля [18]. На рисунке 3 показаны типичные автокорреляционные функции ин-

тенсивности, снятые с разрешением по интерференционным полосам в сканирующем интерферометре

Майкельсона, для двух образцов с длиной резонатора 100 микрон. Время двукратного обхода света в резонаторе составляло 3.1–3.2 пс. На рисунке 3 хорошо видны осцилляции поля с частотой около 1 ТГц. Расстояние между компонентами спектральных дублетов и частота осцилляций поля зависели от параметров накачки. Рисунок 4 иллюстрирует измеренное спектральное расщепление для одного из образцов как функцию величины запирающего напряжения.

В таблице 1 приведены параметры 6 образцов и соответствующие данные измерений. Экспериментальные данные, представленные на рис. 2-4 и в табл. 1, можно объяснить в рамках режима сильной связи и осцилляций Раби. Действительно, в обычном лазерном режиме в используемых гетероструктурах наблюдение осцилляций Раби невозможно из-за слабой связи электронно-дырочной системы с электромагнитным полем в резонаторе. Типичная ширина лазерной моды в нашем случае составляет не более 0.2 нм. Из-за принципа Паули электроны и дырки сильно “размазаны” по энергии. Поэтому, только малая часть всех носителей заряда, инжектированных в активную область, взаимодействует с лазерной модой. Эту часть легко оценить, зная плотность состояний в зонах, пороговую плотность лазерного излучения, длину волны излучения и ширину лазерной моды. Эта оценка дает значение для величины N при лазерном излучении в диапазоне 10^3 – 10^4 , что явно недостаточно для выполнения критерия (1). Однако в процессе сверхизлучающего фазового перехода происходит нестационарная конденсация электронов и дырок на дно зон. Этот процесс подробно описан нами ранее [21, 27, 28]. В результате конденсации число излучателей, взаимодействующих с полем, быстро растет, и параметр связи $g(N) = g_0\sqrt{N}$ увеличивается на много порядков. Когда число N становится настолько велико, что выполняется критерий (1), то наступает режим сильной связи и, наблюдение осцилляций Раби становится возможным. Ранее нами было выяснено, что с ростом запирающего напряжения увеличивается количество электронно-дырочных пар, сконденсированных на дно зон и участвующих в сверхизлучении [29]. Этот факт объясняет наблюдаемое увеличение спектрального расщепления с напряжением, представленным на рис. 4.

Измеренные величины частоты Раби Ω в табл. 1 достаточно хорошо описываются формулой [1]

$$\Omega = 2\sqrt{g_0^2 N - \frac{(\kappa - \gamma)^2}{4}}. \quad (2)$$

Строго говоря, это выражение имеет ограниченную применимость в случае сильно возбужденных полу-

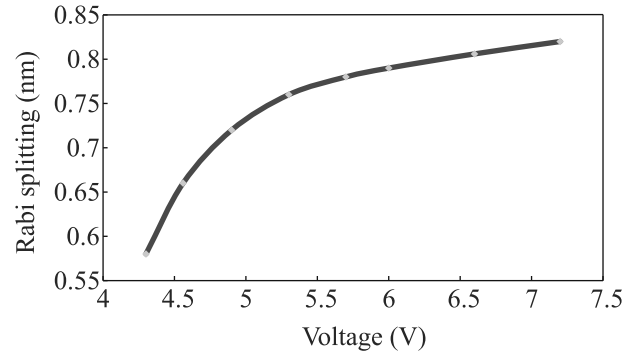


Рис. 4. (Цветной онлайн) Расщепление между компонентами дублета как функция запирающего напряжения

проводников, где большую роль могут играть многочастичные взаимодействия [30]. Однако, эта формула дает качественно правильную оценку частоты Раби и в нашем случае. Действительно, число электронно-дырочных пар, исходя из измерений энергии импульсов сверхизлучения, можно оценить величиной $N = 5.8 \times 10^7$ – 1.2×10^8 . Для дипольного момента межзонного перехода μ в GaAs различные публикации дают значения в диапазоне 20–29 Дебай [31]. Для значений параметров κ и V , приведенных в табл. 1, формула (2) дает величины частоты Раби $\Omega/2\pi = (0.6$ – $1.7)$ ТГц, что хорошо соответствует экспериментальным данным.

Стоит обратить внимание еще на одну важную деталь. На двух нижних спектрах на рис. 2 отчетливо видна тонкая структура дублетов, состоящая из двух субгармоник. Появление тонкой структуры можно объяснить взаимодействием квантовых излучателей друг с другом. Действительно, как продемонстрировано в [8, 32, 33], учет этого взаимодействия приводит к более сложной структуре спектра, по сравнению с дублетным спектром, описываемым формулой (2). Из-за взаимодействия диполей друг с другом возникают субгармоники, и спектр становится ассиметричным. Автор воспользовался формулой (5.14) из работы [8] и формулой (10) из работы [32] и вычислил спектр осцилляций Раби для параметров образца H11 из табл. 1. Сравнение расчетного спектра и экспериментального представлено на рис. 5.

Формы спектров качественно похожи, хотя и отличаются зеркальным расположением субгармоник. Другой причиной возникновения тонкой структуры спектра осцилляций Раби может быть неоднородное пространственное заполнение резонатора когерентным электронно-дырочным состоянием и его разделение на две симметричные части. Этот вопрос требует дополнительного исследования.

Таблица 1. Экспериментальные результаты

Образец	H11	S03	H16	C13	D07	B08
Длина волны излучения (нм)	861	856	864	885	879	881
Длина резонатора (микрон)	100	100	100	150	150	350
Межмодовое расстояние (нм)	0.81	0.84	0.83	0.68	0.67	0.26
Q	1.35×10^4	1.35×10^4	1.35×10^4	1.98×10^4	1.97×10^4	4.63×10^4
V (см ⁻³)	1.2×10^{-10}	1.2×10^{-10}	1.2×10^{-10}	1.8×10^{-10}	1.8×10^{-10}	4.2×10^{-10}
$k/2\pi$ (ТГц)	0.74	0.74	0.74	0.50	0.50	0.21
Спектральное расщепление (нм)	1.79	2.72	2.52	0.84	2.49	2.37
$\Omega/2\pi$ (ТГц)	0.72	1.09	1.01	0.32	0.97	0.91
Ω (мэВ)	2.91	4.41	4.09	1.29	3.92	3.65

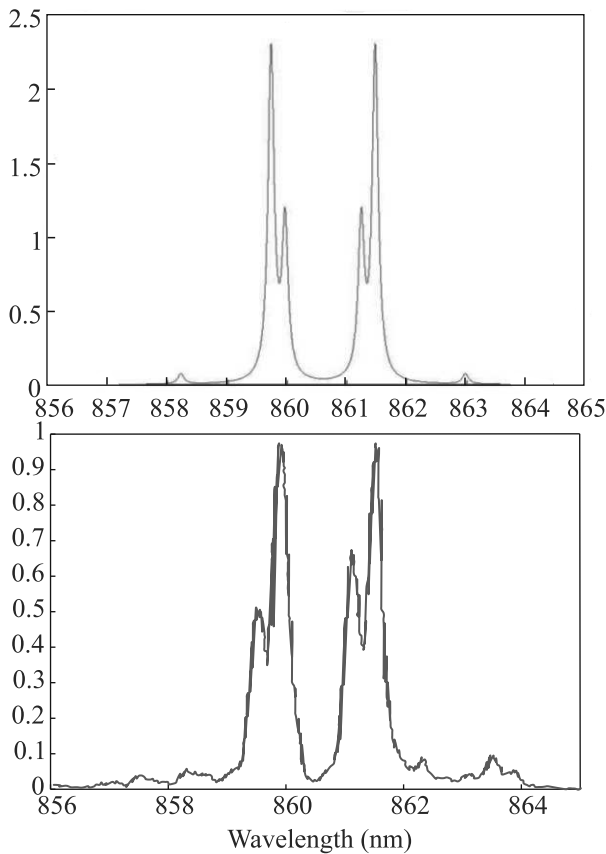


Рис. 5. (Цветной онлайн) Вычисленный с учетом междипольного взаимодействия (вверху) и экспериментальный (внизу) спектр осцилляций Раби

Таким образом, в данной работе были исследованы дублетные спектры и соответствующие когерентные осцилляции оптического поля, генерируемые объемными полупроводниковыми гетероструктурами на основе GaAs/AlGaAs в режиме сверхиз-

лучения. Продемонстрировано, что в отличие от лазерного режима в этих структурах, когда существует режим слабой связи, в случае сверхизлучения наблюдается режим сильной связи поля с полупроводниковой средой. Показано, что режим сильной связи в условиях эксперимента возможен только при условии конденсации достаточно большого числа электронно-дырочных пар в фазовом пространстве. Обнаружены осцилляции Раби со спектральным расщеплением в диапазоне 1.3–4.4 мэВ на длине волны 860–890 нм и соответствующие когерентные колебания поля во временной области с частотами до 1.1 ТГц. Результаты экспериментов являются еще одним убедительным доказательством конденсации электронов и дырок в объемном GaAs при комнатной температуре, обсуждавшейся в наших работах ранее.

В заключение автор выражает благодарность Х. Кан и Х. Ота за создание образцов гетероструктур и Р. Пенти за поддержку.

1. G. S. Agarwal, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge (2012).
2. Y. Ota, D. Takamiya, R. Ohta, H. Takagi, N. Kumagai, S. Iwamoto, and Y. Arakawa, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 093101 (2018).
3. W. Guerin, T. S. do Espirito Santo, P. Weiss, A. Cipris, J. Schachenmayer, R. Kaiser, and R. Bachelard, *Phys. Rev. Letts.* **123**, 243401 (2019).
4. F. Yoshihara, Y. Nakamura, F. Yan, S. Gustavsson, J. Bylander, W.D. Oliver, and J.-S. Tsai, *Phys. Rev. B* **89**, 020503 (2014).
5. G. Khitrova, H. M. Gibbs, M. Kira, S.W. Koch, and A. Scherer, *Nat. Phys.* **2**, 81 (2006).
6. Y. Kaluzny, P. Goy, M. Gross, J.M. Raimond, and S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1175 (1983).

7. D. S. Dovzhenko, S. V. Ryabchuk, Yu. P. Rakovich, and I. R. Nabiev, *Nanoscale* **10**, 3589 (2018).
8. A. F. Kockum, A. Miranowicz, S. De Liberato, S. Savasta, and F. Nori, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 19 (2019).
9. G. S. Agarwal, *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, 480 (1985).
10. S. Rudin and T. L. Reineckle, *Phys. Rev. B* **59**, 10227 (1999).
11. C. Weisbuch, M. Nishioka, A. Ishikawa, and Y. Arakawa, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3314 (1992).
12. A. A. Anappara, S. De Liberato, and A. Tredicucci, *Phys. Rev. B* **79**, 201303(R) (2009).
13. С. С. Демирчян, И. Ю. Честнов, С. М. Аракелян, А. П. Алоджанц, А. В. Кавокин, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 56 (2016).
14. H. Kamada, H. Gotoh, J. Temmyo, T. Takagahara, and H. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 246401 (2001).
15. S. V. Poltavtsev, M. Reichelt, I. A. Akimov, G. Karczewski, M. Wiater, T. Wojtowicz, D. R. Yakovlev, T. Meier, and M. Bayer, *Phys. Rev. B* **96**, 075306 (2017).
16. J. Cao, S. De Liberato, and A. V. Kavokin, *New J. Phys.* **23**, 113015 (2021).
17. H. Deng, H. Haug, and Y. Yamamoto, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1489 (2010).
18. P. Vasil'ev, *Ultrafast Diode Lasers: Fundamentals and Applications*, Artech House, Norwood (1995).
19. П. П. Васильев, Х. Кан, Х. Ота, Т. Хирума, *ЖЭТФ* **120**, 1486 (2001).
20. P. P. Vasil'ev, H. Kan, H. Ohta, and T. Hiruma, *JETP* **96**, 310 (2003).
21. P. P. Vasil'ev, *Phys. Stat. Sol. (b)* **241**, 1251 (2004).
22. П. П. Васильев, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 129 (2005).
23. P. P. Vasil'ev, V. Olle, R. V. Penty, and I. H. White, *EPL* **104**, 40003 (2013).
24. P. P. Vasil'ev, R. V. Penty, and I. H. White, *Light Sci. Appl.* **5**, e16086 (2016).
25. P. P. Vasil'ev and R. V. Penty, *New J. Phys.* **22**, 083046 (2020).
26. P. P. Vasil'ev and R. V. Penty, *EPL* **133**, 37004 (2021).
27. P. P. Vasil'ev and I. V. Smetanin, *Phys. Rev. B* **74**, 125206 (2006).
28. П. П. Васильев, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 35 (2022).
29. P. P. Vasil'ev, *Rep. Prog. Phys.* **72**, 076501 (2009).
30. M. Kira and S. W. Koch, *Semiconductor Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge (2012).
31. A. Schülzgen, R. Binder, M. E. Donovan, M. Lindberg, K. Wundke, H. M. Gibbs, G. Khitrova, and N. Peyghambarian, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2346 (1999).
32. A. Joshi and S. V. Lawande, *J. Mod. Opt.* **40**, 1035 (1993).
33. G. S. Agarwal, R. K. Bullough, and N. Nayak, *Opt. Commun.* **85**, 202 (1991).

Генерация оптических гармоник при взаимодействии высокоинтенсивного (до 10^{14} Вт/см²) фемтосекундного лазерного излучения среднего ИК диапазона лазерной системы на кристалле Fe:ZnSe с плотной ламинарной газовой струей

Б. В. Румянцев⁺¹, К. Е. Михеев⁺, А. В. Пушкин⁺, Е. А. Мигаль⁺, С. Ю. Стремоухов^{+*}, Ф. В. Потемкин⁺

⁺ Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^{*} Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 марта 2022 г.

После переработки 9 марта 2022 г.

Принята к публикации 9 марта 2022 г.

В рамках данной работы реализована генерация гармоник низкого порядка (5-я, 7-я и 9-я) при взаимодействии высокоинтенсивного ($I \sim 10^{14}$ Вт/см²) излучения среднего ИК диапазона фемтосекундной лазерной системы на кристалле Fe:ZnSe (длина волны 4.55 мкм, длительность импульса 160 фс (FWHM по интенсивности), энергия импульса до 3.5 мДж) с аргоновой струей (давление струи до 10 бар) в режиме туннельной ионизации ($\gamma = 0.2$). Максимальная эффективность генерации гармоник по энергии составила $2 \cdot 10^{-7}$ (5-я гармоника), $6 \cdot 10^{-9}$ (7-я гармоника) и $3 \cdot 10^{-10}$ (9-я гармоника). Установлено, что при увеличении давления газовой струи нелинейные эффекты распространения генерирующего излучения начинают оказывать существенное влияние на процесс генерации.

DOI: 10.31857/S1234567822070059, EDN: fldmkt

Введение. Явление генерации гармоник низкого и высокого порядков в настоящее время является объектом активных научных исследований. Первые регистрация излучения, имеющего спектр в виде множества отдельных нечетных гармоник генерирующего излучения, была осуществлена в 1987 г. исследователями из Франции и США при фокусировке пикосекундных лазерных импульсов в объем кюветы, заполненной газом [1, 2]. Развитие данных исследований продолжилось с использованием лазеров фемтосекундного уровня длительности, что позволило повысить энергию генерируемого излучения и расширить диапазон генерируемых гармоник в сторону больших энергий фотонов [3], а также реализовать генерацию в режиме малопериодного лазерного воздействия на среду [4]. Развитие экспериментальных методов генерации гармоник и теоретических подходов к описанию данного процесса [5, 6] привело к фундаментальному пониманию процесса генерации гармоник как комплексного эффекта, описание которого требует использования законов квантовой механики, лазерной физики и нелинейной оптики [7].

В настоящее время исследования в области генерации гармоник высокого и низкого порядков направлены на повышение энергии и средней мощно-

сти генерируемого излучения [8], продвижение в сторону рентгеновской части спектра [9], эффективное формирование когерентных аттосекундных импульсов [10, 11], пригодных для исследований динамики атомарных систем на аттосекундных масштабах времени [12, 13], а также на развитие методов управления поляризационными свойствами генерируемого излучения [14]. К настоящему времени генерация гармоник исследовалась как в газовых и плазменных средах [15], так и в заполненных газом капиллярах [16], в объеме [17] и на поверхности твердых мишеней [18, 19]. Несмотря на перспективность данных методов, наиболее экспериментально простым способом является генерация гармоник в газовых средах – в том числе благодаря возможности тонкой подстройки геометрических и оптических параметров газовой струи для оптимизации параметров генерируемого излучения.

Генерация коротковолнового излучения в вакуумной ультрафиолетовой и рентгеновской частях спектра за счет явления генерации гармоник высокого порядка открывает возможности для создания компактных источников когерентного излучения в указанных спектральных диапазонах [20]. При этом, как показывают экспериментальные и теоретические исследования, коротковолновая граница генерируемого спектра гармоник подчиняется закону $\omega_{\max} \sim I\lambda^2$

¹)e-mail: rumjancev.bv15@physics.msu.ru

[5], где I – интенсивность генерирующего излучения, λ – его длина волны. За счет этого открываются два пути для расширения спектра генерируемых гармоник – увеличение интенсивности генерирующего излучения и увеличение его длины волны. При этом увеличение интенсивности приводит к ионизации среды и росту деструктивного вклада свободных электронов, приводящего к нарушению условий фазового синхронизма, что отрицательно сказывается на энергетическом выходе генерируемых гармоник. Таким образом, наиболее естественным способом расширения спектра генерируемых гармоник является увеличение длины волны генерирующего излучения.

Увеличение длины волны генерирующего излучения приводит к уменьшению эффективности фотоэмиссионного отклика одиночного атома за счет расплывания электронного волнового пакета на стадии свободного движения, что приводит к падению энергетического отклика в заданном спектральном интервале пропорционально $1/\lambda^x$, где показатель степени, как показывают теоретические и экспериментальные результаты, принимает значения в диапазоне $x = 5 - 6.5$ [21]. При этом для сохранения энергии генерируемых гармоник при увеличении длины волны λ требуется увеличивать количество атомов, участвующих в генерации, что может быть достигнуто за счет увеличения давления газовой струи и соответствующего изменения условий фазового синхронизма. Одним из способов компенсации увеличения длины волны генерирующего излучения может выступать использование в качестве среды для генерации плотной (на уровне десятков бар) газовой смеси атомарного и молекулярного газов, в которой атомарный газ обеспечивает высокую нелинейность, в то время как молекулярный газ позволяет управлять условиями фазового синхронизма за счет изменения его парциального давления [22].

К настоящему моменту существуют работы, в которых для генерации гармоник используются как источники ближнего (800 нм) [23], так и среднего (3.9 мкм) [24, 25] ИК диапазонов. В данной работе в качестве источника для генерации гармоник впервые используется уникальная фемтосекундная лазерная система на кристалле Fe:ZnSe [26], генерирующая излучение на длине волны 4.55 мкм – в более длинноволновом диапазоне, чем системы, использовавшиеся к настоящему моменту в экспериментах по генерации гармоник.

В рамках данной работы были зарегистрированы гармоники низкого порядка (5-я, 7-я и 9-я) и проведено исследование зависимости энергии генериру-

емых гармоник от давления газовой струи в диапазоне 0.25–10 бар. Измеренные экспериментальные зависимости были соотнесены с теоретическими расчетами, выполненными с использованием непертурбативного теоретического подхода к описанию излучения одиночного атома [27] и интерференционной модели, позволяющей рассчитывать отклик протяженной среды с учетом откликов ансамблей атомов, рассчитанных на квантово-механическом уровне [28]. Проведенное сравнение экспериментальных и теоретических результатов показало, что при увеличении давления газовой струи существенную роль в процессе генерации гармоник начинают играть эффекты нелинейного распространения лазерного излучения, проявление которых было зарегистрировано в рамках проведенного эксперимента.

Экспериментальная установка. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. В качестве источника излучения используется фемтосекундная лазерная система на кристалле Fe:ZnSe [26] (длина волны 4.55 мкм, энергия до 3.5 мДж, длительность импульса 160 фс (FWHM по интенсивности)). Лазерное излучение системы на кристалле Fe:ZnSe фокусируется линзой $f = 150$ мм внутрь иглы (внутренний диаметр 1 мм), через которую пропускается аргон (чистота 6.0). Игла установлена в камере, откачиваемой до давления 10^{-2} Торр (Ebara EV-SA20, 1760 л/мин). В игле друг напротив друга проделаны два отверстия (входное – 400 мкм в диаметре, выходное – 160 мкм), через которые проходит лазерное излучение (диаметр перетяжки по уровню $1/e^2$ интенсивности равен 144 ± 17 мкм, соответствующая вакуумная длина Рэлея 3.58 мм) и выходит излучение генерируемых гармоник. Торцевое отверстие в игле заделано. Энергия генерирующего импульса в перетяжке достигает 1.57 мДж, что соответствует вакуумной интенсивности в перетяжке лазерного излучения $1.13 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Излучение гармоник после камеры взаимодействия собирается коллиматором в волокно, подсоединенное к спектрометру Ocean Optics QE Pro с диапазоном регистрации 200–1000 нм. Давление аргона регулируется посредством газового редуктора, установленного в тракте газа на пути к игле.

Результаты и обсуждение. В рамках проведенного эксперимента были получены спектры излучения гармоник для набора давлений газовой струи (рис. 2). Максимальная эффективность генерации гармоник по энергии составила $2 \cdot 10^{-7}$ (5-я гармоника), $6 \cdot 10^{-9}$ (7-я гармоника) и $3 \cdot 10^{-10}$ (9-я гармоника). Далее в работе обсуждаются зависимости для 5-й и 7-й гармоник, поскольку 9-я гармоника реги-

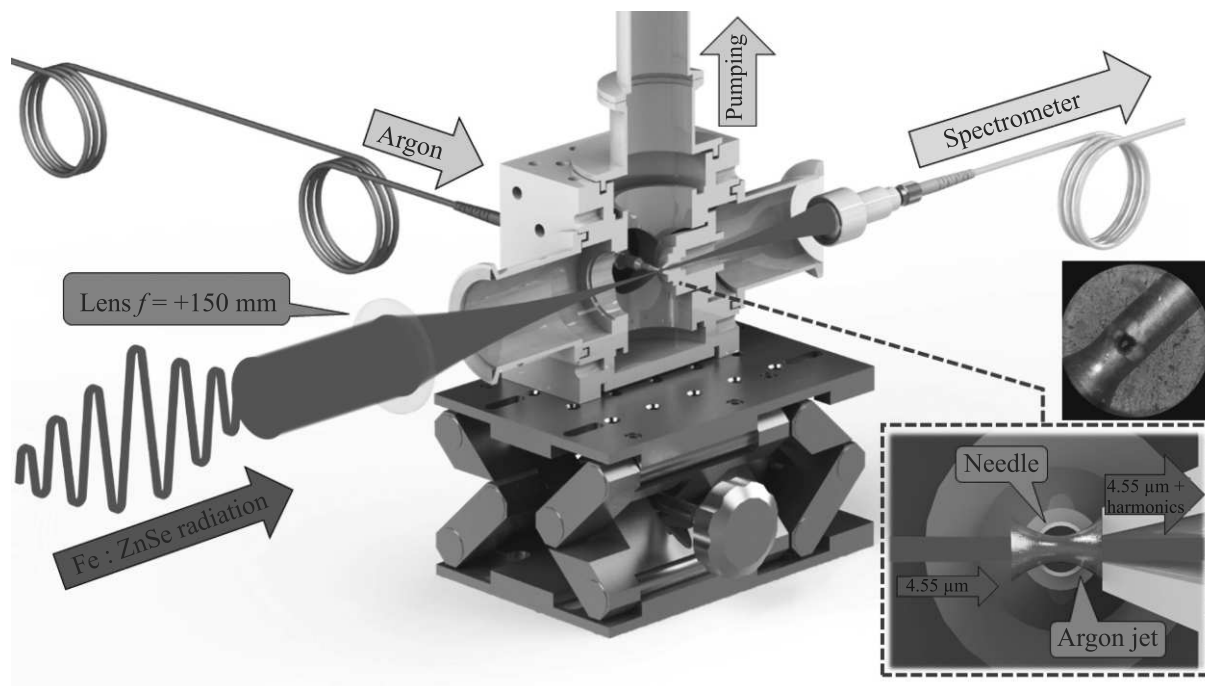


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. Камера взаимодействия показана в разрезе. На вставке показана фотография отверстия в игле

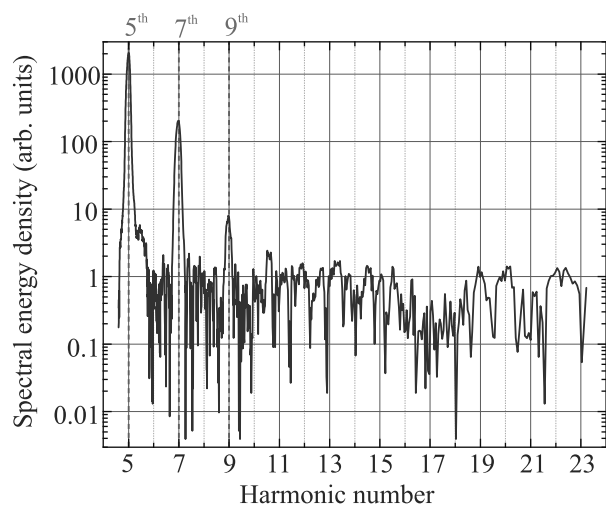


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр гармоник при интенсивности $1.13 \cdot 10^{14}$ Вт/см² на струе газа, давлении струи 10 бар. Отчетливо видны 5-я, 7-я и 9-я гармоники

стрировалась только при максимальном давлении в 10 бар.

Для экспериментального определения энергии каждой гармоники производилась калибровка спектра по энергии с учетом измеренного спектрального отклика системы регистрации и калибровочного значения энергии. Энергия каждой гармоники вы-

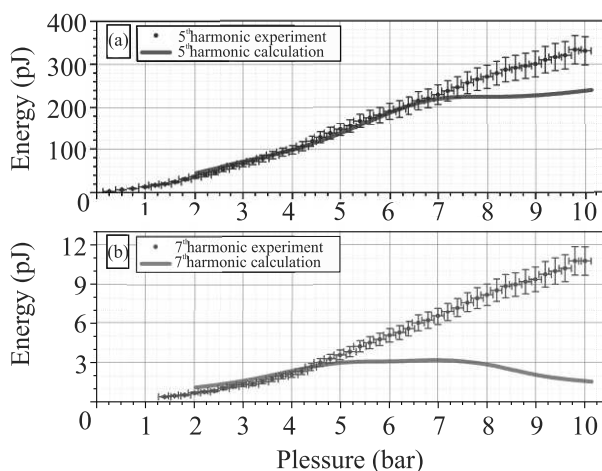


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости энергий 5-й (a) и 7-й (b) гармоник от давления газовой струи – экспериментальные (точки с погрешностями) и расчетные (линии) результаты

числялась как интеграл спектра в окрестности спектрального пика гармоники. На рисунке 3 представлены экспериментальные зависимости энергий 5-й и 7-й гармоник от давления газовой струи. Физические механизмы, определяющие вид экспериментальных зависимостей на рис.3, могут быть качественно описаны на основе пертурбативного приближения и эффектов фазового синхронизма. Справед-

ливость пертурбативного приближения обусловлена малостью энергий генерируемых фотонов ($\hbar\omega_5 = 1.36$ эВ, $\hbar\omega_7 = 1.91$ эВ) по сравнению с потенциалом ионизации атома аргона ($I_p^{Ar} = 15.76$ эВ). В соответствии с [29], зависимость энергии q -й гармоники от давления может быть выражена как

$$E_q \sim |p \cdot F(p)|^2, \quad (1)$$

где $p \sim N$ – давление среды, N – объемная плотность атомов среды, $F(p) = \int_{-L/2}^{L/2} dz' \cdot (1 + i \frac{2z'}{b(p)})^{1-q} \times e^{-i \cdot \Delta k_q(p, z') \cdot z'}$ – интеграл фазового синхронизма, L – длина нелинейной среды, $b(p) = 2z_R(p)$ – конфокальный параметр генерирующего пучка, $z_R(p)$ – его длина Рэлея, $\Delta k_q(p, z)$ – расстройка волновых векторов между генерирующей волной и ее q -й гармоникой. Учитывая материальную дисперсию среды [30] и генерируемой плазмы [31], а также фазу Гюи [21], расстройка волновых векторов может быть выражена как

$$\Delta k_q(p, z) = \frac{2\pi q}{\lambda_1} \frac{p}{p_0} (n_q - n_1)(1 - \eta) - q \frac{\lambda_1}{\pi a^2(p, z)} - q \frac{p}{p_0} \eta n_a r_e \lambda_1, \quad (2)$$

где λ_1 – длина волны генерирующего излучения, p – давление газовой струи, p_0 – атмосферное давление (1 атм), $n_q - n_1$ – разница показателей преломления q -й гармоники и основного излучения при давлении 1 атм, η – степень ионизации, $a^2(p, z)$ – квадрат радиуса гауссова пучка основного излучения по уровню $1/e$ по полю, n_a – концентрация атомов газовой струи, r_e – классический радиус электрона.

В соответствии с приведенными выражениями, при малых давлениях квадратичный рост энергии гармоник $E_q \sim p^2$ обеспечивается ростом концентрации элементарных излучателей (атомов среды), при этом влияние фазовой расстройки Δk_q и, как следствие, интеграла фазового синхронизма $F(p)$ мало – см. выражение (1). При увеличении давления газовой струи влияние фазовой расстройки Δk_q становится сравнимым с влиянием роста количества атомов среды, что приводит к отклонению от зависимости $E_q \sim p^2$.

Для более детального и последовательного описания экспериментально измеренных зависимостей была использована модель, в рамках которой для описания микроскопического отклика среды используется непертурбативный теоретический подход к описанию излучения одиночного атома [27], а для описания макроскопического отклика среды используется интерференционная модель [28]. В рамках модели учтено изменение параметров лазерного поля

при распространении в газе за счет дисперсии и фокусировки линзой, учтены изменение интенсивности лазерного излучения по перетяжке и фаза Гюи. Влияние свободных электронов учитывается в соответствии с классической теорией Лоренца. При этом в модели не учитывается поглощение генерируемого излучения. Результаты расчетов в соответствии с данной моделью представлены на рис. 3. Расчетная зависимость совпадает с экспериментальной в области малых давлений – до 7 бар для 5-й гармоники и до 5 бар для 7-й гармоники, при этом в области больших давлений наблюдается отклонение расчетных зависимостей от экспериментальных. Данное отличие может объясняться влиянием не учтенных в рамках проведенных расчетов нелинейных эффектов распространения генерирующего излучения в газовой среде, которые приводят к изменению пространственно-временной структуры поля генерирующего лазерного импульса. При малых давлениях газовой струи влияние данных эффектов на генерирующий импульс мало вследствие малой концентрации атомов среды, что объясняет совпадение расчетных зависимостей с экспериментальными в области малых давлений. При переходе к большим давлениям концентрация атомов среды увеличивается, что приводит к усилению влияния эффектов нелинейного распространения на генерирующий импульс, в связи с чем наблюдается отклонение расчетных зависимостей от экспериментальных.

Подтверждением данной гипотезы служит зарегистрированное в эксперименте влияние фазовой самомодуляции (ФСМ) на спектр генерируемых гармоник. Так, при изменении давления газовой струи в эксперименте наблюдалось изменение спектральной ширины генерируемых гармоник. Измеренные зависимости спектральной ширины гармоник от давления газа представлены на рис. 4.

Таблица 1. Параметры аппроксимации зависимостей на рис. 4

Уравнение	$y = a + b \cdot x$	
	5-я гармоника	7-я гармоника
Зависимость		
a	12.595 ± 0.035	8.459 ± 0.049
b	6.942 ± 0.060	4.854 ± 0.079
R^2	0.997	0.989

На проявление эффекта ФСМ указывает линейность зависимостей на рис. 4. Так, при ФСМ на нелинейности третьего порядка $\chi^{(3)}$ уширение спектра может быть выражено как [32]

$$\Delta\omega(t) = -k \cdot n_2 \cdot \int_0^L \frac{\partial I(t, z')}{\partial t} \cdot dz' \quad (3)$$

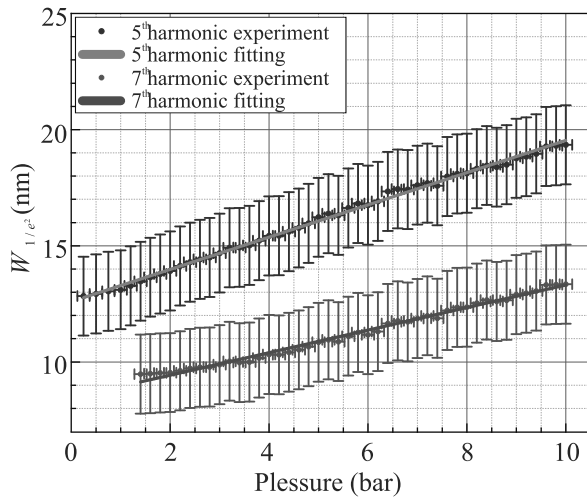


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость спектральной ширины 5-й и 7-й гармоник от давления газовой струи. Точками обозначены экспериментальные зависимости, линиями обозначен результат линейной аппроксимации. Параметры аппроксимации представлены в табл. 1

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число импульса на центральной длине волны, n_2 – коэффициент нелинейности, определяющий нелинейную добавку к показателю преломления $\Delta n = n_2 \cdot I$, время t – время в бегущей системе координат, L – длина среды. Поскольку коэффициент нелинейности n_2 аргона линейно пропорционален давлению газа [33], то, согласно формуле (3), уширение спектра также должно быть линейно пропорционально давлению газа, что и наблюдается в эксперименте (рис. 4). Таким образом, влияние давления газовой среды на спектральную ширину гармоник можно объяснить эффектом ФСМ. При этом, как видно из аппроксимации зависимостей на рис. 4, скорость роста спектральной ширины с увеличением давления больше для 5-й гармоники по сравнению с 7-й. Данный факт объясняется тем, что величина обужения спектра q -й гармоники по сравнению со спектром генерирующего излучения пропорциональна q . Так, например, для случая генерации 2-й гармоники ее спектральная плотность энергии [34]:

$$S_2(\omega) \sim \text{sinc}^2\left(-\frac{\Delta k_2 z}{2}\right) \cdot S_1(\omega). \quad (4)$$

Обобщая данное выражение (4) на случай q -й гармоники и учитывая, что $\Delta k_q \sim q$ (см. формулу (2)), получим, что обужение спектра q -й гармоники описывается функцией:

$$S_q(\omega) \sim \text{sinc}^2\left(-\frac{\text{const} \cdot z}{2 \cdot 1/q}\right). \quad (5)$$

Ширина данной функции $\sim 1/q$. Поэтому спектральные ширины для 5-й и 7-й гармоник, равно как и

скорости их роста при увеличении давления газа, должны соотноситься как обратные номера этих гармоник, т.е. должно выполняться равенство $w_7/w_5 = q_5/q_7$. Отношение $q_5/q_7 = 5/7 = 0.71$, отношение скоростей роста зависимостей на рис. 4 (см. табл. 1) равно $4.854 \frac{\text{нм}}{10 \text{ бар}} / 6.942 \frac{\text{нм}}{10 \text{ бар}} = 0.699 \pm 0.012$. Таким образом, оба отношения совпадают в пределах погрешности эксперимента. Отсюда следует, что разница в скорости роста спектральных ширин 5-й и 7-й гармоник объясняется зависимостью величины обужения спектра гармоники от ее номера.

Закключение. В рамках данной работы реализована генерация гармоник низкого порядка (5-я, 7-я и 9-я) при воздействии высокоинтенсивного (1.13×10^{14} Вт/см²) фемтосекундного лазерного излучения среднего ИК диапазона (4.55 мкм) на струю аргона при давлениях до 10 бар. Максимальная эффективность генерации гармоник по энергии составила $2 \cdot 10^{-7}$ (5-я гармоника), $6 \cdot 10^{-9}$ (7-я гармоника) и $3 \cdot 10^{-10}$ (9-я гармоника).

Сравнение результатов эксперимента и теоретических расчетов указывает на заметное проявление нелинейных эффектов распространения, влияющих на пространственно-временное распределение поля лазерного импульса, при больших (больше 5 бар) давлениях газовой струи. В частности, как было показано в эксперименте, повышение давления газовой струи приводит к уширению спектра каждой из генерируемых гармоник за счет эффекта фазовой самомодуляции генерирующего излучения.

Таким образом, поскольку эффективная генерация гармоник с использованием длинноволнового излучения сопряжена с повышением давления газовой струи, то можно сделать вывод, что, в отличие от излучения ближнего ИК диапазона, при использовании излучения среднего ИК диапазона для генерации гармоник наблюдается существенное влияние нелинейных эффектов распространения на энергетический выход генерируемого излучения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 19-29-12030. Румянцев Б.В. является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. A. McPherson, G. Gibson, H. Jara, U. Johann, T. S. Luk, I.A. McIntyre, K. Boyer, and Ch. K. Rhodes, *JOSA B* **4**(4), 595 (1987).
2. M. Ferray, A. L’Huillier, X.F. Li, L. A. Lompre, G. Mainfray, and C. Manus, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **21**(3), L31 (1988).

3. J. J. Macklin, J. D. Kmetec, and C. L. Gordon III, *Phys. Rev. Lett.* **70**(6), 766 (1993).
4. G. Tempea, M. Geissler, and T. Brabec, *JOSA B* **16**(4), 669 (1999).
5. P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **71**(13), 1994 (1993).
6. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov, A. L'huillier, and P. B. Corkum, *Phys. Rev. A* **49**(3), 2117 (1999).
7. R. A. Ganeev, S. Y. Stremoukhov, A. V. Andreev, and A. S. Alnaser, *Applied Sciences* **9**(8), 1701 (2019).
8. R. Klas, A. Kirsche, M. Gebhardt, J. Buldt, H. Stark, S. Hädrich, J. Rothhardt, and J. Limpert, *PhotonIX* **2**(1), 1 (2021).
9. B. Shan and Z. Chang, *Phys. Rev. A* **65**(1), 011804 (2001).
10. A. S. Johnson, T. Avni, E. W. Larsen, D. R. Austin, and J. P. Marangos, *Philos. Trans. R. Soc. A* **377**(2145), 20170468 (2019).
11. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, М. О. Жукова, А. Н. Цыпкин, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **113**(4), 237 (2021).
12. P. B. Corkum and F. Krausz, *Nat. Phys.* **3**(6), 381 (2007).
13. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, И. В. Бабушкин, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **114**(5), 298 (2021).
14. U. Bengs and N. Zhavoronkov, *Sci. Rep.* **11**(1), 1 (2021).
15. R. A. Ganeev, G. S. Boltaev, S. Y. Stremoukhov, V. V. Kim, A. V. Andreev, and A. S. Alnaser, *Eur. Phys. J. D* **74**(10), 1 (2020).
16. A. Rundquist, Ch. G. Durfee III, Z. Chang, C. Herne, S. Backus, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, *Science* **280**(5368), 1412 (1998).
17. L. Hareli, G. Shoulga, and A. Bahabad, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **53**(23), 233001 (2020).
18. H. Agueny, *J. Chem. Phys.* **154**(24), 244702 (2021).
19. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **112**(1), 22 (2020).
20. М. К. Есеев, В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, *Письма в ЖЭТФ* **114**(7), 444 (2021).
21. В. В. Стрелков, В. Т. Платоненко, А. Ф. Стержантов, М. Ю. Рябикин, *Успехи физических наук* **186**(5), 449 (2016).
22. E. A. Migal, S. Yu. Stremoukhov, and F. V. Potemkin, *Phys. Rev. A* **101**(2), 021401 (2020).
23. E. Constant, D. Garzella, P. Breger, E. Mével, Ch. Dorrer, C. Le. Blanc, F. Salin, and P. Agostini, *Phys. Rev. Lett.* **82**(8), 1668 (1999).
24. A. V. Mitrofanov, D. A. Sidorov-Biryukov, M. V. Rozhko, S. V. Ryabchuk, A. A. Voronin, and A. M. Zheltikov, *Opt. Lett.* **43**(22), 5571 (2018).
25. T. Popmintchev, M.-Ch. Chen, D. Popmintchev et al. (Collaboration), *Science* **336**(6086), 1287 (2012).
26. E. Migal, A. Pushkin, B. Bravy, V. Gordienko, N. Minaev, A. Sirotkin, and F. Potemkin, *Opt. Lett.* **44**(10), 2550 (2019).
27. A. V. Andreev, S. Yu. Stremoukhov, and O. A. Shoutova, *Eur. Phys. J. D* **66**(1), 1 (2012).
28. S. Yu Stremoukhov and A. V. Andreev, *Laser Physics* **28**(3), 035403 (2018).
29. X. F. Li, A. l'Huillier, M. Ferray, L. A. Lompré, and G. Mainfray, *Phys. Rev. A* **39**(11), 5751 (1989).
30. J. Rothhardt, M. Krebs, S. Hädrich, S. Demmler, J. Limpert, and A. Tünnermann, *New J. Phys.* **16**(3), 033022 (2014).
31. T. Popmintchev, M.-Ch. Chen, A. Bahabad, M. Gerrity, P. Sidorenko, O. Cohen, I. P. Christov, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **106**(26), 10516 (2009).
32. Y. R. Shen and G.-Zh. Yang, *Theory of self-phase modulation and spectral broadening*, in *The Supercontinuum Laser Source*, Springer, N.Y., NY (2016), p. 1.
33. Á. Börzsönyi, Z. Heiner, A. P. Kovács, M. P. Kalashnikov, and K. Osvay, *Opt. Express* **18**(25), 25847 (2010).
34. С. А. Ахманов, В. А. Выслоух, А. С. Чиркин, *Оптика фемтосекундных лазерных импульсов*, Наука, М. (1988).

Измерение временной структуры поля и фазы несущей однопериодных импульсов ближнего и среднего инфракрасного диапазона

И. В. Савицкий⁺, Е. А. Степанов^{+*}, А. А. Ланин^{+*}, А. А. Воронин^{+*}, Е. Е. Серебрянников^{+*}, А. А. Иванов^{+*×},
М. Ху^{°1)}, Я. Ли^{°1)}, А. Б. Федотов^{+*}, А. М. Желтиков^{+*∇2)}

⁺Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

^{*}Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Россия

[×]Центр фотохимии РАН, 119421 Москва, Россия

[°]Tianjin University, 300072 Tianjin, People's Republic of China

[∇]Department of Physics and Astronomy, Texas A&M University, College Station TX 77843, USA

Поступила в редакцию 4 марта 2022 г.

После переработки 10 марта 2022 г.

Принята к публикации 11 марта 2022 г.

Реализованная методика прямого измерения светового поля позволяет выяснить особенности временной структуры однопериодных импульсов, формируемых в результате солитонной самокомпрессии импульсов ближнего и среднего инфракрасного (ИК) диапазонов. Широкополосная аномальная дисперсия, необходимая для солитонного преобразования импульсов ближнего и среднего ИК-диапазонов, обеспечивается структурой световодной системы, оптимизируемой в классе полых фотонно-кристаллических световодов с антирезонансной оболочкой. Для структуры поля импульсов, формируемых в таких условиях, характерно наличие центрального, наиболее интенсивного полупериода поля, воспроизводимость которого от импульса к импульсу обеспечивается устойчивостью фазы поля относительно огибающей.

DOI: 10.31857/S1234567822070060, EDN: fldrug

Изучение новых физических явлений, возникающих при воздействии на вещество интенсивных сверхкоротких электромагнитных импульсов длительностью, близкой периоду поля, является одной из наиболее интересных, актуальных и сложных задач современной оптической физики [1–3]. Фундаментальные оптические свойства вещества оказываются чувствительными к временной структуре поля внутри огибающей импульса [4]. Для широкого круга оптических явлений оказывается характерной зависимость от фазы несущей поля относительно огибающей импульса [5, 6]. Такая зависимость открывает новые возможности управления широким классом физических, химических и биологических процессов [7, 8]. Активно разрабатываемые в последние годы методы прямого измерения поля световых импульсов [9] являются основой систематического исследования таких процессов и ключом к пониманию физической картины взаимодействия однопериодных и субпериодных электромагнитных импульсов с веществом.

Реализованная в настоящей работе методика прямого измерения светового поля позволяет выяснить особенности временной структуры однопериодных импульсов, формируемых в результате солитонной самокомпрессии импульсов ближнего и среднего инфракрасного (ИК) диапазонов [10, 11] в полых фотонно-кристаллических световодах. Широкополосная аномальная дисперсия, необходимая для солитонного преобразования импульсов ближнего и среднего ИК-диапазонов, обеспечивается структурой световодной системы, оптимизируемой в классе полых фотонно-кристаллических (ФК) световодов с антирезонансной оболочкой. Для структуры поля импульсов, формируемых в таких условиях, характерно наличие центрального, наиболее интенсивного полупериода поля, воспроизводимость которого от импульса к импульсу обеспечивается устойчивостью фазы поля относительно огибающей.

Источником сверхкоротких импульсов ИК-диапазона в наших экспериментах (рис. 1) служит лазерная система [12] на основе титан-сапфирового генератора, позволяющего получить импульсы с центральной длиной волны, варьированной в диапа-

¹⁾Y. Li, M. Hu.

²⁾e-mail: zheltikov@physics.msu.ru

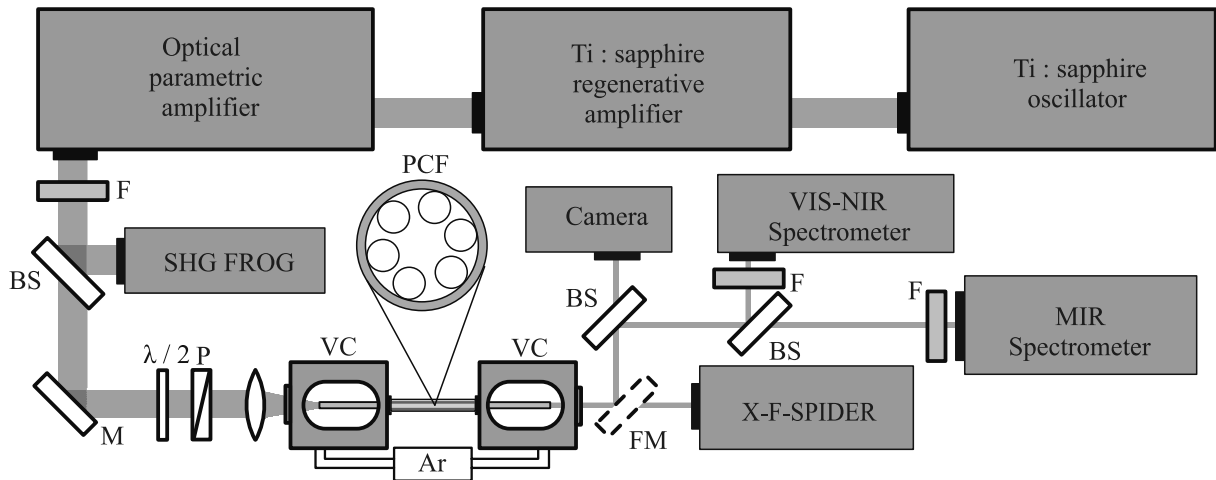


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. Optical parametric amplifier – оптический параметрический усилитель; М – зеркала; FM – откидываемое зеркало; F – спектральные фильтры; BS – светоделители; $\lambda/2$ – полуволновая пластинка; P – поляризатор; VC – вакуумные камеры; PCF – полый ФК-световод

зоне 790–840 нм, длительностью 45 фс и энергией до 10 нДж. Импульсы, формируемые задающим генератором, растягиваются во времени с помощью стретчера (рис. 1) и усиливаются в схеме регенеративного усиления в кристалле титан-сапфира, накачиваемого импульсами наносекундной длительности с центральной длиной волны 532 нм, энергией 7.5–10 мДж, следующими с частотой повторения 1 кГц. Получаемые на выходе регенеративного усилителя импульсы имеют энергию до 2.6 мДж. Усиленные импульсы сжимаются до длительности 50 фс с помощью решеточного компрессора и используются в качестве поля накачки в двухпроходном оптическом параметрическом усилителе (ОПУ) на кристаллах в кристалле β -бората бария (ВВО) толщиной 5 и 3 мм. Для затравки первой ступени ОПУ используется широкополосное излучение (“белый свет”), получаемое в результате спектрального уширения излучения титан-сапфирового лазера в кристалле сапфира толщиной 3 мм. Сигнальная волна, получаемая в результате ОПУ излучения затравки, затем подается на вход второй ступени ОПУ. На выходе ОПУ формируются импульсы сигнальной и холостой волны с центральной длиной волны 1320 и 2100 нм, энергией до 300 и 180 мкДж и длительностью импульса около 60 и 55 фс соответственно.

Для солитонного преобразования формируемых на выходе ОПУ сверхкоротких импульсов использовались полые кварцевые ФК-световоды, поперечная структура которых представлена на рис. 2а–д. Полая сердцевина диаметром D в световодных системах этого класса окружена микроструктурированной

оболочкой, внутренняя часть которой представляет собой набор из шести кварцевых колец с внутренним диаметром d и толщиной стенок t (рис. 2а–д). Выбором параметров структуры световода обеспечивается требуемый спектр пропускания и достигается активное формирование профиля дисперсии волноводных мод [13–17]. В экспериментах исследовались волноводные структуры с диаметром полой сердцевины, варьируемым в диапазоне от 50 до 70 мкм (рис. 2а–д). Для исследования спектров пропускания и дисперсионных свойств световодов, помимо фемтосекундных импульсов ближнего и среднего ИК-диапазона, использовался набор узкополосных непрерывных лазерных источников, а также широкополосный источник на основе галогенной лампы с вольфрамовой спиралью.

На рисунке 2е представлены результаты исследования спектра пропускания и профиля дисперсии полого ФК-световода с полой сердцевиной с диаметром $D = 70$ мкм и структурированной частью оболочки, образуемой шестью капиллярами с диаметром $d = 36$ мкм и толщиной стенок t около 590 нм. Оболочка с такой структурой обеспечивает резонансную связь мод сердцевины и оболочки [14, 18, 19] на длинах волн $\lambda_k^r = 2t(n^2 - 1)^{0.5}/k$ при $k = 1, 2$ и $n = 1.44$: $\lambda_1^r, \lambda_2^r = 1227$ нм, 611 нм. Положение первого резонанса λ_1^r в области ближнего ИК спектра вблизи ~ 1 мкм предоставляет хороший потенциал использования данного световода для формирования когерентного суперконтинуума в средней ИК области спектра. Теоретические оценки дисперсии (красные штриховые линии на рис. 2е) и потери (голубая заливка) были проведены при помо-

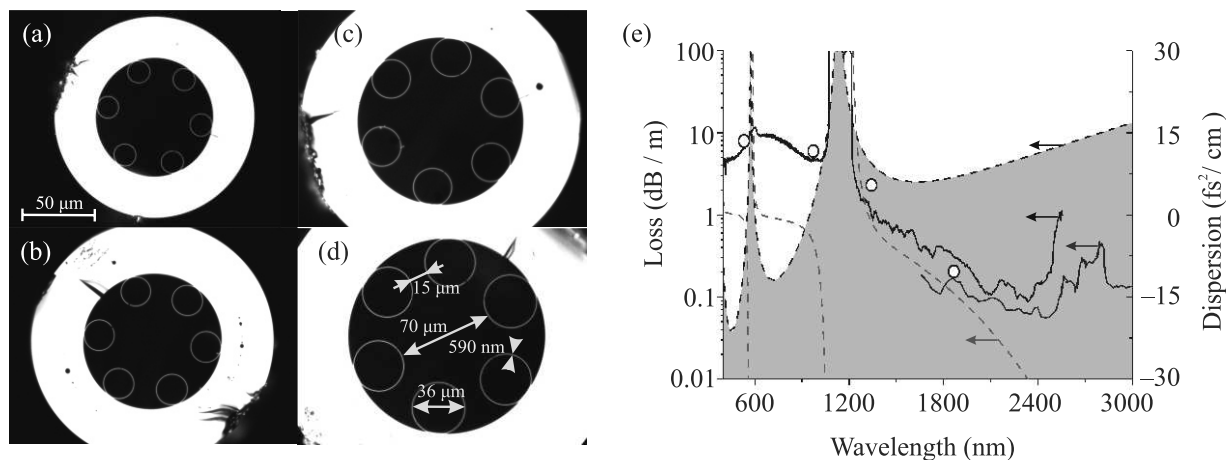


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a)–(d) – Увеличенные изображения поперечного сечения полых ФК-световодов. (e) – Дисперсия групповых скоростей антрирезонансного волновода (красные штриховые линии) и его спектр потерь: измеренные данные (черная сплошная и белые кружки), теоретические данные (голубая заливка), данные из литературы [15] (голубая сплошная). На вставке – поперечная структура полого антрирезонансного световода

щи аналитической модели кольцевой структуры оболочки [20]. При помощи широкополосного источника на основе галогенной лампы с вольфрамовой спиралью и четырех узкополосных лазерных источников на длинах волн 532, 975, 1342 и 1900 нм, обладающие пространственной модой высокого качества, удается восстановить спектр потерь световода (черная сплошная и белые кружки на рис. 2e). На измеренном спектре отчетливо видны предсказанные полосы резонансных потерь на длинах волн 550–620 и 1030–1260 нм.

Важно отметить низкий уровень потерь в интересующем нас среднем ИК спектральном диапазоне $\lambda > \lambda_1^r$ и высокий – в ближнем ИК и видимом диапазонах $\lambda_2^r < \lambda < \lambda_1^r$. Это можно объяснить оптимальным подбором расстояния между кольцами капилляров, равного 15 мкм, приведшим к уменьшению связи мод сердцевины и мод колец оболочки, а также межмодовое связывание отдельных колец между собой в ближнем и среднем ИК-диапазоне [14, 18]. Положительная дисперсия заполняющего световод аргона при давлении до 15 бар позволяет обеспечить широкий диапазон аномальной дисперсии в широком диапазоне длин волн $\lambda > 1$ мкм. При этом большая площадь моды волновода ~ 2800 мкм² позволяет использовать световоды этого класса для спектрального и временного преобразования лазерных импульсов высокой средней и пиковой мощности. Таким образом, данный волновод является перспективным инструментом для реализации солитонной самокомпрессии мощных импульсов ближнего и среднего ИК-диапазона.

Для характеристики динамики спектрально-временного преобразования сверхкоротких импульсов в полых ФК-световодах импульсы холостой волны, формируемые на выходе ОПУ, ослабляются по интенсивности с помощью оптического аттенюатора, состоящего из полуволновой пластинки и поляризатора, и заводятся в световод с помощью собирающей линзы с фокусным расстоянием 50 мм (рис. 1). Эффективность заведения излучения в волновод составляет 75 %.

Возможность прямого измерения поля является ключом [21–23] к пониманию физических сценариев, приводящих к формированию однопериодных импульсов в полых ФК-световодах. В представленном исследовании эта задача решается на основе адаптации к условиям световодной компрессии техники прямого восстановления поля методом спектральной интерферометрии (SPIDER) [24]. В реализованной в наших экспериментах схеме прямого измерения поля (рис. 3) информация о фазе поля кодируется с помощью пространственной, а не частотной карты спектральной интерференции (X-SEA-F-SPIDER). Такой подход позволяет существенно уменьшить ошибки и избежать многих артефактов при восстановлении структуры поля сверхкоротких импульсов [25, 26].

На вход схемы, реализующей характеристику поля сверхкороткого импульса, подается исследуемое излучение из световода ω_{IR} , а также пробный импульс, получаемый напрямую из регенеративного усилителя (рис. 3). Пробное излучение разделяется на два плеча, в каждом из которых расположены узкополосные фильтры (NF1,2, # 64-258, Edmund

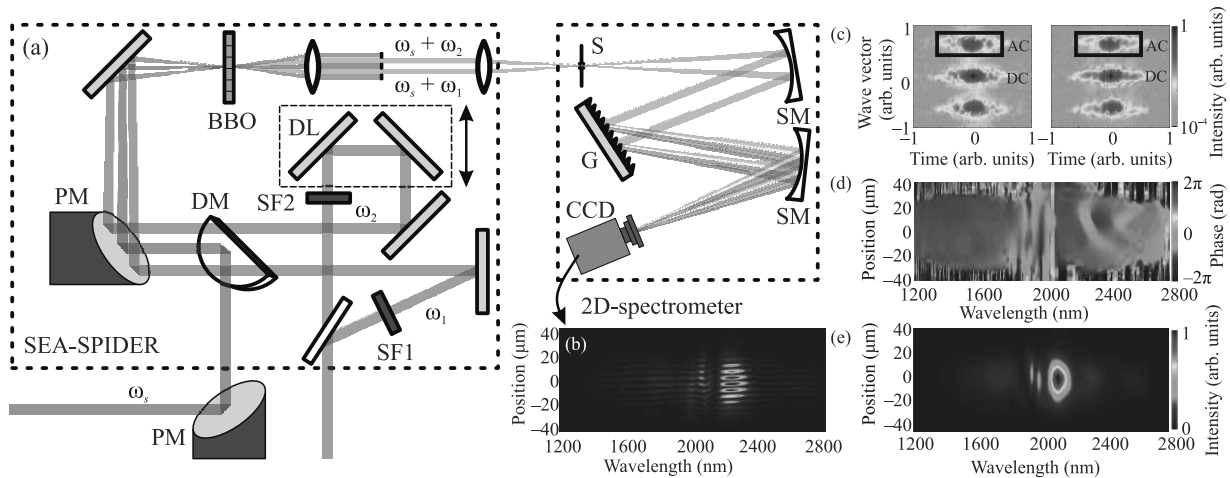


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Характеризация светового поля с помощью пространственной карты спектральной интерференции: PM – параболические зеркала; DM – зеркало D-формы; SF1, SF2 – узкополосные спектральные фильтры, пропускающие частоты ω_1 и ω_2 ; DL – линия задержки; BBO – нелинейный кристалл; S – щель спектрометра; SM – сферические зеркала; G – дифракционная решетка; CCD – CCD-камера с кремниевой матрицей. (б)–(е) – Характеризация сверхкороткого импульса: (б) – SPIDER-интерферограмма; (с) – спектрограмма интенсивности в координатах время – длина волн; (д) – разность фазы $\Delta\varphi(\omega) = \varphi(\omega) - \varphi(\omega - \Omega)$; (е) – пространственно-спектральная карта интенсивности

Optics) с центральной длиной волны 808 нм и шириной полосы пропускания 3 нм, выделяющие излучение на длинах волн $2\pi c/\omega_{1,2} = 800$ и 805 нм за счет поворота фильтров. Это позволяло управлять необходимым спектральным сдвигом $\Omega = \omega_1 - \omega_2$ между пробными импульсами, распространяющимися в разных плечах. Исследуемое ИК излучение перестраивается с торца волновода на кристалл ВВО толщиной 20 мкм (ВВО на рис. 3) при помощи отражательной 4f системы (PM на рис. 3) с увеличением в 1.5 раза. Для того чтобы избежать оптического пробоя кристалла и нежелательных нелинейных эффектов в нем, ИК импульсы ослаблялись при помощи отражения от CaF₂ клина, обеспечивающего коэффициент отражения около 7.5 %.

В результате нелинейного взаимодействия в кристалле ВВО формируется пара импульсов на суммарных частотах $\omega_{IR} + \omega_1$ и $\omega_{IR} + \omega_2$. Неполлинейная геометрия преобразования (~ 5 градусов между измеряемым и пробными пучками) необходима для наблюдения пространственной интерференции, а также позволяет использовать пространственную фильтрацию (рис. 3) для выделения излучения на суммарных частотах $\omega_{IR} + \omega_1$ и $\omega_{IR} + \omega_2$. Изображение интерференционной картины перестраивается с нелинейного кристалла на щель изображающего спектрометра при помощи отражательной 4f системы, состоящей из параболических зеркал с фокусным расстоянием 5 см (PM3) и 10 см (PM4). Спектрометр состоит из серебряных сфери-

ческих зеркал с фокусным расстоянием 10 см (SM на рис. 3) и дифракционной решетки с плотностью штрихов 300 шт/мм. Увеличение пучков в спектрометре необходимо для разрешения полос пространственной интерференционной картины при помощи CMOS-камеры (Thorlabs, CS895MU, 2160 × 4096 пикселей).

Восстановление поля производится на основе анализа интерференционной картины двух приходящих на камеру пучков ап-конверсии $\omega_1 + \omega_{IR}$ и $\omega_2 + \omega_{IR}$, разложенных по спектру. На интерферограммах можно различить более десяти полос (рис. 3б), что достаточно для применения алгоритма восстановления спектральной фазы. Необходимо выделить постоянную и осциллирующую компоненты интерференционной картины, для разделения которых достаточно применить одномерное преобразование Фурье вдоль пространственной координаты, однако двумерное преобразование Фурье позволяет уменьшить количество шумов. На карте Фурье образа (рис. 3с) присутствуют три пика, центральный из которых соответствует постоянной (DC) компоненте, т.е. спектральной интенсивности $I_{DC} = |E_1^2|^2 + |E_2^2|^2$, а два боковых пика отвечают за осциллирующие (AC) компоненты $I_{AC} = |E_1||E_2| \cos(\pm(\varphi(\omega) - \varphi(\omega - \Omega) - \Delta K))$, где $E_{1,2}$ – поля пучков ап-конверсии на частотах $\omega_1 + \omega_{IR}$ и $\omega_2 + \omega_{IR}$, $\varphi(\omega)$, искомая спектральная фаза ИК излучения, $\Omega = \omega_1 - \omega_2$, разница частот двух полей накачки, ΔK , геометрическая разница оптических плеч двух пучков, которая мо-

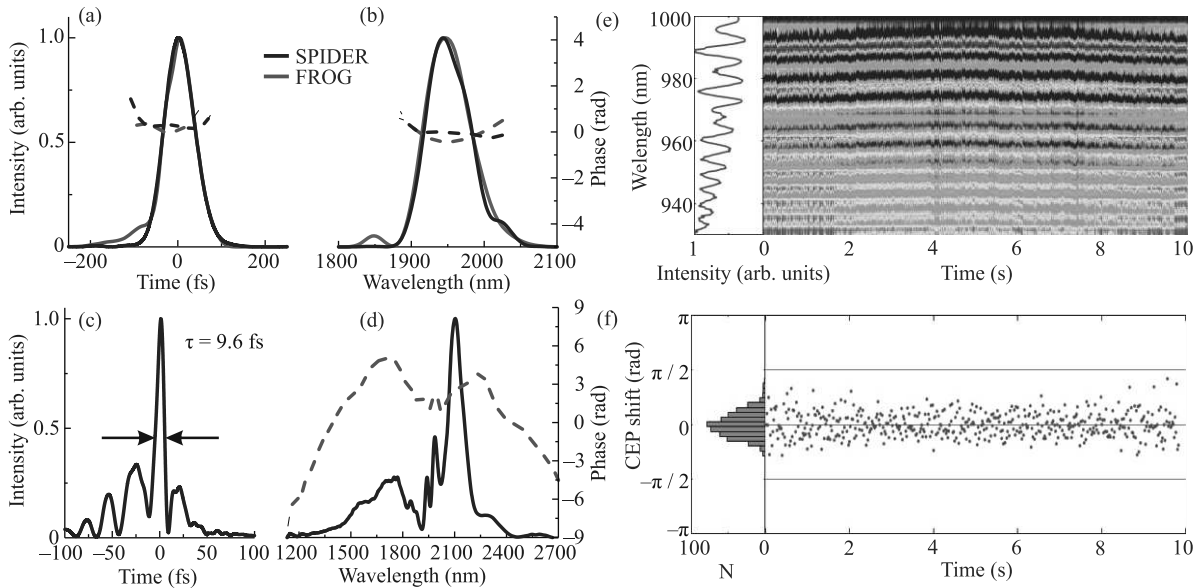


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Временная огибающая интенсивности импульса холостой волны ОПУ, восстановленная с помощью метода спектральной интерферометрии (SEA-SPIDER) и оптического стробирования с разрешением по частоте на основе генерации второй гармоники (SHG-XFROG). (b) – Спектральная интенсивность (синяя сплошная) и спектральная фаза (красная сплошная) импульса холостой волны ОПУ, восстановленные методом спектральной интерферометрии. (c) – Временная структура поля; (d) – спектральная интенсивность (сплошная линия) и фаза (штриховая линия); (e) – $f-2f$ интерферограмма предельно короткого импульса на выходе полого ФК-световода при энергии лазерного импульса 27.5 мкДж. (f) – Гистограмма и временной трейс скачков фазы поля предельно короткого импульса на выходе полого ФК-световода

жет быть вычислена независимо при калибровочном измерении $\Omega = 0$: $I_{AC}^0 = |E_1||E_2| \cos(\pm\Delta K)$.

Для восстановления спектральной интенсивности ИК излучения $I(\omega)$ (рис. 3e) и разности фазы $\Delta\varphi(\omega) = \varphi(\omega) - \varphi(\omega - \Omega)$ (рис. 3d) необходимо поочередно выделять при помощи цифрового прямоугольного фильтра пики DC и AC, после чего произвести обратное двумерное преобразование Фурье. Восстановление спектральной фазы происходит при вычислении $\varphi(\omega) = \int \Delta\varphi(\omega) d\omega / \Omega$ вдоль каждой пространственной компоненты. В итоге удастся получить информацию о пространственном распределении мощности и спектральной фазы ИК излучения вдоль одной из координат пучка суперконтинуума, генерируемого на выходе полого световода.

На рисунке 4b представлены спектр и спектральная фаза импульса холостой волны ОПУ. Профиль спектральной фазы, представленный на этом рисунке, восстановлен с помощью метода спектральной интерферометрии. На рисунке 4a производится сравнение временной огибающей импульса, полученной путем преобразования Фурье спектра интенсивности, представленного на рис. 4b, с профилем временной огибающей, полученной в результате характеристики холостой волны ОПУ методом оптического стро-

бирования с разрешением по частоте на основе генерации второй гармоники (SHG-FROG). Как видно из произведенного сравнения, результаты характеристики сверхкоротких импульсов на основе этих методик полностью совпадают. На рисунках 4c и d изображены результаты восстановления спектра и спектральной фазы (рис. 4d) с помощью описанного метода X-SEA-F-SPIDER, а также восстановленная временная структура огибающей предельно короткого импульса (рис. 4c).

На рисунке 5 представлены результаты спектрально-временной характеристики импульсов, формируемых на выходе полого ФК-волновода с диаметром сердцевинки D , варьируемым от 50 до 70 мкм. Давление аргона в этих экспериментах изменялось в диапазоне от 1 до 15 бар. Длина световодов варьировалась в пределах от 200 до 300 мм. Распространение лазерных импульсов в световодах с такими параметрами сопровождалось эффективным спектральным уширением. Излучение, регистрируемое на выходе полых ФК-световодов при таких условиях, характеризовалось непрерывным спектром с высокочастотным крылом, достигающим диапазона длин волн 1.0–1.1 мкм, и низкочастотной границей в области 2.8 мкм. Мощность и

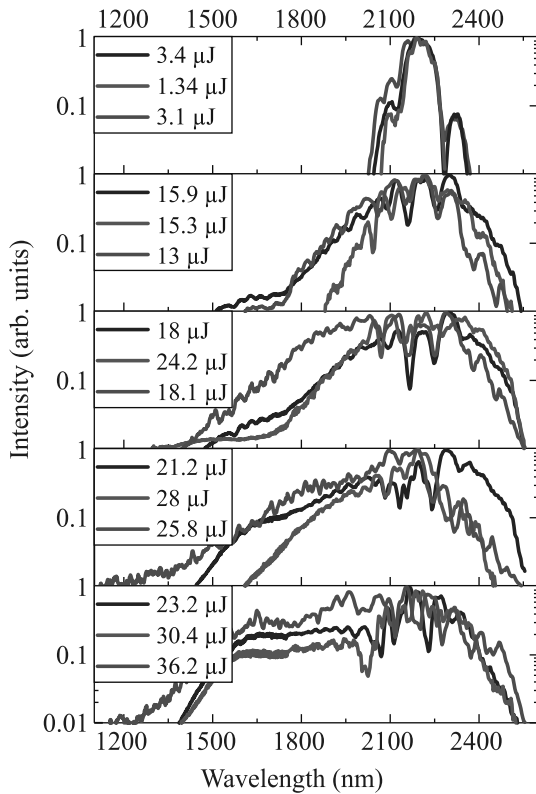


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектры излучения на выходе полого ФК-световода с диаметром сердцевинки 50 мкм (синяя кривая), 56 мкм (красная кривая) и 60 мкм (зеленая кривая). Световод заполнен аргоном под давлением 10 бар (синяя и красная кривые) и 8 бар (зеленая кривая)

интенсивность импульсов, спектрально-временное преобразование которых может быть осуществлено с помощью полого ФК-световода, оказываются ограничены эффектами ионизации, приводящими к резкому падению пропускания световода при больших интенсивностях поля. В частности, для полых ФК-световодов с диаметром сердцевинки $D = 50$ и 56 мкм пропускание резко уменьшается при достижении входной энергии импульса на уровне 20 и 28 мкДж, соответственно, что соответствует интенсивности поля на уровне 20–25 ТВт/см².

Для измерения стабильности фазы поля сверхкоротких импульсов, формируемых в полом ФК-световоде, использовалась схема $f-2f$ интерферометрии. Для этой цели импульсы, формируемые на выходе ФК-световода, пропускались через кристалл ВВО толщиной около 100 мкм. Получаемое при этом широкополосное излучение второй гармоники использовалось для получения картины интерференции с высокочастотной частью спектра излучения, выходящего из полого ФК-световода. На рисун-

ке 4е представлена характерная интерференционная картина, записанная с помощью ИК-спектрометра. Определяемое по этой спектрохронограмме среднеквадратичное отклонение сдвига фазы поля излучения на выходе полого ФК-световода составляет приблизительно 400 мрад (рис. 4f), что немного превышает среднеквадратичное отклонение фазы холостой волны (350 мрад), однако свидетельствует о высокой стабильности фазы несущей поля относительно огибающей в сверхкоротком импульсе на выходе из микроструктурированного волновода.

Таким образом, реализованная в настоящей работе методика прямого измерения светового поля позволяет выяснить особенности временной структуры однопериодных импульсов, формируемых в результате солитонной самокомпрессии импульсов ближнего и среднего ИК-диапазонов. Широкополосная аномальная дисперсия, необходимая для солитонного преобразования импульсов ближнего и среднего ИК-диапазонов, обеспечивается структурой световодной системы, оптимизируемой в классе полых фотоннокристаллических световодов с антирезонансной оболочкой. Для структуры поля импульсов, формируемых в таких условиях, характерно наличие центрального, наиболее интенсивного полупериода поля, воспроизводимости которого от импульса к импульсу обеспечивается устойчивостью фазы поля относительно огибающей.

Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 20-21-00131, 20-52-53046), а также Министерства науки и высшего образования РФ (Госконтракт 075-15-2020-801). Исследования в области каскадных спектрально-временных преобразований сверхкоротких лазерных импульсов поддержаны грантом Российского научного фонда # 20-12-00088.

1. E. Goulielmakis, M. Schultze, M. Hofstetter, V. S. Yakovlev, J. Gagnon, M. Uiberacker, A. L. Aquila, E. M. Gullikson, D. T. Attwood, R. Kienberger, F. Krausz, and U. Kleineberg, *Science* **320**, 1614 (2008).
2. M. Th. Hassan, T. T. Luu, A. Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Nature* **530**, 66 (2016).
3. A. Zheltikov, *J. Opt. Soc. Am. B* **36**, A168 (2019).
4. A. Baltuška, Th. Udem, M. Uiberacker, M. Hentschel, E. Goulielmakis, Ch. Gohle, R. Holzwarth, V. S. Yakovlev, A. Scrinzi, T. W. Hänsch, and F. Krausz, *Nature* **421**, 611 (2003).

5. H. R. Telle, G. Steinmeyer, A. E. Dunlop, J. Stenger, D. H. Sutter, and U. Keller, *Appl. Phys. B* **69**, 327 (1999).
6. M. Schultze, E. M. Bothschafter, A. Sommer, S. Holzner, W. Schweinberger, M. Fiess, M. Hofstetter, R. Kienberger, V. Apalkov, V. S. Yakovlev, M. I. Stockman, and F. Krausz, *Nature* **493**, 75 (2013).
7. T. Balciunas, C. Fourcade-Dutin, G. Fan, T. Witting, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, F. Gerome, G. G. Paulus, A. Baltuska, and F. Benabid, *Nature Commun.* **6**, 6117 (2015).
8. A. M. Желтиков, *УФН* **191**, 386 (2021).
9. E. Goulielmakis, M. Uiberacker, R. Kienberger, A. Baltuska, V. Yakovlev, A. Scrinzi, T. Westerwalbesloh, U. Kleineberg, U. Heinzmann, M. Drescher, and F. Krausz, *Science* **305**, 1267 (2004).
10. A. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 22 (2020).
11. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, А. А. Воронин, М. В. Рожко, П. Б. Глек, М. М. Назаров, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, and А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 304 (2021).
12. E. A. Stepanov, A. A. Lanin, A. A. Voronin, A. V. Fedotov, and A. M. Zheltikov, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 043901 (2016).
13. A. D. Pryamikov, A. S. Biriukov, A. F. Kosolapov, V. G. Plotnichenko, S. L. Semjonov, and E. M. Dianov, *Opt. Express* **19**, 1441 (2011).
14. C. Wei, R. J. Weiblen, C. R. Menyuk, and J. Hu, *Adv. Opt. Photonics* **9**, 504 (2017).
15. U. Elu, M. Baudisch, H. Pires, F. Tani, M. H. Frosz, F. Köttig, A. Ermolov, P. S. J. Russell, and J. Biegert, *Optica* **4**, 1024 (2017).
16. M. Cassataro, D. Novoa, M. C. Gunendi, N. N. Edavalath, M. H. Frosz, J. C. Travers, and P. S. J. Russell, *Opt. Express* **25**, 7637 (2017).
17. E. A. Stepanov, A. A. Voronin, F. Meng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. A* **99**, 033855 (2019).
18. N. M. Litchinitser, A. K. Abeeluck, C. Headley, and B. J. Eggleton, *Opt. Lett.* **27**, 1592 (2002).
19. A. M. Zheltikov, *Phys.-Uspekhi* **51**, 591 (2008).
20. M. Zeisberger and M. A. Schmidt, *Sci. Rep.* **7**, 1 (2017).
21. A. A. Voronin and A. M. Zheltikov, *Phys. Rev. A* **94**, 023824 (2016).
22. A. A. Voronin and A. M. Zheltikov, *Sci. Rep.* **10**, 12253 (2020).
23. A. A. Voronin and A. M. Zheltikov, *Sci. Rep.* **7**, 36263 (2017).
24. C. Iaconis and I. A. Walmsley, *Opt. Lett.* **23**(10), 792 (1998).
25. E. M. Kosik, A. S. Radunsky, I. A. Walmsley, and C. Dorrer, *Opt. Lett.* **30**, 326 (2005).
26. G. Fan, T. Balciunas, C. Fourcade-Dutin, S. Haessler, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, F. Gerome, F. Benabid, A. Baltuska, and T. Witting, *Opt. Express* **24**, 12713 (2016).

Эффект Холла в легированном моттовском диэлектрике: DMFT-приближение

Э. З. Кучинский⁺, Н. А. Кулеева⁺, Д. И. Хомский*, М. В. Садовский⁺¹⁾

⁺Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

*II Physikalisches Institut, Universitaet zu Koeln, 50937 Koeln, Germany

Поступила в редакцию 1 марта 2022 г.

После переработки 1 марта 2022 г.

Принята к публикации 1 марта 2022 г.

В рамках подхода, основанного на динамической теории среднего поля (DMFT) анализируется эффект Холла в легированном моттовском диэлектрике, как прототипе купратного сверхпроводника. Рассматривается ситуация с частичным заполнением (дырочным допированием) нижней хаббардовской зоны. Найдена зависимость коэффициента Холла и холловского числа от степени дырочного легирования и определено значение критической концентрации, при которой происходит смена знака коэффициента Холла. Отмечается существенная зависимость параметров эффекта Холла от температуры. Промонстрировано хорошее согласие с концентрационной зависимостью холловского числа, найденной в экспериментах в нормальном состоянии YBCO.

DOI: 10.31857/S1234567822070072, EDN: flfjiq

1. Введение. В последние годы большой интерес вызывают экспериментальные исследования эффекта Холла при низких температурах в нормальном состоянии высокотемпературных сверхпроводников (купратов), которое реализуется в очень сильных внешних магнитных полях [1–3]. Наблюдающиеся при этом аномалии эффекта Холла обычно связываются с реконструкцией поверхности Ферми, связанной с формированием (антиферромагнитной) псевдощели и с близостью к соответствующей квантовой критической точке [4].

В то же время, почти общепринятой является точка зрения о том, что купраты являются сильно коррелированными системами и металлическое (сверхпроводящее) состояние в них реализуется в результате легирования (допирования) исходной фазы моттовского диэлектрика, который в простейшем приближении может быть описан в рамках модели Хаббарда. При этом практически отсутствуют работы, в которых в рамках этой модели проводились бы систематические исследования зависимости эффекта Холла от степени допирования. Здесь возникает известный вопрос, что определяет знак эффекта Холла? При малом дырочном допировании исходного диэлектрика, такого как La_2CuO_4 или YBCO, он, очевидно, просто определяется концентрацией дырок δ . Но при какой степени допирования происходит смена знака коэффициента Холла, когда происходит пе-

реход от небольшой дырочной поверхности Ферми к электронной? Решение этого вопроса представляется важным и для общей теории транспортных явлений в сильно коррелированных системах.

Весьма общим подходом к исследованию модели Хаббарда остается динамическая теория среднего поля (DMFT) [5–7]. Целью данной работы является систематическое исследование концентрационной и температурной зависимости эффекта Холла при различных степенях легирования нижней хаббардовской зоны в рамках DMFT-подхода и сравнение полученных результатов с экспериментом на YBCO [2]. Мы увидим, что удивительным образом имеющиеся экспериментальные данные могут быть практически количественно объяснены в рамках этой элементарной модели.

2. Основные соотношения. В DMFT [5–7] собственно энергетическая часть одноэлектронной функции Грина $G(\mathbf{p}\varepsilon)$ является локальной, т.е. не зависящей от импульса. В условиях такой локальности и обычная, и холловская проводимость полностью определяются спектральной плотностью

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (1)$$

В частности, статическая проводимость имеет вид:

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi e^2}{2\hbar a} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 A^2(\mathbf{p}\varepsilon), \quad (2)$$

¹⁾e-mail: sadovski@iep.uran.ru

а холловская проводимость [5]:

$$\sigma_{xy}^H = \frac{2\pi^2 e^3 a H}{3\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \times \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} A^3(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (3)$$

Здесь a – параметр решетки, $\varepsilon(\mathbf{p})$ – электронная дисперсия, $f(\varepsilon)$ – функция распределения Ферми, а H – напряженность магнитного поля вдоль оси z . Таким образом, коэффициент Холла:

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}^H}{H \sigma_{xx}^2} \quad (4)$$

также полностью определяется спектральной плотностью $A(\mathbf{p}\varepsilon)$, которую мы далее будем находить в рамках DMFT [5–7]. Для решения эффективной однопримесной модели Андерсона в DMFT в данной работе использовался метод численной ренормгруппы (NRG) [8].

Мы провели достаточно обширные расчеты эффекта Холла для различных моделей исходного зонного спектра. Ниже, имея в виду сравнение с экспериментальными данными по YBCO, мы ограничимся результатами, полученными для двумерной модели электронного спектра в приближении сильной связи:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos(p_x a) + \cos(p_y a)) - 4t' \cos(p_x a) \cos(p_y a). \quad (5)$$

В этой модели мы в дальнейшем рассмотрим два случая:

(1) модель с перескоком лишь на ближайших соседях ($t' = 0$) и полной электрон-дырочной симметрией;

(2) случай $t'/t = -0.4$, качественно соответствующий ситуации, наблюдаемой в YBCO.

Для других купратов следует использовать другие значения отношения t'/t .

В дальнейшем для используемых двумерных моделей статическая проводимость находилась в единицах универсальной двумерной проводимости $\sigma_0 = e^2/\hbar$, а холловская проводимость в единицах $e^3 a^2 H/\hbar^2$. Соответственно, коэффициент Холла (4) далее определялся в единицах a^2/e .

3. Результаты расчетов и сравнение с экспериментом. Для сильно коррелированных систем коэффициент Холла существенно зависит от температуры. При низкой температуре в таких системах в DMFT приближении наряду с нижней и верхней хаббардовскими зонами вблизи уровня Ферми формируется узкая квазичастичная зона – квазичастичный пик в плотности состояний. В допированном

дырками моттовском диэлектрике (далее мы будем рассматривать именно дырочное допирование) такой пик лежит вблизи верхнего края нижней хаббардовской зоны (см. рис. 1). Поэтому при низкой темпе-

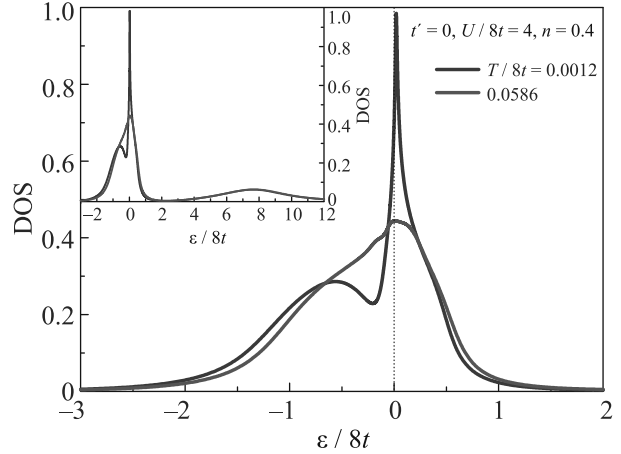


Рис. 1. (Цветной онлайн) Плотность состояний в допированном моттовском диэлектрике при различных температурах. Параметры модели Хаббарда приведены на рисунке, $8t$ – ширина исходной зоны (5). На вставке показана плотность состояний в широком интервале энергий, включающем верхнюю хаббардовскую зону

ратуре коэффициент Холла во многом определяется заполнением квазичастичной зоны. При высокой температуре (порядка или больше ширины квазичастичного пика) квазичастичный пик размывается и коэффициент Холла определяется заполнением нижней хаббардовской зоны. Таким образом, необходимо рассматривать два достаточно разных температурных режима для эффекта Холла.

В низкотемпературном режиме и ширина, и амплитуда квазичастичного пика зависят как от заполнения, так и от температуры. Рост температуры приводит к уширению квазичастичного пика и некоторому смещению уровня Ферми ниже максимума этого пика (см. рис. 1). Это может приводить к заметному падению коэффициента Холла, однако дальнейший рост температуры, размывая квазичастичный пик, приводит к росту этого коэффициента. Существенная зависимость квазичастичного пика от заполнения зоны в низкотемпературном режиме приводит к областям немонотонной зависимости коэффициента Холла от заполнения (см. рис. 2).

В высокотемпературном режиме квазичастичный пик размывает температурными поправками и фактически отсутствует. В этом случае глубоко в допированном дырками моттовском диэлектрике коэффициент Холла фактически определяется заполне-

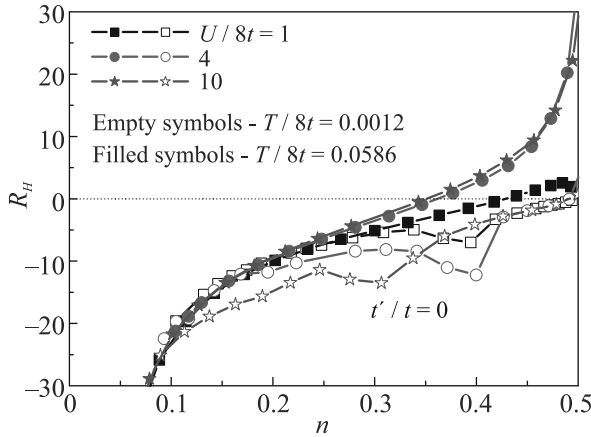


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента Холла от заполнения зоны при низких (незаполненные символы) и при высоких (заполненные символы) температурах в двумерной модели электронного спектра (5) с перескоком лишь на ближайших соседей ($t'/t = 0$)

нием нижней хаббардовской зоны (верхняя находится существенно выше по энергии и практически не заполнена). В такой ситуации в модели с электрон-дырочной симметрией ($t' = 0$) оценка заполнения зоны, при котором происходит смена знака коэффициента Холла, может быть получена из качественных соображений. Будем рассматривать парамагнитную фазу $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n$, так что n далее обозначает плотность электронов на одну проекцию спина, а их полная плотность равна $2n$. Естественно предположить, что смена знака коэффициента Холла происходит вблизи половинного заполнения нижней хаббардовской зоны $n_0 \approx 1/2$. Пусть мы рассматриваем состояния с проекцией спина “вверх”, тогда полное число состояний в нижней хаббардовской зоне есть $1 - n_{\downarrow} = 1 - n$. Тогда для заполнения зоны получаем $n = n_{\uparrow} = n_0(1 - n) \approx 1/2(1 - n)$. Таким образом, для заполнения, при котором происходит смена знака коэффициента Холла, получаем $n_c \approx 1/3$.

Этот же результат легко получается и в приближении Хаббард I, где функция Грина для электронов с проекцией спина “вверх” имеет вид [9]:

$$G_{\uparrow}^R(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{1 - n_{\downarrow}}{\varepsilon - \varepsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} + \frac{n_{\downarrow}}{\varepsilon - \varepsilon_{+}(\mathbf{p}) + i\delta}, \quad (6)$$

где $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p})$ – спектр квазичастиц в верхней и нижней хаббардовских зонах. Видим, что в этом приближении число состояний с проекцией спина “вверх” в нижней хаббардовской зоне (первое слагаемое в (6)) действительно есть $1 - n_{\downarrow}$. При допировании дырками моттовского диэлектрика практически весь вклад в заполнение дает нижняя хаббардовская зона, поэтому:

$$\begin{aligned} n &= n_{\uparrow} \approx (1 - n_{\downarrow}) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} \right) = \\ &= (1 - n)n_0. \end{aligned} \quad (7)$$

Тогда при половинном заполнении нижней хаббардовской зоны $n_0 = 1/2$ происходит смена знака эффекта Холла (эффективной массы квазичастиц), так что снова получаем $n = n_c = 1/3$.

На рисунке 2 легко видеть, что высокотемпературное поведение коэффициента Холла в допированном моттовском диэлектрике ($U/2D = 4; 10$) в модели с полной электрон-дырочной симметрией ($t' = 0$) полностью подтверждает такую оценку. При заметном нарушении такой симметрии эта простейшая оценка перестает работать, поскольку даже в отсутствие корреляций смена знака эффекта Холла наблюдается не при половинном заполнении (см. рис. 3).

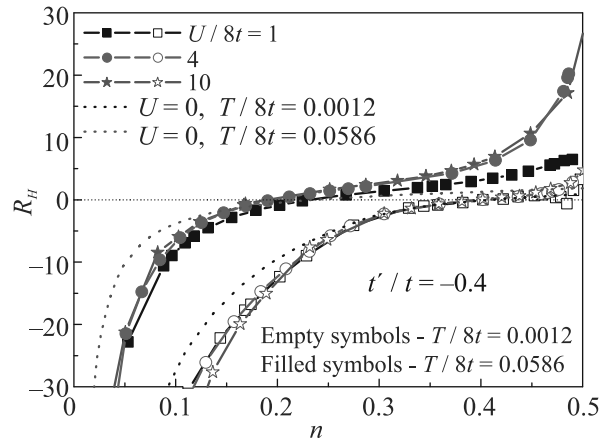


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента Холла от заполнения зоны при низких (незаполненные символы) и при высоких (заполненные символы) температурах в двумерной модели электронного спектра (5) с перескоками между первыми и вторыми ближайшими соседями ($t'/t = -0.4$)

Необходимо отметить, что к размытию и исчезновению квазичастичного пика приводит не только рост температуры, но и разупорядочение [10, 12], а также псевдоцелевые флуктуации, которыми локальный подход DMFT полностью пренебрегает [11, 12]. Таким образом, область применимости приведенных выше простых оценок в условиях электрон-дырочной симметрии реально оказывается заметно шире.

На рисунке 4 показано сравнение результатов наших расчетов для холловского числа (холловской концентрации) $n_H = \frac{a^2}{|eR_H|}$ для достаточно типичных

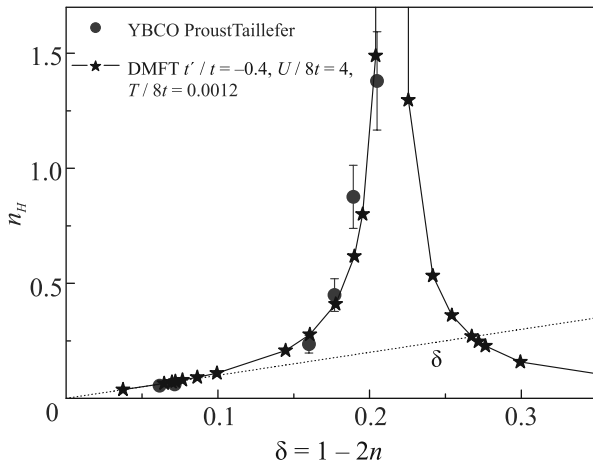


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость холловского числа n_H от степени легирования – сравнение с экспериментом [2] для YBCO, $\delta = 1 - 2n$ – концентрация дырок. Звездочки – результаты наших расчетов, синие кружки – эксперимент

значений параметров модели с экспериментальными данными по YBCO из работы [2]. Видим, что даже при этом достаточно произвольном выборе параметров, мы получаем практически количественное согласие с экспериментом, без всяких предположений о связи эффекта Холла с реконструкцией поверхности Ферми псевдощелью и близости к соответствующей квантовой критической точке, которые использовались в работах [2–4]. Достаточно очевидно, что аналогичные данные [3] для системы NLSCO могут быть интерпретированы в рамках нашей модели при соответствующем изменении параметров t/t' и U . Таким образом, оказывается, что интерпретация эффекта Холла в купратах на основе картины легирования нижней хаббардовской зоны моттовского диэлектрика может оказаться достаточно разумной альтернативой картине квантовой критической точки.

Было бы крайне интересно более детально изучить эффект Холла в окрестности критической концентрации, соответствующей смене знака коэффициента Холла (расходимости холловского числа). Для этого требуется исследовать системы (купраты), в которых такая смена знака возникает при изменении степени легирования.

4. Заключение. Мы исследовали поведение эффекта Холла в металлической фазе, возникающей при дырочном легировании (допировании) нижней хаббардовской зоны моттовского диэлектрика. Смена знака эффекта Холла и соответствующая ей расходимость холловского числа происходит в простейшем (симметричном) случае вблизи заполнения нижней хаббардовской зоны $n = 1/3$ в расчете на одну

проекцию спина или $2/3$ для полной плотности электронов, что соответствует дырочному легированию $\delta = 1 - 2n = 1/3$, но в общем случае она достаточно сильно зависит от выбора параметров модели. Эта концентрация возникает из простых качественных оценок и не связана с более сложными факторами, такими как изменение топологии поверхности Ферми или наличием квантовых критических точек.

Более чем удовлетворительное согласие полученных концентрационных зависимостей холловского числа с экспериментами на YBCO [2] показывает, что рассмотренная нами модель может быть достаточно разумной альтернативой картине эффекта Холла в окрестности квантовой критической точки, связанной с закрытием псевдощели [4].

Работа Э.З. Кучинского, Н.А. Кулеевой и М.В. Садовского выполнялась при частичной поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00011. Работа Д.И. Хомского поддержана грантом DFG по проекту # 277146847 – CRC 1238.

1. F.F. Balakirev, J.B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G.S. Boebinger, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 017004 (2009).
2. S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberte, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Beard, D.A. Bonn, W.N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, and C. Proust, *Nature* **531**, 210 (2016).
3. C. Collignon, S. Badoux, S.A.A. Afshar, B. Michon, F. Laliberte, O. Cyr-Choiniere, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, *Phys. Rev. B* **95**, 224517 (2017).
4. C. Proust and L. Taillefer, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **10**, 409 (2019).
5. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J.K. Freericks, *Adv. Phys.* **44**, 187 (1995).
6. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M.J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
7. D. Vollhardt, in *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, ed. by A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings, AIP, Melville, N.Y. (2010), v. 1297, p. 339; ArXiv: 1004.5069.
8. R. Bulla, T.A. Costi, and T. Pruschke, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 395 (2008).
9. D.I. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*, Cambridge University Press, NY (2010).
10. E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **133**, 670 (2008) [*JETP* **106**, 581 (2008)].
11. M.V. Sadovskii, I.A. Nekrasov, E.Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V.I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **72**, 155105 (2005).
12. Э.З. Кучинский, И.А. Некрасов, М.В. Садовский, *УФН* **182**, 345 (2012) [*Phys.-Uspekhi* **55**, 325 (2012)].

A quantum dynamical approach to various scattering mechanisms and their influences on thermal conductivity of Sr- and Zn-doped La_2CuO_4 high temperature superconductor cuprate

A. Parmar⁺, A. K. Dimri^{*}, M. K. Bera⁺¹⁾

⁺Department of Physics, Maharishi Markandeshwar (Deemed to be University), 133207 Mullana Ambala, Haryana, India

^{*}Department of Physics, Maharaj Singh College, 247001 Saharanpur, Uttar Pradesh, India

Submitted 30 January 2022

Resubmitted 2 March 2022

Accepted 5 March 2022

DOI: 10.31857/S1234567822070084, EDN: flgyvx

Despite enormous experimental and theoretical accomplishments over the last thirty years, the nature of the cuprates' superconducting fluctuation domain remains highly contentious. One of the major challenges in condensed matter physics is the mechanism of superconductivity in cuprates. Although numerous theories (many of which have flaws) have been proposed to analyse the thermal conductivity of HTS, beginning with the pioneering work of Bardeen, Rickayzen, and Tewordt and continuing to the present, a viable answer has yet to be established [1]. When impurities and electrons are the dominant scatterers, these theories provided a method for determining the electronic contribution to thermal conductivity (which is similar to the numerically approachable model of Callaway [2]). It was later expanded to account for phonon scattering, resulting in phonon thermal conductivity in HTS below the strong coupling limit for both *s*-wave and *d*-wave pairing processes [3, 4]. Meanwhile, heat carriers in materials, such as phonons or electrons, are collided often (scatterings). Despite the fact that numerous scattering events such as boundary, dislocation, point, phonon-phonon, electron-phonon and so on have previously been reported to explain the phenomena, the curves above the conductivity maximum could not be properly described. While the Callaway theory is useful for predicting the thermal conductivity of various HTS, it has numerous significant complications, notably the accumulation of inverse relaxation periods when Matthiessen's rule may be applied to separate scattering events. It also does not include phonon polarisation or phonon dispersion relations. Even at very low temperatures, however, the effects of anharmonicities, defects, and other variables on various scattering events of HTS cannot be ignored,

and hence a violation of Matthiessen's criteria is inescapable. Fortunately, the violation of Matthiessen's rule may be avoided by substituting interaction life times or linewidths for the relaxation time [5]. In this study, a quantum dynamical based analytical model is developed to analyse the thermal conductivity of Sr- and Zn-doped La_2CuO_4 by taking into consideration various phonon scattering mechanisms. The proposed formulation expands the idea of relaxation times from frequency (energy) line widths for multiple scattering processes and eliminates the shortcomings of the Matthiessen's rule employed in the Callaway theory. A theoretical calculation of the thermal conductivity of Sr- and Zn-doped La_2CuO_4 below and above the transition temperature demonstrates reasonable agreement with experimental observations.

In comparison to the standard Callaway model, Fig. 1 shows good agreement between experimental findings and theoretical calculations based on the current model. Indeed, at low doping concentrations ($x < 5\%$), Sr doping results in hole doping, whereas Zn doping results in electron doping in lanthanum cuprate superconductor, $\text{La}_{2-x}\text{CuO}_4$ (LCO). Because of increased phonon scattering, the phonon peak in thermal conductivity along the *c*-axis declines quicker with Sr doping than with Zn doping. The phonon peak in thermal conductivity along the *ab*-plane, on the other hand, decreases somewhat quicker with Zn doping than with Sr doping. Based on the specific doping dependence of the steep damping of the low temperature phonon peak, it is possible to deduce that phonon scattering is much stronger along the *c*-axis heat transfer than along the in-plane (*ab*-plane) phonon scattering. It is worth noting that, despite the fact that lanthanum cuprate is not a ferromagnetic insulator, recent neutron scattering investigations on LSCO superconductors revealed better

¹⁾e-mail: m.k.bera@mmumullana.org

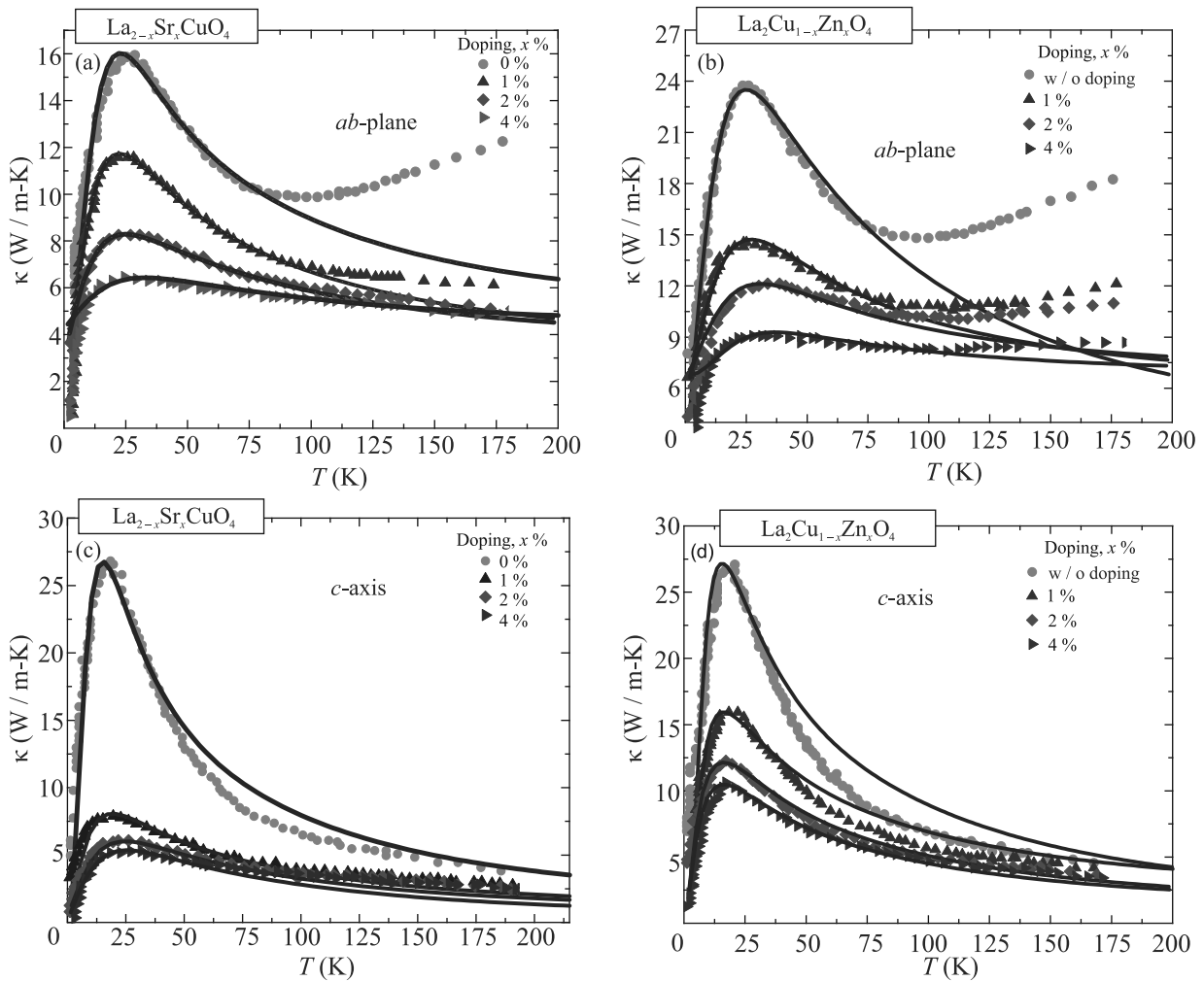


Fig. 1. (Color online) Theoretical investigation on thermal conductivity of Sr-doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) and Zn-doped $\text{La}_2\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_4$ (LCZO) along the ab -plane and c -axis. The experimental data were taken from Sun et al. [8]

antiferromagnetic order in the vortex state. As a result, at low doping levels, LCO will display aniferromagnetic behaviour at low temperatures, and the phonon-magnon contribution to thermal conductivity might eventually play a major role at low temperatures [6, 7]. Indeed, theoretical fitting has revealed that for both Sr and Zn doped LCO, phonon-magnon scattering below 25 K contributes more to heat transport in the ab -plane than in the c -axis. The proposed analytical model explains the experimental findings of Sr- and Zn-doped La_2CuO_4 thermal conductivity data in the temperature range 0–200 K adequately.

This is an excerpt of the article “A quantum dynamical approach to various scattering mechanisms and their influences on thermal conductivity of Sr- and Zn-doped La_2CuO_4 high temperature superconductor cuprate”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022200383

1. J. Bardeen, G. Rickayzen, and L. Tewordt, Phys. Rev. **113**, 982 (1959).
2. J. Callaway, Phys. Rev. **113**, 1046 (1959).
3. G. P. Srivastava, *The Physics of Phonons*, 1st ed., Taylor and Francis, N.Y. (1990).
4. L. Tewordt and Th. Wolkhausen, Solid State Commun. **75**, 515 (1990).
5. P. G. Klemens, Proc. Phys. Soc. A **68**, 1113 (1955).
6. G. B. Teitelbaum, V. E. Kataev, E. L. Vavilova, P. L. Kuhns, A. P. Yeyes, and W. G. Moulton, JETP Lett. **78**, 1242 (2003).
7. P. D. Grigoriev and T. Ziman, JETP Lett. **106**, 349 (2022).
8. X. F. Sun, J. Takea, S. Komia, and Y. Ando, Phys. Rev. B **67**, 104503 (2003).

Прямая и обратная прецессия массивного вихря в бинарном бозе-конденсате

В. П. Рубан¹⁾

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Россия

Поступила в редакцию 3 марта 2022 г.

После переработки 5 марта 2022 г.

Принята к публикации 5 марта 2022 г.

Численно и аналитически исследуется динамика заполненного массивного вихря в двумерной модели захваченного гармонической ловушкой двух-компонентного бозе-конденсата, находящегося в режиме разделения фаз. В рамках связанных уравнений Гросса–Питаевского продемонстрировано, что в некоторой области параметров нелинейного взаимодействия прецессия достаточно массивного вихря вокруг центра сильно замедляется, а при дальнейшем увеличении массы даже меняет свое направление на обратное. Выведено приближенное обыкновенное дифференциальное уравнение, позволяющее объяснить такое поведение системы.

DOI: 10.31857/S1234567822070096, EDN: fohxv

Введение. Ультрахолодные газовые смеси, состоящие либо из различных химических (щелочных) элементов, либо из различных изотопов одного и того же элемента, либо из одинаковых изотопов в двух различных (сверхтонких) квантовых состояниях, демонстрируют намного большее разнообразие статических и динамических свойств в сравнении с однокомпонентными бозе-конденсатами [1–5]. В немалой мере это обусловлено наличием нескольких параметров нелинейных взаимодействий, которые пропорциональны соответствующим длинам рассеяния и иногда могут настраиваться в широких пределах по желанию экспериментатора с использованием резонансов Фешбаха [6–10]. В частности, при достаточно сильном перекрестном отталкивании между двумя видами волн материи возможен режим пространственного разделения конденсатов [11, 12], при котором формируются доменные стенки между фазами, характеризующиеся эффективным поверхностным натяжением [4, 13]. Пространственной сегрегацией объясняются многие интересные конфигурации и явления, например, нетривиальная геометрия основного состояния бинарных несмешивающихся бозе-конденсатов в ловушках [14–16] (включая оптические решетки [17–19]), динамика пузырей [20], квантовые аналоги классических гидродинамических неустойчивостей (Кельвина–Гельмгольца [21, 22], Рэлея–Тейлора [23–25], Плато–Рэлея [26]), параметрическая неустойчивость капиллярных волн на границе раздела фаз [27, 28], сложные тексту-

ры во вращающихся бинарных конденсатах [29–31], трехмерные топологические структуры [32–37], капиллярная плавучесть плотных капель в захваченных несмешивающихся бозе-конденсатах [38], и т.д.

В частности, значительный интерес вызывают вихри с заполненной сердцевинкой в бинарных бозе-конденсатах и их динамика [3, 39–45]. Такая структура представляет собой квантованный вихрь в одной из компонент, сердцевина которого заполнена второй компонентой (см. численный пример на рис. 1). При этом провал плотности вихревой компоненты служит потенциальной ямой, удерживающей вторую (“светлую”) компоненту. В свою очередь, светлая компонента создает потенциальный “холм”, “расталкивающий” вихревую компоненту и тем самым увеличивающий ширину сердцевинки вихря. В результате самосогласованным образом достигается некоторый равновесный профиль.

Тут надо сказать, что по сравнению с вихрями в B -фазе сверхтекучего ^3He , занятыми киральной A -фазой, заполненные вихри в ультрахолодных разреженных смесях бозе-газов устроены намного проще (см. для сравнения обзор [46], а также работу [47]). В частности, в сердцевине (неподвижного) холодного газового вихря сверхтекучий ток имеет простую структуру $\mathbf{j} \propto [\rho_1(r)/r]\mathbf{e}_\varphi$ (в отличие от рис. 41 из [46], где имеется участок противовращения). Более того, поскольку бинарные бозе-конденсаты холодных атомов описываются системой связанных уравнений Гросса–Питаевского, в гамильтониане которой нет перекрестных членов в кинетической энергии, здесь полностью отсутствует известный эффект

¹⁾e-mail: ruban@itp.ac.ru

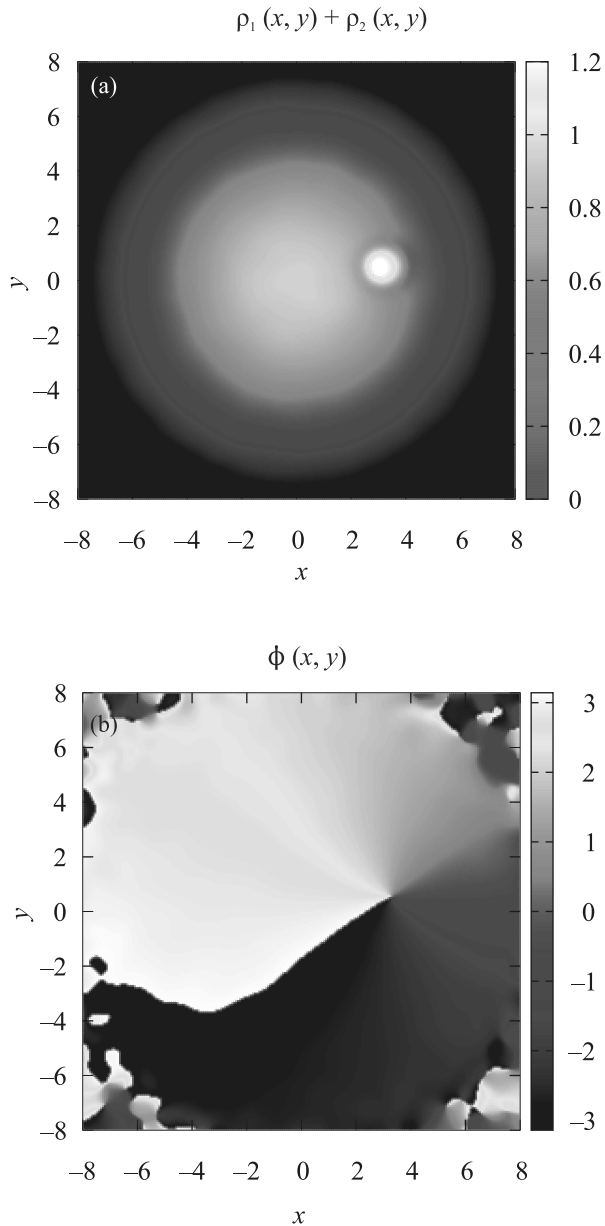


Рис. 1. (Цветной онлайн) Численный пример заполненного вихря: (a) – отнормированная суммарная плотность конденсатов; (b) – фаза вихревой компоненты

Андреева–Башкина, при котором сверхтекучая скорость одной компоненты дает вклад в ток другой компоненты [48, 49].

Находясь во внешнем потенциале ловушки и будучи выведенным из равновесного положения, вихревой комплекс приходит в движение, приблизительно как единое целое. Одной из задач исследования является теоретический анализ возникающего движения и вывод эффективных упрощенных уравнений для его описания. Например, в недавних работах [42, 43] рассматривались пространственно дву-

мерные модели бинарных конденсатов в потенциальной яме с плоским дном, и для подобных систем были предложены обыкновенные дифференциальные уравнения, которые определяют динамику массивных “точечных” вихрей. При этом практически важный случай плавного внешнего потенциала оставался неисследованным. В данной работе этот пробел заполнен. Здесь будут выведены приближенные уравнения движения для массивных вихрей в плавно неоднородных бозе-конденсатах. Эти уравнения имеют неканоническую гамильтонову структуру и для одного вихря формально соответствуют динамике электрического заряда в некотором статическом (двумерном) неоднородном электромагнитном поле, где электростатическое поле лежит в плоскости (x, y) , а магнитное поле направлено вдоль оси z и пропорционально равновесному значению плотности безвихревого конденсата $\rho(x, y)$.

Анализируя зависимость параметров этой упрощенной модели от параметров исходной системы дифференциальных уравнений в частных производных (у нас это связанные двумерные уравнения Гросса–Питаевского), мы увидим интересный эффект, ранее не распознанный применительно к вихрям в бозе-конденсатах. А именно, в случае неравных нелинейных коэффициентов самоталкивания возможна такая ситуация, когда при малом заполнении вихря светлой компонентой (его малой эффективной массе), “электрическая” сила направлена от центра системы, а при увеличении массы постепенно уменьшается и затем меняет свое направление на противоположное. Это приводит к изменению направления дрейфа вихря (его прецессии вокруг начала координат). Подчеркнем, что при такой обратной прецессии не происходит какой-либо качественной перестройки внутри вихревой сердцевинки. Прямое численное моделирование уравнений Гросса–Питаевского подтвердит предсказание упрощенной модели.

Исходная модель. Мы рассматриваем двумерный, достаточно разреженный бинарный бозе-конденсат в пределе нулевой температуры, когда применимы уравнения Гросса–Питаевского. Для максимальной простоты имеем в виду ситуацию с равными массами обоих типов атомов, $m_1 = m_2 = m$. Случай малой разницы в массах изотопов, как, например, ^{85}Rb и ^{87}Rb , включается сюда приближенно. Пусть гармоническая ловушка характеризуется поперечной частотой ω , одинаковой для обоих типов атомов. Выбираем масштаб $\tau = 1/\omega$ для времени, $l_{\text{tr}} = \sqrt{\hbar/\omega m}$ для длины, и $\varepsilon = \hbar\omega_{\perp}$ для энергии. Это позволяет нам записать уравнения движения для комплексных волновых функций

$A(\mathbf{r}, t)$ (вихревая компонента) и $B(\mathbf{r}, t)$ (светлая компонента) в обезразмеренном виде,

$$i\dot{A} = -\frac{1}{2}\nabla^2 A + [V(x, y) + g_{11}|A|^2 + g_{12}|B|^2] A, \quad (1)$$

$$i\dot{B} = -\frac{1}{2}\nabla^2 B + [V(x, y) + g_{21}|A|^2 + g_{22}|B|^2] B, \quad (2)$$

где $V = (x^2 + y^2)/2$ – потенциал ловушки, $g_{\alpha\beta}$ – симметричная матрица нелинейных взаимодействий. Физически взаимодействия определяются длинами рассеяния $a_{\alpha\beta}$ [2]:

$$g_{\alpha\beta}^{\text{phys}} = 2\pi\hbar^2 a_{\alpha\beta} (m_\alpha^{-1} + m_\beta^{-1}). \quad (3)$$

Поскольку нас интересует ситуация, когда все длины рассеяния положительны, первый коэффициент самоотталкивания можно нормировать на единицу, $g_{11} = 1$. При наличии только одной компоненты A без всяких вихрей равновесная плотность конденсата была бы

$$|A_0|^2 = \rho(\mathbf{r}) \approx [\mu - V(\mathbf{r})], \quad (4)$$

где $\mu \gg 1$ – химический потенциал. Эффективный радиус конденсата $R_* = \sqrt{2\mu}$. На таком неоднородном фоне и происходит движение массивного вихревого комплекса.

Существованию заполненного вихря способствует условие разделения фаз $g = (g_{12}^2 - g_{11}g_{22}) > 0$ [11, 12]. Имеется относительно узкий переходный слой между сегрегированными конденсатами, где плотности обеих фаз спадают практически до нуля в одном либо в другом направлении. Но для применимости уравнений Гросса–Питаевского толщина этого слоя $\delta \sim \sim 1/\sqrt{g\rho}$ все же обязана многократно превышать характерную длину рассеяния a (обычно это несколько сот боровских радиусов), т.е. $\delta(l_{\text{tr}}/a) \gg 1$. При этом соответствующий избыток энергии (коэффициент поверхностного натяжения) определяется формулой вида

$$\sigma = K(g_{22}/g_{11}, g_{12}/g_{11})\rho^{3/2}, \quad (5)$$

где $K \sim \sqrt{g}$ при малых g [11, 13]. Далее будет видно, что зависимость поверхностного натяжения от фоновой плотности существенно влияет на динамику массивного вихря, поскольку создает градиент его эффективной потенциальной энергии.

Структура волновых функций. При выводе уравнений движения вихря мы будем пренебрегать свободными возбуждениями звуковых колебаний и отличием формы вихря от циркулярной. Решающим обстоятельством, позволяющим это сделать, будет малость отношения радиуса вихревой сердцевинки w

к размеру конденсата R_* , так что структура вихря почти такая же, как на однородном фоне, а скорость его движения мала в сравнении со скоростями потенциальных возбуждений. Это дает нам основание сделать упрощающее приближение, что волновые функции A и B имеют вид

$$A = \sqrt{\rho_a} e^{i\Phi_a} \approx \Psi_v(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \exp[i\mathbf{U} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{R})], \quad (6)$$

$$B = \sqrt{\rho_b} e^{i\Phi_b} \approx \Psi_b(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \exp[i\mathbf{U} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{R})], \quad (7)$$

где $\mathbf{R}(t)$ – положение вихря, а $\mathbf{U}(t)$ – некоторый двумерный вектор, связь которого со скоростью перемещения вихря будет выяснена позднее. Очень важно, что функция Ψ_v содержит квантованный вихрь, т.е. ее фаза $\Phi_v(\mathbf{r})$ набирает приращение 2π при обходе точки \mathbf{R} против часовой стрелки. Вихревая фаза $\Phi_v(\mathbf{r})$ должным образом согласована с плотностью ρ_a , которая вдали от вихря совпадает с $\rho(\mathbf{r})$, а внутри его сердцевинки $\rho_a \approx \varrho(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|, \mathbf{R})$, так что

$$\text{div}(\rho_a \nabla \Phi_v) = 0. \quad (8)$$

В свою очередь, плотности $\varrho(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|, \mathbf{R})$ и ρ_b согласованы между собой так же, как и в случае заполненного вихря на локально однородном фоне плотности со значением $\varrho(\infty, \mathbf{R}) = \rho(\mathbf{R})$. Дополнительные функции \mathbf{F} и \mathbf{G} в фазах A и B связаны с теми частями полей скорости, которые появляются соответственно при движении провала плотности вихревой компоненты и при квазиоднородном движении светлой компоненты. С достаточной точностью можно считать, что $\mathbf{G} = \mathbf{r} - \mathbf{R}$, а $\mathbf{F} = (\mathbf{r} - \mathbf{R})f(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|, \mathbf{R})$, где при фиксированном \mathbf{R} скалярная функция $f(\chi)$ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\varrho(\chi)[\chi f'' + 3f'] + \varrho'(\chi)[\chi f' + f] = \varrho'(\chi), \quad (9)$$

которое следует из уравнения непрерывности для стационарного обтекания

$$\text{div}(\varrho[U_i F_{i,k} - U_k]) = 0. \quad (10)$$

Уравнение (9) дополняется условием стремления f к нулю на бесконечности и условием как можно более слабой сингулярности в нуле. Очень важно, что f быстро спадает на расстояниях порядка ширины вихревой сердцевинки. В качественном отношении комбинация $\mathbf{U} \cdot \mathbf{F}$ подобна тому потенциалу скорости в классической гидродинамике, который описывает обтекание цилиндра и определяет соответствующую присоединенную массу.

Упрощенные уравнения движения вихря. Вывод приближенных уравнений движения для за-

полненного вихря произведем на основе гамильтоновой структуры уравнений Гросса–Питаевского,

$$i\dot{A} = \delta\mathcal{H}/\delta A^*, \quad i\dot{B} = \delta\mathcal{H}/\delta B^*, \quad (11)$$

где гамильтониан дается выражением

$$\mathcal{H} = \int \left[\frac{|\nabla A|^2}{2} + \frac{|\nabla B|^2}{2} + V(x, y)(|A|^2 + |B|^2) + \frac{g_{11}|A|^4}{2} + g_{12}|A|^2|B|^2 + \frac{g_{22}|B|^4}{2} \right] dx dy. \quad (12)$$

Используя уравнения (6), (7) и (11), легко получаем следующие два равенства:

$$\int \left(\dot{\rho}_a \frac{\partial \Phi_a}{\partial \mathbf{R}} - \dot{\Phi}_a \frac{\partial \rho_a}{\partial \mathbf{R}} \right) dx dy + \{a \rightarrow b\} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{R}}, \quad (13)$$

$$\int \left(\dot{\rho}_a \frac{\partial \Phi_a}{\partial \mathbf{U}} - \dot{\Phi}_a \frac{\partial \rho_a}{\partial \mathbf{U}} \right) dx dy + \{a \rightarrow b\} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{U}}. \quad (14)$$

Теперь заметим, что вдали от вихря либо $\dot{\rho}_{a,b}$ пренебрежимо малы, либо вариационные производные $\partial \rho_{a,b}/\partial \mathbf{R}$ пренебрежимо малы (а $\partial \rho_{a,b}/\partial \mathbf{U} = 0$ везде). Поэтому основной вклад в интегралы происходит от близкой окрестности вихря, где можно использовать приближенные формулы

$$\dot{A} \approx -\dot{\mathbf{R}} \cdot \nabla A + iA(\dot{\mathbf{U}} \cdot \mathbf{F}), \quad (15)$$

$$\dot{B} \approx -\dot{\mathbf{R}} \cdot \nabla B + iB(\dot{\mathbf{U}} \cdot \mathbf{G}). \quad (16)$$

Выразив отсюда временные производные плотностей и фаз и подставив их в (13) и (14), после несложных вычислений получим два векторных уравнения,

$$-M\dot{\mathbf{U}} + 2\pi[\hat{z} \times \dot{\mathbf{R}}]\rho(\mathbf{R}) \approx \partial H/\partial \mathbf{R}, \quad (17)$$

$$M\dot{\mathbf{R}} \approx \partial H/\partial \mathbf{U}, \quad (18)$$

причем скалярная величина M определяется из соотношения

$$M\delta_{ik} = \int (\rho_a F_{k,i} + \rho_b G_{k,i}) dx dy. \quad (19)$$

Очевидно, что гамильтониан $H(\mathbf{R}, \mathbf{U})$ квадратичен по \mathbf{U} и должен иметь вид

$$H \approx M_{\text{tot}} \frac{\mathbf{U}^2}{2} + W(\mathbf{R}). \quad (20)$$

Поэтому следует отождествить \mathbf{U} со скоростью движения вихря $\dot{\mathbf{R}}$, и тогда M оказывается полной эффективной массой заполненного вихря, которая включает в себя как захваченную сердцевинной вихря массу светлой компоненты M_{br} , так и присоединенную массу вихревой компоненты, обусловленную

наличием дополнительной кинетической энергии при движении провала плотности сквозь конденсат.

В принципе, присоединенная масса M_{add} могла бы оказаться зависящей от \mathbf{R} , и тогда для сохранения консервативности системы следовало бы ввести вектор $\mathbf{P} = M(\mathbf{R})\mathbf{U}$ и переписать уравнения движения в “слегка подправленном” виде

$$-\dot{\mathbf{P}} + 2\pi[\hat{z} \times \dot{\mathbf{R}}]\rho(\mathbf{R}) = \partial H/\partial \mathbf{R}, \quad (21)$$

$$\dot{\mathbf{R}} = \partial H/\partial \mathbf{P}. \quad (22)$$

Возможно, такое обобщение пригодились бы при рассмотрении сильно сплюснутых трехмерных конденсатов, находящихся в режиме Томаса–Ферми по всем трем координатам. Однако нетрудно показать, что в случае строго двумерных уравнений Гросса–Питаевского масса M_{add} в главном приближении не зависит от положения вихря.

Оценка коэффициентов. Если эффективный радиус вихря w существенно превышает толщину доменной стенки δ , то присоединенная масса может быть оценена по известной формуле из классической гидродинамики, т.е. $M_{\text{add}} \approx \pi\rho(\mathbf{R})w^2$. С другой стороны, поскольку гидродинамические давления конденсатов равны $P_a = g_{11}\rho_a^2$ и $P_b = g_{22}\rho_b^2$, и по обе стороны от доменной стенки в главном порядке они совпадают (если не учитывать поверхностное натяжение σ), то сохранение массы светлой компоненты позволяет оценить зависимость величины $w(\mathbf{R})$ через условие

$$M_{\text{br}} = \pi\rho_b w^2 = \pi\sqrt{\frac{g_{11}}{g_{22}}}\rho(\mathbf{R})w^2 = \sqrt{\frac{g_{11}}{g_{22}}}M_{\text{add}}. \quad (23)$$

Кроме того, мы имеем отсюда оценку для эффективной массы

$$M = [1 + (g_{22}/g_{11})^{1/2}]M_{\text{br}}. \quad (24)$$

Тот факт, что полная масса достаточно большого вихря оказалась не зависящей от его положения на пространственно неоднородном фоне плотности, делает выведенную систему уравнений (17)–(18) [с учетом выражения (20)] математически идентичной уравнению двумерного движения электрического заряда в магнитном и электрическом полях. “Электростатический потенциал” $W(\mathbf{R})$ при этом равен сумме трех частей. Во-первых, это та часть кинетической энергии, которая обусловлена градиентом вихревой фазы $\Phi_v(\mathbf{r})$. Во-вторых, это энергия нелинейных взаимодействий плюс потенциальная энергия вихря в поле ловушки. В-третьих, это энергия “квантового давления”. Первый вклад в широко известном приближении локальной индукции можно оценить как

$$W_1 \approx \pi\Lambda_0\rho(\mathbf{R}), \quad \Lambda_0 = \ln(R_*/w_0). \quad (25)$$

Заметим при этом, что в практически интересных случаях $\Lambda_0 \approx 2$. Второй и третий вклады можно оценить (с точностью до несущественной аддитивной константы), используя концепцию поверхностного натяжения,

$$W_2 + W_3 \approx 2\pi\sigma w + [1 - (g_{22}/g_{11})^{1/2}]M_{\text{br}}U(\mathbf{R}) = \\ = [\pi C M_{\text{br}}^{1/2} - [1 - (g_{22}/g_{11})^{1/2}]M_{\text{br}}]\rho(\mathbf{R}), \quad (26)$$

где коэффициент C – порядка единицы. Таким образом, все выражение для потенциальной энергии свелось к простой формуле

$$W(\mathbf{R}) = \pi\Lambda\rho(\mathbf{R}), \quad (27)$$

где эффективный безразмерный параметр Λ нетривиально зависит от массы захваченной светлой компоненты,

$$\Lambda \approx \Lambda_0 + C M_{\text{br}}^{1/2} - [1 - (g_{22}/g_{11})^{1/2}]M_{\text{br}}/\pi. \quad (28)$$

Второе слагаемое здесь обусловлено поверхностным натяжением на границе фаз, а третье отвечает за “массовый” вклад с учетом “силы Архимеда”. При этом следует сказать, что гидродинамический вклад Λ_0 по своей величине вполне может оказаться существенно меньшим, чем каждое из остальных слагаемых.

Скорость прецессии вихря. Если ввести комплексную координату вихря $Z(t) = X(t) + iY(t)$, то окончательное уравнение движения массивного вихря запишется следующим образом:

$$-\tilde{M}\ddot{Z} + i(\mu - |Z|^2/2)\dot{Z} + \frac{\Lambda}{2}Z = 0, \quad (29)$$

где $\tilde{M} = M/2\pi$. Данное уравнение интегрируемо в квадратурах очевидным образом при переходе к полярным координатам. Мы не приводим здесь соответствующих формул. Заметим только, что существуют частные решения вида $Z(t) = R_0 \exp(-i\Omega t)$. Подстановка дает две ветви решения

$$\Omega_{\pm}(R_0) = -\left[\frac{(\mu - R_0^2/2)}{2\tilde{M}} \pm \sqrt{\frac{(\mu - R_0^2/2)^2 - 2\Lambda\tilde{M}}{4\tilde{M}^2}}\right]. \quad (30)$$

Нас здесь интересует, главным образом, решение $\Omega_-(R_0)$, которое соответствует дрейфу заряда в скрещенных магнитном и электрическом полях. Видно, что большие положительные значения Λ способствуют быстрому дрейфу против часовой стрелки [отрицательная частота $\Omega_-(R_0)$]. Более того, обе ветви сливаются при некотором критическом значении радиуса, уменьшающемся с ростом Λ . Наоборот, при

малых Λ дрейф замедляется, а при отрицательных Λ меняет свое направление на обратное (по часовой стрелке – положительная частота). В связи с этим, при взгляде на выражение (28) в глаза бросаются два свойства рассматриваемой системы, имеющие место при $g_{22} \neq g_{11} = 1$. Во-первых, при $g_{22} > 1$ параметр Λ довольно быстро растет при увеличении массы вихря, что должно сокращать область устойчивости движения. Во-вторых, если $g_{22} < 1$, то при увеличении массы достижимы отрицательные значения Λ и обратный дрейф.

Результаты численной проверки. Параметрическая область $\Lambda \gg 1$ будет исследована в другой работе. Здесь же путем прямого численного моделирования связанных двумерных уравнений Гросса–Питаевского проверено предсказание теории насчет обратного дрейфа. Проведенные вычисления были ориентированы на экспериментально реализуемые смеси ^{85}Rb – ^{87}Rb [8], где $a_{12}/a_{22} \approx 2$, тогда как a_{11} можно изменять в широких пределах с помощью резонанса Фешбаха. Поэтому в наших численных экспериментах были взяты значения $g_{11} = g_{12} = 1$, $g_{22} = 0.5$. Используемый нами численный метод подобен тому, что применялся ранее в работах [37, 38, 50].

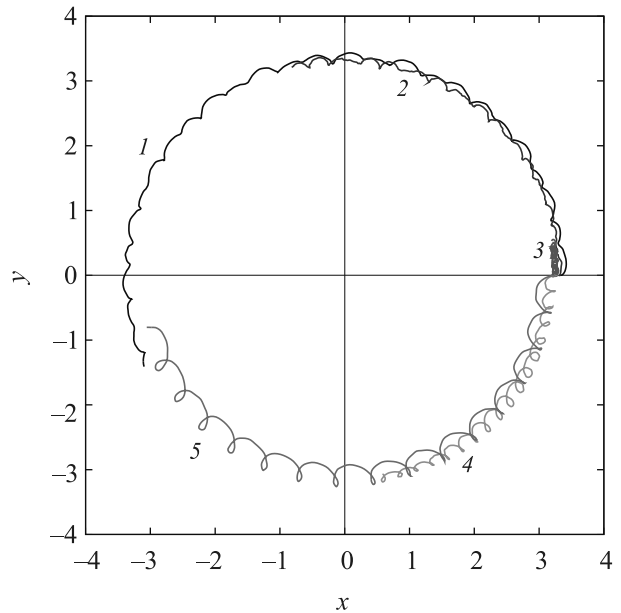


Рис. 2. (Цветной онлайн) Примеры траекторий массивного вихря на отрезке времени $[0 : 100]$ при $\mu = 30$ для различных значений массы светлой компоненты. Последовательным номерам траекторий от “1” до “5” соответствуют значения $M_{\text{br}}/2\pi = 8.0, 10.0, 12.0, 14.0, 16.0$. Движение начинается приблизительно в одной точке, но направление и скорости дрейфа оказываются различными

Начальное состояние для численного интегрирования приготавливалось таким образом, что заполненный вихрь находился в некоторой точке $\mathbf{R}(0) = (X_0, 0)$ и имел при этом нулевую скорость. Далее отслеживалась его траектория (положение центра масс светлой компоненты) и вычислялась угловая скорость дрейфа. Примеры траекторий показаны на рис. 2. Видно, что на медленный дрейф накладываются быстрые осцилляции, характерные для движения заряда в магнитном поле. Зависимости угловой скорости дрейфа, подтверждающие возможность обратного движения, представлены на рис. 3.

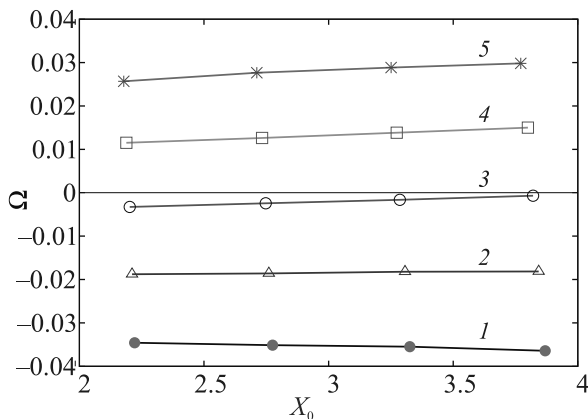


Рис. 3. (Цветной онлайн) Численные зависимости угловой скорости дрейфа от начальной координаты для различных значений светлой массы вихря при $g_{11} = g_{12} = 1$, $g_{22} = 0.5$, $\mu = 30$. Номерам линий от “1” до “5” соответствуют значения $M_{br}/2\pi = 8.0, 10.0, 12.0, 14.0, 16.0$

Закключение. Таким образом, в данной работе выведено простое уравнение движения для массивного вихря в двумерном плавно неоднородном бинарном бозе-конденсате и численно подтверждена предсказываемая этим уравнением возможность обратного дрейфа. Уравнение отличается от подобного уравнения для безмассового вихря добавлением естественного слагаемого $M\ddot{\mathbf{R}}$ и изменением коэффициента в выражении для эффективной потенциальной энергии. Еще больше возможностей для контроля коэффициентов имеется в случае неравных масс атомов $m_1 \neq m_2$ и при различающихся внешних потенциалах $V_1(\mathbf{r}) \neq V_2(\mathbf{r})$.

Надо сказать, что система нескольких массивных вихрей может быть рассмотрена аналогичным образом. Техническая трудность там имеется только при вычислении парных взаимодействий. Но для некоторых специальных равновесных профилей плотности $\rho(x, y)$ эта трудность успешно преодолевается, как

было показано в работах [51, 52] на примере однокомпонентных бозе-конденсатов.

Строго двумерный конденсат является идеализацией. Задачей на будущее остается подробная проверка режима обратной прецессии для сильно сплюснутых трехмерных конденсатов. Предварительные численные эксперименты уже показали качественное сходство с плоским случаем.

1. T.-L. Ho and V. B. Shenoy, Phys. Rev. Lett. **77**, 3276 (1996).
2. H. Pu and N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. **80**, 1130 (1998).
3. B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **85**, 2857 (2000).
4. S. Coen and M. Haelterman, Phys. Rev. Lett. **87**, 140401 (2001).
5. G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **89**, 190404 (2002).
6. J. P. Burke, Jr., J. L. Bohn, B. D. Esry, and C. H. Greene, Phys. Rev. Lett. **80**, 2097 (1998).
7. G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **100**, 210402 (2008).
8. S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **101**, 040402 (2008).
9. S. Tojo, Y. Taguchi, Y. Masuyama, T. Hayashi, H. Saito, and T. Hirano, Phys. Rev. A **82**, 033609 (2010).
10. C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
11. E. Timmermans, Phys. Rev. Lett. **81**, 5718 (1998).
12. P. Ao and S. T. Chui, Phys. Rev. A **58**, 4836 (1998).
13. B. van Schaeybroeck, Phys. Rev. A **78**, 023624 (2008).
14. A. A. Svidzinsky and S. T. Chui, Phys. Rev. A **68**, 013612 (2003).
15. S. Gautam and D. Angom, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 095302 (2010).
16. R. W. Pattinson, T. P. Billam, S. A. Gardiner, D. J. McCarron, H. W. Cho, S. L. Cornish, N. G. Parker, and N. P. Proukakis, Phys. Rev. A **87**, 013625 (2013).
17. K. Suthar, A. Roy, and D. Angom, Phys. Rev. A **91**, 043615 (2015).
18. K. Suthar and D. Angom, Phys. Rev. A **93**, 063608 (2016).
19. K. Suthar and D. Angom, Phys. Rev. A **95**, 043602 (2017).
20. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A **83**, 033602 (2011).
21. H. Takeuchi, N. Suzuki, K. Kasamatsu, H. Saito, and M. Tsubota, Phys. Rev. B **81**, 094517 (2010).
22. N. Suzuki, H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Saito, Phys. Rev. A **82**, 063604 (2010).
23. K. Sasaki, N. Suzuki, D. Akamatsu, and H. Saito, Phys. Rev. A **80**, 063611 (2009).

24. S. Gautam and D. Angom, *Phys. Rev. A* **81**, 053616 (2010).
25. T. Kadokura, T. Aioi, K. Sasaki, T. Kishimoto, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **85**, 013602 (2012).
26. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **83**, 053606 (2011).
27. D. Kobayakov, V. Bychkov, E. Lundh, A. Bezett, and M. Marklund, *Phys. Rev. A* **86**, 023614 (2012).
28. D.K. Maity, K. Mukherjee, S.I. Mistakidis, S. Das, P.G. Kevrekidis, S. Majumder, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **102**, 033320 (2020).
29. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 150406 (2003).
30. K. Kasamatsu and M. Tsubota, *Phys. Rev. A* **79**, 023606 (2009).
31. P. Mason and A. Aftalion, *Phys. Rev. A* **84**, 033611 (2011).
32. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250406 (2004).
33. H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Nitta, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 245301 (2012).
34. M. Nitta, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Takeuchi, *Phys. Rev. A* **85**, 053639 (2012).
35. K. Kasamatsu, H. Takeuchi, M. Tsubota, and M. Nitta, *Phys. Rev. A* **88**, 013620 (2013).
36. S.B. Gudnason and M. Nitta, *Phys. Rev. D* **98**, 125002 (2018).
37. В. П. Рубан, *ЖЭТФ* **160**, 912 (2021).
38. В. П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 848 (2021).
39. K.J.H. Law, P.G. Kevrekidis, and L.S. Tuckerman, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 160405 (2010); *Erratum*, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 199903 (2011).
40. M. Pola, J. Stockhofe, P. Schmelcher, and P.G. Kevrekidis, *Phys. Rev. A* **86**, 053601 (2012).
41. S. Hayashi, M. Tsubota, and H. Takeuchi, *Phys. Rev. A* **87**, 063628 (2013).
42. A. Richaud, V. Penna, R. Mayol, and M. Guilleumas, *Phys. Rev. A* **101**, 013630 (2020).
43. A. Richaud, V. Penna, and A.L. Fetter, *Phys. Rev. A* **103**, 023311 (2021).
44. В. П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 539 (2021).
45. V.P. Ruban, W. Wang, C. Ticknor, and P.G. Kevrekidis, *Phys. Rev. A* **105**, 013319 (2022).
46. M.M. Salomaa and G.E. Volovik, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 533 (1987).
47. G.E. Volovik and T. Sh. Misirpashaev, *Pis'ma v ZhETF* **51**, 475 (1990) [*JETP Lett.* **51**, 537 (1990)].
48. A.F. Andreev and E. P. Bashkin, *ZhETF* **69**, 319 (1975) [*JETP* **42**, 164 (1976)].
49. G.E. Volovik, *Pis'ma v ZhETF* **115**, 306 (2022).
50. В. П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **108**, 638 (2018).
51. В. П. Рубан, *ЖЭТФ* **151**, 1092 (2017).
52. В. П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 449 (2017).

Полуметаллическая метастабильная твердая атомарная фаза азота

К. С. Гришаков^{+*1)}, Н. Н. Дегтяренко⁺

⁺Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

*Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, 119620 Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 марта 2022 г.

После переработки 7 марта 2022 г.

Принята к публикации 8 марта 2022 г.

В рамках теории функционала плотности предсказана новая твердая атомарная фаза азота, динамически устойчивая при давлениях выше 20 ГПа. Данная фаза обладает низкой симметрией кристаллической решетки $P\bar{1}$, и демонстрирует уникальные для азотных кристаллических структур в области низких давлений электронные свойства, характерные для полуметаллов. Представлены расчеты структурных, энергетических, механических и электронных свойств для данной фазы, а также их сопоставление с аналогичными характеристиками Гош фазы азота.

DOI: 10.31857/S1234567822070102, EDN: ftiav

Введение. В природе азот существует в виде двухатомных молекул N_2 с прочной тройной ковалентной связью. Одной из важных особенностей азота является нетипичное для множества других элементов соотношение между энергиями тройной и одинарной связи: сумма трех энергий одинарной связи примерно в 1.5 раза меньше, чем энергия тройной связи [1]. Таким образом, создавая азотосодержащее вещество, в котором атомы азота связаны друг с другом одинарными связями, можно запастись энергией. В этой связи, чисто азотные кластеры и кристаллические структуры с одинарными связями между атомами представляют наибольший интерес, и по теоретическим оценкам, их эффективность по крайней мере в несколько раз выше других высокоэнергетических веществ [1, 2]. Молекулярная фаза азота при нормальных условиях более термодинамически стабильна по сравнению с азотными кластерами и кристаллическими структурами, поэтому немолекулярные структуры имеют тенденцию к распаду на двухатомные молекулы с высвобождением большого количества энергии. Этот процесс происходит без образования загрязняющих соединений, поскольку молекулы N_2 являются основным компонентом атмосферного воздуха. Поэтому различные немолекулярные азотные структуры рассматриваются в качестве экологически чистых материалов с высокой плотностью запасаемой энергии.

За последние десятилетия было проведено большое количество теоретических и экспериментальных

исследований, посвященных поиску и предсказанию немолекулярных азотных структур, а также исследованию их свойств и устойчивости. К настоящему моменту теоретически предсказывается устойчивость для множества различных изолированных кластеров N_m , $m = 3 \div 78$ [3–13]. Однако экспериментальное получение подобных структур остается достаточно сложной задачей и к настоящему моменту были синтезированы лишь несколько азотных кластеров: N_8 [14], N_4 [3, 15], N_3^- [16], N_5^+ [5] и N_5^- [4].

Под высоким давлением молекулярная фаза азота должна переходить в твердое атомарное состояние, которое также активно исследуется наряду с кластерными формами азота. Впервые возможность существования кристаллического состояния азота с одинарными связями между атомами была теоретически предсказана в работе [17]. Предсказанная азотная структура обладает симметрией кристаллической решетки $I2_13$ [17] и называется кубической Гош фазой азота (*cg-N*). В ходе дальнейших теоретических расчетов было предложено множество различных твердых фаз азота [18–26]. Среди всех предсказанных теоретически азотных кристаллических структур при давлениях, меньших 150 ГПа, наиболее термодинамически выгодной является Гош фаза азота [25, 27, 28]. Моделирование декомпрессии при нулевой температуре показало, что в области низких давлений динамически устойчивыми оказываются только фазы *cg-N* [17], *Pccn* [35], $R\bar{3}$ [24] и $P\bar{6}2c$ [25]. Все рассмотренные теоретически твердые фазы азота, по крайней мере до давлений 400 ГПа, демонстрируют электронные свойства, характерные для

¹⁾e-mail: ksgrishakov@mephi.ru

полупроводников или изоляторов, поэтому должны быть прозрачными для оптического излучения соответствующей длины волны. Наименьшей шириной запрещенной зоны обладает фаза $R\bar{3}$ [24].

Впервые твердая фаза азота в аморфном состоянии была синтезирована в 2001 г. путем сжатия молекулярного азота в алмазной наковальне [29]. Постепенно снижая давление и поддерживая температуру ниже 100 К, удалось сохранить на определенное время азот в данном аморфном состоянии вплоть до атмосферного давления. Это состояние проявляло полупроводниковые свойства и при давлениях ~ 240 ГПа демонстрировало ширину запрещенной зоны ~ 0.4 эВ. Впоследствии при давлении выше 110 ГПа и температуре выше 2000 К удалось экспериментально получить полимерную фазу азота со связями первого порядка, по структуре соответствующую предсказанной ранее теоретически Гош фазе азота [30, 31]. При высоких давлениях также были синтезированы и другие твердые атомарные фазы азота, такие как слоистая полимерная фаза LP-N [32], фаза со структурой черного фосфора [33], структура азота, аналогичная предсказанной ранее теоретически фазе $Pba2$ [28], гексагональная слоистая полимерная фаза HLP-N [34]. Во всех экспериментах попытки декомпрессии образцов до нормального давления приводили к разрушению немоллекулярной фазы.

Таким образом, несмотря на активные исследования, экспериментальный синтез твердых атомарных азотных структур, устойчивых при условиях, близких к нормальным, является нерешенной задачей. Поэтому одним из актуальных направлений исследований является поиск новых твердых азотных фаз с одинарными связями между атомами, устойчивых в области низких давлений (< 50 ГПа). Поскольку для предсказания азотных структур уже ранее активно применялись различные алгоритмы глобальной оптимизации (например, эволюционный алгоритм), позволившие открыть ряд кристаллических фаз азота (см., например, работы [21, 25, 28]), то дальнейший теоретический поиск новых структур, устойчивых в области низких давлений, с использованием таких алгоритмов оказывается существенно затруднен, и требуется разработка новых подходов.

В данной работе для поиска новых твердых фаз азота мы проводили моделирование процесса адиабатического сжатия при нулевой температуре различных кристаллов, образованных кластерами азота. Такой подход более “физичен”, чем использование алгоритмов глобальной оптимизации, и позволяет установить влияние прекурсора на возможность

формирования устойчивой твердой фазы под давлением. Применение такой методики позволило обнаружить новую кристаллическую фазу атомарного азота, устойчивую в области низких давлений (< 50 ГПа). Проведено детальное исследование ее структурных, электронных и механических свойств, а также их сопоставление с аналогичными характеристиками Гош фазы азота, которая является наиболее термодинамически выгодной среди других твердых атомарных структур азота в области низких давлений, а также является экспериментально синтезированной.

Методика расчета. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности с использованием программы Quantum ESPRESSO (QE) 6.7 [35, 36]. Использовался обменно-корреляционный функционал PBEsol и сохраняющий норму псевдопотенциал, который был создан с использованием программы ONCVSP (Optimized Norm-Conserving Vanderbilt Pseudopotential) 3.3.1 [37]. Энергия обрезания составляла 90 Ry, а расстояние между точками в k -пространстве не превышало 0.025 \AA^{-1} . Проведенные тестовые расчеты с другими значениями энергии обрезания и сетки в k -пространстве показали, что использование выбранных нами значений этих параметров при расчетах является достаточным для получения результатов с относительной ошибкой менее 1%. Для расчета упругих постоянных использовалась программа thermo_pw [38]. Построение пути между точками высокой симметрии в зоне Бриллюэна для графиков электронной зонной структуры и фононного спектра проводилось с использованием программы SeeK-path [39]. Симметрия кристаллической решетки определялась с точностью 10^{-4} \AA .

Методика моделирования процесса адиабатического сжатия азотных структур при нулевой температуре заключалась в следующем: при данном значении давления проводилась геометрическая оптимизация кристаллической структуры, и затем полученная отрелаксированная конфигурация использовалась в качестве начальной конфигурации для запуска при более высоком значении давления. Шаг по давлению составлял 20 ГПа.

Расчет энергии Гиббса проводился по формуле $G = E_{\text{total}} + P \cdot V + F_{\text{ph}}(T)$, где $F_{\text{ph}}(T)$ – фононная свободная энергия, найденная в квазигармоническом приближении, P – давление, V – объем, E_{total} – полная энергия.

Результаты. Мы проводили моделирование процесса адиабатического сжатия при нулевой температуре для различных кристаллических структур,

Таблица 1. Структурные параметры элементарной ячейки фазы $P\bar{1}$, состоящей из 12 атомов азота, при давлении 20 ГПа

Параметры решетки (\AA , $^\circ$)	Атомные координаты (относительные единицы)
$a = b = 4.1527$, $c = 4.6485$, $\alpha = \beta = 89.0$, $\gamma = 89.9$	(0.1719, 0.8796, 0.7194); (0.1204, 0.8281, 0.2806); (0.1488, 0.1403, 0.1765); (0.8645, 0.2776, 0.1192); (0.7224, 0.1355, 0.8808); (0.8597, 0.8512, 0.8235); (0.3512, 0.3597, 0.3235); (0.6355, 0.2224, 0.3808); (0.7776, 0.3645, 0.6192); (0.6403, 0.6488, 0.6765); (0.3281, 0.6204, 0.7806); (0.3796, 0.6719, 0.2194)

элементарная ячейка которых содержала 2 кластера азота. Пример такой кристаллической структуры, состоящей из кластеров $N_6(C_{2v})$ -А, изображен на рис. 1а. В результате такого моделирования структу-

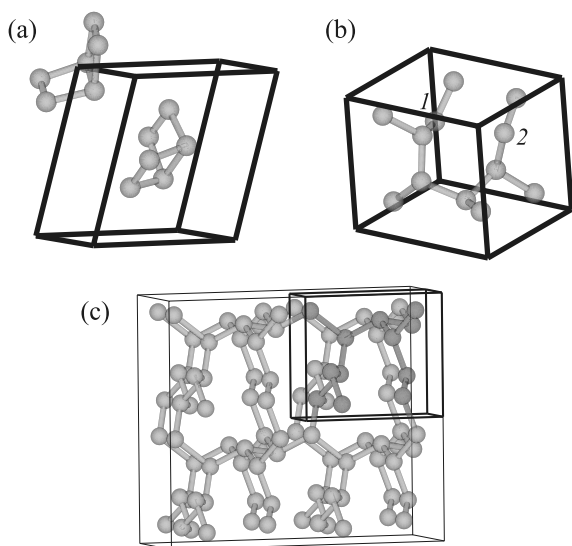


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Элементарная ячейка структуры, состоящей из двух кластеров азота $N_6(C_{2v})$ -А; (б) – элементарная ячейка твердой атомарной фазы азота с симметрией кристаллической решетки $P\bar{1}$; (с) – суперъячейка $2 \times 2 \times 2$ твердой фазы $P\bar{1}$ (атомы элементарной ячейки отмечены красным цветом)

ра, состоящая из кластеров $N_6(C_{2v})$ -А, при давлении 160 ГПа трансформировалась в трехмерную твердую атомарную фазу с симметрией кристаллической решетки $P\bar{1}$ (см. рис. 1б и с). Поскольку нас интересовала возможность сохранения твердого атомарного состояния при низких давлениях, мы провели моделирование декомпрессии фазы $P\bar{1}$ вплоть до нулевого давления. Другие кластерные структуры трансформировались под давлением в квазиодномерные структуры, состоящие из цепочек связанных кластеров, и оказались динамически неустойчивыми, поэтому не будут рассматриваться в работе.

Расчеты фононных спектров для твердой атомарной фазы азота с симметрией $P\bar{1}$ показали, что при давлениях ниже 20 ГПа данная структура является неустойчивой, о чем свидетельствует наличие мнимых частот на фононном спектре. При давлениях от 20 до 200 ГПа фаза $P\bar{1}$ является динамически устойчивой, что для давления 20 ГПа продемонстрировано на рис. 2, где изображены фононный спектр и плотность числа фононных состояний с $\omega^2(k) > 0$.

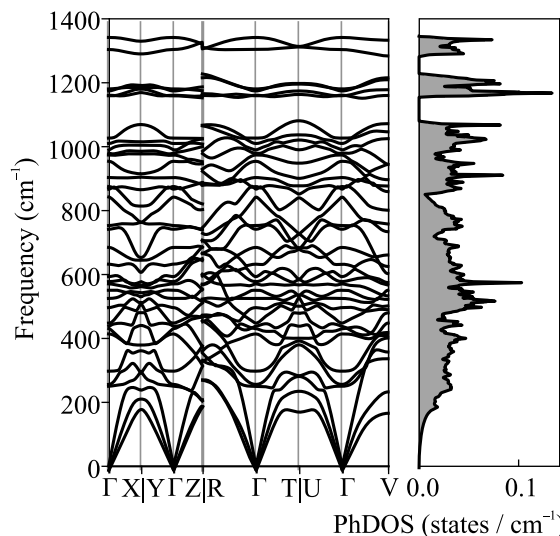


Рис. 2. Фононный спектр и плотность числа фононных состояний для твердой атомарной фазы азота $P\bar{1}$

Структурные параметры элементарной ячейки для фазы $P\bar{1}$ при давлении 20 ГПа представлены в табл. 1. На рисунке 3 демонстрируется зависимость длины связи в структуре $P\bar{1}$ от давления (при построении данных зависимостей учитываются только три ближайших соседа, что соответствует случаю одинарной связи между атомами). Низкая симметрия данной фазы приводит к большому разбросу значений длин связи и углов между связями. С ростом давления фаза $P\bar{1}$ становится существенно более однородной по величине длины связи между атомами. Из приведенных на рис. 3 зависимостей видно, что в структуре присутствуют атомы, у которых одна из

Таблица 2. Механические свойства твердых атомарных фаз азота $P\bar{I}$ и $cg-N$ для различных значений давления P . V – объемный модуль упругости, E – модуль Юнга, G – модуль сдвига, n – коэффициент Пуассона

Модули упругости	$P = 20$ ГПа	$P = 50$ ГПа	$P = 100$ ГПа	$P = 200$ ГПа
$B_{P\bar{I}}$, ГПа	231	372	558	896
$E_{P\bar{I}}$, ГПа	405	552	702	908
$G_{P\bar{I}}$, ГПа	167	220	272	342
$n_{P\bar{I}}$, ГПа	0.21	0.25	0.29	0.33
B_{cg-N} , ГПа	284	451	610	910
E_{cg-N} , ГПа	585	780	920	1086
G_{cg-N} , ГПа	253	322	368	418
n_{cg-N} , ГПа	0.16	0.21	0.25	0.30

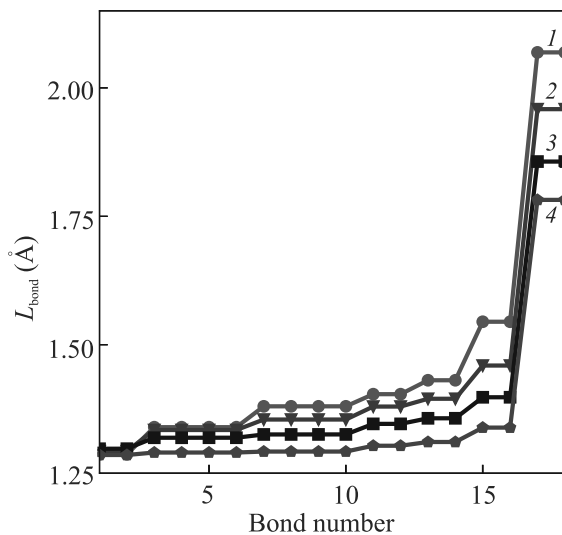


Рис. 3. (Цветной онлайн) Значения длин связи L_{bond} в твердой атомарной структуре $P\bar{I}$ для различных значений давлений: 1 – 20 ГПа; 2 – 50 ГПа; 3 – 100 ГПа; 4 – 200 ГПа

трех длин связи имеет значения от 1.75 Å при давлении 200 ГПа до 2.1 Å при давлении 20 ГПа (эти атомы обозначены 1 и 2 на рис. 1b), т.е. фактически можно говорить о том, что такая связь очень слабая или вообще отсутствует. Для сравнения Гош фаза азота $cg-N$ имеет одинаковое значение длины связи для всех атомов: $L_{\text{bond}} = 1.382$ Å, 1.362 Å, 1.338 Å, 1.306 Å для давлений 20, 50, 100 и 200 ГПа, соответственно.

Механические свойства фазы $P\bar{I}$, а также фазы $cg-N$, при различных значениях давления представлены в табл. 2. За исключением коэффициента Пуассона, модули упругости для фазы $P\bar{I}$ оказываются меньше, чем для Гош фазы азота $cg-N$. Таким образом, “жесткость” связей между атомами в фазе $P\bar{I}$ должна быть несколько меньше, чем для $cg-N$, а, следовательно, ее структура должна испытывать большую деформацию при приложении давле-

ния. Например, при изменении давления от 20 до 200 ГПа объем на атом для фазы $P\bar{I}$ уменьшается на величину $2.0 \text{ \AA}^3/\text{атом}$, а аналогичное уменьшение объема для структуры $cg-N$ составляет $1.6 \text{ \AA}^3/\text{атом}$.

Для кристаллической фазы $P\bar{I}$ были найдены значения энергии Гиббса на атом (G) в диапазоне давлений 20–200 ГПа. На рисунке 4 приведены зави-

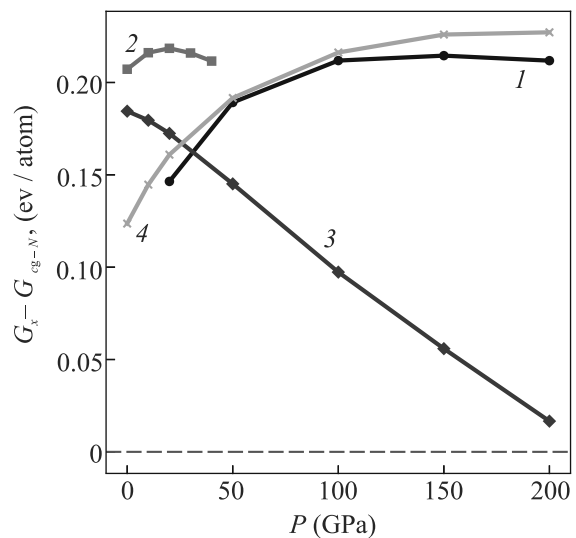


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость разности в энергии Гиббса $G_X - G_{cg-N}$ на атом при $T = 300$ К между твердыми атомарными фазами азота $X = P\bar{I}$ (1), $P62c$ (2), $Pccn$ (3), $R\bar{3}$ (4) и Гош фазой $cg-N$ от давления. Представленные кривые изображены для области динамической устойчивости соответствующих азотных структур

симости G от давления для различных твердых атомарных фаз азота, динамически устойчивых в области низких давлений. За начало отсчета при каждом значении давления на рис. 4 выбрана соответствующая величина энергии Гиббса Гош фазы азота $cg-N$. Среди твердых атомарных фаз азота наименьшим значением G во всем рассмотренном диапазоне дав-

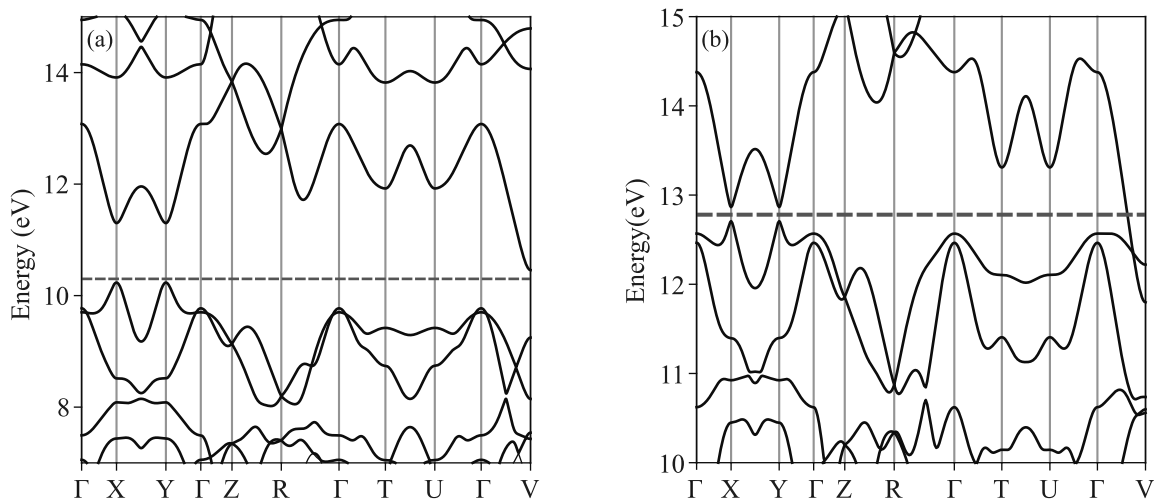


Рис. 5. (Цветной онлайн) Электронная зонная структура для твердой атомарной фазы азота с симметрией кристаллической решетки $P\bar{1}$: (a) – при давлении 20 ГПа; (b) – при давлении 50 ГПа. Положение уровня Ферми изображено красной штриховой линией

лений обладает структура $cg-N$. По величине энергии Гиббса фаза $P\bar{1}$ оказывается близкой к структуре $R\bar{3}$, но обладает меньшими значениями G . Поскольку значение энергии Гиббса для полуметаллической фазы с симметрией кристаллической решетки $P\bar{1}$ больше, чем для Go фазы азота, то фаза $P\bar{1}$ потенциально способна запасать большее количество энергии.

Известно, что функционал PBE может занижать значение ширины запрещенной зоны, поэтому мы использовали гибридный функционал HSE06 при расчетах электронных спектров для структуры $P\bar{1}$. При давлении 20 ГПа азотная фаза $P\bar{1}$ проявляет полупроводниковые свойства, и ширина запрещенной зоны составляет 0.22 эВ (см. рис. 5a). Однако уже при повышении давления до 50 ГПа фаза $P\bar{1}$ переходит в полуметаллическое состояние, за счет пересечения одной из энергетических зон уровня Ферми на пути в k -пространстве между точками с высокой симметрией Γ и V , что видно из изображенной на рис. 5b электронной зонной структуры.

С ростом давления полуметаллическое состояние структуры $P\bar{1}$ сохраняется, и при увеличении давления до 100 ГПа характеризуется также наличием особенностей на зонной структуре, подобных конусам Дирака. Эти особенности наблюдаются в точках высокой симметрии X и Y в k -пространстве (см. рис. 6). Для сравнения, в диапазоне давлений 0–200 ГПа фаза $cg-N$ является изолятором с шириной запрещенной зоны ≥ 4 эВ, причем для азотных фаз $cg-N$, $Pscn$, $R\bar{3}$ характерно увеличение ширины запрещенной зоны с ростом давления до 100 ГПа, а

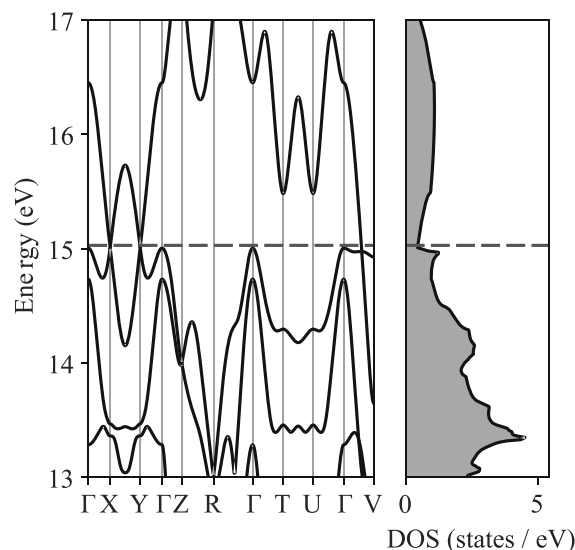


Рис. 6. (Цветной онлайн) Электронная зонная структура и плотность числа электронных состояний для фазы $P\bar{1}$ при давлении 100 ГПа. Положение уровня Ферми изображено красной штриховой линией

при больших давлениях ширина запрещенной зоны начинает постепенно уменьшаться. Однако из-за высокой степени “жесткости” связей азотных структур (данные структуры обладают большими значениями модуля объемного сжатия ~ 200 –280 ГПа) их структурные и электронные свойства медленно меняются с ростом давления. Это позволяет, например, в случае фазы $R\bar{3}$ достигнуть металлического состояния лишь при сверхвысоких давлениях, превышающих 400 ГПа.

Заклучение. При моделировании процесса адиабатического сжатия при нулевой температуре для кристаллической структуры, образованной двумя кластерами $N_6(C_{2v})$ -А, удалось обнаружить новую твердую фазу азота, которая оказывается динамически устойчивой при давлениях выше 20 ГПа. Данная структура имеет симметрию кристаллической решетки $P\bar{1}$ и проявляет уникальные для подобных систем электронные свойства, характеризующие ее как полуметалл при достаточно низких давлениях: начиная с 50 ГПа и выше. При давлениях ~ 100 ГПа реализуется полуметаллическое состояние, образованное двумя особенностями на электронной зонной структуре, характерными для конусов Дирака. Исследования этих особенностей нуждаются в отдельном рассмотрении. За счет “жесткости” ковалентных связей это полуметаллическое состояние сохраняется и при повышении давления до 200 ГПа. При экспериментальном наблюдении данная фаза должна быть непрозрачна для оптического излучения соответствующей длины волны, в отличие от Гош фазы азота. Результаты работы также показывают, что азотные кластеры представляют интерес не только как самостоятельные объекты исследований, но и как прекурсоры для получения твердых атомарных фаз азота.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-72-00017.

1. V. E. Zarko, *Combust. Explos. Shock Waves* **46**, 121 (2010).
2. Н. Н. Krause, *New Energetic Materials in Energetic Materials: Particle Processing and Characterization*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2005), ch. 1, p. 1.
3. F. Cacace, G. de Petris, and A. Troiani, *Science* **295**, 480 (2002).
4. A. Vij, J. G. Pavlovich, W. W. Wilson, V. Vij, and K. O. Christe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **41**, 3051 (2002).
5. K. O. Christe, W. W. Wilson, J. A. Sheehy, and J. A. Boatz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **38**, 2004 (1999).
6. S. Fau, K. J. Wilson, and R. J. Bartlett, *J. Phys. Chem. A* **106**, 4639 (2002).
7. L. J. Wang, P. G. Mezey, and M. Z. Zgierski, *Chem. Phys. Lett.* **391**, 338 (2004).
8. D. L. Strout, *J. Phys. Chem. A* **108**, 2555 (2004).
9. H. Zhou, N.-B. Wong, G. Zhou, and A. Tian, *J. Phys. Chem. A* **110**, 3845 (2006).
10. M. R. Manaa, *Chem. Phys. Lett.* **331**, 262 (2000).
11. H. Zhou, N.-B. Wong, G. Zhou, and A. Tian, *J. Phys. Chem. A* **110**, 7441 (2006).
12. H. Zhou, N.-B. Wong, and A. Tian, *Journal of Molecular Graphics and Modelling* **25**, 578 (2006).
13. A. C. R. Gomes, M. X. Silva, and B. R. L. Galvão, *RSC Adv.* **11**, 21567 (2021).
14. S. Duwal, Y.-J. Ryu, M. Kim, C.-S. Yoo, S. Bang, K. Kim, and N. H. Hur, *J. Chem. Phys.* **148**, 134310 (2018).
15. E. E. Rennie and P. M. Mayer, *J. Chem. Phys.* **120**, 10561 (2004).
16. T. M. Klapötke, *New Nitrogen-Rich High Explosives, in High Energy Density Materials*, Springer, Berlin (2007), p. 85.
17. C. Mailhot, L. H. Yang, and A. K. McMahan, *Phys. Rev. B* **46**, 14419 (1992).
18. M. M. G. Alemany and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **68**, 024110 (2003).
19. W. D. Mattson, D. Sanchez-Portal, S. Chiesa, and R. M. Martin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 125501 (2004).
20. F. Zahariev, A. Hu, J. Hooper, F. Zhang, and T. Woo, *Phys. Rev. B* **72**, 214108 (2005).
21. A. R. Oganov and C. W. Glass, *J. Chem. Phys.* **124**, 244704 (2006).
22. J. Sun, M. Martinez-Canales, D. D. Klug, C. J. Pickard, and R. J. Needs, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 175502 (2013).
23. A. A. Adeleke, M. J. Greschner, A. Majumdar, B. Wan, H. Liu, Z. Li, H. Gou, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **96**, 224104 (2017).
24. S. V. Bondarchuk and B. F. Minaev, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 6698 (2017).
25. K. S. Grishakov and N. N. Degtyarenko, *JETP Lett.* **112**, 630 (2020).
26. K. Grishakov, K. Katin, M. Gimaldinova, and M. Maslov, *Lett. Mater.* **9**, 366 (2019).
27. F. Zahariev, J. Hooper, S. Alavi, F. Zhang, and T. K. Woo, *Phys. Rev. B* **75**, 140101(R) (2007).
28. Y. Ma, A. R. Oganov, Z. Li, Y. Xie, and J. Kotakoski, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 065501 (2009).
29. M. I. Eremets, R. J. Hemley, H. Mao, and E. Gregoryanz, *Nature* **411**, 170 (2001).
30. M. I. Eremets, A. G. Gavriliuk, N. R. Serebryanaya, I. A. Trojan, D. A. Dzivenko, R. Boehler, H. K. Mao, and R. J. Hemley, *J. Chem. Phys.* **121**, 11296 (2004).
31. M. I. Eremets, A. G. Gavriliuk, I. A. Trojan, D. A. Dzivenko, and R. Boehler, *Nature Mater.* **3**, 558 (2004).
32. D. Tomasino, M. Kim, J. Smith, and C.-S. Yoo, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 205502 (2014).
33. D. Laniel, B. Winkler, T. Fedotenko, A. Pakhomova, S. Chariton, V. Milman, V. Prakapenka, L. Dubrovinsky, and N. Dubrovinskaia, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 216001 (2020).

34. D. Laniel, G. Geneste, G. Weck, M. Mezouar, and P. Loubeyre, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 066001 (2019).
35. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. (Collaboration), *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
36. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al. (Collaboration), *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
37. D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **88**, 085117 (2013).
38. https://dalcorso.github.io/thermo_pw for information about the thermo_pw software.
39. Y. Hinuma, G. Pizzi, Y. Kumagai, F. Oba, and I. Tanaka, *Computational Materials Science* **128**, 140 (2017).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

П И С Ь М А
В
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 115

Выпуск 8

25 апреля 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора

Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

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

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2022

α_s in DIS schemeA. V. Kotikov^{+*1)}, V. G. Krivokhizhin*, B. G. Shaikhatdenov*⁺*II Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg, 22761 Hamburg, Germany***Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia*

Submitted 23 February 2022

Resubmitted 13 March 2022

Accepted 14 March 2022

DOI: 10.31857/S1234567822080018, EDN: ftqid

Deep inelastic scattering data on F_2 structure function accumulated by various collaborations in fixed-target experiments are analyzed in the nonsinglet approximation and within \overline{MS} and DIS schemes. The study of high statistics deep inelastic scattering data provided by BCDMS, SLAC and NMC collaborations, is carried out by applying a combined analysis. The application of the DIS scheme leads to the resummation of contributions that are important in the region of large x values. It is found that using the DIS scheme does not significantly change the strong coupling constant itself but does strongly change the values of the twist-four corrections.

We work within the framework of the variable-flavor-number scheme (VFNS) (see [1]). Nevertheless, to make it more clear the effect of changing the sign for twist-four corrections, the fixed-flavor-number scheme (FFNS) with $n_f = 4$ is also used.

As is seen from Table 1 the central values of $\alpha_s(M_Z^2)$ are fairly the same given total experimental and theoretical errors (see [1–4]):

$$\pm 0.0022 \quad (\text{total exp. error}), \quad \left\{ \begin{array}{l} +0.0028 \\ -0.0016 \end{array} \right. \quad (\text{theor. error}). \quad (1)$$

Table 1. Parameter values of the twist-four term in different cases obtained in the analysis of data (314 points: $Q^2 \geq 2 \text{ GeV}^2$) carried out within VFNS (FFNS)

x	NLO	NLO	NNLO	NNLO
	\overline{MS} scheme $\chi^2 = 246(259)$ $\alpha_s(M_Z^2) = 0.1195$ (0.1192)	DIS scheme $\chi^2 = 238(251)$ $\alpha_s(M_Z^2) = 0.1177$ (0.1179)	\overline{MS} scheme $\chi^2 = 241(254)$ $\alpha_s(M_Z^2) = 0.1177$ (0.1170)	DIS scheme $\chi^2 = 242(249)$ $\alpha_s(M_Z^2) = 0.1178$ (0.1171)
0.275	-0.25 ± 0.02 (-0.26 ± 0.03)	-0.18 ± 0.01 (-0.17 ± 0.02)	-0.19 ± 0.02 (-0.20 ± 0.02)	-0.14 ± 0.01 (-0.17 ± 0.01)
0.35	-0.24 ± 0.02 (-0.25 ± 0.02)	-0.11 ± 0.01 (-0.13 ± 0.01)	-0.19 ± 0.03 (-0.19 ± 0.02)	-0.13 ± 0.02 (-0.15 ± 0.01)
0.45	-0.19 ± 0.02 (-0.19 ± 0.02)	-0.04 ± 0.04 (-0.09 ± 0.01)	-0.17 ± 0.03 (-0.16 ± 0.01)	-0.11 ± 0.09 (-0.10 ± 0.02)
0.55	-0.12 ± 0.03 (-0.10 ± 0.03)	-0.11 ± 0.01 (-0.09 ± 0.04)	-0.17 ± 0.05 (-0.14 ± 0.03)	-0.12 ± 0.03 (-0.08 ± 0.04)
0.65	0.05 ± 0.08 (0.12 ± 0.08)	-0.17 ± 0.04 (-0.09 ± 0.05)	-0.14 ± 0.14 (-0.05 ± 0.06)	-0.22 ± 0.05 (-0.10 ± 0.05)
0.75	0.34 ± 0.12 (0.48 ± 0.12)	-0.57 ± 0.08 (-0.44 ± 0.18)	-0.11 ± 0.19 (0.06 ± 0.10)	-0.59 ± 0.08 (-0.32 ± 0.12)

From Table 1, it can also be seen that upon resumming at large x values (i.e. in the DIS scheme [5]), the twist-four corrections become large and negative in this x region. Moreover, it appears that they rise as $1/(1-x)$ at large x but this observation needs additional investigations.

Such a behavior is completely contrary to the analyses [1–4, 6, 7] performed in \overline{MS} scheme, where twist-four corrections are mostly positive at large x and rise as $1/(1-x)$. Note that this rise is usually less pronounced in higher orders (see [1–3, 6]) and sometimes is even absent at NNLO level (see Table 1).

¹⁾e-mail: kotikov@theor.jinr.ru

This is an excerpt of the article “ α_s in DIS scheme”.
Full text of the paper is published in JETP Letters
journal. DOI: 10.1134/S0021364022100411

1. B. G. Shaikhatdenov, A. V. Kotikov, V. G. Krivokhizhin, and G. Parente, Phys. Rev. D **81**, 034008 (2010).
2. A. V. Kotikov, V. G. Krivokhizhin, and B. G. Shaikhatdenov, JETP Lett. **101**, 141 (2015).
3. A. V. Kotikov, V. G. Krivokhizhin, and B. G. Shaikhatdenov, J. Phys. G **42**, 095004 (2015).
4. A. V. Kotikov, V. G. Krivokhizhin, and B. G. Shaikhatdenov, Phys. Atom. Nucl. **81**, 244 (2018).
5. G. Altarelli, R. K. Ellis, and G. Martinelli, Nucl. Phys. B **143**, 521 (1978).
6. J. Blumlein and H. Bottcher, Phys. Lett. B **662**, 336 (2008).
7. S. I. Alekhin, Phys. Rev. D **63**, 094022 (2001).

Тормозное излучение при нерезонансном неупругом рассеянии фотона атомным ионом

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский¹⁾

Ростовский государственный университет путей сообщения, 344038 Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 26 февраля 2022 г.

После переработки 20 марта 2022 г.

Принята к публикации 21 марта 2022 г.

Теоретически предсказаны аналитическая структура, абсолютные значения и угловая анизотропия дважды дифференциального сечения тормозного излучения при нерезонансном неупругом рассеянии рентгеновского фотона многозарядным гелиоподобным атомным ионом.

DOI: 10.31857/S1234567822080110, EDN: fmaddl

1. Введение. В рамках квантовой теории, начиная с работ Зоммерфельда, Бете и Гайтлера [1, 2] и до настоящего времени, продолжают исследования (см., например, монографии [3, 4] и обзоры [5, 6]) фундаментального в микромире эффекта тормозного излучения при рассеянии свободного электрона в электрическом поле атома (атомного ядра). Наряду с этим эффектом, фундаментальный интерес (например, для физики лабораторной [7] и астрофизической [8] плазмы) представляют эффекты тормозного излучения, инициированные неупругим рассеянием фотона атомом (атомным ионом). В этом случае амплитуды вероятности тормозного излучения [например, излучение фотона электроном сплошного спектра (рис. 1b) [4–6] и поляризация атома (атомного иона) электроном сплошного спектра с последующим излучением фотона (рис. 1d) [3]] возникают как подструктуры полных амплитуд вероятности рассеяния. Первое такое исследование проведено в работах авторов [9, 10] для процесса однократного резонансного неупругого рассеяния [11–13] фотона многоэлектронным атомом. В данном Письме мы проводим первое теоретическое исследование эффекта тормозного излучения, инициированного однократным нерезонансным неупругим рассеянием [14–16] фотона многозарядным атомным ионом. Такие исследования необходимы, в частности, для интерпретации фоновых (континуальных) структур спектров рентгеновской эмиссии многозарядных атомных ионов горячей плазмы. В качестве объекта исследования взят гелиоподобный ион атома кремния (Si^{12+} ; заряд ядра иона $Z = 14$; конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2[{}^1S_0]$). Выбор обусловлен сфери-

ческой симметрией основного состояния иона Si^{12+} и его предполагаемой доступностью в газовой фазе для проведения высокоточных экспериментов. В частности, таким экспериментом может быть комбинирование методов генерации многозарядных ионов и их захвата в “ловушке” с последующим рассеянием излучения рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL; см., например, [17] и обзор [18]).

2. Теория. Рассмотрим процессы нерезонансного неупругого рассеяния фотона электронами гелиоподобного атомного иона:

$$\omega + [0] \rightarrow 1s\epsilon l({}^1L_J) + \omega_C, \quad (1)$$

$$\omega + [0] \rightarrow 1sxp({}^1P_1) \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} K_s \\ K_d \end{array} \right\} + \omega_C, \quad (2)$$

$$K_s = 1s\epsilon s({}^1S_0), \quad K_d = 1s\epsilon d({}^1D_2). \quad (3)$$

В (1), (2) и далее принята атомная система единиц ($e = \hbar = m_e = 1$), $l \geq 0$, $J = L$, ω (ω_C) – энергия падающего (рассеянного) фотона, $x(\epsilon)$ – энергия электрона сплошного спектра промежуточного (конечного) состояния рассеяния, $x \in [0; \infty)$, $\epsilon = \omega - I_{1s} - \omega_C$ и I_{1s} – энергия порога ионизации $1s^2$ -оболочки иона. Рассеянию по каналу (1) соответствует нерезонансное комптоновское рассеяние (рис. 1a) по оператору контактного взаимодействия:

$$\hat{Q} = \frac{1}{2c^2} \sum_{n=1}^N (\hat{A}_n \cdot \hat{A}_n). \quad (4)$$

Рассеянию по каналам (2) соответствует инициированное тормозное излучение (рис. 1b) по оператору радиационного перехода:

$$\hat{R} = -\frac{1}{c} \sum_{n=1}^N (\hat{p}_n \cdot \hat{A}_n), \quad (5)$$

¹⁾e-mail: amnrnd@mail.ru

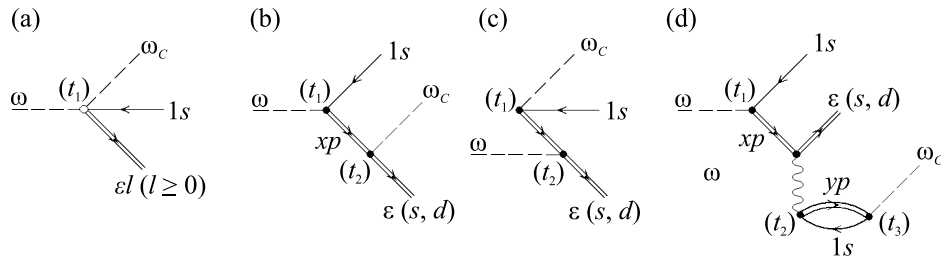


Рис. 1. Амплитуды вероятности нерезонансного неупругого рассеяния фотона гелиоподобным атомным ионом (Si^{12+}) в представлении диаграмм Фейнмана: (a) – нерезонансное комптоновское рассеяние; (b) – тормозное излучение; (c) – рассеяние “по-времени-назад”; (d) – поляризационное тормозное излучение. Стрелка вправо – электрон, стрелка влево – вакансия. Двойная линия – состояние получено в Хартри-Фоковском поле $1s$ -вакансии. Волнистая линия – электростатическое взаимодействие. Черный (светлый) кружок – вершина взаимодействия по оператору радиационного (контактного) перехода. ω (ω_c) – падающий (рассеянный) фотон. Направление времени – слева направо ($t_1 < t_2 < t_3$)

где \hat{A}_n – оператор электромагнитного поля в представлении вторичного квантования, \hat{p}_n – оператор импульса n -электрона иона, c – скорость света в вакууме и N – число электронов в ионе. В данном Письме при построении амплитуд вероятности рассеяния принято приближение Тамма–Данкова [19] с ограничением на число “частиц” (фотонов, электронов, вакансий) в рассеяниях диаграмм Фейнмана максимальным значением $N_0 = 2$. Например, амплитуда вероятности поляризационного тормозного излучения (рис. 1d) с $N_0 = 5$ отброшена. Амплитуда вероятности спонтанного рождения “частиц” до момента поглощения падающего фотона (рис. 1c с $N_0 = 4$) в приближении Тамма–Данкова игнорируется. Заметим, что проблема аналитического обоснования приближения Тамма–Данкова и границ его применимости остается открытой (см., например, [20] и ссылки там). Однако в нашем случае учет диаграмм Фейнмана лишь с $N_0 \leq 2$ в приближении Тамма–Данкова соответствует методу квантовомеханической теории возмущений. Именно отбрасывание, например, диаграмм Фейнмана на рис. 1d формально математически обусловлено более высоким порядком малости этой диаграммы по сравнению с диаграммой на рис. 1b. Конечно, можно предположить, что учет резонансного рождения виртуальных электрона и вакансии в момент времени $t_2 < t_3$ (рис. 1d) даст описание физически значимого эффекта резонансного поляризационного тормозного излучения.

Установим аналитические структуры дважды дифференциальных сечений рассеяния по каналам (1) и (2), используя методы алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов, теории неприводимых тензорных операторов, теории неортогональных орбиталей (см., например, [20] и ссылки там) и приближение нулевой естественной ширины распада $1s$ -вакансии. Для сечения нерезонансного

комптоновского рассеяния (CS; рис. 1a, 2b) вне рамок дипольного приближения для \hat{Q} -оператора получаем [15]:

$$\frac{d^2 \sigma_{CS}}{d\omega_c d\Omega_C} \equiv \sigma_{CS}^{(2)} = r_0^2 \frac{\omega_c}{\omega} \eta \mu C, \quad (6)$$

$$C = \sum_{l=0}^{\infty} (4l+2) \langle 1s_0 | \hat{j}_l(qr) | \varepsilon l_+ \rangle^2, \quad (7)$$

где Ω_C – пространственный угол вылета рассеянного фотона, r_0 – классический радиус электрона, $\eta = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle^2 / (27.21)$, \hat{j}_l – сферическая функция Бесселя первого рода l -порядка, $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|$ и \mathbf{k} (\mathbf{k}_c) – волновой вектор падающего (рассеянного) фотона. Индексы “0” и “+” соответствуют радиальным частям волновых функций электронов, полученных решением уравнений Хартри–Фока для конфигураций начального ($[0]$) и конечного ($[1s_+]$) состояний иона. Как показал расчет, для иона Si^{12+} сумма в (7) практически ограничена лишь слагаемым с $l = 1$, тогда как вклад состояний с $l \neq 1$ исчезающе мал. Как результат, квантовая интерференция каналов (1) и (2) отсутствует. Аксиально-симметричный (относительно вектора \mathbf{k}) параметр μ в (6) определяет (наряду с параметром q в \hat{j}_l -функции Бесселя) эффект угловой анизотропии нерезонансного комптоновского рассеяния. Он конкретизирован в соответствии с тремя схемами предполагаемого эксперимента. Первая схема – векторы поляризации фотонов перпендикулярны плоскости рассеяния ($\mathbf{e}, \mathbf{e}_c \perp P$). Вторая схема – векторы поляризации фотонов параллельны плоскости рассеяния ($\mathbf{e}, \mathbf{e}_c \parallel P$). Третья схема – схема с неполяризованными (NP) фотонами. Здесь P – плоскость рассеяния, проходящая через векторы \mathbf{k} и \mathbf{k}_c . Как результат, имеем:

$$\mu^\perp = 1, \quad (8)$$

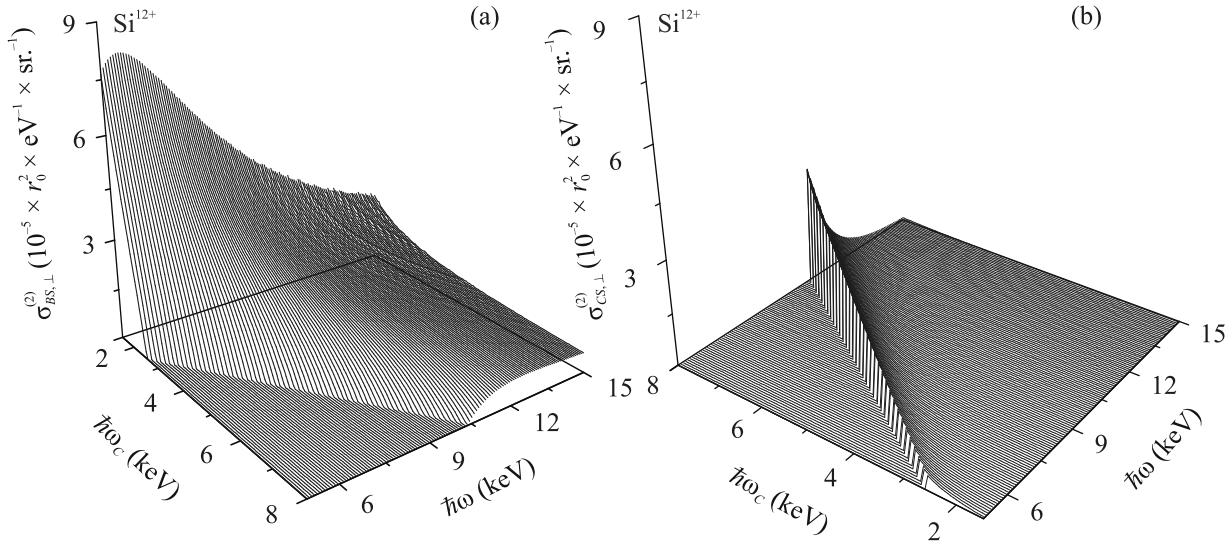


Рис. 2. (Цветной онлайн) Дважды дифференциальное сечение нерезонансного неупругого рассеяния фотона ионом Si^{12+} для \perp -схемы эксперимента: (a) – сечение тормозного излучения ($\rho^\perp = 1$); (b) – сечение нерезонансного комптоновского рассеяния ($\mu^\perp = 1$). Угол рассеяния $\theta = 90^\circ$. $\hbar\omega$ ($\hbar\omega_C$) – энергия падающего (рассеянного) фотона

$$\mu^\parallel = \cos^2 \theta, \quad (9)$$

$$\mu_{NP} = \frac{1}{2}(\mu^\perp + \mu^\parallel), \quad (10)$$

где θ – угол рассеяния (угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}_C). Для сечения тормозного излучения (BS; рис. 1b, рис. 2a) в дипольном приближении для \hat{R} -оператора получаем:

$$\sigma_{BS}^{(2)} = r_0^2 \frac{\omega_C}{\omega} \eta \rho B, \quad (11)$$

$$B = \frac{4}{5} \varepsilon \left(1 - \frac{\omega}{\omega_C}\right)^2 \langle 1s_0 | \hat{r} | \varepsilon p_+ \rangle^2, \quad (12)$$

где параметр ρ определяет эффект угловой анизотропии тормозного излучения и имеет вид:

$$\rho^\perp = 1, \quad (13)$$

$$\rho^\parallel = \frac{1}{3}(1 + 2 \cos^2 \theta), \quad (14)$$

$$\rho_{NP} = \frac{1}{2}(\rho^\perp + \rho^\parallel). \quad (15)$$

Сингулярная одноэлектронная амплитуда вероятности тормозного излучения получена в форме скорости в приближении плоских волн для радиальных частей волновых функций электронов сплошного спектра: $|x\rangle \cong \left(\frac{2}{\pi^2 x}\right)^{1/4} \sin(r\sqrt{2x})$ и, как результат,

$$(x - \varepsilon) \langle x p_+ | \hat{r} | \varepsilon(s, d)_+ \rangle \cong i\sqrt{2x} \delta(x - \varepsilon), \quad (16)$$

где δ – дельта-функция Дирака. Аналитическая структура сечения (11) качественно воспроизводит

следующие известные результаты. Первый. В приближении нулевой естественной ширины распада $1s$ -вакансии для нулевой энергии рассеянного фотона возникает “инфракрасная расходимость” сечения тормозного излучения [11, 12]:

$$\lim_{\omega_C \rightarrow 0} \sigma_{BS}^{(2)} = \infty. \quad (17)$$

Второй. При нулевой энергии электрона сплошного спектра конечного состояния рассеяния имеем [рис. 2a; прямая $\omega_C = \omega - I_{1s}$ на плоскости $(\omega; \omega_C)$]:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sigma_{BS}^{(2)} = 0. \quad (18)$$

Равенство (18) соответствует результату борновского приближения для нерелятивистского дифференциального сечения тормозного излучения электроном в кулоновском поле ядра [21, 22]:

$$\frac{d\sigma}{d\omega_C} \sim \ln \left(\frac{v_1 + v_2}{v_2 - v_1} \right) \rightarrow 0 \quad (19)$$

при $v_2 \rightarrow 0$, где $v_1(v_2)$ – скорость налетающего (уходящего) электрона. Как и следовало ожидать, наряду с (17) и (18), сечение (11) удовлетворяет асимптотическому условию: при $\omega \rightarrow \infty$ одноэлектронная амплитуда вероятности перехода $\langle 1s_0 | r | \varepsilon p_+ \rangle \sim \omega^{-7/4}$ и, как результат,

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \sigma_{BS}^{(2)} = 0. \quad (20)$$

3. Результаты и обсуждение. Результаты расчета представлены на рис. 2, 3. Для энергии порога

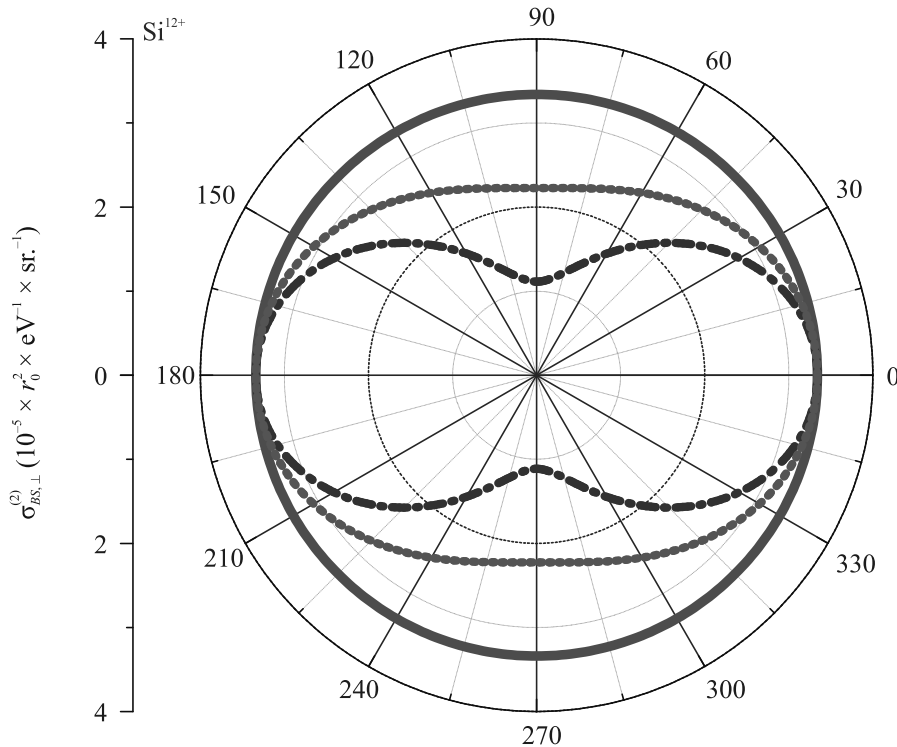


Рис. 3. (Цветной онлайн) Индикатриса тормозного излучения для иона Si^{12+} с полярным радиусом $\sigma_{BS}^{(2)}$ и полярным углом θ при фиксированных значениях энергий падающего ($\hbar\omega = 6.70$ кэВ) и рассеянного ($\hbar\omega_C = 2.88$ кэВ) фотонов. Схема эксперимента: \perp (сплошная кривая), \parallel (штрих-пунктирная кривая), неполяризованные фотоны (пунктирная кривая)

ионизации $1s^2$ -оболочки иона Si^{12+} принято значение $I_{1s} = 2437.650$ эВ [23]. Для энергий падающего фотона рассмотрен диапазон $\omega \in (4.5; 15.0)$ кэВ. В этом диапазоне при расчете сечения тормозного излучения выполнен критерий применимости дипольного приближения для \hat{R} -оператора: $\lambda_\omega / \langle r_{1s} \rangle \gg \gg 1$ при, например, длине волны падающего фотона $\lambda_\omega = 1.852 \text{ \AA}$ ($\omega = 6.70$ кэВ; энергия $K\alpha$ -линии эмиссии Fe^{24+} [24]) и среднем радиусе $1s$ -оболочки иона Si^{12+} $\langle r_{1s} \rangle = 0.058 \text{ \AA}$.

Результаты на рис. 2а демонстрируют тенденцию сечения тормозного излучения к “инфракрасной расходимости” (17), выполнению асимптотического условия (20) и его лидирующую роль в ближней запороговой области ($I_{1s} < \omega < 15$ кэВ) полного сечения рассеяния. При $\omega \geq 15$ кэВ лидирующим становится сечение нерезонансного комптоновского рассеяния (рис. 2б). Заметим, однако, что в \parallel -схеме эксперимента для угла рассеяния $\theta = 90^\circ$ сечение нерезонансного комптоновского рассеяния обращается в нуль ($\mu^\parallel = 0 \Rightarrow \sigma_{CS}^{(2)} = 0$) и полное сечение рассеяния определено лишь эффектом тормозного излучения ($\rho^\parallel = 1/3$). Результаты на рис. 3 демонстрируют эффект угловой анизотропии (преимущественное рас-

сеяние в направлении углов $\theta = 0^\circ, 180^\circ$) тормозного излучения для \parallel -схемы эксперимента и эксперимента с неполяризованными фотонами. Этот результат качественно воспроизводит таковой работы [10] для случая резонансного неупругого рассеяния фотона многоэлектронным атомом. Отметим, что K_s - и K_d -состояния рассеяния в (3) дают сравнимые вклады в полное сечение рассеяния. При этом, игнорирование K_d -состояния приводит к обращению в нуль сечения тормозного излучения при угле рассеяния $\theta = 90^\circ$ для \parallel -схемы эксперимента.

4. Заключение. Теоретически исследовано дважды дифференциальное сечение нерезонансного неупругого рассеяния рентгеновского фотона многозарядным гелиоподобным атомным ионом. Установлены (а) лидирующая роль эффекта тормозного излучения в ближней запороговой области рассеяния и (б) ярко выраженный эффект угловой анизотропии тормозного излучения в соответствующих схемах предполагаемого эксперимента. Полученные результаты носят предсказательный характер. Их возможное обобщение, например, на многозарядные ионы другого типа и многоэлектронные атомы, переход к следующим порядкам

приближения Тамма–Данкова, а также учет ненулевой ширины спектрального разрешения XFEL-эксперимента ($\Gamma_{\text{beam}} \cong 0.15\text{--}0.50\text{ эВ}$ [25]) являются предметом будущих исследований.

1. A. Sommerfeld, *Ann. Phys.* **11**, 257 (1931).
2. H. A. Bethe and W. Heitler, *Proc. R. Soc. (London) Ser. A* **146**, 83 (1934).
3. М. Я. Амуся, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, М. (1990).
4. E. Haug and W. Nakel, *The Elementary Process of Bremsstrahlung*, World Scientific, Singapore (2004).
5. П. А. Крачков, Р. Н. Ли, А. И. Мильштейн, *УФН* **186**, 689 (2016).
6. D. H. Jakubassa-Amundsen, arXiv: 2103. 06034 [physics. atom-ph].
7. P. Beiersdorfer, *J. Phys. B* **48**, 144017 (2015).
8. S. Zhekov, M. Gagné, and S. L. Skinner, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **510**, 1278 (2022).
9. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, И. Д. Петров, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 61 (2020).
10. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, И. Д. Петров, Р. В. Конеев, *ЖЭТФ* **158**, 1032 (2020).
11. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum, N.Y. (1985), ch. 10, p. 419.
12. P. P. Kane, *Phys. Rep.* **218**, 67 (1992).
13. J. Szlachetko, J.-Cl. Dousse, M. Berset, K. Fennane, M. Szlachetko, J. Hoszowska, R. Barrett, M. Pajek, and A. Kubala-Kukus, *Phys. Rev. A* **75**, 022512 (2007).
14. L. A. LaJohn, *Phys. Rev. A* **81**, 043404 (2010).
15. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, *ЖЭТФ* **142**, 453 (2012).
16. Ch.-K. Qiao, J.-W. Wei, and L. Chen, arXiv: 2103. 04634 [cond-mat. other].
17. S. W. Epp, J. R. C. López-Urrutia, G. Brenner, V. Mackel, P. H. Mokler, R. Treusch, M. Kuhlmann, M. V. Yurkov, J. Feldhaus, J. R. Schneider, M. Welhofer, M. Martins, W. Wurt, and J. Ulrich, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 183001 (2007).
18. P. Indelicato, *J. Phys. B* **52**, 232001 (2019).
19. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, N.Y. (1971).
20. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, *Phys. Rev. A* **98**, 063424 (2018).
21. H. W. Koch and J. W. Motz, *Rev. Mod. Phys.* **31**, 920 (1959).
22. V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, Butterworth-Heinemann, Oxford (2008).
23. W. C. Martin and R. Zalubas, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12**, 323 (1983).
24. A. V. Malyshev, Y. S. Kozhedub, D. A. Glazov, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. A* **99**, 010501 (R) (2019).
25. V. M. Kaganer, I. Petrov, and L. Samoylova, *Acta Crystallogr. A* **77**, 1 (2021).

Монохроматическое оптическое излучение Вавилова–Черенкова умеренно релятивистских ионов в радиаторах с частотной дисперсией

А. П. Потылицын^{a,1)}, Б. А. Алексеев^a, А. В. Вуколов^a, М. В. Шевелев^a, А. А. Балдин^{b,c}, В. В. Блеко^b,
П. В. Каратаев^d, А. С. Кубанкин^{e,f}

^aТомский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

^bОбъединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

^cИнститут перспективных исследований “ОМЕГА”, 141980 Дубна, Россия

^dJohn Adams Institute at Royal Holloway, University of London, Department of Physics, Egham, Surrey, TW20 0EX, United Kingdom

^eБелгородский государственный национальный исследовательский университет, 308015 Белгород, Россия

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

Поступила в редакцию 17 февраля 2022 г.

После переработки 15 марта 2022 г.

Принята к публикации 15 марта 2022 г.

В работе рассматривается оптическое излучение Вавилова–Черенкова (ИВЧ) умеренно релятивистских ионов в пластине CVD-алмаза, обладающего частотной дисперсией. Показано, что ИВЧ, выводимое в вакуум из наклонной пластины алмаза под фиксированным углом наблюдения, становится монохроматическим. Длина волны спектральной линии зависит от энергии иона и от геометрии эксперимента (угла наблюдения и угла наклона пластины). Предлагается эксперимент по исследованию эффекта монохроматизации ИВЧ на пучке нуклотрона ОИЯИ с целью его дальнейшего использования в диагностике ионных пучков. Метод может быть внедрен для мониторинга энергии комплекса NICA.

DOI: 10.31857/S123456782208002X, EDN: fmclpq

Оптическое излучение Вавилова–Черенкова (ИВЧ) [1] широко используется в самых различных областях – для создания детекторов элементарных частиц [2–5], в диагностике пучков современных ускорителей [6–8], в инфраструктуре установок термоядерного синтеза [9], при измерениях дозовых полей установок лучевой терапии [10] и т.д.

Отметим, что практически во всех цитированных работах использовалась такая характеристика ИВЧ как направленность, определяемая известным соотношением:

$$\cos \theta_{\text{ch}} = 1/n(\lambda)\beta, \quad (1)$$

здесь θ_{ch} – угол испускания фотонов ИВЧ в среде, через которую проходит заряженная частица со скоростью $v = \beta c$ (c – скорость света), $n(\lambda)$ – коэффициент преломления среды на длине волны λ .

Ясно, что соотношение (1) определяет также “поперечный” характер эффекта ИВЧ, возникающего

при условии превышения скорости частицы фазовой скорости света в среде:

$$\beta > 1/n(\lambda). \quad (2)$$

Спектральный состав ИВЧ в среде определяется условием

$$n(\lambda) > 1, \quad (3)$$

т.е. спектр ИВЧ практически для всех диэлектриков является непрерывным в диапазоне от ультрафиолета до инфракрасного.

Укажем, что формула (1), строго говоря, справедлива для бесконечной толщины радиатора. В реальном случае, излучение, формирующееся на конечном участке траектории L распространяется в виде конуса фотонов ИВЧ, обладающего конечной “шириной” $\Delta\theta_{\text{ch}}$ [11]:

$$\Delta\theta_{\text{ch}} \sim \frac{2\lambda}{\pi L \sin \theta_{\text{ch}}}. \quad (4)$$

Для традиционной геометрии генерации ИВЧ умеренно релятивистским зарядом в диэлектрической пластине (см. рис. 1а), конус излучения выво-

¹⁾e-mail:potylitsyn@tpu.ru

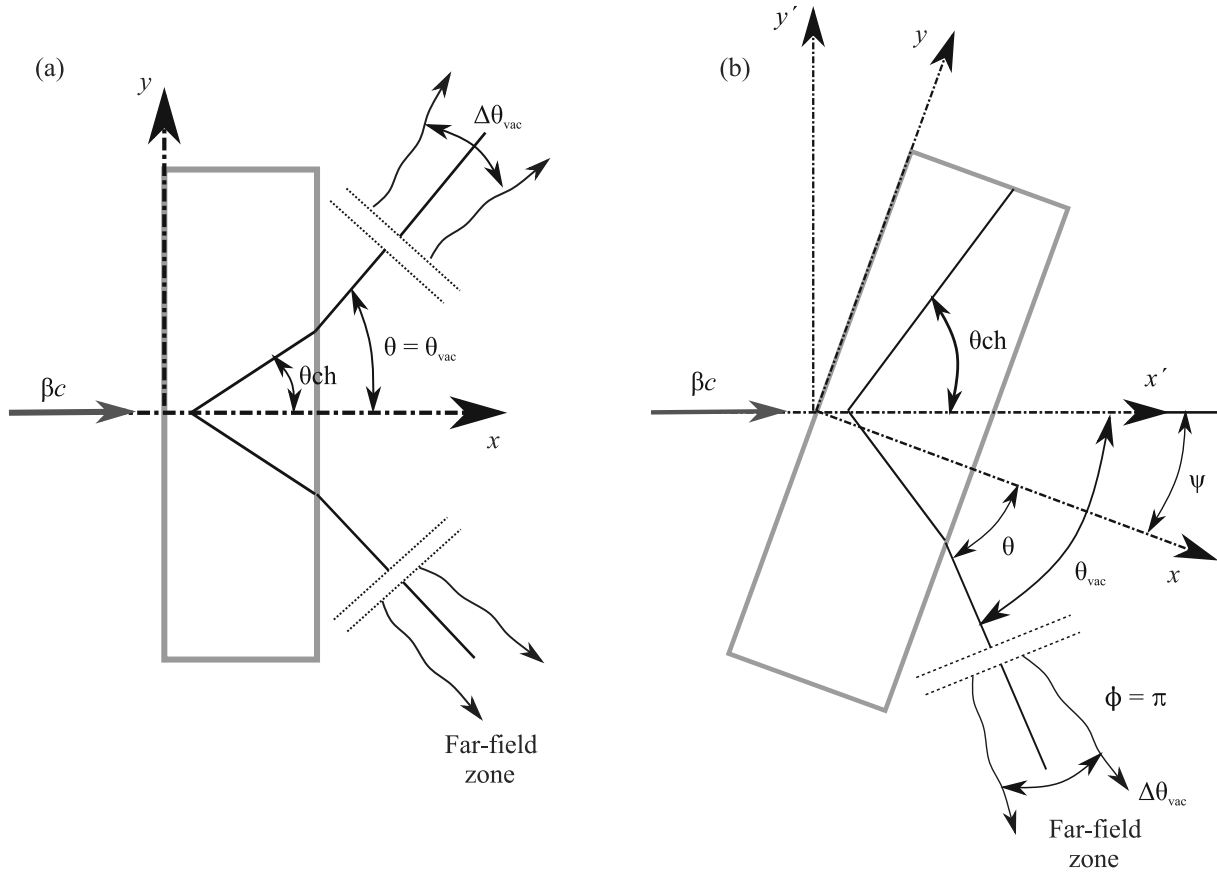


Рис. 1. (Цветной онлайн) Геометрия генерации ИВЧ в диэлектрической пластине: (а) – перпендикулярный пролет заряда; (б) – пролет через наклонную пластину

дится в вакуум, если скорость заряда удовлетворяет условию:

$$\beta_{thr} = 1/n(\lambda) < \beta < \beta_{max} = 1/\sqrt{n^2(\lambda) - 1}. \quad (5)$$

В дальней зоне, т.е. на таком расстоянии от радиатора, когда можно пренебречь длиной траектории, на которой генерируется излучение, и рассматривать излучение точечного источника, неравенство (5) соответствует углу излучения в вакууме θ_{vac} , который отсчитывается от импульса электрона (см. рис. 1а):

$$0 < \theta_{vac} < \pi/2. \quad (6)$$

Для вывода излучения заряда с $\beta > \beta_{max}$ из радиатора в вакуум необходимо “выходную” поверхность радиатора выполнять как коническую [12]. Альтернативная более простая возможность – использование наклонной диэлектрической пластины в качестве радиатора [13] (см. рис. 1б). В этом случае в вакуум выводится только часть конуса ИВЧ. Если среда обладает частотной дисперсией, то из-за преломления на выходной поверхности радиатора под фиксированным углом $\theta = const$ (угол θ отсчитывается

от нормали, см. рис. 1б) в плоскости, проходящей через импульс электрона и нормаль к выходной поверхности (компланарная геометрия), будет испускаться монохроматическое излучение с длиной волны λ , которая определяется соотношением:

$$\theta = \arcsin \left\{ n(\lambda) \sin \left[\arccos \left(\frac{1}{n(\lambda)\beta} \right) - \psi \right] \right\}. \quad (7)$$

Здесь ψ – угол наклона пластины относительно импульса заряженной частицы (см. рис. 1б).

В недавнем эксперименте [14], выполненном на пучке электронов с энергией 855 МэВ, наблюдался этот эффект монохроматизации ИВЧ. В качестве радиатора использовалась кварцевая пластинка толщиной 200 мкм.

Число фотонов ИВЧ в дальней зоне, испускаемое электроном из такого наклонного радиатора толщиной L под углом θ_{vac} , в работе [14] рассчитывалось по модели поляризационных токов [15, 16].

$$\frac{d^2N}{d\lambda d\Omega} = 4\alpha \frac{\cos^2 \theta}{((1 - \beta_y n_y)^2 - \beta_z^2 \cos^2 \theta)^2} \left| \frac{\epsilon - 1}{\epsilon} \right|^2 \times$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{L^2}{\lambda^3} \operatorname{sinc}^2 \left(\pi \frac{L}{\lambda} \frac{1 - \beta_z Z - n_y \beta_y}{\beta_z} \right) \times \\ & \times \left(\beta_y^2 \beta_z^2 \sin^2 \varphi \times (|Z|^2 + \sin^2 \theta) \left| \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\cos \theta + Z} \right|^2 + \right. \\ & \quad \left. + \left| \frac{\varepsilon}{\varepsilon \cos \theta + Z} \right|^2 \right) \times \\ & \times \left| (\beta_z^2 + n_y \beta_y + \beta_z Z - 1) \sin \theta - \beta_y \beta_z \cos \varphi Z \right|^2. \quad (8) \end{aligned}$$

В выражении (8) $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, L – толщина радиатора, θ – полярный угол вылета фотона ИВЧ в вакууме, $\operatorname{sinc}(x) = \sin x/x$, $Z = \sqrt{\varepsilon(\lambda) - \sin^2 \theta}$, λ – длина волны ИВЧ.

Полученное выражение, будучи более простым, в целом, хорошо согласуется с формулой Пафомова (см. формулу (1) в статье [17]).

Компоненты скорости заряда (в единицах скорости света) определены в системе координат $\{x, y, z\}$, связанной с радиатором (см. рис. 1b):

$$\beta_y = \beta \sin \psi, \quad \beta_z = \beta \cos \psi.$$

В этой же системе координат определены направляющие косинусы волнового вектора:

$$n_x = \sin \theta \sin \varphi; \quad n_y = \sin \theta \cos \varphi; \quad n_z = \cos \theta.$$

Условие (7) непосредственно вытекает из равенства нулю аргумента функции $\operatorname{sinc}(x)$ в (8), что соответствует максимуму этой функции:

$$1 - \beta_z Z - n_y \beta_y = 0. \quad (9)$$

В общем случае (для некопланарной геометрии процесса) соотношение (9) определяет двумерную область углов $\{\theta, \varphi\}$, которая описывает часть конуса ИВЧ, выходящего в вакуум.

$$\begin{aligned} 1 - \beta_z Z - n_y \beta_y &= 1 - \beta \cos \psi \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta} - \\ &- \sin \theta \cos \varphi \beta \sin \psi = 0. \quad (10) \end{aligned}$$

Из уравнения (10) следует решение для $\sin \theta$:

$$\begin{aligned} \sin \theta &= \left(\sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \times \right. \\ & \times \left. \sqrt{\varepsilon \beta^2 (1 - \sin^2 \psi \sin^2 \varphi) - 1} \right) / \beta (1 - \sin^2 \psi \sin^2 \varphi). \quad (11) \end{aligned}$$

Для некопланарной геометрии $\varphi = \pi$ (см. рис. 1) из (11) после несложных преобразований получаем соотношение (7), которое есть следствие закона Спеллиуса.

Область азимутальных углов, которая ограничивает часть конуса ИВЧ в вакууме

$$\pi + \Delta\varphi \leq \varphi \leq \pi - \Delta\varphi \quad (12)$$

определяется из (11) при выполнении граничного условия

$$\sin \theta = 1.$$

В приближении $\Delta\varphi < 1$ можно получить следующую оценку:

$$(\Delta\varphi)^2 = 4\beta[1 - n(\lambda) \sin(\theta_{\text{ch}} - \psi)] / \sin \psi \sin 2(\theta_{\text{ch}} - \psi). \quad (13)$$

Так, например, для энергии ионов 165 МэВ/нуклон и спектральной линии ИВЧ с $\lambda = 565$ нм (см. ниже) точное решение уравнения (10) дает значение $\Delta\varphi = 0.764 \approx 43.8^\circ$, тогда как оценка (13) дает несколько завышенное значение $\Delta\varphi \approx 1.11 \approx 63.6^\circ$.

Отметим, что с увеличением скорости ионов интервал углов $\Delta\varphi$ сужается и оценка (13) будет давать не слишком большую погрешность.

Более удобной является система $\{x', y', z'\}$, в которой ось z' направлена вдоль скорости заряда (см. рис. 1b). Угол θ_{vac} определен именно в этой системе. Переходя от углов θ, φ к вакуумным углам в штрихованной системе поворотом на угол ψ , получим:

$$\cos \theta_{\text{vac}} = \cos \theta \cos \psi + \sin \theta \cos \varphi \sin \psi, \quad (14)$$

$$\tan \varphi_{\text{vac}} = \frac{\sin \theta \sin \varphi}{\sin \theta \cos \psi - \sin \theta \cos \varphi \sin \psi}. \quad (15)$$

Для некопланарной геометрии ($\varphi = \pi$) из (14), (15) получаем:

$$\theta_{\text{vac}} = \psi + \theta, \quad \varphi_{\text{vac}} = 0.$$

Из-за частотной дисперсии ИВЧ с различной длиной волны будет излучаться в вакуум под разными углами θ_{vac} . Если использовать апертуру детектора $\Delta\theta$ значительно меньше, чем “естественная” угловая ширина конуса ИВЧ, $\Delta\theta_{\text{ch}}$ испускаемого зарядом с конечной траектории L (2) $\Delta\theta \ll \Delta\theta_{\text{ch}}$, то следует ожидать, что спектр излучения будет квазимонохроматичным. В эксперименте [14] это предположение подтвердилось.

При использовании радиатора из материала с высоким коэффициентом преломления $n(\lambda)$, например, алмаза с $n > 2.4$, ИВЧ будет генерироваться зарядом со скоростью $v > c/2.4$, т.е. при $\beta > 0.417$. Для пучка ионов с такой скоростью Лоренц-фактор приблизительно равен $\gamma \geq 1/\sqrt{1 - \beta^2} \geq 1.09$.

Синтетический алмаз (CVD-алмаз) обладает частотной дисперсией, описываемой формулой Селлмейера [18, 19]

$$\varepsilon(\lambda) = n^2(\lambda) = 1 + 4.658\lambda^2 / (\lambda^2 - 112.5^2), \quad (16)$$

где длина волны подставляется в нанометрах.

Используя формулу (8), можно рассчитывать спектр фотонов ИВЧ умеренно релятивистского ионного пучка, пролетающего через алмазную пластинку, после умножения полученных значений на z^2 (z – заряд иона).

На рисунке 2 приведены зависимости выхода фотонов ИВЧ с различной длиной волны от угла наблюдения в геометрии, соответствующей рис. 1а. Вычисления проводились по формуле (8) для скорости ионов $\beta = 0.4166$ ($\gamma = 1.1$), проходящих через алмазную мишень толщиной 100 микрон.

Как следует из рис. 2, для $\lambda = 0.4$ мкм параметр $\Delta\theta_{\text{vac}} \approx \text{FWHM} \approx 1.5^\circ = 0.026$. Для дли-

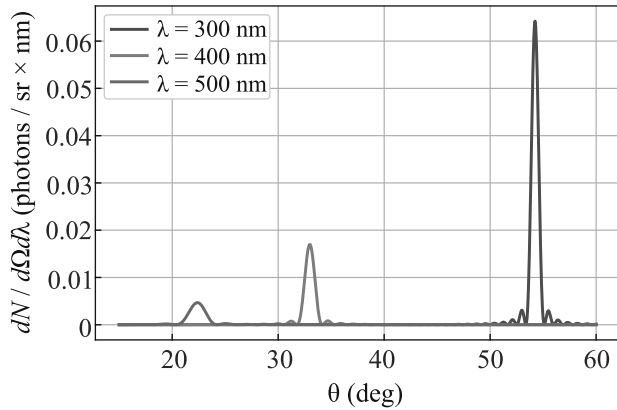


Рис. 2. (Цветной онлайн) Угловая зависимость интенсивности ИВЧ заряда со скоростью $\beta = 0.4166$ ($\gamma = 1.1$), пролетающего через перпендикулярную алмазную пластину ($\psi = 0$) толщиной 100 мкм

ны волны $\lambda = 0.5$ мкм скорость $\beta_{\text{max}} = 0.45116$ ($\gamma_{\text{max}} = 1.119$), это соответствует Лоренц-фактору $\gamma_{\text{max}} = 1.119$, что всего на 1.7% выше пороговой энергии $\gamma_{\text{thr}} = 1/\sqrt{1 - \beta_{\text{thr}}^2}$.

Для вывода в вакуум ИВЧ от более релятивистских ионов, необходимо переходить к наклонной геометрии. На рисунке 3 приведены спектры ИВЧ, которые испускаются под углом $\theta_{\text{vac}} = 79^\circ$ от алмазной мишени толщиной 100 мкм, наклоненной на угол 17° , ионами с энергией менее 0.2 ГэВ/нуклон.

На рисунке 4 приведены спектры ИВЧ для той же геометрии, полученные после интегрирования выражения (8) по телесному углу $\theta_{\text{vac}} \pm \Delta\theta_{\text{ap}} = 79^\circ \pm \pm 0.76^\circ$, $\varphi \pm \Delta\varphi_{\text{ap}} = \pm 0.76^\circ$ ($\Delta\theta_{\text{ap}}$, $\Delta\varphi_{\text{ap}}$ – угловая апертура детектора, соответствующая коллиматору 4×4 мм, расположенному на расстоянии 150 мм от радиатора), а также для удвоенной апертуры $\Delta\varphi_{\text{ap}} = 1.52^\circ$ при прежней апертуре $\Delta\theta_{\text{ap}}$.

Уширение линии, в основном, обусловлено “захватом” по полярному углу $\Delta\theta_{\text{ap}}$, тогда как уширение из-за конечного захвата по азимутальному углу су-

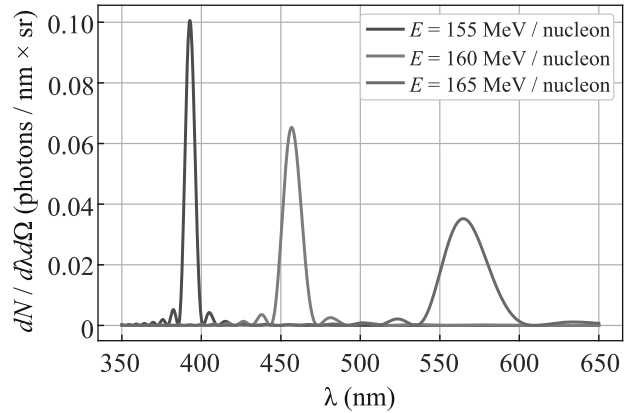


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектр монохроматического ИВЧ умеренно релятивистских ионов, проходящих через наклонную алмазную пластину ($\psi = 17^\circ$) толщиной 100 мкм под углом наблюдения $\theta_{\text{vac}} = 79^\circ$ ($\theta = 62^\circ$)

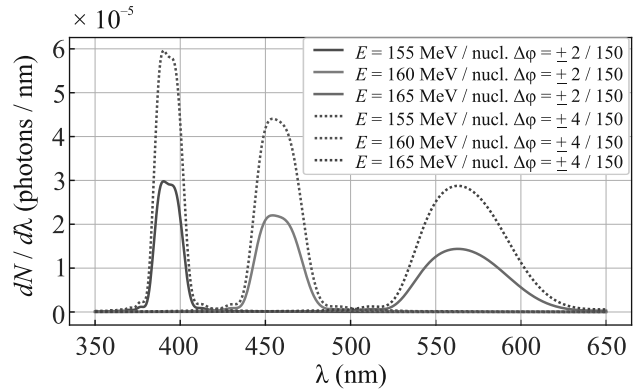


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектр ИВЧ ионов для тех же условий, что на рис. 3 при детектировании спектрометром с конечной апертурой $\Delta\theta_{\text{ap}} = 0.76^\circ$; $\Delta\varphi_{\text{ap}} = 0.76^\circ$ – сплошные кривые; $\Delta\theta_{\text{ap}} = 0.76^\circ$; $\Delta\varphi_{\text{ap}} = 1.52^\circ$ – штриховые кривые

щественно меньше, что позволяет использовать коллиматор с увеличенной апертурой по азимутальному углу для увеличения статистики.

Выход фотонов ИВЧ с энергией 165 МэВ/нуклон для рассматриваемой геометрии в апертуру $\Delta\theta_{\text{ap}} = 0.76^\circ$, $\Delta\varphi_{\text{ap}} = 1.52^\circ$ оценивается как $\Delta N = 0.00174z^2$ фотонов/ион, где z – заряд иона.

В заключение отметим, что используя в качестве радиатора образец CVD-алмаза, возможно наблюдать монохроматическое оптическое ИВЧ пучка умеренно релятивистских ионов при соответствующем выборе геометрии измерений. Спектр монохроматического оптического ИВЧ в этом случае “несет” информацию об энергии ионного пучка, что, в принципе, можно рассматривать как новый подход в спектрометрии.

В работе [6] с помощью оптического ИВЧ измерялась средняя энергия ионного пучка фотометрическим методом, основанным на эффекте направленности ИВЧ, однако достигнутая точность была не высокой.

Предлагаемый метод, основанный на спектральных измерениях, по-видимому, является более точным.

Представленные результаты могут стать основой нового метода диагностики энергии слаборелятивистских заряженных ионов. Экспериментальная верификация выполненных расчетов и разработка на данной основе системы для измерения дисперсии энергии ионов от углерода до золота с энергиями до 4 ГэВ/нуклон будут выполнены в Лаборатории физики высоких энергий ОИЯИ. Эксперименты запланированы на выведенных пучках ускорительного комплекса NICA на установке МАРУСЯ в тестовой зоне SPD, где существует необходимая для этого инфраструктура [20, 21].

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства “Приоритет-2030” (# Приоритет-2030-НИП/ИЗ-005-0000-2030).

1. П. А. Черенков, *Успехи физических наук* **68**(9), 373 (1959).
2. D. F. Anderson, M. Kobayash, Y. Yoshimura, and C. L. Woody, *Nucl. Instrum. Meth. A* **290**, 385 (1990).
3. Yu. Barnyakov, M. Yu. Barnyakova, J. B. Bähr et al. (Collaboration), *Nucl. Instrum. Meth. A* **553**, 125 (2005).
4. K. Fohl, *Nucl. Instrum. Meth. A* **595**(1), 88 (2008).
5. P. Krizan, *Nucl. Instrum. Meth. A* **876**, 272 (2017).
6. J. Ruzicka, S. Saro, V. P. Zrellov et al. (Collaboration), *Nucl. Instrum. Meth. A* **369**, 23 (1996).
7. О. В. Богданов, Е. И. Фикс, Ю. Л. Пивоваров, *ЖЭТФ* **142**(3), 442 (2012).
8. H. Liu, G.-Q. Liao, Y.-H. Zhang, B.-J. Zhu, Z. Zhang, Y. T. Li, G. C. Scott, D. R. Rusby, C. Armstrong, E. Zemaityte, L. C. Carroll, S. Astbury, P. Bradford, N. C. Woolsey, and P. McKenna, *Rev. Sci. Instrum.* **89**, 083302 (2018).
9. M. Shaikh, A. D. Lad, D. Sarkar, K. Jana, G. Ravindra Kumar, and P. P. Rajeev, *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 013301 (2019).
10. T. Miao, P. Bruza, B. W. Pogue, M. Jermyn, V. Krishnaswamy, and W. Ware, *Med. Phys.* **46**(2), 811 (2019).
11. И. Е. Тамм, *УФН* **68**, 387 (1959).
12. В. П. Зрелов, *Излучение Вавилова–Черенкова и его применение в физике высоких энергий*, Атомиздат, М. (1968), ч. 1, 302 с.
13. S. Gogolev and A. P. Potylitsyn, *Phys. Lett. A* **383**, 9 (2019).
14. A. P. Potylitsyn, G. Kube, A. I. Novokshonov, A. Vukolov, S. Gogolev, B. Alexeev, P. Klag, and W. Lauth, *Phys. Lett. A* **417**, 127680 (2021).
15. D. V. Karlovets and A. P. Potylitsyn, *Phys. Lett. A* **373**(22), 1988 (2009).
16. А. П. Потылицын, С. Ю. Гоголев, *Письма в ЭЧАЯ* **16**(2), 147 (2019).
17. V. E. Pafomov, *ЖЭТФ* **6**(4), 829 (1958).
18. G. Turri, S. Webster, Y. Chen, B. Wickham, A. Bennett, and M. Bass, *Opt. Mater. Express* **7**(3), 855 (2017).
19. S. Meijer, J. J. H. Pijpers, H. K. Nienhuys, M. Bonn, and W. J. van der Zande, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **10**(9), 095303 (2008).
20. V. D. Kekelidze, R. Lednicky, V. A. Matveev, I. N. Meshkov, A. S. Sorin, and G. V. Trubnikov, *Eur. Phys. J. A* **52**, 211 (2016).
21. A. Baldin, *JINST* **15**(06), C06051 (2020).

Экспериментальная реализация способа генерации последовательности ультракоротких гигаваттных импульсов черенковского сверхизлучения с наносекундным периодом следования

Е. М. Тотменинов¹⁾, В. Ю. Конев¹⁾, А. И. Климов¹⁾, И. В. Пегель¹⁾

Институт сильноточной электроники Сибирского отделения РАН, 634055 Томск, Россия

Поступила в редакцию 15 марта 2022 г.

После переработки 15 марта 2022 г.

Принята к публикации 15 марта 2022 г.

В эксперименте с релятивистской лампой обратной волны, имеющей волновые отражатели на краях области электронно-волнового взаимодействия, получена генерация периодической последовательности ультракоротких импульсов сверхизлучения на протяжении импульса тока электронного пучка длительностью около 40 нс. Период следования импульсов задавался временем электронно-волновой обратной связи и составил 5.9 нс, что соответствовало частоте повторения 170 МГц, при длительности по полувывсоте около 0.8 нс. Частота СВЧ-колебаний 10 ГГц. Пиковая мощность импульсов $0.8 \div 1.3$ ГВт. Соответствующие коэффициенты конверсии, определяемые как отношение пиковой мощности ультракороткого СВЧ-импульса к мощности электронного пучка, составили $0.7 \div 1.2$.

DOI: 10.31857/S1234567822080031, EDN: fmehkm

Введение. Интерес к источникам мощного микроволнового излучения в значительной мере связан с исследованиями в области электромагнитной совместимости электронных устройств, а также разработками для радиоэлектронной борьбы. Для этих целей используются главным образом импульсно-периодические релятивистские СВЧ-генераторы и усилители, работающие либо в режиме квазистационарной генерации (длительность микроволнового импульса близка к длительности тока питающего электронного пучка и составляет ~ 100 периодов колебаний), либо в режиме ультракоротких импульсов (УКИ) [1–3] с длительностью всего в несколько периодов колебания. В последнем случае пиковая мощность УКИ может превышать мощность электронного пучка. В обоих случаях максимальная частота повторения СВЧ-импульсов определяется возможностями источника высоковольтных наносекундных импульсов, подаваемых на вакуумный диод СВЧ-генератора, в котором генерируется сильноточный электронный пучок, и, как правило, ограничена величиной ~ 1 кГц. В ряде теоретических работ [4–6] были предложены подходы и схемы, позволяющие существенно увеличить частоту следования УКИ. Так, в работах [4, 5] исследованы комбинации реля-

тивистских ламп обратной волны (РЛОВ) и бегущей волны, одна из которых служила активным элементом (усилителем), а другая играла роль нелинейного насыщающегося поглотителя в цепи обратной связи. Такая схема получила экспериментальное подтверждение в работе [7]. Другой подход [6] основан

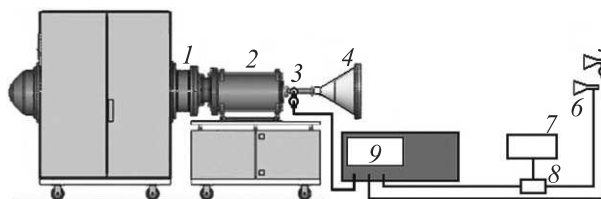


Рис. 1. (Цветной онлайн) 1 – Сильноточный импульсный генератор SINUS с тройной формирующей линией; 2 – импульсный соленоид с расположенной внутри него электродинамической системой генератора УКИ; 3 – направленный волноводный ответвитель в комплексе с ламповым детектором #1; 4 – излучающий рупор; 5 – приемная антенна в комплексе с ламповым детектором #2; 6 – приемная антенна для измерения спектра генерации; 7 – генератор опорной частоты Г4-83; 8 – смеситель; 9 – осциллограф Tektronix TDS 7404 (4 ГГц, 20 Гвыб/с)

на введении частичного отражения УКИ от выхода РЛОВ, срабатывающей в режиме сверхизлучения. Численное моделирование показало, что частота сле-

¹⁾ totm@lfe.hcei.tsc.ru; honour@vtomske.ru; klimov.1955@inbox.ru; pegel@lfe.hcei.tsc.ru

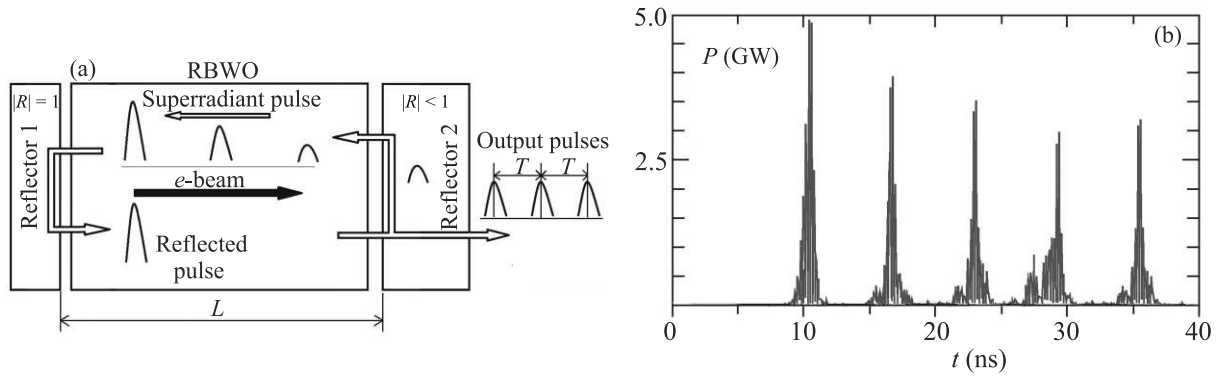


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Блок-схема генератора последовательности УКИ на основе РЛОВ, работающей в режиме сверхизлучения с выводом излучения в сторону коллектора электронов ($|R|$ – коэффициент отражения). (б) – Результат численного моделирования генерации последовательности УКИ с несущей частотой 10 ГГц при токе электронного пучка 4.0 кА, ускоряющем напряжении 270 кВ, длительности импульса тока 40 нс с фронтом 3 нс, ведущем магнитном поле 2.0 Тл. Расчетная частота следования УКИ 160 МГц. Пиковые мощности пяти последовательных УКИ (ГВт): 2.5, 2.0, 1.8, 1.5, 1.6. Соответствующие коэффициенты конверсии K : 2.3, 1.9, 1.7, 1.4, 1.5

дования УКИ в таких приборах определяется характерным временем в цепи обратной связи “волновой импульс–электронный пучок” и достигает сотен мегагерц, а пиковая мощность УКИ превышает мощность питающего электронного пучка. Заметим, что для оценки эффективности таких режимов используют понятие коэффициента конверсии (K) [2], определяемого как отношение пиковой мощности УКИ к мощности электронного пучка.

В настоящей работе представлены результаты эксперимента по генерации периодической последовательности УКИ в рамках подхода, описанного в работе [6]: сверхизлучательная РЛОВ с волновыми отражателями на краях пространства взаимодействия. Предварительно выполненный численный эксперимент показал, что в течение импульса тока пучка формируется периодическая последовательность УКИ с частотой следования около 200 МГц, при этом $K \approx 2$.

Экспериментальная установка и система регистрации СВЧ-сигналов. Общий вид экспериментальной установки с системой СВЧ-регистрации схематически представлен на рис. 1. В качестве источника высоковольтных импульсов использован сильноточный импульсный генератор серии SINUS [8] с тройной формирующей линией (1), формирующий импульсы напряжения с амплитудой до 330 кВ и длительностью на полувысоте 36 нс. Трубчатый релятивистский электронный пучок генерируется в коаксиальном диоде с магнитной изоляцией с кромочным взрывоэмиссионным катодом диаметром 35 мм. Для транспортировки пучка через электродинамическую систему СВЧ-генератора использован импульсный соленоид (2) с длиной однородного

участка магнитного поля около 600 мм. Принцип работы РЛОВ в режиме сверхизлучения основан на накопительном отборе энергии у электронов ультракоротким электромагнитным импульсом, распространяющимся навстречу электронному потоку [2, 3]. Исследуемая конструкция электродинамической системы (рис. 2) была изготовлена на основе результатов численного моделирования с использованием осесимметричной 2.5-D версии полностью электромагнитного PiC-кода KARAT [9]. Конструкция имела два рефлектора, один из которых располагался на входе в замедляющую систему со стороны катодного узла и обеспечивал полное отражение падающей СВЧ-волны. Второй рефлектор, расположенный на выходе генератора со стороны коллектора электронов, возвращал в замедляющую систему около 5% мощности. Наличие такой цепи обратной связи приводит к тому, что каждый сформировавшийся УКИ вызывает зарождение следующего импульса. Замедляющая система генератора представляла собой набор из 45 гофр с периодом 12 мм и средним диаметром $\approx 1.3 \lambda$, где λ – длина волны излучения. Глубина гофрировки плавно увеличивалась от катодного края системы к коллекторному. Последние семь гофр имели одинаковую амплитуду и составляли однородный участок, на котором и зарождается каждый УКИ. На выходе СВЧ-генератора устанавливался направленный ответвитель на основе круглого волновода (3), который в комплексе с ламповым детектором #1 использовался для регистрации амплитуды и формы УКИ в выходном волноводном тракте. Переходное затухание ответвителя измерялось в диапазоне частот $9 \div 12$ ГГц с помощью анализатора цепей

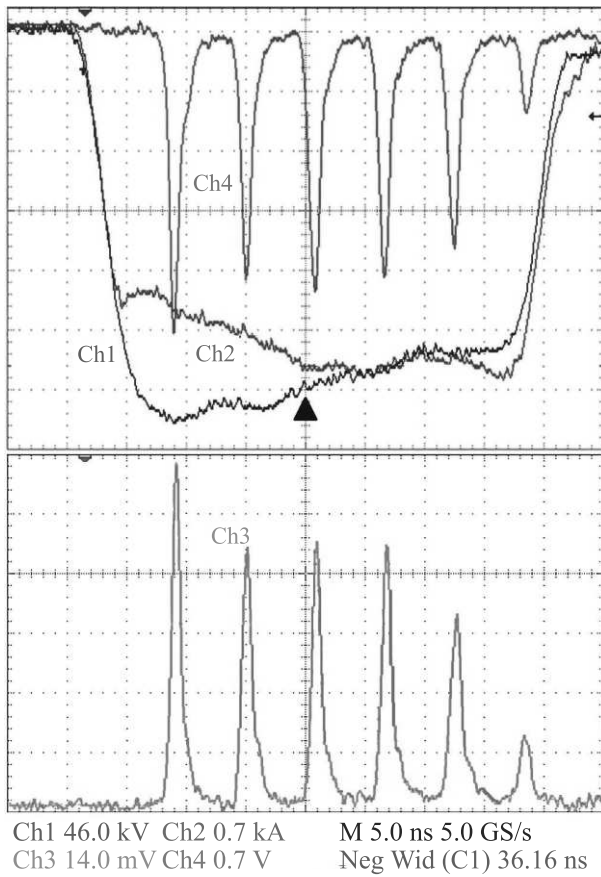


Рис. 3. (Цветной онлайн) Осциллограммы, демонстрирующие эффект генерации периодической последовательности УКИ: Ch1 – напряжение на вакуумном диоде; Ch2 – ток вакуумного диода; Ch3 – детектированный СВЧ-сигнал с волноводного ответвителя; Ch4 – детектированный СВЧ-сигнал с приемной антенны, находящейся в максимуме плотности потока мощности. Параметры электронного пучка в момент времени, выделенный треугольником: ускоряющее напряжение 270 кВ, ток 4.0 кА

Agilent 8719 ET (50 МГц ÷ 12.5 ГГц) и составило 69 ÷ 71 дБ. Для вывода излучения использовался конический рупор (4) с диаметром выходного окна около 200 мм. Приемные антенны в виде открытого конца прямоугольного волновода с геометрическим сечением 23 × 10 мм располагались на расстоянии 4.0 м от апертуры излучающего рупора и использовались для регистрации амплитуды и формы УКИ в открытом пространстве (антенна 5 в комплексе с ламповым детектором #2) и спектральных измерений (антенна 6). Спектр излучения определялся гетеродинным методом (генератор 7 и смеситель 8 на рис.1) путем обработки сигнала промежуточной частоты осциллографом серии Tektronix MSO 64 (6 ГГц, 25 Гвыб/с) с помощью быстрого

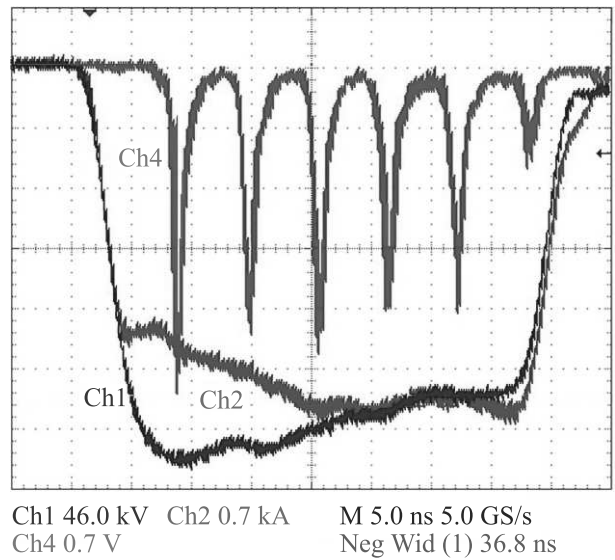


Рис. 4. (Цветной онлайн) Осциллограммы, полученные в режиме накопления за 20 последовательных срабатываний ускорителя электронов

преобразования Фурье. Область антенных измерений была отделена от окружающего пространства СВЧ-поглотителями. Для визуального контроля пространственного распределения плотности потока мощности СВЧ-излучения использовалось газоразрядное индикаторное табло из неоновых ламп. Высоочастотные кабельные трассы (кабель РК50-4-47) калибровались с помощью генератора Г5-84, который формировал видеоимпульсы с длительностью на полувысоте около 1 нс.

Результаты эксперимента. При амплитуде напряжения на вакуумном диоде ускорителя электронов 270 кВ, токе пучка 4.0 кА и ведущем магнитном поле 2.2 Тл получен режим генерации периодической последовательности УКИ (рис. 3) с длительностью на полувысоте ≈ 0.8 нс и частотой следования 170 МГц (период следования 5.9 нс). Такой период следования импульсов соответствует периоду обратной связи в генераторе, оцениваемому как $T = L(1/v_{gr} + 1/v_e)$, где v_e – скорость электронов в пучке, v_{gr} – групповая скорость встречной электромагнитной волны, L – длина системы (рис. 2). В серии из 20 импульсов максимальный разброс амплитуд УКИ не превышал 15% (рис. 4). Частота колебаний в каждом УКИ – около 10 ГГц (рис. 5).

Пиковая мощность в первом УКИ, полученная интегрированием пространственного распределения плотности потока мощности (которое соответствовало волне E_{01}), составила $P_1 = 1.3 \pm 0.2$ ГВт. Зная пиковые амплитуды остальных УКИ и вольт-ваттную

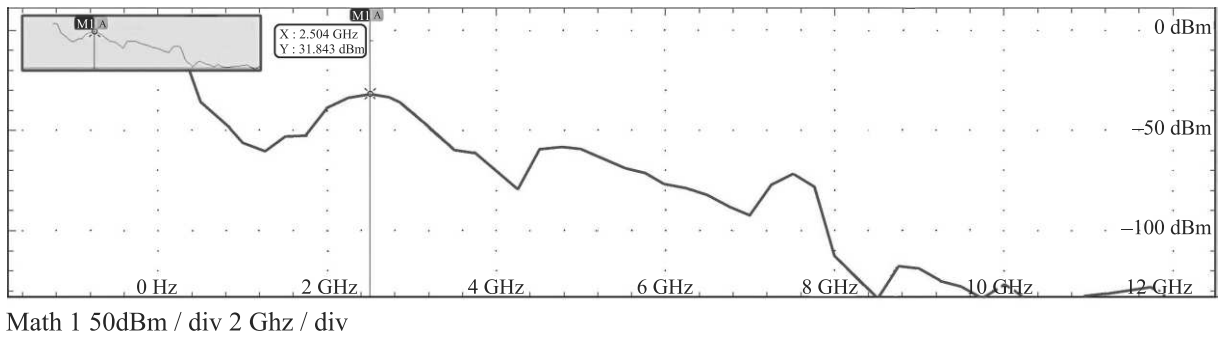


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектр высокочастотных колебаний, измеренный для первого УКИ (аналогичные спектры регистрировались для остальных УКИ). Частота колебаний $F = F_{\text{get}} + \Delta F$, где $F_{\text{get}} \approx 7.5$ ГГц – частота гетеродина, $\Delta F \approx 2.5$ ГГц – промежуточная частота

характеристику лампового детектора, можно оценить их пиковые мощности: $P_2 = 1.0 \pm 0.2$ ГВт, $P_3 = 1.1 \pm 0.2$ ГВт, $P_4 = 1.0 \pm 0.2$ ГВт, $P_5 = 0.8 \pm 0.1$ ГВт, $P_6 = 0.2 \pm 0.03$ ГВт. Коэффициенты конверсии определим как отношение пиковой мощности каждого УКИ к мощности электронного пучка в момент времени, выделенный треугольником на рис. 3: $K_1 = 1.2 \pm 0.2$, $K_2 = 0.9 \pm 0.2$, $K_3 = 1.0 \pm 0.2$, $K_4 = 0.9 \pm 0.2$, $K_5 = 0.7 \pm 0.1$, $K_6 = 0.2 \pm 0.03$. Свечение панели из газоразрядных ламп под действием СВЧ-излучения имело вид кольца.

Одновременно выполнялось независимое измерение мощности излучения с помощью установленного в выходном волноводе генератора направленного волноводного ответвителя, сигнал с которого поступал на ламповый детектор #1 и обрабатывался с учетом вольт-ваттной характеристики этого детектора. Измерение дало следующие оценки для пиковых мощностей УКИ: $P_1 = 1.4 \pm 0.2$ ГВт, $P_2 = 1.0 \pm 0.2$ ГВт, $P_3 = 1.1 \pm 0.2$ ГВт, $P_4 = 1.1 \pm 0.2$ ГВт, $P_5 = 0.8 \pm 0.1$ ГВт, $P_6 = 0.3 \pm 0.04$ ГВт.

В отдельной серии экспериментов с регистрацией сигналов с помощью ответвителя выполнялось измерение энергии СВЧ-излучения с использованием вакуумного калориметра [10], который устанавливался непосредственно за ответвителем. Серия из нескольких измерений, выполненных при указанных выше настройках генератора, показала, что СВЧ-энергия, приходящаяся на одно измерение, лежит в диапазоне $8.5 \div 9.6$ Дж. Анализ соответствующих осциллограмм при допущении, что в промежутках между отдельными УКИ главным образом присутствует “шумовая” генерация на частотах вблизи 10 ГГц, дает оценку для пиковой мощности первого УКИ в $1.4 \div 1.5$ ГВт. Можно оценить и среднюю СВЧ-мощность (\bar{P}) в течение импульса электронного пучка. Полагая, что полная длительность

СВЧ-генерации составляет около 30 нс (рис. 3), имеем $\bar{P} = 8.5 \div 9.6$ Дж/30 нс = $0.28 \div 0.32$ ГВт. Энергетический КПД генератора, определяемый как отношение СВЧ-энергии к энергии электронного пучка, составил около 23 %.

Тот факт, что пиковая мощность УКИ максимальна в первом импульсе и снижается у последующих, следует связывать, во-первых, с постепенной отстройкой генератора от оптимальных параметров, происходящей в течение импульса электронного пучка вследствие расширения катодной плазмы. На последнее указывает монотонное снижение напряжения в вакуумном диоде в течение импульса (рис. 3, 4). Вероятно, свою роль также играет накопление в приборе потерявших кинетическую энергию электронов, в значительном количестве образующихся в каждом акте генерации УКИ. За время паузы между двумя УКИ такие электроны не успевают покинуть замедляющую систему, медленно дрейфуя в сторону коллектора, а с другой стороны проникая в вакуумный диод (см. рис. 3 в работе [6]). Присутствие большого количества сильно заторможенных электронов влияет и на формирование рабочего электронного пучка, и на электронно-волновое взаимодействие и, очевидно, изменяет условия генерации всех УКИ, кроме первого. Вместе с тем, это негативное влияние в рассматриваемой системе с концевыми отражателями оказывается слабее, чем в однопроходном генераторе без отражателей, в котором уже второй по счету УКИ в несколько раз уступал по мощности первому.

Заключение. Полученные экспериментальные результаты продемонстрировали работоспособность предложенной схемы генерации периодической последовательности УКИ и подтвердили корректность теоретической модели прибора. В то же время пиковые мощности УКИ и соответствующие коэффициенты конверсии, полученные в эксперименте, оказались

приблизительно вдвое меньшими, чем при осесимметричном РiС-моделировании. Наиболее вероятная причина этого – неустойчивость диокотронного типа в изначально азимутально-однородном электронном пучке, развивающаяся на протяжении всей длины его транспортировки и приводящая к азимутальной филаментации и радиальному расплыванию пучка. Сравнение автографов пучка на мишенях из капролона, размещенных на входе и выходе замедляющей системы прибора в режиме без СВЧ-генерации показало, что толщина стенки трубчатого пучка увеличивается с 0.8 мм вблизи кромки катода до 3 мм в области с максимальной глубиной гофрировки. В результате в этом месте, где и происходит зарождение УКИ, оценочная величина сопротивления связи рабочей волны E_{01} с электронным пучком оказывается примерно вдвое меньшей, чем в отсутствие неустойчивости. Азимутальная неоднородность пучка может способствовать развитию несимметричных колебаний; однако полученные в описанных экспериментах спектр генерации и распределение плотности потока мощности СВЧ-излучения говорят о селективном возбуждении моды E_{01} .

Авторы выражают благодарность А. А. Ельчанинову, К. О. Селявскому, М. Ю. Сухову, О. П. Кутенкову и С. А. Кицанову за помощь при проведении эксперимента.

1. А. А. Ельчанинов, С. Д. Коровин, В. В. Ростов, И. В. Пегель, Г. А. Месяц, М. И. Яландин, Н. С. Гинзбург, Письма в ЖЭТФ **77**(6), 314 (2003).
2. A. A. Eltchaninov, S. D. Korovin, V. V. Rostov, I. V. Pegel, G. A. Mesyats, S. N. Rukin, V. G. Shpak, M. I. Yalandin, and N. S. Ginzburg, *Laser Part. Beams* **21**, 187 (2003).
3. А. А. Ельчанинов, С. Д. Коровин, И. В. Пегель, В. В. Ростов, Вопросы атомной науки и техники **3**(4), 20 (2003).
4. Н. С. Гинзбург, Э. Б. Абубакиров, М. Н. Вилков, И. В. Зотова, А. С. Сергеев, Письма в ЖТФ **43**(18), 47 (2017).
5. Н. С. Гинзбург, Э. Б. Абубакиров, М. Н. Вилков, И. В. Зотова, А. С. Сергеев, ЖТФ **88**(8), 1241 (2018).
6. Е. М. Тотьменинов, В. В. Ростов, Письма в ЖТФ **47**(1), 51 (2021).
7. N. S. Ginzburg, S. V. Samsonov, G. G. Denisov, M. N. Vilkov, I. V. Zotova, A. A. Bogdashov, I. G. Gachev, A. S. Sergeev, and R. M. Rozental, *Phys. Rev. Appl.* **16**, 054045 (2021).
8. G. A. Mesyats, S. D. Korovin, A. V. Gunin, V. P. Gubanov, A. S. Stepchenko, D. M. Grishin, V. F. Landl, and P. I. Alekseenko, *Laser Part. Beams* **21**, 197 (2003).
9. В. П. Тараканов, *Математическое моделирование. Проблемы и результаты*, Наука, М. (2003), с. 456.
10. P. V. Vykhodtsev, A. I. Klimov, V. V. Rostov, R. V. Tsygankov, and P. V. Pripitnev, *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **70**, 8001506 (2021).

Неоднородность протекания тока в нанопроводах InN высокого качества

А. А. Жуков¹⁾

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 23 января 2022 г.

После переработки 11 марта 2022 г.

Принята к публикации 11 марта 2022 г.

Представлены результаты измерения магнитотранспорта нанопроволок InN высокого качества в присутствии проводящего острия атомно-силового микроскопа (АСМ). Измерения были проведены при температуре $T = 4.2$ К. Продемонстрировано влияние близкорасположенного острия зонда АСМ на сопротивление нанопроволок при определенных значениях напряжений на нижнем затворе, а также то, что данное влияние существенно подавлено во внешнем магнитном поле ($B \geq 150$ мТ). Предложено качественное описание полученных экспериментальных данных в модели неоднородного протекания, или шнурования тока.

DOI: 10.31857/S1234567822080043, EDN: fmpkwn

После первых статей М. А. Topinka et al. [1, 2], в которых проводящее острие зонда АСМ использовалось в качестве подвижного затвора (scanning gate microscopy, или SGM) и было визуализировано шнурование тока в структурах на основе гетероперехода AgAs/AlGaAs, была выполнена серия работ по исследованию магнитотранспорта в системах с низкой размерностью [3–18]. Измерения проводились как в линейном [1, 2], так и в нелинейном режимах [8]. Измерения проводились на образцах различной геометрии. Первые экспериментальные результаты были получены на образцах с точечным контактом [1, 2], далее, исследовались такие структуры как квантовые точки [4], резонаторы [11, 13, 16] и туннели [15]. Наряду с исследованием структур на основе гетероперехода GaAs/AlGaAs, исследования проводились также на однослойном [14, 17, 18] и двухслойном графене [19].

В статье [6] была продемонстрирована устойчивость положения шнуров тока к изменению направления инжектированного заряда, а также продемонстрировано наличие шнурования тока в системах с низкой подвижностью. Переконфигурация пространственного положения шнуров тока при прикладывании напряжения к боковым затворам была исследована в работе [15].

Кроме того, в статье [12] было продемонстрировано, что прикладывание внешнего магнитного поля в несколько миллитесла приводит к размыванию шнуров тока в случае образцов с точечным контактом.

В образцах с геометрией биллиарда центральная область оказывается нечувствительна к присутствию зонда АСМ в поле $B = 300$ мТл из-за формирования скачущих траекторий вдоль границ биллиарда [11].

Истинное пространственное разрешение в экспериментах по изучению транспорта в присутствии проводящего острия АСМ, выполненных на образцах с использованием нанотрубок, нанопроволок или графена, существенно выше, чем в случае исследования двумерного электронного газа на гетеропереходе GaAs/AlGaAs из-за наличия нижнего затвора, экранирующего влияние острия, и оказывается порядка толщины оксида кремния. Пример такого разрешения можно найти в работе [10], характерный размер пространственных флуктуаций составляет $150 \div 200$ нм, при этом толщина оксида кремния 100 нм. Наличие нижнего затвора позволило визуализировать циклотронные орбиты в эксперименте по фокусировке электронного пучка [14] и андреевского отражения [17] в графене.

В большинстве работ, начиная со статей [1, 2], напряжение на острие (V_{tip}) и на нижнем затворе (V_{BG}) при сканировании поддерживалось постоянным. Но в некоторых случаях техника, когда острие неподвижно, а изменяется V_{tip} или V_{BG} оказывается более предпочтительна для регистрирования неоднородности протекания тока в образце (scanning spectroscopy technique, или SST). Хороший пример применения данной техники представлен в работе [18], в которой удалось зафиксировать полосы протекающего тока в режиме квантового эффекта Холла в графене.

¹⁾e-mail: azhukov@issp.ac.ru

Универсальные флуктуации проводимости в образце графена с широкими контактами с применением техники SST были исследованы в работе [7]. Было показано, что присутствие проводящего острия АСМ или его перемещение (перемещение одного рассеивателя) перестраивает зависимость сопротивления образца от напряжения на нижнем затворе во всем диапазоне измеренных затворных напряжений.

В представленной работе демонстрируется влияние близкорасположенного острия АСМ на сопротивление нанопроволок InN при определенных значениях напряжения на нижнем затворе и при включении слабого (несколько миллитесла) магнитного поля. Измерения были проведены при температуре $T = 4.2$ К. Данные экспериментальные результаты объясняются качественно формированием шнуров тока в нанопроволоках InN.

Были исследованы нанопроволоки InN, выращенные с применением плазменной молекулярно-лучевой эпитаксии [20, 21]. Проволоки выращивались на кремниевой подложке (111) при температуре 475°C в атмосфере, насыщенной азотом. Стандартная концентрация носителей в нанопроволоках составляет $5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, данные были получены из экспериментов по фотолюминесценции. Более подробную информацию о технологии роста нанопроволок InN и их характеристиках можно найти в работах [20–22].

Для проведения транспортных измерений нанопроволок в присутствии заряженного острия атомно-силового микроскопа на подложке из допированного кремния (100), покрытого оксидом кремния толщиной 100 нм, при помощи электронной литографии и последующего термического напыления золота были изготовлены контактные площадки и маркеры. Далее, на подготовленную подложку была помещена капля ацетона со взвесью нанопроволок InN. После этого были изготовлены металлические (Ti/Au) контакты при помощи электронной литографии и термического напыления металлов в вакууме. Диаметр нанопроволок в исследуемом образце составляет примерно 40 нм, см. рис. 1а. Расстояние между контактами составляет 540 нм.

Все измерения были проведены при температуре $T = 4.2$ К. Проводящее вольфрамовое острие атомно-силового микроскопа использовалось в качестве подвижного затвора [23]. Все измерения магнитотранспорта в присутствии проводящего острия были проведены при заземленном острие ($V_{ip} = 0$ В) и постоянном поданном напряжении на нижний затвор (V_{BG}). Измерение сопротивления нанопроволок во время сканирования проводилось по двухточечной

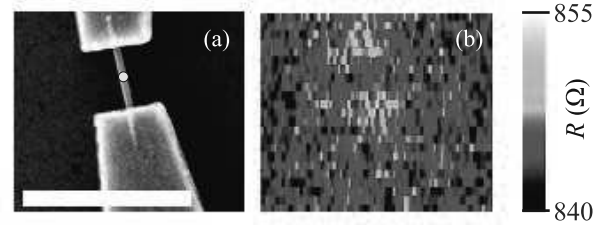


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Представлено изображение образца, полученное при помощи сканирующего электронного микроскопа. Длина прямоугольника соответствует 1 мкм. (б) – Показан результат сканирования методикой SGM на том же участке образца, который представлен на рис. (а). Заземленное проводящее острие АСМ располагалось на высоте 220 нм над поверхностью SiO₂, напряжение на нижнем затворе поддерживалось равным $V_{BG} = -11$ В. Два пятна соответствующих более высокому сопротивлению образца при приближении острия, свидетельствуют о наличии потенциальных барьеров в приконтактной области

схеме. Была использована стандартная схема с синхронным усилителем, частота измерения была равна 231 Гц, измерительный ток составлял $I_{AC} = 50$ нА, падение напряжения на образце измерялось дифференциальным предусилителем. Расстояние от острия до поверхности оксида кремния во время сканирования составляла $h_{tip} = 220$ нм. Магнитное поле в эксперименте прикладывалось перпендикулярно поверхности оксида кремния и оси нанопроволок.

На рисунке 1 б представлен результат измерения сопротивления образца в присутствии проводящего зонда АСМ. Сканирование было проведено точно по той же площади, что и на рис. 1а. Во время сканирования вольфрамовое острие было заземлено, напряжение на нижнем затворе составляло $V_{BG} = -11$ В. Два ярких пятна, отмечающие места с возросшим сопротивлением при приближении зонда, расположены точно над интерфейсами металл/полупроводниковая нанопроволока и свидетельствуют о наличии потенциального барьера на интерфейсах. То, что удается различить два пятна, означает, что пространственное разрешение установки достаточно, чтобы исследовать влияние острия АСМ только на центральную область нанопроволок без влияния на приконтактные области, если высота положения острия не превышает $h_{tip} = 220$ нм. Все дальнейшие экспериментальные данные были получены, когда острие АСМ находилось в центре образца между контактами, данное положение отмечено желтой точкой на рис. 1а. При этом положение острия по высоте менялось от $h_{tip} = 20$ до 120 нм, что соответствует диапазону от 60 до 160 нм над

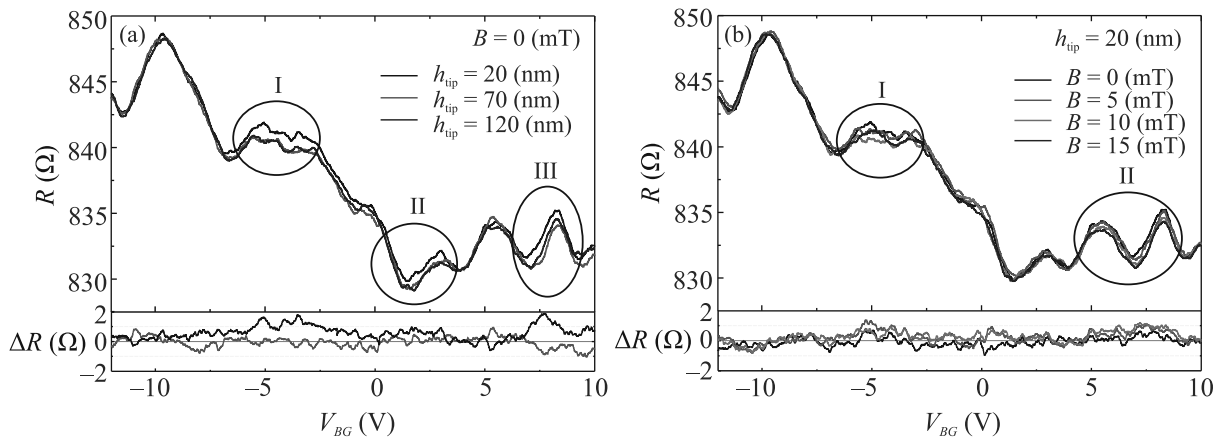


Рис. 2. (Цветной онлайн) На верхнем графике рис. (a) представлены зависимости сопротивления образца от напряжения на нижнем затворе при различных значениях высоты острия АСМ, а именно, $h_{\text{tip}} = 20$ нм (черная кривая), 70 нм (красная кривая) и 120 нм (синяя кривая). Три области затворных напряжений, в которых острие оказывает влияние на сопротивление образца, отмечены овалами. На верхнем графике рис. (b) представлены зависимости $R(V_{BG})$, демонстрирующие влияние слабого магнитного поля на сопротивление образца, когда острие АСМ расположено близко ($h_{\text{tip}} = 20$ нм) к поверхности нанопроволок. Измерения были проведены при $B = 0$ мТл (черная кривая), 5 мТл (красная кривая), 10 мТл (зеленая кривая) и 15 мТл (синяя кривая). Две области затворных напряжений, в которых острие оказывает влияние на сопротивление образца отмечены овалами. При этом область I на рис. (a) совпадает с областью I на рис. (b), а область III на рис. (a) почти совпадает с областью II рис. (b). На нижнем графике рис. (a) представлены зависимости $\Delta R(V_{BG})$. Зависимость $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, h = 20 \text{ нм}) - R(V_{BG}, h = 70 \text{ нм})$ — черная кривая, а зависимость $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, h = 120 \text{ нм}) - R(V_{BG}, h = 70 \text{ нм})$ изображена красной кривой. На нижнем графике рис. (b) построены зависимости $\Delta R(V_{BG})$, при этом черная, красная и зеленая кривые соответствуют зависимостям $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 0 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 5 \text{ мТл})$, $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 0 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 10 \text{ мТл})$ и $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 0 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 15 \text{ мТл})$

поверхностью SiO_2 . Максимальная высота в 160 нм над поверхностью оксида кремния была выбрана, чтобы потенциал острия влиял только на центральную часть нанопроволок, а не на приконтактные области.

На рисунке 2а, верхний график, показана зависимость сопротивления образца $R(V_{BG})$ при различном положении острия АСМ в нулевом магнитном поле. Данные, представленные черной, красной и синей кривой были получены при высоте острия $h_{\text{tip}} = 20$, 70 и 120 нм над поверхностью нанопроволок InN. В то время как зависимости $R(V_{BG})$, измеренные при высоте острия 70 и 120 нм, практически совпадают, зависимость $R(V_{BG})$, полученная при положении острия 20 нм над нанопроволоками, демонстрирует повышение сопротивления образца в трех областях затворных напряжений, а именно, $V_{BG} = -5$, 2 и 7.5 В (все области отмечены овалами на рис. 2а, на верхнем графике).

На верхнем графике рисунка 2b показаны зависимости $R(V_{BG})$ при слабом изменении внешнего магнитного поля, при этом высота острия над поверхностью нанопроволоки составляла 20 нм. Черная, красная и синяя кривые были измерены при $B = 0$, 5, 10

и 15 мТл. Некоторое отличие между всеми кривыми наблюдается при V_{BG} в районе -5 и 6 В, обе области отмечены овалами.

Для того, чтобы проявить более ярко разницу между кривыми, представленными на верхнем графике рис. 2а, на нижнем графике построены зависимости $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, h = 20 \text{ нм}) - R(V_{BG}, h = 70 \text{ нм})$ (черная кривая) и $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, h = 120 \text{ нм}) - R(V_{BG}, h = 70 \text{ нм})$ (красная кривая). Величина $\Delta R(V_{BG})$ превышает 1Ω в области II и практически достигает значения 2Ω в областях I и III. Аналогично, для того, чтобы продемонстрировать разницу между зависимостями, представленными на верхнем графике рис. 2b, соответствующие зависимости $\Delta R(V_{BG})$ построены на нижнем графике. При этом величина $\Delta R(V_{BG})$ превышает значение 1Ω и практически достигает значения 1.5Ω как в области I, так и в области II.

На верхних графиках рис. 3а–d представлены результаты измерения влияния положения острия АСМ (рис. 3а и с), а также слабого изменения внешнего магнитного поля, когда острие расположено близко в поверхности нанопроволок (рис. 3b и d). Измерения $R(V_{BG})$, представленные на верхних графиках

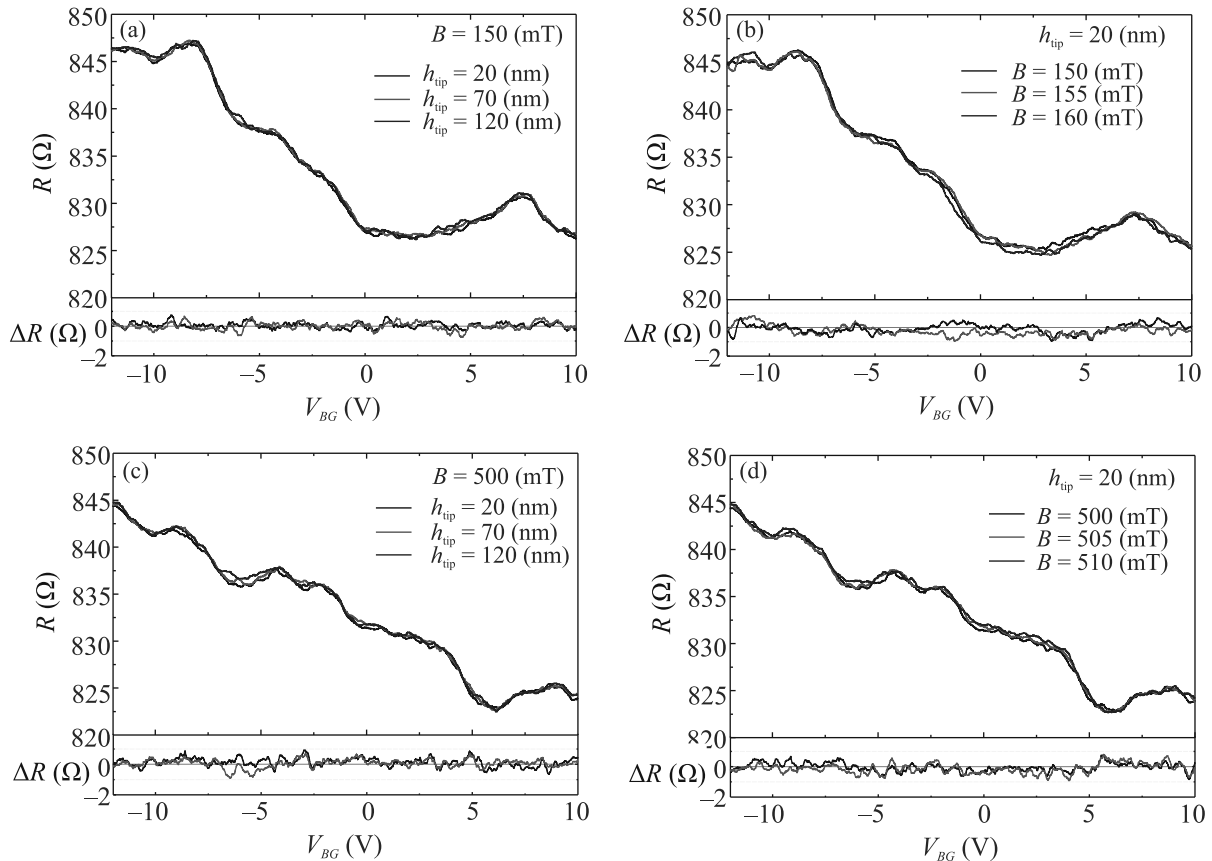


Рис. 3. (Цветной онлайн) Рисунки (a)–(d) демонстрируют влияние близкорасположенного острия АСМ на $R(V_{BG})$ исследуемого образца в ненулевом внешнем магнитном поле. На верхних графиках рис. (a) и (c) показаны зависимости $R(V_{BG})$, измеренные при $B = 150$ и 500 мТл, при этом высота острия над поверхностью нанопроволок поддерживалась равной $h_{tip} = 20$ нм (черные кривые), 70 нм (красные кривые) и 120 нм (синие кривые). Верхний график рис. (b) демонстрирует зависимости $R(V_{BG})$, измеренные при $B = 150$ мТл (черная кривая), 155 мТл (красная кривая) и 160 мТл (синяя кривая). Острие АСМ находилось на высоте 20 нм над поверхностью нанопроволок. На верхнем графике рис. (d) показаны результаты измерений зависимости $R(V_{BG})$ во внешнем магнитном поле, равном $B = 500$ мТл (черная кривая), 505 мТл (красная кривая) и 510 мТл (синяя кривая). Высота острия при данных измерениях поддерживалась равной 20 нм, аналогично измерениям, представленным на верхнем графике рис. (b). Верхние графики рис. (a)–(d) демонстрируют отсутствие какого-либо влияния острия АСМ на зависимости $R(V_{BG})$. Для того, чтобы более наглядно продемонстрировать данное утверждение, на нижних графиках рис. (a) и (c) представлены зависимости $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, h = 20 \text{ нм}) - R(V_{BG}, h = 70 \text{ нм})$ – черные кривые и $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, h = 120 \text{ нм}) - R(V_{BG}, h = 70 \text{ нм})$ – красные кривые. На нижнем графике рис. (b) показаны зависимости $\Delta R(V_{BG})$ трех кривых, измеренных при различных величинах магнитного поля: $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 150 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 155 \text{ мТл})$ – черная кривая и $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 150 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 160 \text{ мТл})$ – красная кривая. На нижнем графике рис. (d) представлены зависимости $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 500 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 505 \text{ мТл})$ – черная кривая и $\Delta R(V_{BG}) = R(V_{BG}, 500 \text{ мТл}) - R(V_{BG}, 510 \text{ мТл})$ – красная кривая

как рис. 3а и с, были выполнены при $B = 150$ и 500 мТл. Высота острия при этом составляла 20 нм (черные кривые), 70 нм (красные кривые) и 120 нм (синие кривые). Все измеренные кривые практически совпадают. На нижних графиках соответствующих рисунков представлена зависимость $\Delta R(V_{BG})$, отклонение которой от нуля не превышает величину 1Ω для всех значений V_{BG} , при которых проводились измерения.

Влияние слабого изменения магнитного поля на сопротивление образца, когда заземленное острие АСМ расположено близко ($h_{tip} = 20$ нм) к поверхности нанопроволок для $B = 150$ и 500 мТл показано на верхних графиках рис. 3b и d. Измерение зависимостей $R(V_{BG})$ на верхнем графике рис. 3b были проведены при $B = 150$ мТл (черная кривая), $B = 155$ мТл (красная кривая) и $B = 160$ мТл (синяя кривая), и при $B = 500$ мТл (черная кривая), $B = 505$ мТл

(красная кривая) и $B = 510$ мТл (синяя кривая), см. верхний график рис. 3d. На верхних графиках рис. 3b и d зависимости $R(V_{BG})$ практически совпадают, а абсолютная величина $\Delta R(V_{BG})$, представленная на нижних графиках рис. 3b и d не превышает 1Ω во всем диапазоне приложенных напряжений V_{BG} .

Во-первых, хотелось бы отметить высокое качество исследуемых нанопроволок InN. Их сопротивление при нулевом напряжении на нижнем затворе составляет $R = 0.84$ к Ω , сопротивление на единицу длины 3.1 к Ω /мкм, а удельное сопротивление на квадрат составляет 0.39 к Ω /□, если мы предполагаем одинаковое качество обеих нанопроволок.

Подробное исследование магнитотранспорта в образце в присутствии проводящего острия АСМ было проведено ранее, см. [24]. В данной статье образец был обозначен как образец II. Согласно полученным экспериментальным данным, в данном образце присутствуют слабые связи или потенциальные барьеры только в приконтактной области. Сканирование было выполнено поддерживая высоту острия 200 нм. Какое-либо существенное влияние острия на сопротивление центральной части образца обнаружить не удалось. Данные результаты аналогичны полученным экспериментальным данным, представленным на рис. 1b. Более подробную информацию о влиянии острия на прозрачность потенциальных барьеров в приконтактной области можно найти в работе [24].

Малое влияние проводящего острия АСМ на сопротивление образца обусловлено как высоким качеством нанопроволок, так и не столь высоким отношением сигнал/шум. Данное отношение можно существенно улучшить, если воспользоваться техникой сканирующей спектроскопии (scanning spectroscopy technique или SST), аналогично примененной в работах [7, 18]. Использование данной методики при помещении острия в центр структуры, которое отмечено на рис. 1a желтой точкой, позволяет измерить малое влияние острия на зависимость $R(V_{BG})$, при этом влияние острия на приконтактные области образца исключены. К сожалению, применение методики SGM с длительным измерением сопротивления образца в каждой точке сканирования не представляется возможным, поскольку характерное время дрейфа образца составляет примерно 20 ч.

Аналогично экспериментальным данным статьи [7], дрейф нанопроволок InN приводит к изменению зависимости $R(V_{BG})$ при определенных значениях напряжений на нижнем затворе. В качестве примера можно отметить результаты, представленные на верхних графиках рис. 3a и b, которые были получены с разнесением по времени в 48 ч.

Для того, чтобы отделить влияние острия на сопротивление образца от влияния дрейфа, была разработана следующая процедура измерений. После разворачивания затворного напряжения в течении 1 ч 30 мин, затворное напряжение возвращается к исходному значению $V_{BG} = -12$ В на 45 мин. Как только две последовательно полученные кривые начинали совпадать, изменялась высота острия или изменялось магнитное поле. Если новые кривые совпали, происходил переход к измерению на следующей высоте острия или следующем выбранном магнитном поле. В конце серии высота острия или величина магнитного поля возвращались к исходному значению, прописывалась последняя экспериментальная зависимость $R(V_{BG})$ и проверялось ее совпадение с первой полученной зависимостью. Хорошую воспроизводимость результатов можно наблюдать на нижних графиках рис. 3, воспроизводимость оказывается лучше, чем 1 Ом.

Согласно данным работы [7], если влияние близкорасположенного острия АСМ на сопротивление образца присутствует, то оно будет присутствовать во всей области измеренных значений напряжений на нижнем затворе. Таким образом, экспериментальные результаты, представленные на рис. 2a, не могут быть объяснены в рамках стандартной модели диффузного когерентного транспорта, т.е. универсальных флуктуаций проводимости. Кроме того, слабое изменение магнитного поля $B \ll B_c = \Phi_0/l_\varphi d = 0.26$ Тл в рамках того же подхода не должно менять сопротивление образца. Здесь Φ_0 – квант потока, а $l_\varphi = 200$ нм – длина сбоя фазы в нанопроволоке InN [25]. Данное утверждение находится в противоречии с экспериментальными данными, представленными на рис. 2b.

Экспериментальные данные, представленные на рис. 3, показывают существенное уменьшение влияния близкорасположенного острия АСМ на сопротивление образца во внешнем магнитном поле $B \geq 0.15$ Тл. Данные, представленные на рис. 3b и d, могут быть объяснены в рамках модели диффузного когерентного транспорта, т.е. если изменение магнитного поля мало по сравнению с B_c , то зависимости $R(V_{BG})$ должны совпадать. В рамках данной модели можно также описать экспериментальные данные, представленные на рис. 3c, магнитная длина $l_B(0.5 \text{ Тл}) = (\hbar/eB)^{0.5} = 36$ нм оказывается меньше, чем диаметр нанопроволоки, что приведет к некоторому увеличению плотности тока на боковых поверхностях нанопроволоки и уменьшению его на верхней и нижней поверхностях. Здесь \hbar – постоянная Планка, а e – заряд электрона. Следует от-

метить, что некоторое уменьшение влияния острия следует ожидать уже в поле $B = 0.15$ Тл, поскольку $l_B(0.15 \text{ Тл}) = 66$ нм сравнимо с диаметром нанопроволоки. Таким образом, в рамках модели когерентного диффузного транспорта можно качественно описать результаты, представленные на рис. 3, однако это невозможно сделать в случае экспериментальных данных, показанных на рис. 2.

Согласно экспериментальным данным по сканированию с применением техники SGM, представленным в работе [12], шнурование тока на образцах с точечным контактом прекращается уже в достаточно малых магнитных полях, а именно $B = 4$ и 8 мТл. Достаточно похожая ситуация наблюдается в образцах, имеющих форму билиярда [12], при этом было показано, что влияние острия в центральной области билиярда существенным образом подавлено уже при магнитном поле, равном $B = 300$ и 500 мТл. Эти экспериментальные данные позволяют качественно описать экспериментальные результаты, представленные на рис. 2.

В нанопроволоках InN электронная система представляет из себя полый цилиндр, при этом максимум концентрации электронов расположен на расстоянии $5 \div 10$ нм от поверхности нанопроволоки [26–30]. Наличие слабого потенциального барьера на интерфейсах означает, что контакт к проволокам неоднороден и может рассматриваться как точечный, а именно, верхняя поверхность нанопроволоки должна иметь контактное сопротивление существенно ниже, чем боковая или нижняя. Электроны, впрыснутые через точечный контакт, формируют шнуры. Наличие шнурования тока было обнаружено в двумерных электронных системах даже с низкой подвижностью носителей [6]. При изменении напряжения на нижнем затворе происходит перемещение шнуров тока по поверхности нанопроволоки [15]. Следует отметить, что взаимное экранирование рядом лежащими проволоками электрического потенциала нижнего затвора приводит к возникновению электрического поля, которое параллельно поверхности подложки [24], что существенным образом помогает перераспределению шнуров тока. Близкорасположенное острие АСМ влияет на сопротивление образца в центральной части нанопроволоки, если острие расположено над шнуром тока, т.е. изменение сопротивления может происходить при определенных значениях затворных напряжений. Таким образом, вводя в рассмотрение шнуры тока, можно достаточно просто описать экспериментальные результаты, представленные на рис. 2а. Энергия когерентности $E_c = \hbar D/l_\varphi^2 \leq 15$ мэВ для всех измеренных значений

V_{BG} , здесь \hbar – постоянная Планка, $D \simeq 1000 \text{ см}^2/\text{с}$ – коэффициент диффузии в данном образце. Характерное напряжение когерентности для нижнего затвора составляет $V_{cBG} = E_c/(e\alpha) \leq 150$ мВ, что подтверждает утверждение, что острие АСМ влияет именно на рассеяние шнуров тока, а не как просто дополнительный рассеиватель, перестраивающий флуктуации сопротивления. В последнем случае совпадение зависимостей $R(V_{BG})$ для различной высоты положения острия АСМ в диапазоне затворных напряжений, превышающих 1 вольт невозможно (см. рис. 2а). Здесь $\alpha = c_{\text{wire-BG}}/c_{\text{total}} \geq 0.1$ – геометрический фактор, $c_{\text{wire-BG}}$ и c_{total} – емкости между затвором и нанопроволокой и полная емкость нанопроволоки.

Слабое изменение магнитного поля приводит к некоторой перестройке положений шнуров тока из-за силы Лоренца [11]. Ларморовский радиус в InN при $B = 15$ мТл составляет 14 нм, и баллистический электрон отклонится на 9 нм, пролетев 270 нм от приконтактной области до центра нанопроволоки. Величина 9 нм представляется разумной оценкой для величины отклонения шнура тока в магнитном поле [11]. Области напряжений по нижнему затвору в которых острие оказывает влияние на зависимость $R(V_{BG})$ при слабом изменении магнитного поля (рис. 2б) должны быть те же, что и в эксперименте по изменению высоты острия (рис. 2а). Две области влияния острия на рис. 2а и б практически совпадают, что подтверждает правильность предложенной модели шнурования тока.

Таким образом, даже если не удастся визуализировать шнурование тока в нанопроволоках InN, тем не менее удастся продемонстрировать наличие шнуров. Данный результат, наряду с работой [18], показывает важность применения техники спектроскопии при исследовании локального влияния острия АСМ на сопротивление исследуемой системы.

Формирование шнуров тока в формально диффузной проволоке представляется нам довольно важным экспериментальным фактом. В работе [31] была предпринята удачная попытка создания квантового хаоса в баллистических образцах. В результате, спектр флуктуаций и зависимость от магнитного поля слаболокализационной квантовой поправки воспроизвели результат диффузного образца в случае билиярда Бунимовича в точном соответствии с теоретической работой [32]. Таким образом билиард Бунимовича может рассматриваться как полностью эргодическая система [31]. Строго говоря, в классическом билиярде Бунимовича введение коэффициента диффузии

не представляется возможным [33]. Круговой билиард, в свою очередь, может рассматриваться как слабоэргодическая система, из-за наличия в нем стабильных траекторий [31]. Если же система находится вблизи перехода металл/диэлектрик, то проводимость прыжковая, и система не является полностью эргодической из-за фрактальной или мультифрактальной структуры волновой функции электронов [34, 35].

Таким образом, в двух предельных случаях, а именно, в баллистическом режиме и в режиме прыжковой проводимости, система не является полностью эргодической (если не были предприняты дополнительные усилия, чтобы ее такой сделать [31]). Вопрос об эргодичности полубаллистических систем был поставлен в работе [36]. Причина возникновения такого вопроса достаточно проста. Возникновение шнуров тока может приводить к формированию устойчивых траекторий даже в случае билиарда Бунимовича или других хаотических билиардов, приводя систему в состояние не полной или слабой эргодичности [36]. Были проведены измерения магнитотранспорта в десятках образцов, включающих билиарды различной формы, изготовленные из 2D гетероструктур с различной подвижностью, а также в нанопроволоках, изготовленных на основе структур GaAs/AlGaAs [37] и n^+ -GaAs [38, 39]. Фрактальное поведение универсальных флуктуаций проводимости было обнаружено во всех измеренных образцах [36]. Таким образом, формирование устойчивых шнуров тока, видимо, оказывает существенное влияние на транспортные свойства баллистических и полубаллистических неинтегрируемых билиардов. Однако фрактальное поведение универсальных флуктуаций проводимости в диффузных проволоках с высокоугловым рассеянием [38, 39] выглядело, некоторым образом, абсурдно. Возможно демонстрация формирования шнуров тока в нанопроволоках InN позволит пролить некоторый свет на данную проблему. Следует отметить, что для определения надежных критериев перехода от слабой эргодичности к полной в мезоскопических системах потребуются существенная дополнительная экспериментальная и теоретическая работа.

Представлены экспериментальные результаты по измерению магнитотранспорта в нанопроволоках InN высокого качества в присутствии проводящего острия АСМ. Наряду с продемонстрированным высоким разрешением при использовании техники SGM были показаны новые особенности в зависимости $R(V_{BG})$, вызванные близкорасположенным острием АСМ. Полученные экспериментальные

результаты объяснены в модели формирования шнуров тока в двумерном электронном газе в нанопроволоках InN. Данные результаты подтверждают существенную роль двумерной цилиндрической поверхности электронной системы в нанопроволоках InN. Данный эффект будет существенно более выражен в нанопроволоках с цилиндрической двумерной электронной системой, но с меньшей концентрацией носителей.

Авторы хотят поблагодарить Кристиана Блемерса, Кристиана Фолька и Томаса Шеперса за изготовление образцов и плодотворные обсуждения экспериментальных результатов, а также Рафаэлли Каралко за выращивание нанопроволок InN.

Данная работа была выполнена в рамках Госзадания ИФТТ РАН.

1. M. A. Topinka, B. J. Leroy, S. E. J. Shaw, R. Fleischmann, E. J. Heller, R. M. Westervelt, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard, *Science* **289**, 2323 (2000).
2. M. A. Topinka, B. J. LeRoy, R. M. Westervelt, S. E. J. Shaw, R. Fleischmann, E. J. Heller, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard, *Nature* **410**, 183 (2001).
3. B. J. LeRoy, A. C. Bleszynski, K. E. Aidala, R. M. Westervelt, A. Kalben, E. J. Heller, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 126801 (2005).
4. A. Pioda, D. Brunner, S. Kicin, T. Ihn, M. Sigrist, A. Fuhrer, K. Ensslin, M. Reinwald, and W. Wegscheider, *Physica E* **32**, 167 (2006).
5. K. E. Aidala, R. E. Parrott, T. Kramer, E. J. Heller, R. M. Westervelt, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, *Nature Phys.* **3**, 464 (2007).
6. M. P. Jura, M. A. Topinka, L. Urban, A. Yazdani, H. Shtrikman, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and D. Goldhaber-Gordon, *Nature Phys.* **3**, 841 (2007).
7. J. Berezovsky and R. M. Westervelt, *Nanotechnology* **21**, 274014 (2010).
8. M. P. Jura, M. Grobis, M. A. Topinka, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and D. Goldhaber-Gordon, *Phys. Rev. B* **82**, 155328 (2010).
9. S. R. Hunt, E. J. Fuller, B. L. Corso, and Ph. G. Collins, *Phys. Rev. B* **85**, 235418 (2012).
10. A. A. Zhukov, Ch. Volk, A. Winden, H. Hardtdegen, and Th. Schäpers, *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 165304 (2014).
11. A. A. Kozikov, D. Weinmann, C. Rössler, T. Ihn, K. Ensslin, C. Reichl, and W. Wegscheider, *New J. Phys.* **15**, 083005 (2013).
12. A. A. Kozikov, C. Rössler, T. Ihn, K. Ensslin, C. Reichl, and W. Wegscheider, *New J. Phys.* **15**, 013056 (2013).

13. R. Steinacher, A.A. Kozikov, C. Rössler, C. Reichl, W. Wegscheider, T. Ihn, and K. Ensslin, *New J. Phys.* **17**, 043043 (2015).
14. S. Bhandari, G.-H. Lee, A. Klales, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Heller, P. Kim, and R.M. Westervelt, *Nano Lett.* **16**, 1690 (2016).
15. R. Steinacher, A.A. Kozikov, C. Rössler, C. Reichl, W. Wegscheider, K. Ensslin, and T. Ihn, *Phys. Rev. B* **93**, 085303 (2016).
16. R. Steinacher, C. Pörtl, T. Krähenmann, A. Hofmann, C. Reichl, W. Zwerger, W. Wegscheider, R. A. Jalabert, K. Ensslin, D. Weinmann, and T. Ihn, *Phys. Rev. B* **98**, 075426 (2018).
17. S. Bhandari, G.-H. Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, Ph. Kim, and R.M. Westervelt, *Nano Lett.* **20**, 4890 (2020).
18. S. Kim, J. Schwenk, D. Walkup, Y. Zeng, F. Ghahari, S. T. Le, M.R. Slot, J. Berwanger, S.R. Blankenship, K. Watanabe, T. Taniguchi, F.J. Giessibl, N.B. Zhitenev, C.R. Dean, and J.A. Stroscio, 2020 cond-mat : 2006.10730.
19. C. Gold, A. Kurzmann, K. Watanabe, T. Taniguchi, K. Ensslin, and Th. Ihn, 2020 cond-mat.mes-hall: 2006.10144.
20. T. Stoica, R.J. Meijers, R. Calarco, T. Richter, E. Sutter, and H. Lüth, *Nano Lett.* **6**, 1541 (2006).
21. R. Calarco and M. Marso, *Appl. Phys. A* **87**, 499 (2007).
22. R. Calarco, *Materials* **5**, 2137 (2012).
23. A. A. Zhukov, *Instrum. Exp. Tech.* **51**, 130 (2008).
24. A. A. Жуков, Ch. Volk, Th. Schapers, *ЖЭТФ* **134**, 116 (2022) [A. A. Zhukova, Ch. Volk, and Th. Schapers, *ЖЭТФ* **134**, 95 (2022)].
25. S. Alagha, H.S. Estévez, Ch. Blömers, T. Stoica, R. Calarco, and Th. Schapers, *J. Appl. Phys.* **108**, 113704 (2010).
26. H. Lu, W.J. Schaff, L.F. Eastman, and C.E. Stutz, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1736 (2003).
27. I. Mahboob, T.D. Veal, L.F.J. Piper, C.F. McConville, H. Lu, W. Schaff, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* **69**, 201307(R) (2004).
28. L. Colakerol, T.D. Veal, H.-K. Jeong, L. Plucinski, A. DeMasi, T. Learmonth, P.-A. Glans, Sh. Wang, Yu. Zhang, L.F.J. Piper, P.H. Jefferson, A. Fedorov, T.-Ch. Chen, T.D. Moustakas, C.F. McConville, and K.E. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 237601 (2006).
29. C.G. van de Walle and D. Segev, *J. Appl. Phys.* **101**, 081704 (2007).
30. Th. Richter, Ch. Blömers, H. Lüth, R. Calarco, M. Indlekofer, M. Marso, and Th. Schapers, *Nano Lett.* **8**, 2834 (2008).
31. C.M. Marcus, A.J. Rimberg, R.M. Westervelt, P.F. Hopkins, and A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 506 (1992).
32. F. Borgonovi, G. Casati, and B. Li, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4744 (1996).
33. P. Bálint and S. Goüezel, *Comm. Math. Phys.* **263**, 461 (2006).
34. B. Huckestein, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 357 (1995).
35. F. Evers and A.D. Mirlin, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1355 (2008).
36. C.A. Marlow, R.P. Taylor, T.P. Martin et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **73**, 195318 (2006).
37. K. Ishibashi, Y. Takagaki, K. Gamo, S. Namba, S. Takaoka, K. Murase, S. Ishida, and Y. Aoyagi, *J. Vac. Sci. Technol. B* **6**, 1952 (1988).
38. K. Ishibashi, K. Nagata, K. Gamo, and S. Namba, *Solid State Commun.* **61**, 385 (1987).
39. R.P. Taylor, M.L. Leadbeater, G.P. Whittington, P.C. Main, L. Eaves, S.P. Beaumont, I. McIntyre, S. Thoms, and C.D.W. Wilkinson, *Surf. Sci.* **196**, 52 (1988).

Возможность контролируемого влияния на атомно-кристаллическую структуру парателлуриата с помощью возбуждения стоячей ультразвуковой волны

Я. А. Элиович^{+*1)}, Е. Н. Овчинникова[×], К. А. Козловская[×], М. Жорнак^{°2)}, Т. Вайгель^{°2)}, К. Лудт^{°2)},
А. Е. Благов^{+*}, В. Е. Дмитриенко⁺, Ю. В. Писаревский^{+*}, М. В. Ковальчук^{+*}

⁺ Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника” РАН, 119333 Москва, Россия

^{*} Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

[×] МГУ им. М. В. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

[°] Технический Университет Горная Академия г. Фрайберга, Институт экспериментальной физики, 09599 Фрайберг, Германия

Поступила в редакцию 7 марта 2022 г.

После переработки 11 марта 2022 г.

Принята к публикации 11 марта 2022 г.

В работе изучается возможность контролируемого изменения атомно-кристаллической и электронной структуры кристалла парателлуриата при возбуждении интенсивных ультразвуковых колебаний. Впервые для этого применен метод резонансной дифракции синхротронного излучения. Экспериментально показано влияние ультразвуковой модуляции, реализованной с помощью стоячей акустической волны, возбуждаемой в высококачественном резонаторе TeO_2 , на структуру запрещенного рентгеновского рефлекса 100.

DOI: 10.31857/S1234567822080055, EDN: fndquy

1. Введение. Напряжения, возникающие в материалах при внешних воздействиях, могут влиять на их структуру и физические свойства [1, 2], в том числе: приводить к фазовым переходам [3–5] или стабилизировать структуру [6], влиять на электронную структуру [7–9] или электронную подвижность [10]. Акустические волны дают возможность создания переменной и контролируемой деформации в материалах [11], и, следовательно, управления электронной структурой и оптическими свойствами [12]. Кристаллические материалы являются ключевым элементом для производства компонент микроэлектроники, радиотехники и акустооптики, при этом соответствующие приборы зачастую работают в условиях различных внешних воздействий, влияющих на их функциональные характеристики [13–19]. Это делает изучение таких материалов и их характеристик в условиях различных внешних воздействий одной из актуальных задач современного материаловедения. Одним из распространенных кристаллических материалов, используемых в том числе в акустооптике, является парателлуриат (TeO_2), исследуемый в настоящей работе [17–20].

Внешние воздействия могут не только выступать как инструмент нагрузки для изучения происходящих в кристалле изменений, но и создавать новые уникальные свойства или даже использоваться для управления различными вторичными параметрами. Пример таких исследований – появление полярной фазы в титанате стронция при воздействии электрического поля [21–24]. В других работах [25, 26] было показано, что стоячие акустические (ультразвуковые) волны в кристаллах не только изменяют параметр решетки кристалла, но также и вызывают перераспределение дефектов в нем. При этом зависимости наблюдаемых структурных изменений от амплитуды ультразвукового сигнала и релаксация наблюдаемых изменений при его отключении могут демонстрировать сложный характер [27]. Для эффективного возбуждения ультразвуковых колебаний используются специальные кристаллы-резонаторы [26], которые позволяют эффективно управлять параметрами дифрагированного рентгеновского пучка, осуществляя как угловую [28], так и спектральную [29] перестройку последнего.

В проведенных ранее работах при изучении новых материалов для изготовления эффективных резонаторов был обнаружен эффект аномального изменения полуширины исследуемого кристалла фто-

¹⁾ e-mail: yan.eliovich@gmail.com

²⁾ M. Zschornak, T. Weigel, L. Christian.

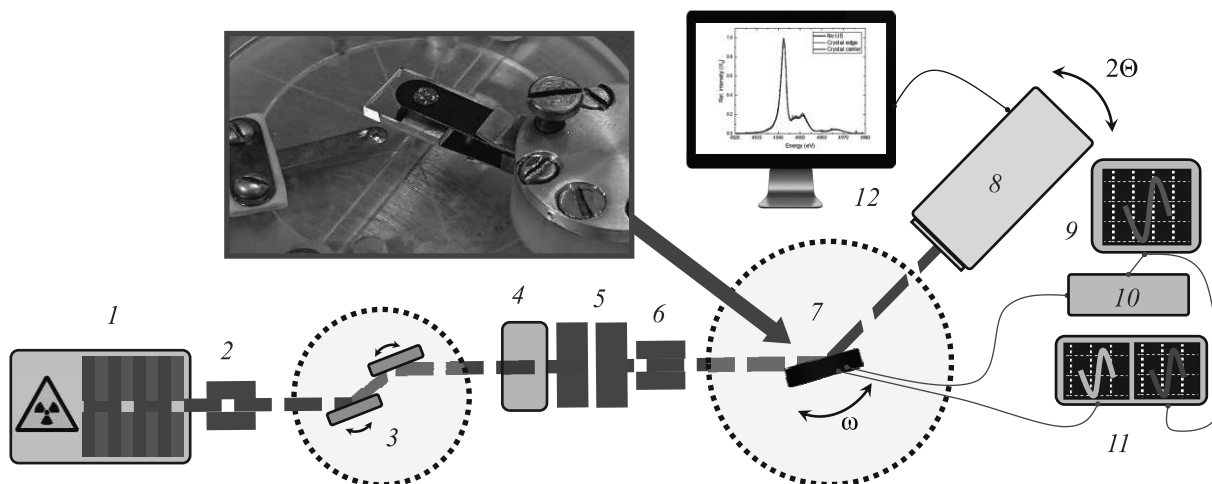


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента на станции P23: 1 – источник излучения; 2, 6 – коллимационные щели; 3 – монохроматор; 4 – фокусировка; 5 – зеркала; 7 – исследуемый резонатор; 8 – детектор; 9 – генератор; 10 – усилитель; 11 – осциллограф; 12 – управляющий ПК

рида лития и парателлурита [27], который свидетельствует о возможности эффективного изменения атомно-кристаллической структуры кристалла с помощью внешнего ультразвукового воздействия, что может быть использовано для придания исследуемому материалу новых свойств и возможностей.

Для рассмотрения этого вопроса были изучены структурные изменения в пьезоэлектрическом кристалле-резонаторе парателлурита при возбуждении ультразвуковых колебаний с помощью рентгеновской дифракции при энергиях, близких к краю поглощения. Особое внимание уделялось влиянию ультразвуковых воздействий на запрещенные рентгеновские рефлекссы: изменение спектральных особенностей последних в условиях ультразвуковой нагрузки свидетельствовало бы об изменении локального окружения атомов и плотности электронных состояний [30].

Ранее при проведении экспериментов с аналогичными кристаллами парателлурита в условиях воздействия электрических полей было показано, что энергетический спектр запрещенных рентгеновских рефлекссов при воздействии электрического поля изменяется незначительно [31]. В свою очередь, ультразвуковые воздействия могут быть более эффективным инструментом для решения поставленной задачи, так как позволяют достигать существенных относительных вариаций параметра решетки $\Delta d/d$, как это было показано в [27].

2. Методика проведения исследований. В качестве образцов для исследований в данной работе были выбраны монолитные высококачественные рентгеноакустические резонаторы, изготовлен-

ные из кристаллов парателлурита. Эксперименты проводились на станции P23 источника синхротронного излучения Petra III (DESY, Гамбург, Германия) при энергиях падающего излучения вблизи L_1 края поглощения теллура 4.94 кэВ. После монохроматора подготовленный рентгеновский пучок попадал на исследуемый образец, закрепленный на специальном рентгеноакустическом держателе, установленном на основном многокружном (5 + 2) гониометре Huber. Отраженный сигнал регистрировался с помощью двухкоординатного детектора Lambda (X-Spectrum Lambda 750K). В детекторе был предусмотрен режим интегрирования регистрируемой интенсивности по определенному угловому диапазону, что позволяло использовать его как обычный сцинтилляционный 0D-детектор для измерения кривых дифракционного отражения (КДО) и оценки степени совершенства структуры исследуемых кристаллов-резонаторов. Принципиальная схема эксперимента представлена на рис. 1.

Исследуемые кристаллы-резонаторы закреплялись на основном гониометре Huber в специальном держателе, обеспечивающим минимальное перекрытие пучка в широком диапазоне настроек экспериментальной схемы, разработанном специально для экспериментов с запрещенными рентгеновскими рефлекссами. Держатель, в свою очередь, располагался на аттачменте, оборудованном X- и Y-подвижками, позволяющими проводить измерения в определенной точке поверхности исследуемого резонатора, что было важным для оценки распределения ультразвуковых деформаций и точного позиционирования образца. Через токопроводящие контакты держа-

теля и систему проводов на кристалл с системы возбуждения и контроля ультразвуковых колебаний подавался электрический сигнал резонансной частоты (165.7 кГц). Система состояла из генератора (Rigol DG1011) и многоканального осциллографа (Voltcraft DSO-1202D), позволяющего отслеживать как исходный контрольный сигнал, так и отклик с исследуемого резонатора, осуществляя тем самым точную подстройку значения резонансной частоты. По результатам предварительных измерений, включающих оценку их амплитудно-частотных характеристик (АЧХ), для дальнейших экспериментов было отобрано два кристалла-резонатора, отличающихся наибольшей эффективностью возбуждения ультразвуковых колебаний. Для этих образцов измерялись зависимости распределения ультразвуковых деформаций вдоль поверхности исследуемого кристалла, а также оценивалось предельное уширение интегральных кривых дифракционного отражения, полученных при воздействии ультразвукового сигнала (пример показан на рис. 2). Их уширение затем можно было пересчитать в относительное изменение параметра решетки $\Delta d/d$, которое использовалось при дальнейших расчетах.

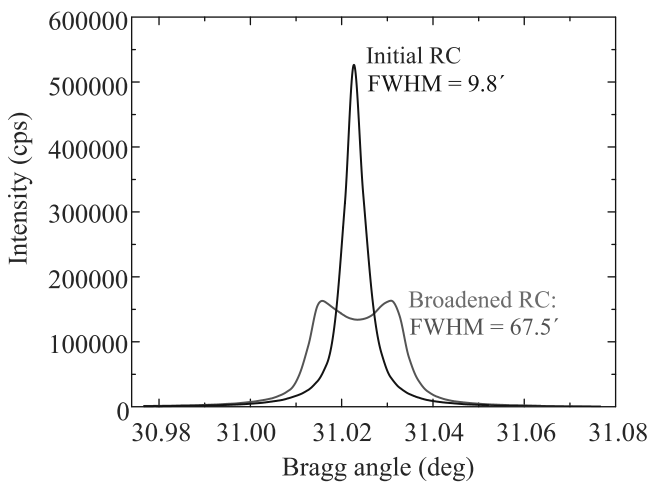


Рис. 2. (Цветной онлайн) Демонстрация уширения КДО разрешенного рентгеновского рефлекса 200 для одного из отобранных резонаторов при воздействии ультразвукового сигнала, напряжение на кристалле 30 В, уширение примерно в 7 раз относительно исходной КДО

Из рисунка 2 хорошо видно, что в результате ультразвукового воздействия наблюдается значительное уширение исходной КДО (вплоть до 70 угл. с).

Ключевой задачей работы было изучение влияния ультразвуковой модуляции, реализованной с помощью стоячей акустической волны, на кристалли-

ческую структуру исследуемого резонатора TeO_2 на примере запрещенного рентгеновского рефлекса 100. Проявление указанного рефлекса возможно в случае резонансной рентгеновской дифракции близ края поглощения теллура (4.9397 кэВ) благодаря появлению диполь-дипольного резонансного вклада в атомный фактор теллура.

Измерения проводились следующим образом. После предварительной настройки экспериментальной схемы и тестирования резонаторов на разрешенном рентгеновском рефлексе 200 экспериментальная схема юстировалась на запрещенный рефлекс 100, при этом из-за особенностей синхротронного пучка проводилось ослабление гармоники более высокого порядка, вносящей существенный вклад в наблюдаемую картину. Для этого оптический стол монохроматора был поднят относительно своего нормального положения на 0.6 мм, что дало возможность “вырезать” из спектра падающего на образец излучения гармонику с помощью системы коллиматоров, установленных после монохроматора. Это позволило проводить измерения на существенно более слабом запрещенном рентгеновском рефлексе.

В такой конфигурации измерялись энергетические спектры запрещенного рентгеновского рефлекса – зависимости интегральной интенсивности от энергии излучения в районе края поглощения теллура. Для большей наглядности спектры измерялись в различных точках поверхности кристалла – с минимальной и максимальной ультразвуковой деформацией, в соответствии с распределением, полученным при первичном тестировании резонаторов.

3. Экспериментальные результаты и их обсуждение. После проведения подготовительных измерений с отобранными кристаллами резонаторами парателлурита на разрешенном рентгеновском рефлексе 200 (угол Брэгга 31.083°) экспериментальная схема была настроена на запрещенное рентгеновское отражение 100 (угол Брэгга 15.123°), где проводились финальные измерения.

В процессе измерений энергетического спектра запрещенного рефлекса 100 было показано, что ультразвук действительно оказывает влияние на тонкую структуру спектра (рис. 3), причем степень этого влияния существенно отличается при измерениях в различных точках кристалла, промодулированно-стоячей акустической волной – с минимальной (на краю кристалла) и максимальной ультразвуковой деформацией (в центре рентгенооптической части).

Из рисунка 3 видно, что акустическая волна сильно влияет как на интенсивность, так и на форму энергетического спектра запрещенного отраже-

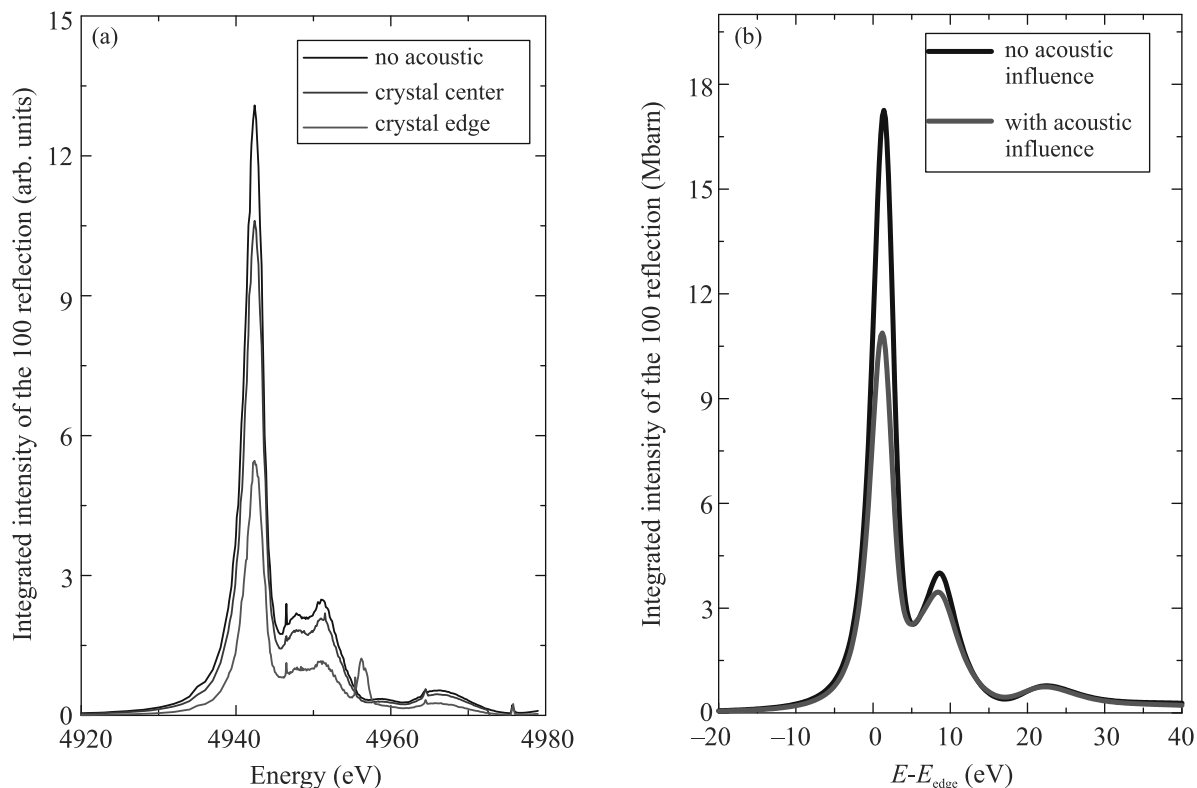


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Энергетический спектр запрещенного рентгеновского рефлекса 100 в районе края поглощения теллура: без звука (черная кривая), на краю кристалла (красная кривая) и в центре кристалла (синяя кривая); (б) – пример рассчитанного спектра отражения 100 без акустического воздействия и с учетом деформации вследствие акустического воздействия

ния. Кроме того, возникает небольшой сдвиг всей кривой. Для того, чтобы этот сдвиг, а также изменение спектральной формы стало более заметным, на рис. 4 представлены центральная и правая части спектра, нормированные на величину максимальной интенсивности.

Хорошо видно, что тонкая структура спектра, а также возникающий энергетический сдвиг не только изменяются при включении ультразвукового сигнала, но и зависят от выбранной точки поверхности кристалла – то есть от градиента ультразвуковой деформации в исследуемом резонаторе. Наблюдаемое изменение спектра зависит от относительных смещений атомов. Хотя в центре кристалла возникающая ультразвуковая деформация максимальна, но она однородна, тогда как на краях ее градиент, наоборот, максимален. Это приводит к тому, что влияние ультразвука становится даже более выраженным на краю кристалла, как это показано на рис. 3 и 4. Выполненные квантовомеханические расчеты атомных смещений, возникающих вследствие деформации, связанной с акустическим воздействием, и последующие расчеты энергетической структуры спек-

тров запрещенного отражения хорошо описывают наблюдаемый эффект и свидетельствуют о том, что меняется также электронная структура, в том числе, плотность электронных состояний, что может проявляться в изменении оптических характеристик. Пример такого расчета приведен на рис. 3б. Детальное описание таких расчетов составит предмет отдельной публикации.

Наблюдаемый при ультразвуковой деформации эффект существенно превосходит эффект от влияния электрических полей, который изучался в аналогичных экспериментах [31]. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что ультразвуковое воздействие на кристалл парателлурита, действительно, может выступать в качестве эффективного инструмента для контролируемого изменения атомно-кристаллической и электронной структуры. Исследования в данном направлении продолжаются, в частности, изучается влияние ультразвуковой деформации на энергетические спектры других рентгеновских рефлексов, в том числе разрешенных. Также проводится работа по выделению зависимости изменений энергетических спектров отражений от фазы

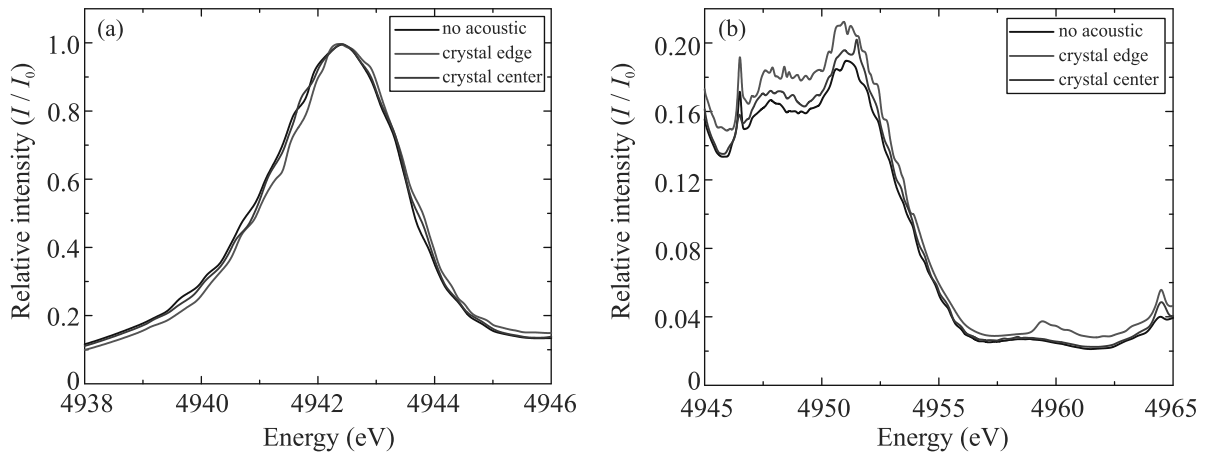


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Центральная часть энергетического спектра отражения 100 в парателлуриде; (б) – тонкая структура в правой части спектра отражения 100. Черные кривые соответствуют спектрам без звука, красные – спектрам на краю кристалла, синие – в центре кристалла

ультразвукового сигнала с помощью системы стробоскопической регистрации.

4. Заключение. В эксперименте, выполненном на станции P23 синхротрона PETRA III, были измерены энергетические спектры запрещенного рентгеновского рефлекса 100 в кристалле-резонаторе парателлурида TeO_2 при энергиях падающего излучения вблизи L_1 края поглощения теллура. Измерения проводились в различных точках поверхности исследуемых резонаторов, отличающихся величиной ультразвуковой деформации.

Показано, что: 1) ультразвуковое воздействие, реализованное в виде стоячей акустической волны, существенно влияет на интенсивность и тонкую структуру энергетического спектра запрещенного рефлекса, а также приводит к небольшому энергетическому сдвигу; 2) наблюдаемые изменения существенно зависят от выбора точки на поверхности исследуемого резонатора в соответствии с градиентом возникающей в кристалле ультразвуковой деформации; 3) возникающие изменения являются обратимыми. Таким образом, можно говорить об управляемых изменениях атомной, кристаллической и электронной структуры кристалла парателлурида.

Авторы работы выражают благодарность DESY (Гамбург, Германия), члену Ассоциации Гельмгольца HGF, в частности, лично Д. В. Новикову и М. Нентвич, за предоставление экспериментального оборудования и помощь при проведении измерений.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части разра-

ботки методик проведения экспериментов, а также при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Немецкого научно-исследовательского сообщества в рамках научного проекта Российского фонда фундаментальных исследований # 19-52-12029 ННИО_а в сотрудничестве с DFG (грант DFG 409743569, ZS 120/1-1) в части изучения особенностей исследуемых резонаторов и их подготовки к проведению экспериментов.

1. H.-W. Chen, C. Li, C.-H. Ma, Y.-H. Chuand, and H.-L. Liu, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 8908 (2021).
2. Y. Kim, R. Sangkyun, and J. Hyoungjeen, *RSC Advances* **9**, 2645 (2019).
3. M. C. Weber, M. Guennou, N. Dix, D. Pesquera, F. Sánchez, G. Herranz, J. Fontcuberta, L. López-Conesa, S. Estradé, F. Peiró, J. Iñiguez, and J. Kreisel, *Phys. Rev. B* **94**, 014118 (2016).
4. J. Schwarzkopf, M. Schmidbauer, T. Remmele, A. Duk, A. Kwasniewski, S. Bin Anooz, A. Devi, and R. Fornari, *J. Appl. Crystallogr.* **45**, 1015 (2012).
5. S.-Q. Wu, S. C. Lu Lu, M. Liu, X.-W. Jin, S.-D. Cheng, S.-B. Mi, *Sci. Rep.* **8**, 1 (2018).
6. N. F. Quackenbush, H. Paik, M. J. Wahila et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **94**, 085105 (2016).
7. J. Hwang, Z. Feng, N. Charle, X. R. Wang, D. Lee, K. A. Stoerzinger, S. Muy, R. R. Rao, D. Lee, R. Jacobs, D. Morgan, and Y. Shao-Horn, *Mater. Today* **31**, 100 (2019).
8. A. Visibile, R. B. Wang, A. Vertova, S. Rondinini, A. Minguzzi, E. Ahlberg, and M. Busch, *Chem. Mater.* **31**, 4787 (2019).

9. P. Schley, R. Goldhahn, G. Gobsch, M. Feneberg, K. Thonke, X. Wang, and A. Yoshikawa, *Phys. Status Solidi (B)* **246**, 1177 (2009).
10. B. Jalan, S. J. Allen, G. E. Beltz, P. Moetakef, and S. Stemmer, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 132102 (2011).
11. S. Uday and S. Adenwalla, *Nanotechnology* **26**, 255707 (2015).
12. Q. Ma, G. Ren, K. Xu, and J. Z. Ou, *Advanced Opt. Mater.* **9**, 2001313 (2021).
13. J. Ward and S. Valle, *Fiber Lasers and Glass Photonics: Materials through Applications* **10683**, 1068327 (2018).
14. C. Zhang, H. Wang, Z. Zhang, J. Yuan, L. Shi, Z. Sheng, and X. Zhang, *Opt. Express* **26**, 1049 (2018).
15. A. Machikhin, A. Gorevoy, V. Batshev, and V. Pozhar, *J. Opt.* **23**, 125607 (2021).
16. O. I. Korablev, D. A. Belyaev, Y. S. Dobrolenskiy, A. Y. Trokhimovskiy, and Y. K. Kalinnikov, *Appl. Opt.* **57**, 103 (2018).
17. S. N. Antonov, *Instruments and Experimental Techniques* **62**, 823 (2019).
18. S. N. Antonov, *Instruments and Experimental Techniques* **62**, 386 (2019).
19. G. Komandin, V. Nozdrin, S. Chuchupal, V. Lomonov, Y. Pisarevskii, O. Porodinkov, and I. Spektor, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53**, 49 (2020).
20. V. M. Epikhin, M. M. Mazur, A. V. Ryabiniin, P. V. Kamaushkin, and L. I. Mazur, *J. Phys. Conf. Ser.* **2127**, 012037 (2021).
21. J. Hanzig, M. Zschornak, F. Hanzig, E. Mehner, H. Stöcker, B. Abendroth, C. Röder, A. Talkenberger, G. Schreiber, D. Rafaja, S. Gemming, and D. C. Meyer, *Phys. Rev. B* **88**, 024104 (2013).
22. H. Stöcker, M. Zschornak, T. Leisegang, I. Shakhverdova, S. Gemming, and D. C. Meyer, *Cryst. Res. Technol* **45**, 13 (2010).
23. C. Richter, M. Zschornak, D. Novikov, E. Mehner, M. Nentwich, J. Hanzig, S. Gorfman, and D. C. Meyer, *Nat. Commun.* **9**, 178 (2018).
24. C. Ludt, E. Ovchinnikova, A. Kulikov, D. Novikov, S. Gemming, D. C. Meyer, and M. Zschornak, *Crystals* **11**, 693 (2021).
25. A. E. Blagov, M. V. Kovalchuk, V. G. Kohn, V. V. Lider, and Yu. V. Pisarevskii, *ЖЭТФ* **101**, 770 (2005).
26. А. Е. Благов, А. Н. Даринский, М. В. Ковальчук, Ю. В. Писаревский, П. А. Просеков, А. В. Таргонский, *Акустический журнал* **59**, 561 (2013).
27. А. Е. Благов, Ю. В. Писаревский, А. В. Таргонский, Я. А. Элиович, М. В. Ковальчук, *Физика твердого тела* **59**, 947 (2017).
28. А. Е. Благов, П. А. Просеков, А. В. Таргонский, Я. А. Элиович, *Кристаллография* **60**, 189 (2015).
29. А. Е. Благов, Ю. В. Писаревский, П. А. Просеков, А. В. Таргонский, Я. А. Элиович, А. И. Проценко, М. В. Ковальчук, *Кристаллография* **62**, 870 (2017).
30. Г. Т. Мулявко, Е. Н. Овчинникова, А. П. Орешко, В. Е. Дмитриенко, Э. Х. Мухамеджанов, *Кристаллография* **57**, 22 (2012).
31. E. Ovchinnikova, D. Novikov, M. Zschornak, A. Kulikov, K. Kozlovskaya, V. Dmitrienko, A. Oreshko, A. E. Blagov, E. Mukhamedzhanov, N. Marchenkov, M. Borisov, A. Khadiev, A. Petrenko, and Y. Pisarevsky, *Crystals* **10**, 719 (2020).

Quantum turbulence and Planckian dissipation

G. E. Volovik¹⁾

Low Temperature Laboratory, Aalto University, P.O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland

Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 3 March 2022

Resubmitted 13 March 2022

Accepted 15 March 2022

DOI: 10.31857/S1234567822080067, EDN: fnewwm

The dissipation is called Planckian, when the relaxation time τ is comparable with \hbar/T , see e.g. [1–3] and criticism in [4]. In principle, the other types of dissipation can be also called Planckian, when the relaxation time τ is comparable with the other quantum time scales. Then, in general, the Planckian dissipation takes place, when the time scales related to dissipation (Thouless time [5], elastic scattering time τ_{el} , inelastic scattering time τ_{inel} , spin-relaxation time, etc.) are compared with the characteristic energy scale: temperature T , kinetic energy per particle, gap in the energy spectrum, interlevel distance ΔE in mesoscopic systems and in the vortex core, etc. We consider the case, when \hbar/τ becomes comparable with the interlevel distance in the core of vortices [6]. In this case the transition from super-Planckian to the sub-Planckian dissipation marks the onset of the vortex turbulence in superconductors and fermionic superfluids [7, 8].

In the weak-coupling BCS regime, where the gap $\Delta \ll E_F$, the vortex core contains the chiral branch of the discrete levels. These Caroli-de Gennes-Matricon levels are quantized with either $E_n = (n + 1/2) \Delta E$ or $E_n = n \Delta E$ [9]. In the latter case the core contains the Majorana fermions [9–11]. The scattering leads to the broadening of the core levels. If the broadening \hbar/τ becomes comparable with or larger than the minigap ΔE , the energy levels overlap, and the chiral branch becomes continuous. This allows the spectral flow from the negative energy states to the positive energy states, which leads to the spectral flow force acting on the vortex [12]. This phenomenon represents the analog of the axial anomaly. The analogy becomes exact in case of continuous vortices (skyrmions) in $^3\text{He-A}$ with Weyl fermionic quasiparticles, where the spectral flow is governed by the Adler–Bell–Jackiw anomaly equation [13]. The spectral flow is the important ingredient of the vortex dynam-

ics experimentally studied in detail in the fully gapped $^3\text{He-B}$ and in the chiral $^3\text{He-A}$ [13, 14].

The coarse-grained hydrodynamic equation for the velocity of the superfluid component is:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \nabla \mu = \mathbf{v}_s \times \boldsymbol{\omega}_s - \alpha' (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n) \times \boldsymbol{\omega}_s + \alpha \hat{\boldsymbol{\omega}}_s \times [\boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n)], \quad \boldsymbol{\omega}_s = \nabla \times \mathbf{v}_s, \quad (1)$$

where \mathbf{v}_s and \mathbf{v}_n are the superfluid and normal velocities correspondingly, and $\hat{\boldsymbol{\omega}}_s$ is the unit vector of superfluid vorticity $\boldsymbol{\omega}_s$. The first term in the rhs of Eq. (1) comes from the conventional Magnus force acting on vortices. The second term with the parameter α' is also the reactive (nondissipative) force, but it comes from the effect of the chiral anomaly. The third term is the friction force acting on quantized vortices, when they move with respect to the normal bath.

As distinct from the turbulence in classical liquids the turbulence in the two-fluid hydrodynamics is described by 3 Reynolds numbers. One Reynolds number describes the dynamics of the normal component. In ^3He due to the high viscosity of the normal component, its Reynolds number is small and the normal flow is laminar. The normal component is typically at rest, i.e. $\mathbf{v}_n = 0$. Then the superfluid dynamics in Eq. (1) contains two dimensionless parameters:

$$1 - \alpha' = \frac{\omega_0^2 \tau^2}{1 + \omega_0^2 \tau^2} \tanh \frac{\Delta}{2T}, \quad (2)$$

$$\alpha = \frac{\omega_0 \tau}{1 + \omega_0^2 \tau^2} \tanh \frac{\Delta}{2T}, \quad (3)$$

where $\hbar \omega_0 = \Delta E$ is the minigap.

The velocity independent superfluid Reynolds number – the ratio between the reactive and dissipative terms – has the direct relation to the Planck dissipation:

$$\text{Re}_v = \frac{1 - \alpha'}{\alpha} = \frac{\Delta E}{\hbar/\tau}. \quad (4)$$

¹⁾e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

In the regime $Re_v < 1$ the spectral flow along the core levels becomes allowed, and in the limit $Re_v \ll 1$ the Kopnin spectral force almost completely compensates the conventional Magnus force. In this regime, the dissipation wins over the combined reactive force, and this prevents the turbulence. When $Re_v > 1$, the energy levels become isolated from each other, the spectral flow is suppressed, the Magnus force wins over dissipation giving rise to the quantum turbulence.

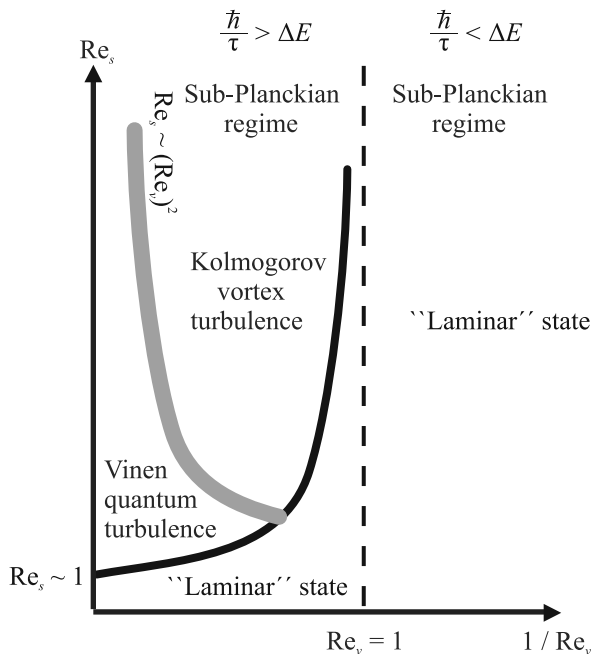


Fig. 1. Phase diagram of the vortex turbulence from [15] in terms of two Planckian parameters, which serve as the quantum Reynolds numbers, Re_v and Re_s , where $1/Re_v = (\hbar/\tau)/\Delta E$ and $1/Re_s = \hbar/(mUR)$

The phase diagram of vortex turbulence in Fig. 1 is determined by superfluid Reynolds numbers, Re_v and Re_s , both can be called Planckian. The Reynolds number Re_s is $Re_s = UR/(\hbar/m)$, where U and R are the parameters of the flow at large scale. This superfluid Reynolds number looks similar to the Reynolds number in classical liquids, $Re = UR/\nu$, but instead of the kinematic viscosity ν the quantum quantity \hbar/m enters. At $T \sim 0.6T_c$, the transition from the laminar flow to the vortex turbulence takes place, which follows both from experiment and theoretical calculations. Below this transition the vortex turbulence is described by the classical-like Kolmogorov cascade. At very low temperature, when $Re_s > Re_v^2$, the dynamics of the individual vortices becomes important. It is the Vinen turbulence [16], which is characterized by the single length scale – the distance between vortices.

In conclusion, the notion of the Planckian dissipation can be extended to the system of the Caroli-de Gennes-

Matricon energy levels in the vortex core of superconductors and fermionic superfluids. In this approach the Planck dissipation takes place when the scattering time τ is comparable with the Heisenberg time $t_H = \hbar/\Delta E$. The spectral flow of levels along the chiral branch of the Caroli-de Gennes-Matricon states takes place in the super-Planckian region, i.e. when $\tau < \hbar/\Delta E$, and is absent in the sub-Planckian region, $\tau > \hbar/\Delta E$. As a result, the Planck dissipation separates the laminar flow of the superfluid liquid at $\tau < \hbar/\Delta E$ and the vortex turbulence at $\tau > \hbar/\Delta E$.

This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement # 694248).

This is an excerpt of the article “Quantum turbulence and Planckian dissipation”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022100344

1. J. Zaanen, arXiv:2110.00961.
2. J. Zaanen, SciPost Phys. **6**, 061 (2019).
3. A. Ataei, A. Gourgout, G. Grissonnanche et al. (Collaboration), arXiv:2203.05035.
4. M.V. Sadovskii, Phys.-Uspekhi **64**, 175 (2021).
5. D.J. Thouless, Phys. Rep. **13**, 93 (1974).
6. C. Caroli, P. G. de Gennes, and J. Matricon, Phys. Lett. **9**, 307 (1964).
7. A.P. Finne, T. Araki, R. Blaauwgeers, V.B. Eltsov, N.B. Kopnin, M. Krusius, L. Skrbek, M. Tsubota, and G.E. Volovik, Nature **424**, 1022 (2003).
8. A.P. Finne, V.B. Eltsov, R. Hanninen, N.B. Kopnin, J. Kopu, M. Krusius, M. Tsubota, and G.E. Volovik, Rep. Prog. Phys. **69**, 3157 (2006).
9. G.E. Volovik, JETP Lett. **70**, 609 (1999).
10. N.B. Kopnin and M. M. Salomaa, Phys. Rev. B **44**, 9667 (1991).
11. D.A. Ivanov, Phys. Rev. Lett. **86**, 268 (2001).
12. N.B. Kopnin, G.E. Volovik, and Ü. Parts, Europhys. Lett. **32**, 651 (1995).
13. T.D.C. Bevan, A.J. Manninen, J.B. Cook, J.R. Hook, H.E. Hall, T. Vachaspati, and G.E. Volovik, Nature **386**, 689 (1997).
14. T.D.C. Bevan, A.J. Manninen, J.B. Cook, H. Alles, J.R. Hook, and H.E. Hall, J. Low Temp. Phys. **109**, 423 (1997).
15. G.E. Volovik, JETP Lett. **78**, 533 (2003).
16. W.F. Vinen, *Progress in Low Temperature Physics III*, ed. by C.J. Gorter, Elsevier, Amsterdam (1961), v. III, p. 1.

Вычисление основных состояний спиновых стекол с использованием ограниченной машины Больцмана

А. О. Король^{+,*}, В. Ю. Капитан^{+,*1)}, А. В. Пержу⁺, М. А. Падалко^{+,*}, Д. Ю. Капитан^{+,*}, Р. А. Вологовский^{+,*},
Е. В. Васильев^{+,*}, А. Е. Рыбин^{+,*}, П. А. Овчинников⁺, П. Д. Андриющенко[×], А. Г. Макаров^{+,*},
Ю. А. Шевченко^{+,*}, И. Г. Ильюшин⁺, К. С. Солдатов^{+,*}

⁺Дальневосточный федеральный университет, 690922 Владивосток, Россия

^{*}Институт прикладной математики Дальневосточного отделения РАН, 690041 Владивосток, Россия

[×]Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 февраля 2022 г.

После переработки 17 марта 2022 г.

Принята к публикации 17 марта 2022 г.

В работе представлен нейросетевой метод вычисления конфигураций и значений энергий основных состояний модели спинового стекла Эдвардса–Андерсона с периодическими граничными условиями. Наблюдается макроскопическое вырождение основных состояний и нарушение трансляционной симметрии. Достоверность результатов подтверждается сравнением с данными точных и приближенных вычислительных методов.

DOI: 10.31857/S1234567822080079, EDN: fnjsdl

Введение. Спиновое стекло характеризуется наличием беспорядка и фрустрации, которые возникают из-за равного количества положительных и отрицательных взаимодействий в системе [1]. Понятие фрустрации определяется как невозможность удовлетворения всех совокупных взаимодействий в системе из-за конкуренции между ними [2]. Решение задач минимизации энергии и вычисления конфигураций основного состояния в моделях спинового стекла связано с серьезными трудностями теоретического анализа и численных расчетов. Эти задачи относятся к классу недетерминистически полиномиальных задач (NP-класс) [3]. По этим причинам создание эффективных алгоритмов для вычисления низкоэнергетических состояний является одной из определяющих проблем в теории фрустрированного магнетизма.

Методы Монте-Карло – группа математических методов вероятностного расчета для исследования интегральных характеристик систем. Данные методы позволяют исследовать системы взаимодействующих многих тел, для которых невозможно выполнить генерацию конфигураций, обладающих минимальной энергией, из-за сложности и размера пространства состояний, поэтому используют приближенные методы [4]. Монте-Карло алгоритмы не

только давно и широко используются для исследования различных физических систем [5–9], но и продолжают активно развиваться и совершенствоваться [10–13], благодаря развитию вычислительной техники.

Несмотря на то, что методы Монте-Карло являются часто используемыми инструментами при исследовании классических систем, вблизи критических точек эффективность резко снижается и возникает так называемое “критическое замедление”, и движение системы в фазовом пространстве становится очень медленным. Одним из алгоритмов, позволяющих преодолеть критическое замедление, является гибридный мультиспиновый метод, который был представлен и подробно описан в работе [12].

В последнее время в физике начали применяться новые вычислительные подходы, такие как машинное обучение и нейронные сети [14, 15]. Можно выделить два основных подхода к применению нейронных сетей для исследования спиновых систем. Первый подход является альтернативой исследованию термодинамических средних физических величин, когда изучение спиновых конфигураций состоит в классификации неупорядоченных и упорядоченных фаз с использованием алгоритмов машинного обучения. Использование такого подхода сводит проблему определения фаз и фазового перехода к задаче классификации [16–19].

¹⁾e-mail: kapitan.vyu@dvvfu.ru

Второй подход заключается в использовании нейронных сетей, например, машины Больцмана [20–22] или авторегрессионной нейронной сети [23] для предсказания спиновых конфигураций с наименьшей энергией.

В данной работе была рассмотрена модель спинового стекла Эдвардса–Андерсона [24] на квадратной решетке спинов Изинга с бимодальным распределением связей и периодическими граничными условиями. Для численных расчетов использовалась комбинация гибридного мультиспинового метода (от англ. Hybrid Multispin Method (HMM)) [12] и ограниченной машины Больцмана (от англ. Restricted Boltzmann Machine (RBM)) для предсказания основных энергетических состояний в модели спинового стекла Эдвардса–Андерсона.

Для вычисления основных состояний мы использовали данные гибридного мультиспинового метода для обучения нейронной сети и прогнозирования состояния спинового стекла с более низким уровнем энергии, чем в наборах обучающих данных. На примере небольших спиновых систем (4×4 и 6×6) были проверены результаты работы нейронной сети и проведено сравнение с результатами точного решения, рассчитанного методом исчерпывающего перечисления (от англ. Exhaustive Enumeration Method (EEM)). Также для проверки был использован алгоритм, основанный на методе трансфер-матриц (от англ. Transfer-Matrix Method (TMM)) [25, 26] для систем до 20×20 спинов Изинга.

Модель спинового стекла Эдвардса–Андерсона. Эдвардс и Андерсон в 1975 г. в работе [24] предложили модель спинового стекла из $L \times L$ спинов Изинга $S_i = \pm 1$, расположенных в узлах квадратной решетки, с линейным размером L , периодическими граничными условиями и Гамильтонианом:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \tag{1}$$

где S_i, S_j – спины Изинга в решетке, $\langle i, j \rangle$ означает, что суммирование идет только по ближайшим соседям; J_{ij} – связь между ближайшими соседними спинами i и j . Важно отметить, что перед началом расчетов определяются все связи, и после этого они остаются неизменными до конца исследования.

Одной из основных характеристик спинового стекла является длительное время релаксации. При низких температурах релаксация системы становится медленной, и трудно достичь равновесия даже для систем небольшого количества частиц, в том числе в численных экспериментах, поэтому применя-

ются различные модификации приближенных методов [27].

Ограниченная машина Больцмана. Ограниченная машина Больцмана – это стохастическая, генеративная модель нейронной сети, которая использует идею “энергии” в качестве метрики для измерения качества обучения [21].

Как видно на рис. 1, ограниченная машина Больцмана состоит из одного видимого слоя нейронов (v_1, \dots, v_n) , одного скрытого слоя (h_1, \dots, h_m) и соответствующих коэффициентов смещения a и b .

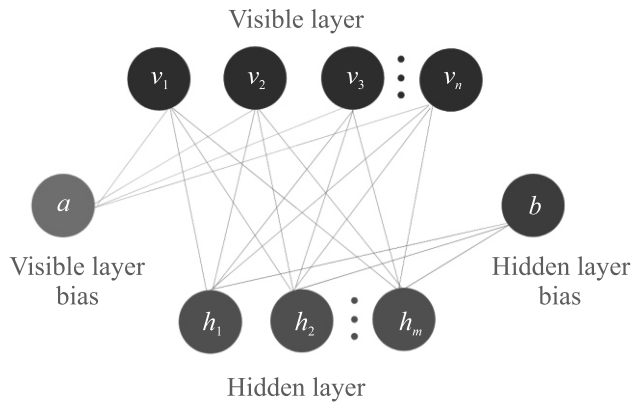


Рис. 1. (Цветной онлайн) Архитектура ограниченной машины Больцмана

Связи между слоями задаются с помощью матрицы весов $W = (w_{i,j})$ размера $m \times n$ и коэффициентов смещения a и b .

Изначально связи и коэффициенты смещения инициализируются случайными значениями. В процессе обучения они меняются по алгоритму, описанному ниже. Входными данными для нейронной сети являются конфигурации спинового стекла и количество нейронов видимого слоя соответствует количеству спинов. Для обучения сети используются прямой (от видимого слоя к скрытому) и обратный (от скрытого слоя к видимому) проходы по нейронам.

В первую эпоху обучения на видимый слой сети подаются входные данные v^0 . При прямом проходе нейроны видимого слоя обрабатывают эти данные и передают результат нейронам скрытого слоя h^0 :

$$h^0 \sim p(h|v^0) \rightarrow p(h_j = 1|\mathbf{v}) = \tag{2}$$

$$\sigma \left(b_j + \sum_{i=1}^m w_{i,j} v_i \right), \tag{3}$$

где σ – сигмоидная функция активации.

При обратном проходе обработанные в скрытом слое данные подаются обратно на видимый слой v^1 :

$$v^1 \sim p(v|h^0) \rightarrow p(v_i = 1|\mathbf{h}) = \sigma \left(a_i + \sum_{j=1}^n w_{i,j} h_j \right). \quad (4)$$

Для контроля переобучения сети сравниваются величины свободной энергии видимого слоя $F(v)$ до прямого и обратного проходов и после них [28]:

$$F(v) = - \sum_i v_i a_i - \sum_j \log(1 + e^{x_j}), \quad (5)$$

$$\mathcal{L} = \sum_{v^1} F(v^1) - \sum_{v^0} F(v^0), \quad (6)$$

где $x_j = b_j + \sum_i v_i w_i$ – входные данные для скрытого нейрона j , \mathcal{L} – функция потерь (от англ. Loss Function).

Если модель не переобучается – значение функции потерь \mathcal{L} должно быть примерно равно нулю. В противном случае – средняя свободная энергия видимого слоя увеличивается после прямого и обратного проходов и эта разница представляет собой величину переобучения. На рисунке 2 представлены значения функции потерь \mathcal{L} в зависимости от номера эпохи обучения для систем различного числа спинов.

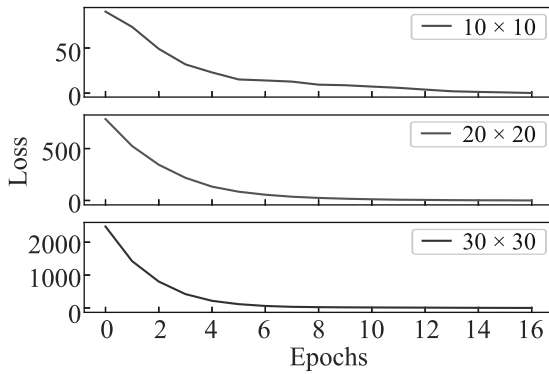


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость значения функции потерь при обучении от порядкового номера эпохи

Далее обновляются значения весов и коэффициенты смещения:

$$\Delta W = v^0 [p(h = 1|v^0)]^T - v^1 [p(h = 1|v^1)]^T, \quad (7)$$

$$\Delta a = v^0 - v^1, \quad (8)$$

$$\Delta b = p(h = 1|v^0) - p(h = 1|v^1), \quad (9)$$

$$W = W + \alpha \Delta W, \quad (10)$$

$$a = a + \alpha \Delta a, \quad (11)$$

$$b = b + \alpha \Delta b, \quad (12)$$

где α – скорость обучения.

Описанный выше способ обучения сети называется алгоритмом контрастной дивергенции с выборкой по Гиббсу [29].

Нейросеть не различает связи и спины, поэтому для обучения используются только спины, значения которых масштабируются в диапазоне $[0; 1] (-1 \rightarrow 0, 1 \rightarrow 1)$. Решетка спинов представляется в виде бинарного одномерного массива длины $L \times L$ (где L – размер системы) и подается на вход сети.

Результаты и обсуждение. Для обучения нейронной сети и подтверждения результатов, методом исчерпывающего перечисления были сгенерированы системы спиновых стекол 4×4 и 6×6 спинов с бимодальным распределением связей J_{ij} . Для обучения выбирались 400 конфигураций из выбранных диапазонов энергий на один спин $[1.5; 1.0]$ и $[-0.5; -0.75]$ для системы 4×4 , $[1.33; 1.22]$ и $[-0.67; -0.89]$ для системы 6×6 . Это было сделано с целью независимого сравнения полученных результатов ограниченной машины Больцмана для каждой системы. Примеры систем для обучения 4×4 ($E = -0.5$) и 6×6 ($E = -0.89$) показаны на рис. 3. Для численных расчетов использовались безразмерные величины в $|J|$ единицах.

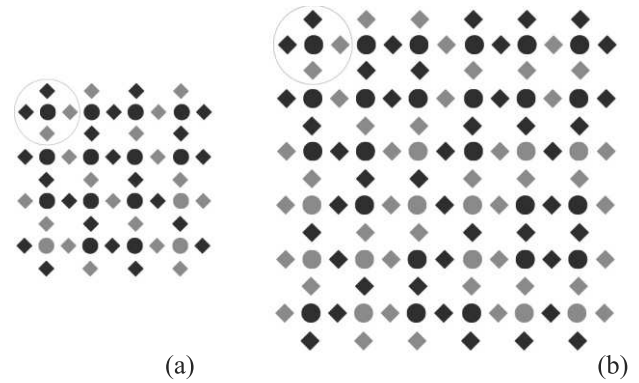


Рис. 3. (Цветной онлайн) Примеры систем для обучения: (а) – 4×4 ($E = -0.5$); (б) – 6×6 ($E = -0.89$) с заданным бимодальным распределением связей. Цвет спинов (круг) или связей (ромб) зависит от координаты z между спином вниз $S = -1$ или $J = -1$ (синий) и вверх $S = +1$ или $J = 1$ (оранжевый)

Исследование систем относительно небольшого числа спинов 4×4 , 6×6 с помощью метода исчерпывающего перечисления позволило получить точные решения. Энергии и конфигурации основных состояний систем относительно большого числа спинов были рассчитаны методами гибридного Монте-Карло и трансфер-матриц, см. табл. 1.

Таблица 1. Сравнение результатов, полученных различными вычислительными подходами

Количество спинов	EEM	TMM	HMM	RBM
	E_{\min}	E_{\min}	E_{\min}	E_{\min}
4×4	-1.5	-1.5	-	-1.5
6×6	-1.3	-1.3	-	-1.3
10×10	-	-1.4	-1.4	-1.4
20×20	-	-1.38	-1.34	-1.38
30×30	-	-	-1.334	-1.342

Различные вычислительные методы показали одинаковые результаты для системы 4×4 : минимальная энергия составила $E_{\min} = -1.5$, кратность вырождения 14, половина конфигураций является антисимметричной, см. рис. 4.

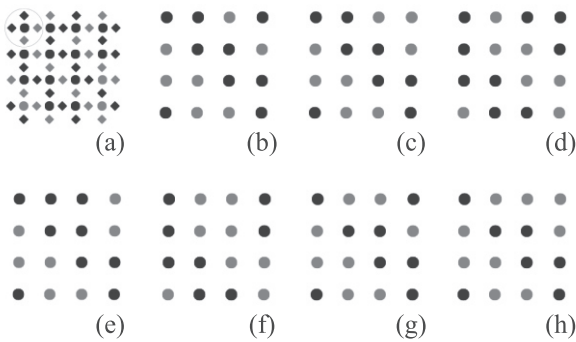


Рис. 4. (a) – Пример системы для обучения: 4×4 , ($E = -0.5$) с заданным бимодальным распределением связей; (b)–(h) – основные состояния системы 4×4 при данном распределении связей

При исследовании системы 6×6 с помощью метода исчерпывающего перечисления вычислены $E_{\min} = -1.3$, 184-х кратное вырождение основного состояния. Результаты ограниченной машины Больцмана: $E_{\min} = -1.3$, 138-ми кратное вырождение основного состояния, что несколько меньше, чем в точном решении. 6×6 – максимальное количество спинов для расчета методом исчерпывающего перечисления; системы относительно большого числа частиц изучались гибридным Монте-Карло методом и методом трансфер-матриц. Метод исчерпывающего перечисления позволяет получить все основные состояния, метод трансфер-матриц вычисляет конфигурации этих состояний для систем меньше, чем 12×12 , а для систем до 20×20 спинов он позволяет рассчитывать только значения минимальной энергии. В свою очередь, методы Монте-Карло, в силу вероятностной специфики, позволяют вычислять лишь малую часть вырожденных основных состояний и не всегда достигают минимума, поэтому для решения такого класса задач актуально приме-

нение нейросетевых алгоритмов как перспективного вычислительного подхода.

Для численных расчетов систем относительно большого числа частиц ограниченная машина Больцмана вычислила конфигурации с меньшей энергией, чем гибридное Монте-Карло для 20×20 и 30×30 , и достигла минимума, который был рассчитан методом трансфер-матриц, см. табл. 1. Также нейронная сеть позволяет вычислять не только отдельные конфигурации в минимуме энергии, но и изучать грубый энергетический ландшафт вырожденных основных состояний спиновых стекол. На примере системы 30×30 спинов было выявлено, что в найденных низкоэнергетических конфигурациях невозможно выделить элементарную ячейку спинов, трансляция которой позволила бы получить такие состояния. В рамках данного исследования ограниченная машина Больцмана показала более высокую точность по сравнению с оптимизированным алгоритмом гибридного Монте-Карло.

Заключение. Нами было показано, что основные состояния систем спинового стекла можно вычислять нейросетевыми методами. Работоспособность ограниченной машины Больцмана проверена точными и приближенными вычислительными методами, которые позволили подтвердить достоверность полученных результатов. Точно вычислена кратность вырождения основных состояний, их энергия и конфигурации для систем с относительно малым числом спинов, для систем с относительно большим числом спинов вычислены значения минимальной энергии и некоторые соответствующие ей конфигурации с разным спиновым избытком.

На основании этих результатов, с одной стороны, можно сделать вывод, что нейронные сети уже являются полезными инструментами для решения задач, связанных с изучением сложных спиновых систем и позволяют значительно улучшить результаты теоретических исследований, проводимых обычными вычислительными методами. С другой стороны, мы столкнулись с проблемой определения числа вырождений основного энергетического уровня из-за отсутствия точных решений для больших систем и, как следствие, невозможностью проверки, смогли ли используемые приближенные вычислительные методы достичь глобального энергетического минимума.

Авторы выражают благодарность проф. К. В. Нефедеву и проф. В. И. Белоконю за советы при планировании исследования и ценные замечания при работе над данной статьей.

Исследование фрустрированных магнитных систем с применением ограниченной машины Больцма-

на выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-72-00058. Развитие гибридного мультиспинового метода ведется в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ # 0657-2020-0005. Исследования методом трансфер-матриц проведены при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации # НШ-2559.2022.1.2.

Для проведения численных расчетов были использованы вычислительные ресурсы ДВФУ.

1. P. Nordblad, *Disordered Magnetic Systems, Encyclopedia of condensed matter physics*, ed. by F. Bassani, G.L. Liedl, and P. Wyder, Elsevier, Amsterdam (2005), p. 452.
2. M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. H. Zeiske, and K. W. Godfrey, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2554 (1997).
3. A. Lucas, *Front. Phys.* **2**, 5 (2014).
4. D. Landau and K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*, Cambridge University press, Cambridge (2003).
5. V. I. Belokon, V. Y. Kapitan, and O. I. Dyachenko, *J. Phys. Conf. Ser.* **490**, 012165 (2014).
6. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. N. Purtov, and M. V. Mamonova, *JETP Lett.* **104** 776 (2016).
7. M. Žukovič, *Phys. Lett. A* **404**, 127405, (2021).
8. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, and M. K. Mazagaeva, *JETP Lett.* **114**, 693 (2021).
9. K. Makarova, V. Strongin, Iu. Titovets, A. Syrov, I. Zinchenko, V. Samoylov, K. Hofhuis, M. Saccone, A. Makarov, A. Farhan, and K. Nefedev, *Phys. Rev. E* **103**, 042129 (2021).
10. K. S. Soldatov, K. V. Nefedev, V. Yu. Kapitan, and P. D. Andriushchenko, *J. Phys. Conf. Ser.* **741**, 012199 (2016).
11. Yu. A. Shevchenko, A. G. Makarov, P. D. Andriushchenko, and K. V. Nefedev, *JETP* **124**, 982 (2017).
12. A. G. Makarov, K. V. Makarova, Yu. A. Shevchenko, P. D. Andriushchenko, V. Yu. Kapitan, K. S. Soldatov, A. V. Perzhu, A. E. Rybin, D. Yu. Kapitan, E. V. Vasil'ev, R. A. Volotovskii, Yu. V. Chubov, and K. V. Nefedev, *JETP Lett.* **110**, 702 (2019).
13. P. Mali, S. Radošević, P. Rakić, L. Stričević, M. Pavkov-Hrvojević, and M. Pantić, *Chin. J. Phys.* **59**, 35 (2019).
14. K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, and A. Walsh, *Nature* **559**, 547 (2018).
15. G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborová, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 045002 (2019).
16. J. Carrasquilla and R. G. Melko, *Nat. Phys.* **13**, 431 (2017).
17. P. Suchsland and S. Wessel, *Phys. Rev. B* **97**, 174435 (2018).
18. K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, and H. K. Lee, *Sci. Rep.* **10**, 1 (2020).
19. V. Kapitan, E. Vasiliev, A. Perzhu, D. Kapitan, A. Rybin, A. Korol, K. Soldatov, and Yu. Shevchenko, *AIP Adv.* **11**, 015041 (2021).
20. D. H. Ackley, G. E. Hinton, and T. J. Sejnowski, *Cogn. Sci.* **9**, 147 (1985).
21. G. Torlai and R. G. Melko, *Phys. Rev. B* **94**, 165134 (2016).
22. L. Huang and L. Wang, *Phys. Rev. B* **95**, 035105 (2017).
23. B. McNaughton, M. V. Milosevic, A. Perali, and S. Pilati, *Phys. Rev. E* **101**, 053312 (2020).
24. S. F. Edwards and P. W. Anderson, *Journal of Physics F: Metal Physics* **5**, 965 (1975).
25. B. Kaufman, *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949).
26. M. A. Padalko, Yu. A. Shevchenko, V. Yu. Kapitan, and K. V. Nefedev, *Algorithms* **15**, 13 (2022).
27. D. Kapitan, A. Rybin, P. Andriushchenko, V. Kapitan, E. Vasiliev, and K. Nefedev, *Solid State Phenomena* **312**, 251 (2020).
28. R. Salakhutdinov, A. Mnih, and G. Hinton, *Proceedings of the 24th International Conference on Machine Learning* (2007), p. 791.
29. G. E. Hinton, *Neural Comput.* **14**, 1771 (2002).

Фазовая диаграмма четырехвершинной модели Поттса с конкурирующими обменными взаимодействиями

Д. Р. Курбанова¹⁾, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов

Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН,
367015 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 17 марта 2022 г.

После переработки 18 марта 2022 г.

Принята к публикации 18 марта 2022 г.

На основе алгоритма Ванга–Ландау методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и магнитных структур основного состояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины J_2 . Установлено, что переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную является фазовым переходом второго рода, в то время как переход из страйповой и страйпово-триплетной фаз в парамагнитную фазу – первого рода. Получены магнитные структуры основного состояния, соответствующие разным областям фазовой диаграммы. Обнаружено, что в интервале $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$ конкуренция обменных взаимодействий приводит к сильной фрустрации и нарушению магнитного упорядочения.

DOI: 10.31857/S1234567822080080, EDN: fnkohe

1. Введение. С момента своего появления модель Поттса сыграла значительную роль в статистической физике [1–3] и в приложениях к различным системам конденсированного состояния [4]. Большинство имеющихся результатов получены для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$ и $q = 3$ [5–8]. В зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует температурный фазовый переход (ФП) первого или второго рода. Критические свойства и фазовая диаграмма ферромагнитной модели Поттса достаточно хорошо изучены в двумерном случае [4, 9]: при $q > 4$ система демонстрирует ФП первого порядка, в то время как при $q \leq 4$ переход непрерывен. Поведение антиферромагнитной модели Поттса считается более сложным, поскольку сильно зависит от микроструктуры решетки. Антиферромагнитная модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на треугольной решетке демонстрирует слабый переход первого рода при нулевой температуре [10, 11], обычную конечно-температурную критическую точку на решетке кагоме [12]; на квадратной решетке она имеет критическую точку при нулевой температуре и разупорядочена при любой положительной температуре [13–16]; на наборе плоских четырехугольных решеток, модель либо имеет критическую точку при нулевой температуре, либо имеет

три упорядоченные сосуществующие фазы, в зависимости от того, является ли четырехугольник самодвойственным или нет [17].

Таким образом, можно сказать, что ферромагнитные модели Поттса достаточно хорошо изучены благодаря их универсальности; для антиферромагнитных моделей, ввиду большого разнообразия критического поведения системы, многие вопросы должны быть исследованы в каждом конкретном случае отдельно.

Мы проводим исследования двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$, поскольку она довольно уникальна и до сих пор мало изучена. Эта модель может быть использована для описания поведения некоторых классов адсорбированных газов на графите [18]. Данная модель интересна и тем, что значение $q = 4$ является граничным значением интервала $q \leq 4$, где наблюдается ФП второго рода и области значений $q > 4$, в котором ФП происходит как переход первого рода [4]. Кроме того, в рассматриваемой модели было обнаружено неоднозначное псевдокритическое поведение [6].

Результаты, полученные для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ и $q = 4$ на разных типах решеток с конкурирующими обменными взаимодействиями, показывают, что многие физические свойства модели Поттса также зависят от величины взаимодействия вторых соседей J_2 [11, 19–26]. В зависимости от геометрии решетки,

¹⁾e-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

при определенных значениях J_2 модель становится фрустрированной [25, 26]. Для модели Поттса на гексагональной решетке фрустрации наблюдаются в интервале $-0.6 \leq J_2 \leq -0.3$ [25], а на решетке кагоме – при $J_2 = -0.5$ [26]. Подобные исследования для двумерной модели Поттса с $q = 4$ на треугольной решетке до сих пор не проводились.

Исследование модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями в литературе практически не встречается. Конкуренция обменного взаимодействия в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические, магнитные и критические свойства. В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка на основе алгоритма Ванга–Ландау (F. Wang and D. P. Landau) метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП, магнитных структур основного состояния и термодинамических свойств этой модели в широком диапазоне величины J_2 . Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением фрустрированных спиновых систем и систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

2. Модель и метод исследования. Гамильтониан модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k =$$

$$= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$. Величина взаимодействия вторых соседей менялась в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq \leq 0.0$.

Схематическое описание данной модели представлено на рис. 1. На вставке приведены направления для каждого из 4 значений спина и соответствующее цветовое представление. На рисунке также представлены взаимодействия между первыми и вто-

рыми ближайшими соседями. Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство:

$$\theta_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases},$$

$$\cos \theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases}. \quad (2)$$

Согласно уравнению (2) для двух спинов S_i и S_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J_1$, если $S_i = S_j$. В случае, когда $S_i \neq S_j$, энергия $E_{i,j} = J_1/3$. Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении, и принимает другое значение при не совпадении направлений спинов. Для модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов, как показано на рис. 1.

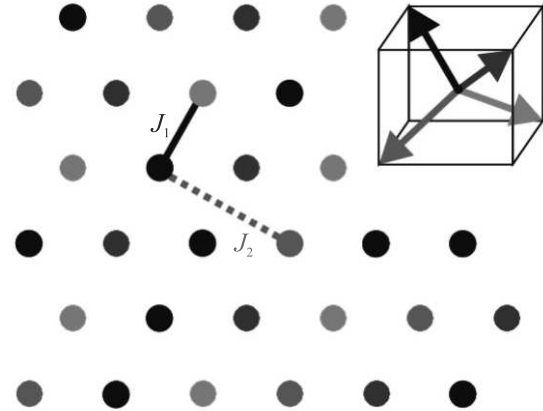


Рис. 1. (Цветной онлайн) Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [27–30]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [31, 32], особенно в низкотемпературной области.

Алгоритм Ванга–Ландау является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Данный алгоритм основан на том, что совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подбрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний

стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний $g(E)$, зная которую, можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Так как плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной $\ln g(E)$.

Алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде:

Задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний $g(E) = 1$, гистограммы распределений по энергиям $H(E) = 0$, стартовый модификационный фактор $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$. Многократно совершаем шаги в фазовом пространстве, пока не получим относительно плоскую гистограмму $H(E)$ (т.е. пока не будут посещены примерно одинаковое количество раз все возможные энергетические состояния системы). При этом вероятность перехода из состояния с энергией E_1 в состояние с энергией E_2 определяется по формуле $p = g(E_1)/g(E_2)$. Если переход в состояние с энергией E_2 состоялся, то $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$, $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$, иначе $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$, $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$. Если гистограмма стала “плоской”, то обнуляем гистограмму $H(E) \rightarrow 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \rightarrow \sqrt{f}$ и продолжаем снова, пока $f \geq f_{\min}$. Гистограмма считается достаточно плоской, если в ней значение для всех возможных энергетических состояний принимают не менее 90% от общего среднего значения. В нашем случае было принято $f_{\min} = 1.0000000001$, что достигается на 34 шаге итерации (модификационный фактор при этом принимает значение $f = e^{2^{-34}} \approx 1.0000000000582$). В стандартный алгоритм Ванга–Ландау нами внесены дополнения, которые позволяют получить магнитную структуру основного состояния системы. При достижении состояния с минимальной энергией (предположительно, основного состояния системы) магнитная структура сохраняется в памяти в виде строки, содержащей значения всех спинов. К примеру, ферромагнитные конфигурации, в которых все спины направлены вдоль одного из четырех направлений, будут представлены как 1111..., 2222..., 3333... или 4444.... При добавлении новой строки она сравнивается с уже имеющимися строками на уникальность. Так как энергетический минимум системы заранее не известен и не будет достигнут на начальных шагах итераций, данная процедура запускается только после 15 итераций. Если в ходе дальнейших расчетов обнаруживается состояние с более низкой энергией, то данное состояние

принимается за основное и массив строк очищается полностью от предыдущих данных. Для экономии вычислительных ресурсов хранятся не более 1000 строк уникальных конфигураций. Процедура является достаточно трудозатратной и эффективна только для систем малых размеров. При моделировании частиц больших размеров данная функция отключается. После завершения расчетов сравнивается количество строк N_{string} и округленное до целого значение плотности состояний $N_{\text{GS}} = \text{Round}(g(E_{\min}))$. Если основное состояние сильно не вырождено, то мы получим, что $N_{\text{GS}} = N_{\text{string}}$. В случае сильного вырождения основного состояния, пример которого приведен на рис. 2b, где для $L = 120$ мы имеем $N_{\text{GS}} \approx 10^{3000}$, данная процедура также полезна, так как показывает сильное вырождение основного состояния и позволяет отображать некоторые из огромного числа всевозможных конфигураций.

Определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , удельную теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (4)$$

$$C = \left(\frac{(|J_1|/k_B T)^2}{N} \right) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (5)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (6)$$

где N – число частиц, T – температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$). Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 \div 120$.

3. Результаты моделирования. Алгоритм Ванга–Ландау является эффективным методом для расчета плотности состояния энергии. Преимущество алгоритма заключается в том, что плотность состояний $g(E)$ в системе не зависит от температуры. Зная плотность состояний системы, можно рассчитать температурную зависимость любого интересующего нас термодинамического параметра.

На рисунке 2a приведены плотности состояний $g(E)$ системы для разных величин обменного взаимодействия J_2 (здесь и далее статистическая по-

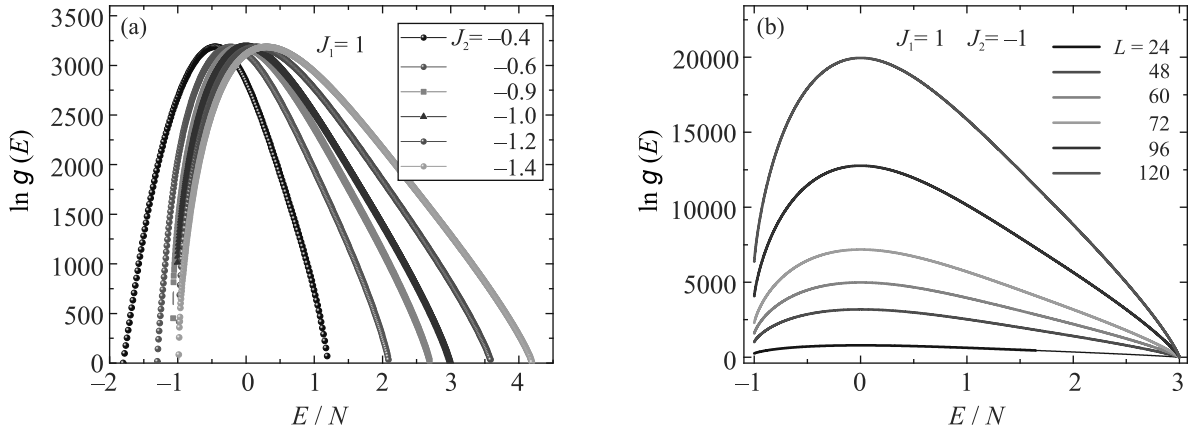


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Плотность состояний $g(E)$ для различных значений J_2 ; (б) – плотность состояний $g(E)$ для $J_2 = -1.0$ при различных линейных размерах L

грешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Плотность состояний имеет куполообразную форму. В интервале $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$ наблюдается сильное вырождение основного состояния, система становится фрустрированной (область, в которой конкуренция обменных взаимодействий приводит к полному нарушению упорядочения основного состояния). Плотности состояния $g(E)$ фрустрированной области ($J_2 = -1.0$) при различных линейных размерах системы приведены на рис. 2б. С увеличением линейных размеров системы, плотность состояний $g(E)$ значительно возрастает, что обусловлено вырождением основного состояния.

Для анализа порядка ФП и определения критической температуры из данных, полученных на основе алгоритма Ванга–Ландау в последние годы успешно используют метод, основанный на разности плотности состояний (DOS) [33–35]:

$$\frac{\Delta \ln g(E)}{\Delta E} = \frac{\ln g(E + \Delta E) - \ln g(E)}{\Delta E}. \quad (7)$$

Системы, демонстрирующие переход первого рода, имеют S-подобную структуру разности DOS. На рисунке 3 видно, что производная от плотности состояний имеет поведение, характерное для ФП первого рода. Температуру перехода $T_C = 1/\beta_C$, как и в термодинамике, можно определить по правилу Максвелла. Линия β_C разделяет разницу DOS в двух зонах с одинаковыми площадями $\beta_C = 3.1058$ (рис. 3). Значение критической температуры, определенное из рис. 3, имеет высокую точность и дает такое же значение, что и другие методы ($T_C = 1/\beta_C = 0.3219$).

Для анализа порядка ФП нами также был использован гистограммный анализ данных метода МК. Гистограммный анализ – один из наиболее

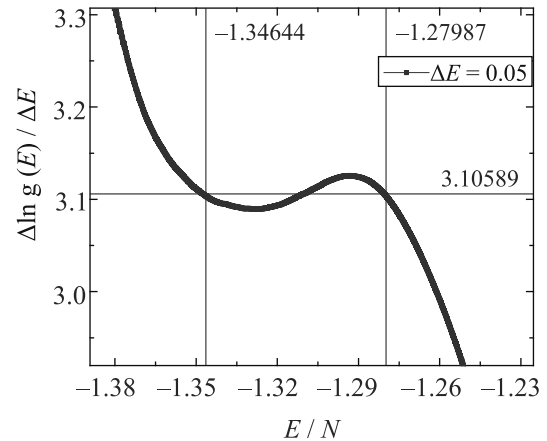


Рис. 3. (Цветной онлайн) Производная от плотности состояний для $J_2 = -0.6$ при $L = 60$. Горизонтальная линия $\beta_C = 3.1058$ соответствует обратной критической температуре, полученной с помощью правила равных площадей Максвелла $T_C = 1/\beta_C = 0.3219$

точных методов, позволяющих установить род ФП [29, 30]. На рисунке 4 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$. Графики построены при различных температурах, близких к критической температуре. Видно, что в зависимости вероятности W от энергии E/N при критической температуре $T_C = 0.3219$ и в ее окрестности наблюдаются два максимума. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является характерным признаком ФП первого рода. Отметим, что двойные пики на гистограммах распределения для исследуемой модели наблюдаются в интервалах $-0.8 \leq J_2 \leq 0.0$ и $-2.0 \leq J_2 \leq -1.3$.

Однако наличие двойных пиков на гистограммах распределения энергии не является достаточным

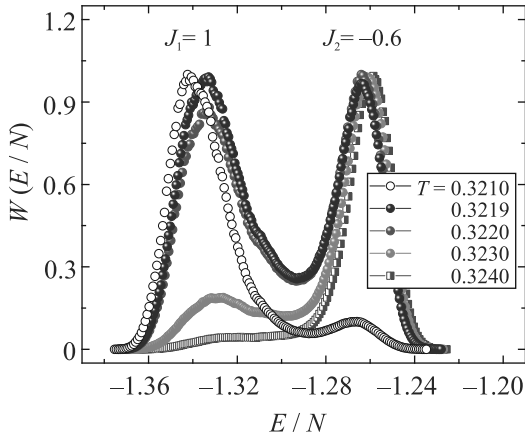


Рис. 4. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения энергии для $J_2 = -0.6$ при $L = 60$

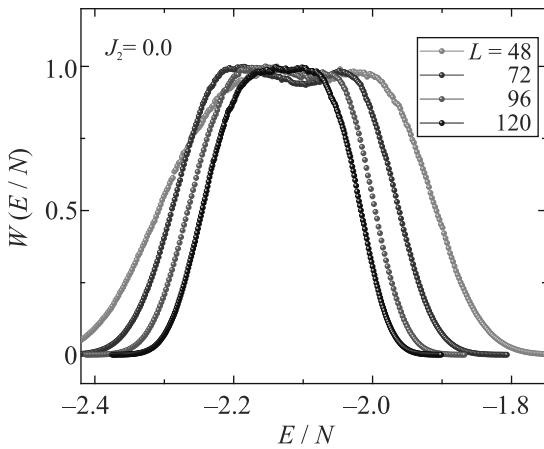


Рис. 5. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения энергии для $J_2 = 0.0$ при различных L

условием существования ФП первого рода. На рисунке 5 представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 48; 72; 96$ и 120 при $J_2 = 0.0$. Видно, что с увеличением линейных размеров системы расстояние между пиками на гистограмме уменьшается и два пика сходятся в один. Такое поведение характерно для систем, в которых наблюдаются фазовые переходы второго рода с признаками переходов первого рода, исчезающие в термодинамическом пределе. Аналогичное поведение на гистограммах распределения энергии наблюдается в интервале $-0.5 < J_2 \leq 0.0$. Данные, полученные в ходе исследования, показывают, что расстояние между перегибами функции плотности состояний в этом интервале также уменьшается с ростом линейных размеров решетки. На гистограммах, полученных для интервалов $-0.8 \leq J_2 \leq -0.5$ и $-2.0 \leq J_2 \leq -1.3$ с увеличением линейных размеров

пики не сливаются в один, а наоборот, становятся более ярко выраженными, что характерно для ФП первого рода. Таким образом, для исследуемой модели в интервале $-0.5 < J_2 \leq 0.0$ наблюдается ФП второго рода с признаками перехода первого рода, а в интервалах $-0.8 \leq J_2 \leq -0.5$ и $-2.0 \leq J_2 \leq -1.3$ наблюдается ФП первого рода.

Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей приведена на рис. 6. На

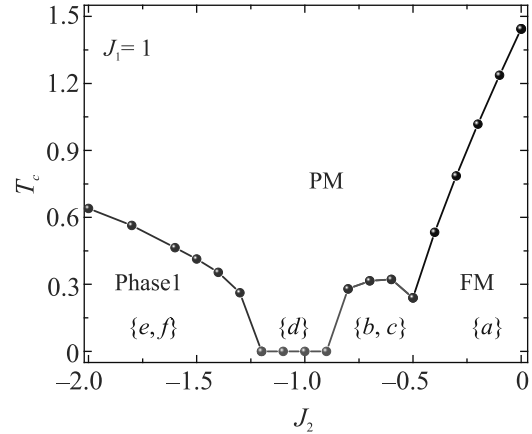


Рис. 6. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма четырехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей J_2

диаграмме наблюдаются несколько различных фаз: ферромагнитная (FM), парамагнитная (PM), страйповая (в интервале $-0.8 \leq J_2 \leq -0.5$), фрустрированная (в интервале $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$) и Phase 1 (страйпово-триплетная). В интервале значений $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$ критическая температура равна нулю и ФП отсутствует. Это объясняется тем, что конкуренция обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей в данном интервале приводит к возникновению сильной фрустрации. Фрустрации нарушают порядок в системе и приводят к исчезновению ФП. Анализ порядка ФП, проведенный для всего рассмотренного интервала J_2 , показывает, что ФП из ферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом второго рода, а переход страйповой и страйпово-триплетной фаз в парамагнитную фазу – первого рода. Значения J_2 , при которых система становится фрустрированной, полученные в данном исследовании, не совпадают со значениями, полученными для аналогичной модели на гексагональной решетке ($-0.6 \leq J_2 \leq -0.3$) [25] и на решетке кагоме ($J_2 = -0.5$) [26]. Это позволяет говорить, что в двумерной модели Поттса с $q = 4$ области, в которых

возникают фрустрированные состояния зависят от типа решетки.

На рисунке 7 представлены магнитные структуры основного состояния, соответствующие различ-

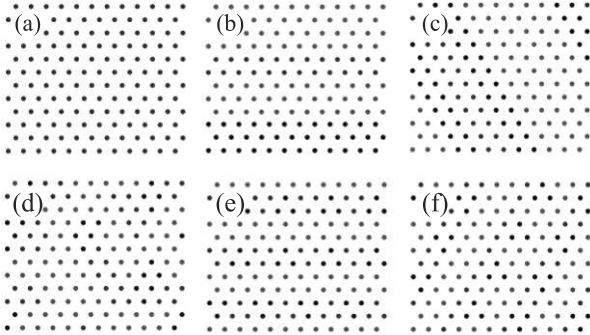


Рис. 7. (Цветной онлайн) Магнитные структуры основного состояния, реализуемые в системе при $J_1 = 1$ и различных значениях J_2 : (a) $-0.4 \leq J_2 \leq 0.0$; (b), (c) $-0.8 \leq J_2 \leq -0.5$; (d) $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$; (e), (f) $-2.0 \leq J_2 \leq -1.3$

ным областям фазовой диаграммы. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На рисунке 7а представлены магнитные структуры основного состояния для $J_2 = 0.0$. Основное состояние является ферромагнитным, в котором все спины ориентированы вдоль одного из четырех направлений – система четырехкратно вырождена (для систем любых линейных размеров $N_{GS} = 4$). Такая картина наблюдается в интервале значений $-0.5 < J_2 \leq 0.0$. На рисунках 7b и c приведены магнитные структуры основного состояния для случаев $J_2 = -0.5$ и $J_2 = -0.7$. Происходит нарушение ферромагнитного упорядочения. Наблюдается полосовая структура, причем ширина, цвет и направление полос может быть произвольным. Количество состояний пропорционально $\ln(N_{GS}) \propto L$. Для $J_2 = -1.0$ (рис. 7d) учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к полному нарушению магнитного упорядочения. Степень вырождения основного состояния в данном случае $\ln(N_{GS}) \propto L^2$. Аналогичная картина наблюдается в диапазоне $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$. Выше этой области в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq -1.3$ (рис. 7e, f) в системе возникают триплетные и страйпово-триплетные структуры. Количество состояний пропорционально $\ln(N_{GS}) \propto L$.

Таким образом, в зависимости от величины обменного взаимодействия J_2 , с понижением температуры в системе возможны несколько сценариев упорядочения:

1. Триплетное или смешанное страйпово-триплетное состояние (рис. 7e, f) в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq -1.3$.

2. Фрустрированное неупорядоченное состояние (рис. 7d) в интервале $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$.

3. Страйповое состояние (рис. 7b и c) в интервале $-0.8 \leq J_2 \leq -0.5$.

4. Упорядоченное ферромагнитное состояние (рис. 7a) при $J_2 > -0.5$.

4. Заключение. Исследование фазовых переходов, магнитных структур основного состояния и термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с конкуренцией обменных взаимодействий выполнено с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Используя метод разности плотности состояний и гистограммный метод, проведен анализ порядка фазовых переходов. Установлено, что переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом второго рода, а переход из страйповой и страйпово-триплетной фаз в парамагнитную фазу – первого рода. В интервале $-1.2 \leq J_2 \leq -0.9$ наблюдаются сильные эффекты фрустрации, что приводит к нарушению магнитного упорядочения.

Определены магнитные структуры основного состояния, соответствующие различным областям фазовой диаграммы: триплетное или смешанное страйпово-триплетное состояние для фазы 1, неупорядоченное сильно вырожденное состояние для фрустрированной фазы, многослойное слабо вырожденное состояние для страйповой фазы и упорядоченное ферромагнитное состояние для ферромагнитной фазы. Показано, что в зависимости от соотношений обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями, основное состояние системы может быть как сильно вырожденным, что свидетельствует о наличии фрустрации в системе, так и слабо вырожденным.

1. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
2. С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, УФН **175**, 92 (2005).
3. G. Toulouse, Commun. Phys. **2**, 115 (1977).
4. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
5. Zh. Fu, W. Guo, and H. W. J. Blöte, Phys. Rev. E **101**, 012118 (2020).
6. N. Schreiber, R. Cohen, and S. Haber, Phys. Rev. E **97**, 032106 (2018).

7. D. P. Foster and C. Gérard, *Phys. Rev. B* **70**, 014411 (2004).
8. I. Puha and H. T. Diep, *J. Appl. Phys.* **87**, 5905 (2000).
9. R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6**, 445 (1973).
10. J. Adler, A. Brandt, W. Janke, and S. Shmulyian, *J. Phys. A* **28**, 5117 (1995).
11. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, *Physica A* **521**, 543 (2019).
12. R. Kotecký, J. Salas, and A. D. Sokal, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 030601 (2008).
13. J. K. Burton Jr. and C. L. Henley, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 8385 (1997).
14. J. Kolafa, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17**, L777 (1984).
15. M. P. M. den Nijs, M. P. Nightingale, and M. Schick, *Phys. Rev. B* **26**, 2490 (1982).
16. J. Salas and A. D. Sokal, *J. Stat. Phys.* **92**, 729 (1998).
17. J. P. Lv, Y. Deng, J. L. Jacobsen, and J. Salas, *J. Phys. A: Math. Theor.* **51**, 365001 (2018).
18. E. Domany, M. Schick, and J. S. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1148 (1977).
19. F. A. Kassan-Ogly and A. I. Proshkin, *Phys. Solid State* **60**, 1090 (2018).
20. Y. Panov and O. Rojas, *Phys. Rev. E* **103**, 062107 (2021).
21. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004), p. 624.
22. Д. П. Курбанова, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Т. А. Тааев, *ЖЭТФ* **158**, 1095 (2020).
23. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, *ЖЭТФ* **156**, 502 (2019).
24. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, *ФТТ* **62**, 442 (2020).
25. А. К. Муртазаев, М. К. Мазагаева, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, А. А. Муртазаева, *ФТТ* **63**, 622 (2021).
26. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, T. R. Rizvanova, and A. A. Murtazaeva, *Low Temp. Phys.* **47**, 396 (2021).
27. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова, О. А. Петренко, А. Я. Шапиро, Л. Н. Демьянец, *Письма в ЖЭТФ* **80**, 231 (2004).
28. А. О. Сорокин, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 423 (2019).
29. А. О. Сорокин, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 34 (2020).
30. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
31. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
32. C. Zhou and R. N. Bhatt, *Phys. Rev. E* **72**, 025701 (2005).
33. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
34. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
35. Y. Komura and Y. Okabe, *Phys. Rev. E* **85**, 010102 (2012).

О дифференциальных уравнениях для диаграмм Фейнмана (Миниобзор)

В. Мишняков^{+*×◦1)}, П. Супрун^{+◦}

⁺Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

^{*}Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

[×]Институт теоретической и математической физики, МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

[◦]Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 117218 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 марта 2022 г.

После переработки 21 марта 2022 г.

Принята к публикации 21 марта 2022 г.

Каким образом современный физик должен вычислять петлевые интегралы, задаваемые диаграммами Фейнмана? Этот вопрос в последнее время привлекал к себе существенное внимание. Хотя его исследование остается незавершенным, можно выделить основные направления, в которых ведется активная работа. Одним из таких направлений является *метод дифференциальных уравнений*, основные идеи и особенности которого мы попытаемся обозначить с целью выделения стоящих за ним принципов в наибольшей общности.

DOI: 10.31857/S1234567822080122, EDN: fnljzp

1. Содержание метода. Типичный фейнмановский интеграл представляет из себя выражение вида

$$J(p_1, \dots, p_M; m_1, \dots, m_N) = \int \frac{d^d k_1 d^d k_2 \dots d^d k_l}{D_1 D_2 \dots D_n}, \quad (1)$$

где k_i – контурные импульсы, D – пропагаторы, зависящие от их сумм и разностей (конкретные комбинации задаются графом Фейнмана по широко известным правилам). Основной задачей подобных методов является установление зависимости функции J от ее аргументов – масс частиц-переносчиков m_i и внешних импульсов p_j . Идея метода дифференциальных уравнений заключается в том, чтобы искать и использовать соотношения между J и ее производными по параметрам [1]. Точнее, предлагаемый алгоритм можно описать следующим образом:

1. Продифференцировать исследуемый интеграл по параметрам, что дает (линейные комбинации) выражений вида

$$\partial_i J = \int \frac{P(k)}{D_1^{a_1} D_2^{a_2} \dots D_e^{a_e}} d^d k_1 d^d k_2 \dots d^d k_l, \quad (2)$$

где $P(k)$ – скалярный многочлен от петлевых и внешних импульсов.

2. Применить максимально возможное количество соотношений следующего типа (которые после взятия всех производных и раскрытия скобок связывают между собой различные интегралы, аналогичные по форме приведенным выше):

$$0 = \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}_i} \frac{P(k) \mathbf{q}_j}{D_1^{a_1} D_2^{a_2} \dots D_e^{a_e}} d^d k_1 d^d k_2 \dots d^d k_l = \dots \quad (3)$$

Основное содержание этих соотношений в том, что “интеграл от полной производной зануляется”.

3. Из бесконечного числа возможных интегралов фейнмановского типа (различающихся степенями пропагаторов и одночленами в числителе) выбрать конечное подмножество, содержащее исходный интеграл и обладающее тем свойством, что любая производная по параметру любого выбранного интеграла является рациональной линейной комбинацией интегралов, принадлежащих этому множеству. Иными словами, сумма интегралов, возникающая при дифференцировании любого выбранного, должна снова сводиться к выбранным интегралам в силу тождеств типа (3) и их линейных комбинаций. Для поиска такого множества су-

¹⁾e-mail: mishnyakovvv@gmail.com

ществуют специальные методы, из которых мы упомянем *алгоритм Лапорты*.

4. В результате должна получиться система дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\partial_i J_\alpha = \sum A_{i\alpha\beta}(t_j) J_\beta, \quad (4)$$

где в левой части стоят производные по параметрам функций J_α , входящих в конечный набор, выбранный на предыдущем шаге, так называемых “master integrals”. Коэффициенты $A_{i\alpha\beta}(p_j, m_k)$ являются рациональными функциями своих параметров. Решение системы, заданной в подобной форме, может быть записано как:

$$\partial_i J_\alpha = \sum A_{i\alpha\beta}(t_j) J_\beta \rightarrow \mathbf{J} = \text{Rexp} \left(\int A dx \right), \quad (5)$$

где Rexp – упорядоченная экспонента, причем в ее разложение входят интегралы A -матрицы (связности) вида

$$J_{\text{iterated}} = \int_0^x dx_{n-1} A(x_{n-1}) \times \int_0^{x_{n-1}} dx_{n-2} A(x_{n-2}) \int_0^{x_{n-2}} \dots \int_0^{x_1} A(x_0) dx_0. \quad (6)$$

С другой стороны, эти соотношения между интегралами фейнмановского типа могут быть сформулированы в виде уравнения или системы уравнений более высокого порядка на меньшее число базисных интегралов. Система уравнений первого порядка приводится к такой форме взятием следующих производных и исключением дополнительных (к исходному) мастер-интегралов. Например, для процессов, включающих только один внешний импульс, таких как диаграммы типа собственной энергии, система сводится к единственному уравнению по переменной $t = p^2$:

$$\mathcal{L}[J] = 0, \quad (7)$$

где $\mathcal{L} = \frac{d^n}{dt^n} + \dots$ – дифференциальный оператор априори неизвестного порядка, который может быть достаточно высоким, а сам оператор – иметь сложную форму. В таком виде очевидно, что дифференциальная структура семейства интегралов фейнмановского типа полностью аналогична структуре классических уравнений Пикара–Фукса для периодов эллиптических кривых и кривых старшего рода. В следующем разделе мы приведем несколько примеров.

Напомним вкратце, как устроено уравнение Пикара–Фукса в случае рода 1. Период эллиптической кривой с “модулем” λ определяется следующим образом:

$$\omega(\lambda) = \oint \frac{dx}{\sqrt{x(x-1)(x-\lambda)}}. \quad (8)$$

После двукратного дифференцирования по λ получаем три замкнутые дифференциальные формы. Так как пространство когомологий эллиптической кривой двумерно, должна существовать линейная комбинация $\omega(\lambda)$, $\partial_\lambda \omega(\lambda)$ и $\partial_\lambda^2 \omega(\lambda)$, являющаяся интегралом точной формы по замкнутому контуру, и, следовательно, равная нулю. Это условие эквивалентно дифференциальному уравнению на ω , коэффициенты которого могут быть вычислены и оказываются следующими:

$$\left[\frac{d^2}{d\lambda^2} + \frac{1-2\lambda}{(\lambda-1)\lambda} \frac{d}{d\lambda} - \frac{1}{4(\lambda-1)\lambda} \right] \omega = 0 \quad (9)$$

Заметим, что уравнение имеет форму (7) и означает, в сущности, что интеграл от полной производной (точной 1-формы) обращается в нуль, в полной аналогии с уравнением (3). Единственное отличие от описанного выше метода состоит в том, что в данном случае мы начали с производных интеграла по параметру и объединили их в полную производную, во время как выше мы сначала рассмотрели набор полных производных, которые затем выразили в форме соотношений между интересующими нас интегралами. Заметим также, что в задачах квантовой теории поля обычно требуется рассмотрение интегралов не по замкнутому контуру, а по некоторому интервалу. В этом случае соответствующее уравнение типа Пикара–Фукса может оказаться неоднородным, но после умножения на подходящий множитель и дополнительного дифференцирования его можно сделать однородным, увеличив порядок на единицу.

Поскольку пространство первых когомологий кривой рода g является $2g$ -мерным, порядок аналогичных уравнений на периоды старших кривых определяется их родом. Отсюда ясно, что задача определения порядка таких уравнений является вопросом теории когомологий. Построение соответствующей геометрической конструкции для интегралов Фейнмана является интересным открытым вопросом, активно изучаемым в последнее время [2], а также [3].

Последнее замечание, которое мы хотим сделать в этом разделе, состоит в том, что обращение в нуль интегралов от полных производных является основным содержанием тождеств Уорда (условий

Вирасоро) в теории матричных моделей [4, 5]. Соответственно, возникает интригующий вопрос, можно ли поднять тождества на отдельные диаграммы, возникающие из интегрирования по частям на уровень точных статистических сумм и корреляторов. Мы планируем уделить внимание этой проблеме в нашей дальнейшей работе.

2. Результаты. Свойства решений. Вышеописанный метод дает возможность представить диаграммы Фейнмана в виде некоторых новых интегралов, не выражающихся в элементарных функциях. Однако иногда указанные интегралы могут быть выражены через известные специальные функции. Следовательно, можно предположить, что те из них, которые не могут быть выражены подобным образом, дают указание на “правильное” обобщение традиционной системы спецфункций. Связь между диаграммами Фейнмана и специальными функциями можно грубо обозначить следующим образом:

1. Однопетлевые диаграммы представляют собой функции, выражаемые через *полилогарифмы* Li_n [6, 7].
2. Некоторые двухпетлевые диаграммы соответствуют *многократным полилогарифмам*, обобщающим обычные [6], но этих функций недостаточно: существуют диаграммы с двумя петлями, которые требуют для своего выражения повторных интегралов квадратных корней и других эллиптических функций, иногда называемых *эллиптическими полилогарифмами*, свойства которых на текущий момент остаются до конца не изученными [8–10].

3. “Правильное” обобщение обозначенной иерархии, в которое входят, по всей видимости, произвольно многократные полилогарифмы любого рода, и ее связь с интегралами Фейнмана общего вида в высших петлях, в настоящее время неизвестны, относительно прогресса в этом направлении см. [11, 12].

Определение многократных полилогарифмов (по Гончарову) следующее:

$$I(a_0; a_1, a_2, \dots, a_n; z) = \int_{a_0}^z \frac{dt_1}{t_1 - a_1} \int_{a_0}^{t_1} \frac{dt_2}{t_2 - a_2} \dots \int_{a_0}^{t_{n-1}} \frac{dt_n}{t_n - a_n}. \quad (10)$$

Наряду с функциями I , применение находят функции типа Li , определяемые как:

$$Li_{m_1, m_2, \dots, m_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{0 < k_1 < k_2 < \dots < k_n} \frac{x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n}}{k_1^{m_1} k_2^{m_2} \dots k_n^{m_n}}. \quad (11)$$

Эти два класса функций эквивалентны в силу следующего тождества:

$$Li_{m_1, m_2, \dots, m_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = I \left(\underbrace{0}_{m_1}, \frac{1}{x_1}, \underbrace{0}_{m_2-1}, \frac{1}{x_1 x_2}, \dots, \underbrace{0}_{m_n-1}, \frac{1}{x_1 x_2 \dots x_n} \right). \quad (12)$$

(Еще не стандартное) определение эллиптических полилогарифмов:

$$ELi_{n_1, \dots, n_l; m_1, \dots, m_l; a_1, \dots, a_l}(x_i, y_j, q) = \sum_{j_r, k_s=0}^{\infty} \frac{x_1^{j_1}}{j_1^{m_1}} \cdot \frac{x_2^{j_2}}{j_2^{m_2}} \cdot \dots \cdot \frac{x_l^{j_l}}{j_l^{m_l}} \cdot \frac{y_1^{k_1}}{k_1^{m_1}} \cdot \frac{y_2^{k_2}}{k_2^{m_2}} \cdot \dots \cdot \frac{y_l^{k_l}}{k_l^{m_l}} \times \frac{q^{j_1 k_1 + j_2 k_2 + \dots + j_l k_l}}{(j_1 k_1 + j_2 k_2 + j_3 k_3 + \dots + j_l k_l)^{a_1} (j_2 k_2 + j_3 k_3 + \dots + j_l k_l)^{a_2} \dots (j_l k_l)^{a_l}}. \quad (13)$$

Ниже мы приводим примеры, в которых эти функции оказываются полезными.

2.1. Пример на уровне одной петли. Описанный метод применительно к безмассовой треугольной диаграмме, изображенной на рис. 1, дает следующий результат:

$$J_{\text{triangle}}(p_1, p_2, p_3) = \frac{2i}{p_1^2(z - \bar{z})} \times \left(Li_2(z) - Li_2(\bar{z}) + \frac{1}{2} \ln(z\bar{z}) \ln \frac{1-z}{1-\bar{z}} \right), \quad (14)$$

где

$$p_2^2 = p_1^2 |z|^2, \quad p_3^2 = p_1^2 |1-z|^2. \quad (15)$$

Хорошо видны полилогарифмы (в данном случае диллогарифмы).

2.2. *Пример на уровне двух петель.* Возможно, самым простым примером, когда обычных (рода нуль) кратных интегралов недостаточно, является так называемая “sunrise”-диаграмма, изображенная на рис. 2. Система уравнений записана в терминах

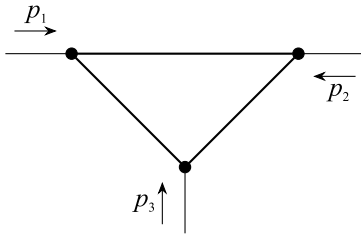


Рис. 1. Треугольная диаграмма

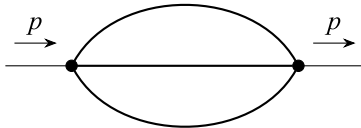


Рис. 2. Двупетлевая диаграмма собственной энергии

четырёх “master integrals” [13], но в случае равных масс их количество сокращается до двух [14].

$$J_1 = \int \frac{d^d k_1 d^d k_2}{(k_1^2 + 1)(k_2^2 + 1)((p - k_1 - k_2)^2 + 1)} \quad (16)$$

$$J_2 = \int \frac{d^d k_1 d^d k_2}{(k_1^2 + 1)^2(k_2^2 + 1)((p - k_1 - k_2)^2 + 1)}. \quad (17)$$

В этом случае зависимость от массы может быть частично учтена заменой нормировочного коэффициента. Тогда дифференциальные уравнения формулируются в терминах безразмерного импульса $z = p^2/m^2$:

$$\begin{aligned} \partial_z J_1 &= \frac{d-3}{z} J_1 + \frac{3}{z} J_2, \\ \partial_z J_2 &= \frac{(d-3)(8-3d)(z+3)}{2z(z+1)(z+9)} J_1 + \\ &+ \frac{(d-4)z^2 + 10(2-d)z + 9(8-3d)}{2z(z+1)(z+9)} J_2 + \\ &+ \frac{z}{2(d-4)^2 z(z+1)(z+9)}. \end{aligned} \quad (18)$$

С помощью подходящих операций дифференцирования эта система может быть записана в эквивалентной форме одного уравнения для S в форме Пикара–Фукса.

Система дифференциальных уравнений для случая различных масс здесь не приводится из-за ее гро-

мозкости и недостатка наглядности, см. [13]. Ответ, однако, мы приведем для общего случая [15]:

$$J_1 = \frac{4}{\sqrt[4]{(p^2 - \mu_1^2)(p^2 - \mu_2^2)(p^2 - \mu_3^2)(p^2 - \mu^2)}} \times \frac{K(k)}{\pi} \sum_{j=1}^3 E_{2;0}(w_j; -1; -q), \quad (19)$$

где $\mu = m_1 + m_2 + m_3$, $\mu_i = \mu - 2m_i$, q, k – стандартные параметры эллиптической кривой

$$-p^2 x_1 x_2 x_3 + (x_1 m_1^2 + x_2 m_2^2 + x_3 m_3^2)(x_1 + x_2 + x_3) = 0, \quad (20)$$

w_i – комплексные (униформизованные) координаты точек пересечения координатных осей (полусов подынтегральной функции) $x_i = x_j = 0$ с эллиптической кривой, приведенной к нормальной форме Якоби. Хорошо видны эллиптические дилогарифмы ($E_{2;0}$). Их связь с функциями ELi , определенными выше, дается формулой

$$\begin{aligned} E_{2;0}(x; y; q) &= -i \left(\frac{1}{2} Li_2(x) - \frac{1}{2} Li_2 \left(\frac{1}{x} \right) + \right. \\ &\left. + ELi_{2;0}(x; y; q) - ELi_{2;0} \left(\frac{1}{x}, \frac{1}{y}, q \right) \right). \end{aligned} \quad (21)$$

3. Алгебраическая природа петлевых интегралов. Когда решение проблемы оказывается выраженным в терминах специальных функций, возникает обычный вопрос, делает ли это проблему “решенной” или предлагаемое решение не представляет из себя ничего сверх специального обозначения для функции, остающейся при этом по-прежнему загадочной. Разница между специальными функциями, решающими задачи, и специальными обозначениями для нерешенных задач заключается в том, что первые обладают достаточно полным набором хорошо изученных свойств. К счастью, специальные функции, возникающие в фейнмановских вычислениях, принадлежат к семейству, которое, по имеющимся данным, устроено “регулярно” с алгебраической точки зрения, что делает их весьма перспективными для использования и исследования. К сожалению, продвижения в изучении свойств этих функций можно считать существенными только для случая “рациональных” кратных полилогарифмов, в то время как для эллиптических такие продвижения можно в лучшем случае только обозначить. По этой причине в данном разделе обсуждаются только рациональные кратные полилогарифмы.

Многочисленные полилогарифмы являются обобщением классических, а классические полилогарифмы, как известно, удовлетворяют большому количе-

ству функциональных тождеств. Простейшим примером таких тождеств являются следующие:

$$\text{Li}_2(1 - z) = -\text{Li}_2(z) - \ln(z) \ln(1 - z) + \frac{\pi^2}{6}, \quad (22)$$

$$\text{Li}_2(1/z) = -\text{Li}_2(z) - \frac{\ln^2(-z)}{2} - \frac{\pi^2}{6}, \quad (23)$$

но, конечно, среди них существует и множество других, более сложных. Поэтому возникает естественный вопрос обобщения тождеств подобного рода на многократный случай, и возможное более или менее систематическое решение основано на использовании *Хопф-алгебраических соотношений* между исследуемыми функциями [16], которые мы в общих чертах описываем ниже.

Во-первых, произведение кратных полилогарифмов есть сумма полилогарифмов, что означает, что их семейство является алгеброй. Лучше всего это видно на интегралах, начинающихся с одной и той же точки:

$$\begin{aligned} & I(0, a_1, a_2, \dots, a_n) I(0, b_1, b_2, \dots, b_m) = \\ & = \sum_{S_{m+n}/S_m \times S_n} I(0, a_1, b_1, b_2, a_3, a_4, a_5, b_3 \dots) \end{aligned} \quad (24)$$

(суммирование происходит по всем “перетасовкам” a_i и b_j , сохраняющим порядок a и b между собой внутри каждого класса, но допускающим произвольное чередование самих классов букв).

Требование, чтобы первый аргумент I был равен нулю, не приводит к ограничению общности, поскольку

$$I(a_0, a_1, a_2) = I(0, a_1, a_2) - I(0, a_1, a_0).$$

Путем дальнейшего интегрирования этого тождества, получаем его аналог для четырех аргументов, $I(a_0, a_1, a_2, a_3) = I_0(0, a_1, a_2, a_3) - I(0, a_1, a_2, a_0) - I(0, a_1, a_0)(I(0, a_2, a_3) - I(0, a_2, a_0))$ и т.д. для всякого n . Из этого представления нетрудно видеть, что число интегрирований в I -функциях является градуировкой, согласованной с умножением (если $\text{grd}[a] = i$ и $\text{grd}[b] = j$, то ab строго однородна и $\text{grd}[ab] = i + j$). Предполагается также, что эта градуировка должна сохраняться всеми функциональными отношениями между многократными полилогарифмами и остается верной для ограничений этих функций, т.е. при наложении условий на набор аргументов (например, если принять все a_i равными z или 1). При таком подходе эта градуировка называется *трансцендентным весом*.

Во-вторых, это так называемое “перетасовочное произведение” допускает согласованное с ним копроизведение, так что эти две операции превращают семейство полилогарифмов в бIALгебру. Определение этого коумножения таково:

$$\begin{aligned} \Delta(I(a_0; a_1, a_2, \dots, a_n; a_{n+1})) &= \\ &= \sum I(a_0; a_i, a_j, \dots, a_k; a_{n+1}) \otimes \\ &\otimes \prod_{\text{all the rest}} I(a_p; a_{p+1}, a_{p+2}, \dots, a_{q-1}; a_q). \end{aligned} \quad (25)$$

Поскольку эта формула, вероятно, не отличается избытком ясности, приведем более подробное объяснение. Каждое слагаемое в копроизведении получается следующим образом:

1. Необходимо выбрать несколько переменных a_i, a_j, \dots, a_k , идущих по порядку между a_0 и a_{n+1} .
2. Тогда первый тензорный множитель равен $I(a_0; a_i, a_j, \dots, a_k; a_{n+1})$. Другой множитель получается в результате следующих шагов.
3. Выбранные параметры a_i, a_j, \dots, a_k делят всю последовательность $a_0; a_1, a_2, \dots, a_n; a_{n+1}$ в серию подпоследовательностей переменных a , идущих подряд, причем выбранные переменные являются концами этих подпоследовательностей. Каждой подпоследовательности соответствует функция $I(a_p; a_{p+1}, a_{p+2}, \dots, a_{q-1}; a_q)$, и все такие функции следует перемножить по всем подпоследовательностям, тогда полученное произведение будет являться вторым тензорным множителем.

Полученные тензорные объекты затем суммируются по всем возможным выборам, сделанным в п. 1. Например, для $n = 2$ получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Delta(I(a_0; a_1, a_2, a_3)) &= 1 \otimes I(a_0; a_1, a_2; a_3) + \\ &+ I(a_0; a_1, a_2; a_3) \otimes 1 + I(a_0; a_1; a_3) \otimes I(a_1; a_2; a_3) + \\ &+ I(a_0; a_2; a_3) \otimes I(a_0; a_1; a_2). \end{aligned} \quad (26)$$

Эту процедуру можно проиллюстрировать графически, см. рис. 3.

Наконец, отображение антипода может быть однозначно определено из копроизведения для алгебр этого класса [17], что делает рассматриваемое функциональное пространство настоящей алгеброй Хопфа.

Копроизведение функции класса I – это сумма тензорных произведений функций того же класса с (как правило) меньшим трансцендентным весом; последовательно применяя копроизведение к тензорным множителям, можно сопоставить данной функции элемент тензорной алгебры над обсуждаемым

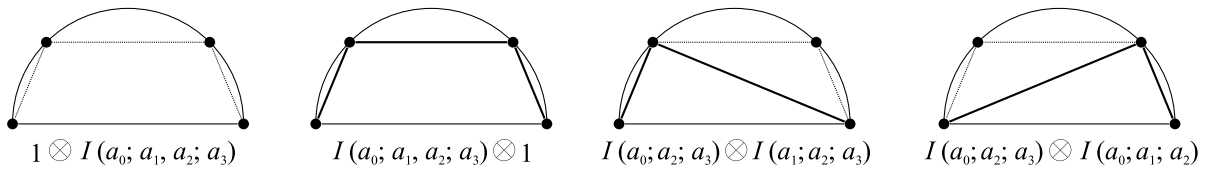


Рис. 3. Правило коумножения в алгебре Хопфа полилогарифмов веса 2

функциональным пространством, все более и более высокой тензорной степени, но со все более и более низким трансцендентным весом сомножителей. Следовательно, в некоторой степени Δ одной из однородных компонент (относительно трансцендентного веса отдельных тензорных множителей, т.е. $3 \otimes 1$ -, $2 \otimes 2$ - и $1 \otimes 3$ -компоненты считаются имеющими разный вес) будет сумма произведений обычных логарифмов (веса 1). Эта однородная компонента, называемая “символом” данной функции, ставится ей в соответствие и содержит информацию о “наиболее трансцендентной части” этой функции. Так как символы функций являются произведениями обыкновенных логарифмов, свойства последних определяют соотношения между символами, которые, в свою очередь, являются отражением соотношений между их прообразами на уровне старшей трансцендентности. Отслеживая ядра операторов коумножения, которые были применены к данной функции, и рассматривая другие однородные компоненты, можно восстановить менее трансцендентные поправки. Описанная техника была с успехом применена при вычислении двухпетлевой амплитуды двухпетлевого рассеяния в суперсимметричной теории Янга–Миллса [18]. Сказанное может быть проиллюстрировано диаграммным образом, см. рис. 4.

Приведем простой пример вычисления методом символов. Допустим, что нам требуется выразить $\text{Li}_2(1/z)$ через $\text{Li}_2(z)$. Согласно приведенному выше описанию, мы должны взять n -е копроизведение $\text{Li}_2(1/z)$ (в данном случае просто обычное копроизведение) и взять его однородную компоненту трансцендентного веса (точнее, набора весов) $1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1$ (в данном случае $1 \otimes 1$). Обозначая через $\Delta_{1,1}$ проекцию копроизведения на эту однородную компоненту, имеем:

$$\begin{aligned} \Delta_{1,1}(\text{Li}_2(1/z)) &= -\ln(1 - 1/z) \otimes \ln(1/z) = \\ &= \ln(1 - z) \otimes \ln(z) - \ln(z) \otimes \ln(z) + i\pi \otimes \ln(z) = \\ &= \Delta_{1,1}(\text{Li}_2(z) - \frac{1}{2}(\ln z)^2 + i\pi \ln z), \end{aligned} \quad (27)$$

поэтому (поскольку ядро $\Delta_{1,1}$ веса 2 состоит только из $\text{Li}_2(1) = \zeta(2)$)

$$\text{Li}_2(1/z) = \text{Li}_2(z) - \frac{1}{2}(\ln z)^2 + i\pi \ln z + A\zeta(2). \quad (28)$$

Сравнивая левую и правую части при $z = 1$ получаем, что $A = 2$. Чтобы доказать равенство $\Delta_{1,1}(\zeta(2)) = 0$, заметим, что

$$\text{Li}_2(z) = \int_0^z \frac{dt_2}{t_2} \int_0^{t_2} \frac{dt_1}{1 - t_1} = I(0, 1, 0, z),$$

следовательно,

$$\begin{aligned} \Delta(\text{Li}_2(z)) &= I(0, 1, 0, z) \otimes 1 + 1 \otimes I(0, 1, 0, z) + \\ &+ I(0, 1, z) \otimes I(1, 0, z) + I(0, 0, z) \otimes I(0, 1, 0) = \\ &= \text{Li}_2(z) \otimes 1 + 1 \otimes \text{Li}_2(z) - \ln(1 - z) \otimes \ln(z). \end{aligned}$$

Подстановкой $z = 1$ получаем

$$\Delta(\zeta(2)) = 1 \otimes \zeta(2) + \zeta(2) \otimes 1.$$

В это выражение не входят члены с весовой структурой $1 \otimes 1$, следовательно, $\Delta_{1,1}(\zeta(2)) = 0$.

4. Обсуждение. В этой заметке нами обсуждались наиболее базовые свойства петлевых интегралов в квантовой теории поля. Из этих свойств мы рассмотрели три основных сюжета. Во-первых, это структура D -модуля на петлевых интегралах. Вместо вычисления в явной форме, интегралы Фейнмана представляются в виде решений систем дифференциальных уравнений, имеющих когомологическое происхождение в терминах некоторой внутренней геометрии. Очень похожий подход используется при исследовании свойств статистических сумм в теории матричных моделей. С другой стороны, при анализе решений возникает интересная иерархия сложности решений этих уравнений как функций импульсов и масс, которая отсутствует (или, по крайней мере, не видна при наивном походе) в нульмерных моделях. Полная характеристика этой иерархичности в терминах топологии графа Фейнмана или каких-либо других параметров на сегодняшний день неизвестна. Наконец, свойства алгебры Хопфа функций на графах тесно связаны с общими свойствами статистических сумм в КТП. Билинейный характер хопфово-алгебраических соотношений позволяет, по видимому, перевести их на язык свойств, подобных

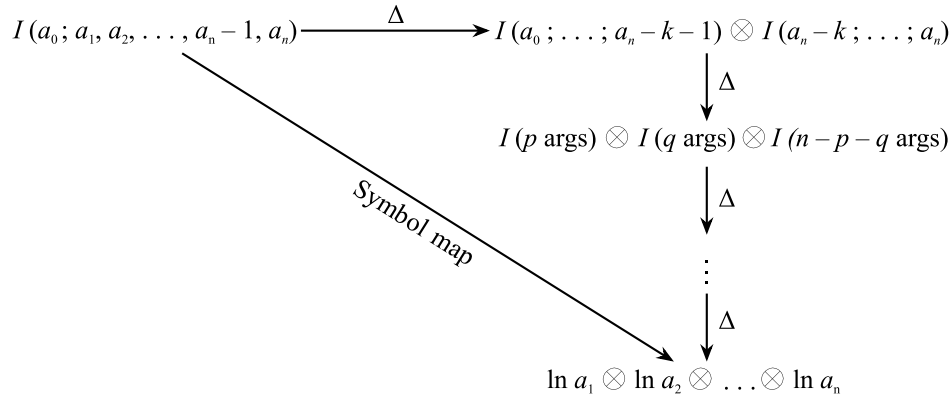


Рис. 4. Диаграмма для отображения символа

интегрируемости, для полных статистических сумм. Эта программа была исследована в наиболее общей постановке [19–21] и в простейших КТП – матричных моделях [5]. Однако, как мы видим, подобными свойствами обладают и основные строительные блоки фейнмановских интегралов (см. также [22] и ссылки в нем для более подробной информации о билинейных тождествах в контексте петлевых интегралов). Обычно интегрируемость матричных моделей не рассматривается с точки зрения соотношений между диаграммами. Однако и для теорий такого вида подобное рассмотрение возможно, и приводит к выводу, что билинейные уравнения на статистические суммы на уровне теории возмущений задают коммутативную алгебру Хопфа графов (см. также [23]). В целом, активное изучение интегралов Фейнмана за последние годы показывает, что и КТП в обычном смысле проявляет свойства, аналогичные свойствам матричных моделей, хотя и формулируемые в более сложном виде. Среди таких свойств отметим билинейные соотношения общего вида и уравнения типа Пикара–Фукса, аналогичные условиям Вирасоро. Следовательно, можно ожидать, что дальнейшие исследования должны позволить нам установить наиболее общие свойства интегрируемости и для теорий поля в ненулевых измерениях.

Мы благодарны А. Морозову за предложение подумать над этим кругом вопросов и полезные замечания, а также участникам рабочего семинара ИГЭФ/МФТИ за ценные обсуждения. Работа Виктора Мишнякова частично финансировалась Российским фондом фундаментальных исследований и МОСТ, проект # 21-52-52004 и грант РФФИ 20-01-00644.

of Feynman Amplitudes, Springer Nature Switzerland, Cham (2021), v. 2; arXiv: 2102.07424 [hep-ph].

2. R. N. Lee and A. A. Pomeransky, *JHEP* **11**, 165 (2013); arXiv:1308.6676 [hep-ph].
3. S. Müller-Stach, S. Weinzierl, and R. Zayadeh, *Commun. Math. Phys.* **326**, 237 (2014); arXiv:1212.4389 [hep-ph].
4. A. Mironov and A. Morozov, *Phys. Lett. B* **252**, 47 (1990).
5. A. Morozov, *Phys.-Uspekhi* **37**, 1 (1994); arXiv:hep-th/9303139.
6. E. Panzer, *Feynman integrals and hyperlogarithms*, PhD thesis, Humboldt U. (2015); arXiv:1506.07243 [math-ph].
7. G. 't Hooft and M. J. G. Veltman, *Nucl. Phys. B* **153**, 365 (1979).
8. J. Broedel, C. Duhr, F. Dulat, B. Penante, and L. Tancredi, *JHEP* **05**, 120 (2019); arXiv:1902.09971 [hep-ph].
9. J. Broedel, C. Duhr, F. Dulat, and L. Tancredi, *JHEP* **05**, 093 (2018); arXiv:1712.07089 [hep-th].
10. S. Weinzierl, *Iterated Integrals Related to Feynman Integrals Associated to Elliptic Curves*, in *Antidifferentiation and the Calculation of Feynman Amplitudes*, Springer Nature Switzerland, Cham (2020), v. 12; arXiv:2012.08429 [hep-th].
11. J.L. Bourjaily, A.J. McLeod, M. von Hippel, and M. Wilhelm, *Phys. Rev. Lett.* **122**(3), 031601 (2019); arXiv:1810.07689.[hep-th].
12. K. Bönisch, C. Duhr, F. Fischbach, A. Klemm, and C. Nega, arXiv:2108.05310 [hep-th].
13. M. Caffo, H. Czyz, S. Laporta, and E. Remiddi, *Nuovo Cim. A* **111**, 365 (1998); arXiv:hep-th/9805118.
14. S. Laporta and E. Remiddi, *Nucl. Phys. B* **704**, 349 (2005); arXiv:hep-ph/0406160.
15. L. Adams, C. Bogner, and S. Weinzierl, *A walk on sunset boulevard*, RADCOR2015, UCLA, PoS, Los Angeles (2016), v. 096; arXiv:1601.03646 [hep-ph].

1. A. V. Kotikov, *Differential Equations and Feynman Integrals*, in *Antidifferentiation and the Calculation*

16. C. Duhr, *Mathematical aspects of scattering amplitudes*, in *Theoretical Advanced Study Institute in Elementary Particle Physics: Journeys Through the Precision Frontier: Amplitudes for Colliders*, World Scientific Publishing, Singapore (2015), p. 419; arXiv:1411.7538 [hep-ph].
17. C. Duhr and F. Dulat, *JHEP* **08**, 135 (2019); arXiv:1904.07279 [hep-th].
18. A.B. Goncharov, M. Spradlin, C. Vergu, and A. Volovich, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 151605 (2010); arXiv:1006.5703 [hep-th].
19. A. Gerasimov, A. Morozov, and K. Selivanov, *Int. J. Mod. Phys. A* **16**, 1531 (2001); arXiv:hep-th/0005053.
20. A. Morozov, *AIP Conf. Proc.* **1562**(1), 167 (2013).
21. A. Connes and D. Kreimer, *Commun. Math. Phys.* **199**, 203 (1998); arXiv:hep-th/9808042.
22. S.L. Cacciatori, M. Conti, and S. Trevisan, *Universe* **7**(9), 328 (2021); arxiv:2107.14721 [hep-th].
23. S. Chmutov, M. Kazarian, and S. Lando, *Selecta Mathematica* **26**(3), 1 (2020).

Исследование свойств когерентности и запутанности макроскопических квантовых интерферирующих альтернатив

Ю. И. Богданов¹⁾, Н. А. Богданова, Д. В. Фастовец, В. Ф. Лукичев

Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН, 117218 Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 февраля 2022 г.

После переработки 14 марта 2022 г.

Принята к публикации 18 марта 2022 г.

Предложен подход, позволяющий рассчитывать характеристики когерентности и интерференции макроскопических квантовых систем. На основе разложения Шмидта представлен общий метод анализа двухчастичных квантовых систем, позволяющий исследовать квантовую запутанность между системой и окружением, а также когерентность интерферирующих альтернатив. Получены простые формулы, выражающие связь между когерентностью, интерференционной видимостью и числом Шмидта. Разработанный метод применен к многомодовым квантовым состояниям кота Шредингера.

DOI: 10.31857/S1234567822080092, EDN: fnvgcr

1. Введение. Интерференция квантовых состояний является ключевым ресурсом квантовых информационных технологий [1]. Рассматриваемое явление наблюдается в самых различных физических системах, включая дифракционные решетки, бифотонные поля, двухлучевые электронные интерферометры [2] и другие. Взаимодействие квантовой системы с окружением приводит к возникновению эффекта декогерентизации, при котором квантовое состояние системы неконтролируемо изменяется. Изучение характеристик когерентности различных открытых квантовых систем [3–6] в максимально общем виде, является важной задачей, за которой стоит возможность учета и компенсации декогерентизации при реализации квантовых вычислений и квантовых симуляторов.

Одним из примеров интерферирующих квантовых систем являются квантовые состояния кота Шредингера, которые представляют собой суперпозицию когерентных состояний [7] с разной фазой. Данные состояния активно используются в квантовой оптике и оптических технологиях [8–10]. Кроме того, эти состояния используются и в других областях науки, например, в вычислениях с непрерывными переменными [11–13], в квантовых кодах с исправлением ошибок [14, 15] и в прецизионных измерениях [16, 17]. Существенный практический интерес представляют многомодовые состояния, образованные несколькими подсистемами (модами). Наличие запутанности в таких состояниях делает их универ-

сальным инструментом для использования в различных квантовых алгоритмах [18, 19].

Важно отметить, что генерация многомодовых состояний квантового кота Шредингера является чрезвычайно сложной задачей, поскольку прямое преобразование когерентного состояния света в состояние кота Шредингера требует создания среды со значительной нелинейностью [20]. Масштабирование и генерация многомодовых состояний кота Шредингера – весьма сложная задача еще и из-за наличия декогерентизации. Отметим, что для большинства приложений требуется, чтобы состояния когерентного кота Шредингера имели достаточно высокие значения среднего числа фотонов и числа мод [12, 21]. Проблема генерации многомодовых состояний кота Шредингера с высоким средним числом фотонов является важной и актуальной как с точки зрения фундаментальной науки, так и с точки зрения прикладного интереса в метрологии, алгоритмах квантовых вычислений и т.д.

2. Многомодовое состояние кота Шредингера. Многомодовое состояние кота Шредингера является непосредственным обобщением одномодового состояния. Последнее представляет собой суперпозицию двух когерентных состояний, отличающихся по фазе на π (см., например, [22, 23]):

$$|\psi_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+q_\alpha)}}(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle). \quad (1)$$

Здесь $q_\alpha = \langle \alpha | -\alpha \rangle = \exp(-2|\alpha|^2)$. В координатном представлении состояние кота Шредингера есть:

$$\psi_\alpha(x) = \frac{\sqrt{2}C_\alpha}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) \cosh(\sqrt{2}\alpha x). \quad (2)$$

¹⁾e-mail: bogdanov_yurii@inbox.ru

Здесь $C_\alpha = (\exp(2\bar{\alpha}^2) + \exp(-2\bar{\alpha}^2))^{-1/2}$ – нормировочный множитель, в записи которого использованы следующие обозначения для действительной и мнимой частей соответственно: $\bar{\alpha} = \text{Re}(\alpha)$, $\bar{\bar{\alpha}} = \text{Im}(\alpha)$.

Состояние кота Шредингера в импульсном представлении задается Фурье-образом от состояния в координатном представлении (2):

$$\tilde{\psi}_\alpha(p) = \frac{\sqrt{2}\tilde{C}_\alpha}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}p^2\right) \cos(\sqrt{2}\alpha p). \quad (3)$$

Здесь $\tilde{C}_\alpha = (\exp(2\bar{\alpha}^2) + \exp(-2\bar{\alpha}^2))^{-1/2}$ – нормировочная константа. Можно заметить, что константы C_α и \tilde{C}_α переходят друг в друга, если $\bar{\alpha}^2$ и $\bar{\bar{\alpha}}^2$ меняются местами. Более подробно, при повороте когерентного состояния на угол $\pi/2$ координата переходит в импульс $x \rightarrow p$, а амплитуда α переходит в некоторую новую амплитуду α' : $\alpha \rightarrow \alpha' = \exp(i\pi/2)\alpha = i\alpha$, поэтому $\bar{\alpha}' = -\bar{\bar{\alpha}}$, а $\bar{\bar{\alpha}}' = \bar{\alpha}$. При таком преобразовании координатная волновая функция (2) переходит в импульсную волновую функцию (3).

Рассмотренное одномодовое состояние можно непосредственно обобщить на многомодовый случай. По аналогии с (1) определим состояние кота Шредингера, образованное n модами, следующей формулой:

$$|\psi_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + \prod_{j=1}^n q_{\alpha_j}\right)}} \times \\ \times (|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\rangle + |-\alpha_1, -\alpha_2, \dots, -\alpha_n\rangle). \quad (4)$$

Здесь $q_{\alpha_j} = \langle \alpha_j | -\alpha_j \rangle = \exp(-2|\alpha_j|^2)$, $j = 1, \dots, n$. Координатное представление многомодового состояния кота Шредингера есть непосредственное обобщение соответствующей формулы (2) для одномодового случая:

$$\psi_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{\sqrt{2}C_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n}}{\sqrt[4]{\pi^n}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^n x_j^2\right) \cosh\left(\sqrt{2}\sum_{j=1}^n \alpha_j x_j\right). \quad (5)$$

Здесь

$$C_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n} = \left(\exp\left(2\sum_{j=1}^n \bar{\alpha}_j^2\right) + \exp\left(-2\sum_{j=1}^n \bar{\bar{\alpha}}_j^2\right)\right)^{-1/2}$$

– нормировочный множитель, в записи которого, аналогично одномодовому случаю, использованы обозначения: $\bar{\alpha}_j = \text{Re}(\alpha_j)$, $\bar{\bar{\alpha}}_j = \text{Im}(\alpha_j)$.

Аналогично координатному представлению, импульсное представление многомодового состояния кота Шредингера есть непосредственное обобщение соответствующей формулы (3) для одномодового случая:

$$\tilde{\psi}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n}(p_1, p_2, \dots, p_n) = \frac{\sqrt{2}\tilde{C}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n}}{\sqrt[4]{\pi^n}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^n p_j^2\right) \cos\left(\sqrt{2}\sum_{j=1}^n \alpha_j p_j\right), \quad (6)$$

где

$$C_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n} = \left(\exp\left(2\sum_{j=1}^n \bar{\alpha}_j^2\right) + \exp\left(-2\sum_{j=1}^n \bar{\bar{\alpha}}_j^2\right)\right)^{-1/2}$$

– нормировочный множитель. Заметим, что, как и в одномодовом случае, нормировочные множители координатного и импульсного представлений связаны соотношением $\tilde{C}_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n} = C_{i\alpha_1, i\alpha_2, \dots, i\alpha_n}$. Снова, как и в одномодовом случае, при повороте когерентного состояния в каждой моде на угол $\pi/2$, координатная волновая функция (5) переходит в импульсную волновую функцию (6).

3. Исследование когерентности состояний с использованием разложения Шмидта. Выделим в состоянии (4) две подсистемы. Пусть первая подсистема A является основной и содержит в себе первые $n - m$ мод состояния, а вторая подсистема B , которую мы рассматриваем в качестве окружения, состоит из оставшихся m мод

$$\left| \underbrace{\alpha_1, \dots, \alpha_{n-m}}_A, \overbrace{\alpha_{n-m+1}, \dots, \alpha_n}_B \right\rangle + \\ + \left| \underbrace{-\alpha_1, \dots, -\alpha_{n-m}}_A, \overbrace{-\alpha_{n-m+1}, \dots, -\alpha_n}_B \right\rangle.$$

Рассмотрим двухчастичную систему, состоящую из представленных подсистем A и B . У нас имеются две интерферирующие альтернативы $|\varphi_1\rangle = |\alpha_1, \dots, \alpha_{n-m}\rangle$ и $|\varphi_2\rangle = |-\alpha_1, \dots, -\alpha_{n-m}\rangle$ первой подсистемы A , запутанные с соответствующими состояниями $|e_1\rangle = |\alpha_{n-m+1}, \dots, \alpha_n\rangle$ и $|e_2\rangle = |-\alpha_{n-m+1}, \dots, -\alpha_n\rangle$ второй подсистемы B , которая характеризует окружение (все указанные состояния нормированы на единицу):

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1 + q_1 q_2)}} (|\varphi_1, e_1\rangle + |\varphi_2, e_2\rangle). \quad (7)$$

Здесь $q_1 = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \exp\left(-2 \sum_{j=1}^{n-m} |\alpha_j|^2\right)$ – амплитуда вероятности обнаружить альтернативу $|\varphi_1\rangle$ при условии, что была приготовлена альтернатива $|\varphi_2\rangle$. Аналогично $q_2 = \langle e_1 | e_2 \rangle = \exp\left(-2 \sum_{j=1}^m |\alpha_{n-m+j}|^2\right)$ – амплитуда вероятности совпадения состояний окружения.

Рассмотрим с использованием разложения Шмидта квантовую запутанность между системой и окружением, а также когерентность интерферирующих альтернатив. Замечательно, что рассматриваемая задача сводится к исследованию двухкубитной системы, независимо от сложности интерферирующих состояний и состояний окружения самих по себе. При этом, первый кубит задает интерферирующие альтернативы, а второй – соответствующие им состояния окружения. Путем ортогонализации нетрудно получить базисные состояния рассматриваемых кубитов. Для кубита, связанного с интерферирующими альтернативами, получаем следующие состояния логического нуля и логической единицы:

$$|0\rangle_1 = |\varphi_1\rangle, \quad |1\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{1-|q_1|^2}}(|\varphi_2\rangle - q_1|\varphi_1\rangle). \quad (8)$$

Аналогично, для кубита окружения имеем:

$$|0\rangle_2 = |e_1\rangle, \quad |1\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{1-|q_2|^2}}(|e_2\rangle - q_2|e_1\rangle). \quad (9)$$

В результате двухкубитовое состояние (7) можно представить в виде:

$$|\psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle. \quad (10)$$

Здесь $c_{00} = \frac{1+q_1q_2}{\sqrt{2(1+q_1q_2)}}$, $c_{01} = \frac{q_1\sqrt{1-|q_2|^2}}{\sqrt{2(1+q_1q_2)}}$, $c_{10} = \frac{q_2\sqrt{1-|q_1|^2}}{\sqrt{2(1+q_1q_2)}}$, $c_{11} = \frac{\sqrt{(1-|q_1|^2)(1-|q_2|^2)}}{\sqrt{2(1+q_1q_2)}}$. Рассмотрим квадрат модуля детерминанта $\Delta = |c_{00}c_{11} - c_{01}c_{10}|^2$. Из представленных выражений следует, что $\Delta = \frac{(1-|q_1|^2)(1-|q_2|^2)}{4(1+q_1q_2)^2}$. Через параметр Δ можно выразить веса разложения Шмидта λ_0 и λ_1

$$\lambda_0 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1-4\Delta}), \quad \lambda_1 = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{1-4\Delta}), \quad (11)$$

а также число Шмидта:

$$K = \frac{1}{\lambda_0^2 + \lambda_1^2} = \frac{1}{1-2\Delta}. \quad (12)$$

Заметим, что в случае хорошо различимых альтернатив, например, для узких щелей в эксперименте Юнга, когда $q_1 = 0$, получим: $\Delta = (1 - |q_2|^2)/4$.

С явлением интерференции в теории оптических явлений неразрывно связано понятие видности интерференционной картины V [24]. Видность интерференционной картины (для узких щелей) определяется в классической оптике формулой:

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}. \quad (13)$$

Здесь I_{\max} и I_{\min} – максимальная и минимальная интенсивность регистрируемого оптического сигнала. На языке разложения Шмидта в качестве полезного сигнала I_{\max} выступает вес λ_0 основной (нулевой) моды, а в качестве шума I_{\min} выступает вес λ_1 первой моды, поэтому получаем следующую связь между видностью и числом Шмидта:

$$V = \lambda_0 - \lambda_1 = \sqrt{\frac{2-K}{K}} = \sqrt{1-4\Delta}. \quad (14)$$

Заметим, что непосредственное рассмотрение интерференционной картины от двух узких щелей [25] показывает, что данное нами определение видности полностью согласуется с классическим определением. Для хорошо различимых альтернатив (для узких щелей в эксперименте Юнга), когда $q_1 = 0$, имеем следующую простую связь между видностью и когерентностью состояний окружения:

$$V = |q_2| = |\langle e_1 | e_2 \rangle|. \quad (15)$$

Сравнивая представленное описание интерферирующих квантовых альтернатив с классическим описанием явления когерентности, мы видим, что скалярное произведение состояний окружения $q_2 = \langle e_1 | e_2 \rangle$ выступает в качестве естественного обобщения классического параметра γ , называемого степенью когерентности световых колебаний [24].

4. Примеры исследования явлений когерентности и интерференции. Разработанный математический аппарат может быть применен к любой сколь угодно сложной системе, в которой имеется интерференция двух различных альтернатив. Прежде чем рассматривать приложение развитой теории к многомодовым состояниям кота Шредингера, рассмотрим в качестве простой иллюстрации классическую задачу о двухщелевой интерференции поляризованных световых пучков, изученную Араго и Френелем более 200 лет назад [26]. Пусть, для определенности, исходное излучение поляризовано вертикально. Разместим в левой щели поляризатор, ось поляризации которого повернута на угол $\theta/2$ от вертикали. Аналогично, разместим в правой щели поляризатор, ось поляризации которого повернута на угол

$-\theta/2$ от вертикали, отличающийся от первого только знаком. Поляроиды в щелях действуют на излучение по-разному, создавая тем самым разные поляризационные состояния окружения $|e_1\rangle$ и $|e_2\rangle$ для интерферирующих альтернатив и вызывая появление запутанности между координатной и поляризационной степенями свободы света. Угол между направлениями поляризаторов равен θ , поэтому степень когерентности есть $\langle e_1|e_2\rangle = \cos(\theta)$, а видность равна $V = |\langle e_1|e_2\rangle| = |\cos(\theta)|$. Интерференция полностью исчезает ($V = 0$), когда угол между направлениями поляризации становится прямым ($\theta = \frac{\pi}{2}$), что и наблюдалось в опытах Араго и Френеля в 1819 г. [26]. Заметим, что в реальных оптических системах состояния окружения $|e_1\rangle$ и $|e_2\rangle$, как и сами интерферирующие альтернативы $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$, могут быть весьма сложными, но простые формулы (14) и (15) остаются верными и в общем случае.

Рассмотрим теперь более подробно частный случай многомодового состояния кота Шредингера, для которого амплитуды состояний в каждой моде равны одному и тому же действительному числу α , т.е. $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = \alpha$.

Осуществим ортогональное преобразование к новым (нормальным) координатам в координатном представлении: $q_j = O_{jk}x_k$, $j, k = 1, \dots, n$. Здесь O – ортогональная матрица, первая строка которой состоит из n одинаковых элементов, равных $1/\sqrt{n}$. Обратное преобразование задается матрицей, транспонированной по отношению к исходной: $x_j = O_{jk}^T q_k$, $j, k = 1, \dots, n$. Учитывая, что сумма квадратов координат остается инвариантной при ортогональных преобразованиях, мы можем в рассматриваемом случае представить волновую функцию многомодового состояния кота Шредингера (5) в новых координатах в виде:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_1=\alpha_2=\dots=\alpha_n=\alpha}(q_1, q_2, \dots, q_n) &= \\ &= \psi_{\alpha_0}(q_1) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi^{n-1}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=2}^n q_j^2\right). \end{aligned} \quad (16)$$

Важно отметить, что в новых координатах состояние перестало быть запутанным. Здесь $q_1 = \frac{x_1 + \dots + x_n}{\sqrt{n}}$ – первая (главная) нормальная координата. Ей отвечает одномерное состояние $\psi_{\alpha_0}(q_1)$ кота Шредингера (2) с амплитудой $\alpha_0 = \alpha\sqrt{n}$. Остальным нормальным координатам q_2, q_3, \dots, q_n в (16) отвечают вакуумные состояния.

Описанный алгоритм может быть использован для численного моделирования сложным образом коррелированных исходных многомерных координат x_1, x_2, \dots, x_n кота Шредингера посредством

генерации независимых нормальных координат q_1, q_2, \dots, q_n с последующим их ортогональным преобразованием. При этом случайная величина q_1 соответствует одномерному распределению кота Шредингера с амплитудой $\alpha_0 = \alpha\sqrt{n}$, а остальные координаты q_2, q_3, \dots, q_n представляют собой гауссовы случайные величины с нулевым средним и дисперсией $\sigma^2 = 1/2$, отвечающей дисперсии вакуумных флуктуаций.

Рассматриваемое одномерное состояние кота Шредингера $\psi_{\alpha_0}(q_1)$ можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_0}(q_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\sqrt[4]{\pi}}\sqrt{1 + \exp(-2\alpha^2 n)}} \times \\ &\times \left[\exp\left(-\frac{1}{2}(q_1 - \sqrt{2}\alpha\sqrt{n})^2\right) + \right. \\ &\left. + \exp\left(-\frac{1}{2}(q_1 + \sqrt{2}\alpha\sqrt{n})^2\right) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Будем условно считать, что в суперпозиции (17) первое слагаемое отвечает состоянию “живого” кота, а второе – состоянию “мертвого” кота. Распределение вероятностей, отвечающее волновой функции (17), есть:

$$\begin{aligned} P_{\alpha_0}(q_1) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}(1 + \exp(-2\alpha^2 n))} \times \quad (18) \\ &\times \left[\frac{1}{2}e^{-(q_1 - \sqrt{2}\alpha\sqrt{n})^2} + \frac{1}{2}e^{-(q_1 + \sqrt{2}\alpha\sqrt{n})^2} + e^{-(q_1^2 + 2\alpha^2 n)} \right]. \end{aligned}$$

В контексте рассматриваемой задачи наиболее интересен случай, когда каждая мода несет в себе малое число фотонов ($\alpha^2 \ll 1$), но общее число фотонов велико ($n\alpha^2 \gg 1$). Пусть, например, $\alpha = 0.01$, а $n = 10^6$, тогда $\exp(-2\alpha^2 n) = \exp(-200) = 1.38 \cdot 10^{-87}$ – исчезающе малая величина. Это соответствует приближению хорошо различимых альтернатив в (17) и при этом, согласно (18), распределение вероятностей для q_1 представляет собой смесь с равными весами двух гауссовых распределений со средними соответственно $\pm\sqrt{2}\alpha\sqrt{n}$ и дисперсиями, равными $\sigma^2 = 1/2$. Здесь знак “плюс” отвечает состоянию “живого” кота, а знак “минус” – состоянию “мертвого” кота. В условиях, когда $\alpha\sqrt{n} \gg 1$, рассматриваемые альтернативы могут быть хорошо различимы между собой, если найти величину q_1 посредством измерения суммарной координаты во всех n модах. Однако в условиях макроскопического числа мод, нет необходимости измерять все n мод, а достаточно измерить только ограниченное их число $m \ll n$ такое, что $\alpha\sqrt{m} \sim 1$. При этом суммарная координата в ограниченной системе из m мод позволит предсказывать суммарную

координату в полной системе из n мод (т.е. оценивать “жив”, кот или “мертв”). Это оказывается возможным в силу сильной корреляционной связи между рассматриваемыми величинами. Исследуем искомые корреляционные связи между подсистемами. Для этого осуществим ортогональное преобразование к нормальным координатам для подсистем A и B , рассмотренных выше. Для подсистемы A в координатном представлении получим: $q_j^A = O_{jk}^A x_k$, $j, k = 1, \dots, n - m$. Здесь O^A – ортогональная матрица, действующая в подсистеме A , первая строка которой состоит из $n - m$ одинаковых элементов, равных $1/\sqrt{n - m}$. Аналогично, для подсистемы B в координатном представлении получим: $q_j^B = O_{jk}^B x_{n-m+k}$, $j, k = 1, \dots, m$. Здесь O^B – ортогональная матрица, действующая в подсистеме B , первая строка которой состоит из m одинаковых элементов, равных $1/\sqrt{m}$.

Заметим, что в рассматриваемом случае ортогональные преобразования в подсистемах A и B являются локальными преобразованиями, которые действуют только внутри подсистем и не меняют характеристик запутанности между самими рассматриваемыми подсистемами. Теперь мы можем представить волновую функцию многомодового состояния кота Шредингера (5) в новых координатах в виде:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_1=\alpha_2=\dots=\alpha_n=\alpha}^{A,B}(q_1^A, \dots, q_{n-m}^A; q_1^B, \dots, q_m^B) = \\ = \psi_{\alpha_0^A \alpha_0^B}(q_1^A, q_1^B) \frac{1}{\sqrt{\pi^{n-2}}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=2}^{n-m} (q_j^A)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=2}^m (q_j^B)^2\right). \end{aligned} \quad (19)$$

В новых координатах запутанность состояния определяется координатами $q_1^A = \frac{x_1 + \dots + x_{n-m}}{\sqrt{n-m}}$ и $q_1^B = \frac{x_{n-m+1} + \dots + x_n}{\sqrt{m}}$, которые есть первые (главные) нормальные координаты в подсистемах A и B соответственно. Им отвечает двумерное состояние $\psi_{\alpha_0^A \alpha_0^B}(q_1^A, q_1^B)$ кота Шредингера с амплитудами $\alpha_0^A = \alpha\sqrt{n-m}$ и $\alpha_0^B = \alpha\sqrt{m}$ соответственно (явный вид этого состояния можно легко найти с помощью формулы (5)). Остальным нормальным $n - 2$ координатам $q_2^A, \dots, q_{n-m}^A; q_2^B, \dots, q_m^B$ в (19) отвечают вакуумные состояния.

Рассматриваемое двумерное состояние кота Шредингера можно переписать также в виде:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_0^A \alpha_0^B}(q_1^A, q_1^B) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{1 + \exp(-2\alpha^2 n)}} \times \\ \times \left[\exp\left(-\frac{1}{2}(q_1^A - \sqrt{2}\alpha_0^A)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}(q_1^B - \sqrt{2}\alpha_0^B)^2\right) + \right. \end{aligned} \quad (20)$$

$$\left. + \exp\left(-\frac{1}{2}(q_1^A + \sqrt{2}\alpha_0^A)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}(q_1^B + \sqrt{2}\alpha_0^B)^2\right) \right].$$

Полученная формула наглядно представляет квантовую запутанность между переменной q_1^A , отвечающей состоянию кота и переменной q_1^B , отвечающей окружению. Наблюдение переменной окружения q_1^B вблизи $\sqrt{2}\alpha_0^B = \sqrt{2}\alpha\sqrt{m}$ отвечает регистрации состояния “живого” кота. Напротив, наблюдение q_1^B вблизи $-\sqrt{2}\alpha_0^B = -\sqrt{2}\alpha\sqrt{m}$ отвечает регистрации состояния “мертвого” кота.

В выражении (20) амплитуды вероятностей наблюдений состояний “живого” и “мертвого” кота пропорциональны соответственно величинам $\exp(-\frac{1}{2}(q_1^B - \sqrt{2}\alpha_0^B)^2)$ и $\exp(-\frac{1}{2}(q_1^B + \sqrt{2}\alpha_0^B)^2)$. Тогда вероятности “выживания” P_0 и “гибели” кота P_0 будут выражаться формулами:

$$P_0 = \frac{\exp(-(q_1^B - \sqrt{2}\alpha_0^B)^2)}{\exp(-(q_1^B - \sqrt{2}\alpha_0^B)^2) + \exp(-(q_1^B + \sqrt{2}\alpha_0^B)^2)}, \quad (21)$$

$$P_1 = \frac{\exp(-(q_1^B + \sqrt{2}\alpha_0^B)^2)}{\exp(-(q_1^B - \sqrt{2}\alpha_0^B)^2) + \exp(-(q_1^B + \sqrt{2}\alpha_0^B)^2)}.$$

Соответствующие вероятности задаются первой нормальной координатой окружения $q_1^B = \frac{x_{n-m+1} + \dots + x_n}{\sqrt{m}}$, которая, в свою очередь, определяется суммарной координатой всех измеренных мод окружения.

Введем понятие “здоровья” H многомодового кота Шредингера, которое определим формулой:

$$H(m) = \ln\left(\frac{P_0}{P_1}\right). \quad (22)$$

Из формул (21) и (22) нетрудно получить, что “здоровье” многомодового кота Шредингера определяется суммой всех измеренных мод окружения:

$$H(m) = 4\alpha\sqrt{2} \sum_{j=1}^m x_{n-m+j}. \quad (23)$$

Введенный параметр определяет уровень “коллапса” квантового состояния кота Шредингера. Очевидно, что значение $H = 0$ соответствует $P_0 = P_1 = 0.5$ и отвечает максимальной когерентности между подсистемами. Далее, если $H \rightarrow +\infty$ (при $n \rightarrow \infty$ и $m \rightarrow \infty$), то $P_0 \rightarrow 1$ (коллапс к состоянию “живого” кота), и наоборот, если при тех же условиях $H \rightarrow -\infty$, то $P_0 \rightarrow 0$ (коллапс к состоянию “мертвого” кота).

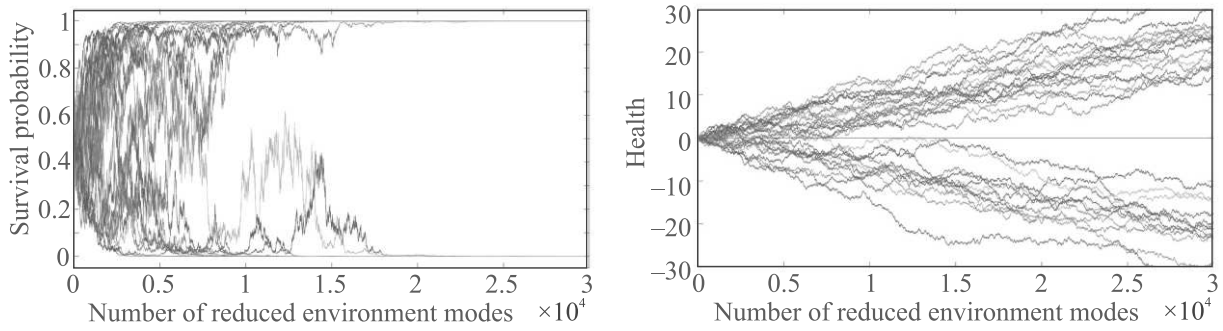


Рис. 1. (Цветной онлайн) Слева: зависимость вероятности “выживания” кота Шредингера от числа редуцированных мод, $\alpha = 0.01$, $n = 1000000$. Выполнено 30 численных экспериментов. Справа: зависимость параметра “здоровья” кота Шредингера от числа редуцированных мод (для тех же данных, что и слева)

На рисунке 1 представлены зависимость вероятности “выживания” P_0 (слева) и параметра “здоровья” H (справа) для многомодового кота Шредингера в зависимости от числа измеренных мод окружения m . Видно, что, начиная примерно с $m = 15 \cdot 10^3$ (соответствует $m\alpha^2 = 1.5$ фотона), суперпозиция состояний “живого” и “мертвого” кота практически полностью разрушается. Мы видим, что многомодовое квантовое состояние кота Шредингера является практически неустойчивым, так как редукция всего лишь одного-двух фотонов приводит к почти полной потери когерентности исходного квантового состояния.

Структура состояния (20) полностью соответствует структуре двухчастичного состояния (7), при этом $q_1 = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \exp(-2\alpha^2(n - m))$, а $q_2 = \langle e_1 | e_2 \rangle = \exp(-2\alpha^2 m)$. В условиях макроскопически большого числа мод n параметр q_1 исчезающе мал, при этом видность интерференционной картины есть:

$$V = |\langle e_1 | e_2 \rangle| = \exp(-2\alpha^2 m). \quad (24)$$

Из формулы (24) мы видим, что в условиях, когда каждая мода содержит в среднем ничтожное число фотонов (α^2 очень мало), можно наблюдать разрушение состояний весьма большого числа мод без существенного влияния на свойства когерентности и интерференции. Однако, когда среднее суммарно накопленное число фотонов в декогерентизированных модах составит величину всего порядка одного фотона ($\alpha^2 m \sim 1$), суперпозиция макроскопических альтернатив станет практически малозаметной. В этом смысле исходная идея Шредингера [27] о возможном решающем влиянии отдельной микрочастицы на судьбу макроскопического объекта является совершенно верной.

Для наглядного представления интерференции удобно перейти от координатного представления к

импульсному представлению, что легко сделать заменой α на $i\alpha$. Введем главную компоненту, связанную с интерференцией:

$$x = \frac{p_1 + \dots + p_{n-m}}{\sqrt{n-m}}. \quad (25)$$

Ее распределение, которое и обеспечивает интерференцию, находится посредством интегрирования по переменной окружения. Результат имеет вид:

$$\tilde{P}(x) = \frac{1}{(1 + \exp(-2n\alpha^2))\sqrt{\pi}} \times \exp(-x^2) \left[1 + V \cos(2\sqrt{2}\alpha\sqrt{n-m}x) \right]. \quad (26)$$

Здесь видность задается представленной выше формулой (24). Рассматриваемое явление наглядно иллюстрируется на рис. 2. Демонстрируется хорошее согласие между теорией, задаваемой формулой (26), и результатами численного моделирования в соответствии с представленным выше методом.

5. Выводы. В настоящей работе был предложен и исследован математический аппарат анализа систем с интерферирующими альтернативами. С использованием разложения Шмидта был разработан общий метод анализа двухчастичных квантовых систем, позволяющий исследовать квантовую запутанность между системой и окружением, а также когерентность интерферирующих альтернатив. Были получены простые формулы, выражающие связь между когерентностью, интерференционной видностью и числом Шмидта. В качестве иллюстрации были исследованы характеристики когерентности и интерференции для многомодового квантового состояния кота Шредингера. Было показано, что явление декогерентизации многомодовых состояний ярко проявляется в условиях, когда имеется много мод, в каждой из которых среднее число фотонов много меньше единицы. Гипотетически, макроскопически раз-

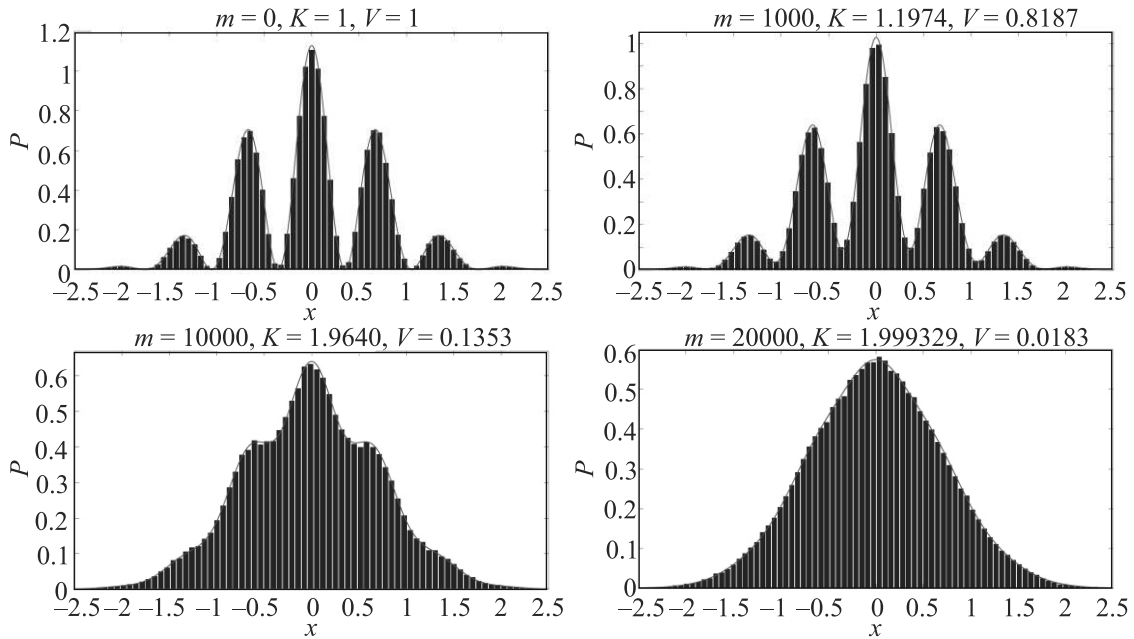


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость интерференционной картины от числа редуцированных мод, $\alpha = 0.01$, $n = 100000$. Сравнение результатов численных экспериментов (гистограммы) с теорией (линии). Гистограммы отвечают объему выборки 200000

личимые интерферирующие альтернативы в много-модовом состоянии кота Шредингера могут характеризоваться сколь угодно высокими значениями полной энергии и полного числа фотонов. Однако такие макроскопически различимые суперпозиции практически полностью разрушаются уже при наблюдении ограниченного числа мод окружения, суммарно содержащих в себе порядка одного фотона. Таким образом, судьба легендарного кота Шредингера зависит не от макроскопического наблюдателя, а от микроскопических процессов, затрагивающих ограниченное число мод окружения и составляющих ничтожно малую долю от самого исходного многомодового состояния.

Работа выполнена в рамках проекта # 22-12-00263 Российского Научного Фонда при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант # 20-1-1-34-1).

1. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, М. (2006), 824 с.
2. E. Buks, R. Schuster, M. Heiblum, D. Mahalu, and V. Umansky, *Nature* **391**, 871 (1998).
3. X.- П. Бройер, Ф. Петруччионе, *Теория открытых квантовых систем*, Регулярная и хаотическая динамика, М.-Ижевск (2010), 824 с.

4. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
5. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, *Письма в ЖЭТФ* **111**(9), 632 (2020).
6. Ю. С. Бараш, *ЖЭТФ* **158**(4), 761 (2021).
7. R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **131**, 2766 (1963).
8. S. J. van Enk and Ch. A. Fuchs, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 027902 (2001).
9. K. Ch. Tan, T. Volkoff, H. Kwon, and H. Jeong, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 190405 (2017).
10. S. Bose, D. Home, and S. Mal, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 210402 (2018).
11. J. S. Neergaard-Nielsen, M. Takeuchi, K. Wakui, H. Takahashi, K. Hayasaka, M. Takeoka, and M. Sasaki, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 053602 (2010).
12. T. C. Ralph, A. Gilchrist, G. J. Milburn, W. J. Munro, and S. Glancy, *Phys. Rev. A* **68**, 042319 (2003).
13. H. Jeong and M. S. Kim, *Phys. Rev. A* **65**, 042305 (2002).
14. P. T. Cochrane, G. J. Milburn, and W. J. Munro, *Phys. Rev. A* **59**, 2631 (1999).
15. D. Gottesman, A. Kitaev, and J. Preskill, *Phys. Rev. A* **64**, 012310 (2001).
16. T. C. Ralph, *Phys. Rev. A* **65**, 042313 (2002).
17. J. Joo, W. J. Munro, and T. P. Spiller, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 083601 (2011).
18. A. Gilchrist, K. Nemoto, W. J. Munro, T. C. Ralph, S. Glancy, S. L. Braunstein, and G. J. Milburn, *Journal*

- of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics **6**(8), S828 (2004).
19. M. Daoud, A.R. Laamara, and R. Essaber, International J. Quantum information **11**(6), 1350057 (2013).
 20. T. Peyronel, O. Firstenberg, Q-Y. Liang, S. Hofferberth, A. V. Gorshkov, T. Pohl, M.D. Lukin, and V. Vuletić, Nature **488**, 57 (2012).
 21. A.P. Lund, T. C. Ralph, and H.L. Haselgrove, Phys. Rev. Lett. **100**, 030503 (2007).
 22. V. V. Dodonov, I. A. Malkin, and V. I. Man'ko, Physica **72**(3), 597 (1974).
 23. S. Glancy and H. M. Vasconcelos, J. Opt. Soc. Am. B **25**, 712 (2008).
 24. М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, М. (1973), 719 с.
 25. Yu.I. Bogdanov, K.A. Valiev, S.A. Nuyanzin, and A.K. Gavrichenko, Russian Microelectronics **39**, 221 (2010).
 26. D.F.J. Arago and A.J. Fresnel, Ann. Chim. Phys. **10**, 288 (1819), на французском; пер. на англ. *The Wave Theory Of Light: Memoirs Of Huygens, Young And Fresnel* (1900), ed. by H. Crew; <https://archive.org/details/wavetheoryoffligh00crewrich/page/144/mode/2up>.
 27. E. Schrodinger, Naturwissenschaften **23**, 807, 8, 844 (1935), на нем., пер. на англ. Proceedings of the American Philosophical Society **124**, 323 (1980).

Вынужденное комбинационное рассеяние в суспензиях вируса мозаики альтернантеры и X-вируса картофеля в диапазоне частот 1–15 ГГц

А. Ф. Бункин⁺, А. Н. Федоров⁺, М. А. Давыдов⁺¹⁾, М. В. Архипенко*, Н. А. Никитин*, С. М. Першин⁺

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

*Биологический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 марта 2022 г.

После переработки 16 марта 2022 г.

Принята к публикации 16 марта 2022 г.

В суспензиях вируса мозаики альтернантеры и X-вируса картофеля были рассчитаны и измерены спектры низкочастотного вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР). Расхождение расчетных и измеренных величин частотного сдвига линий рассеяния для X-вируса картофеля обусловлено, по нашему мнению, различием механических свойств вирусов, в частности модуля Юнга, в нативной среде и при измерениях на атомно-силовом микроскопе. В спектрах ВКР данных вирусов зафиксированы различия, позволяющие их идентифицировать.

DOI: 10.31857/S1234567822080109, EDN: drvtbk

Введение. Изучение вирусных частиц (вирионов) необходимо, в первую очередь, для разработки методов воздействия с целью разрушить их молекулярную структуру. Одним из возможных приемов является резонансная “раскачка” вирионов на собственных частотах. Важно, что при данном подходе не затрагивается окружение частицы, на которую осуществляется воздействие, так как данное воздействие является селективным. Также отметим, что стандартные спектроскопические методы непригодны для решения поставленной задачи, поскольку характерные собственные частоты наночастиц вирусов лежат в диапазоне $\sim 1\text{--}60$ ГГц [1, 2] и по этой причине суспензии вирусов недоступны для спектроскопии спонтанного комбинационного рассеяния света, ИК и СВЧ спектроскопии. Учитывая однозначную связь между собственными акустическими частотами вирусов и их морфологией, вынужденное комбинационное рассеяние света (ВКР) представляется перспективным методом для их идентификации и может быть использовано для разработки новых медицинских и биологических технологий. Используемая в данной работе методика измерений позволяет экспериментально определить собственные частоты акустических колебаний образцов фитовирусов. Ранее рядом авторов (например, [3, 4]) были получены важные результаты в области спектроскопии низко-

частотного вынужденного комбинационного рассеяния в диапазоне частот, смещенных относительно линии возбуждающего лазерного излучения на величины порядка десятков гигагерц.

Целью настоящей работы является измерение собственных частот, близких по морфологии наночастиц вирусов в недоступном для других спектроскопических методов диапазоне 1–15 ГГц.

Объекты исследования и методика эксперимента. В качестве объектов исследования были выбраны: вирус мозаики альтернантеры (ВМАльт, длина вириона ~ 570 нм, диаметр ~ 15 нм, рис. 1а) в буферном растворе трисаминометана $((\text{HOCH}_2)_3\text{CNH}_2 \cdot \text{HCl}$, сокращенно Трис-НСl) и вирус со спиральной структурой рода *Potexvirus*, семейства *Alphaflexiviridae* – X-вирус картофеля (ХВК, длина вириона ~ 515 нм, диаметр ~ 13 нм, рис. 1б) также в Трис-НСl. Данные вирусы представляют собой гибкие нитевидные частицы со спиральной структурой. Геном этих вирусов представлен одноцепочечной молекулой РНК положительной полярности. ВМАльт и ХВК имеют идентичную морфологию и некоторые различия в структуре вирионов, способности белков оболочки полимеризоваться в отсутствие геномной РНК *in vitro*, но общей стратегией экспрессии вируса, например, трансляционной активации генома в составе вириона или вирусного рибонуклеопротеида [5, 6]. Такое сочетание сходств и различий структуры и механизмов

¹⁾e-m: sbs_michail@mail.ru

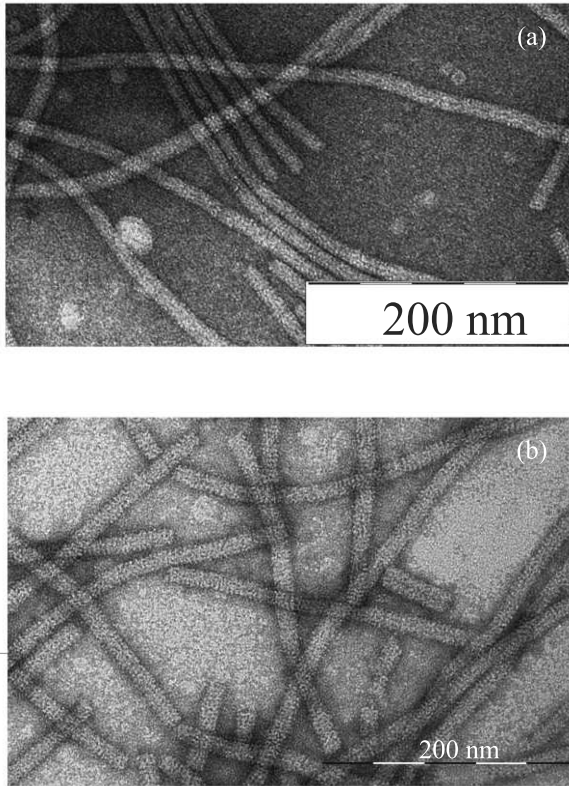


Рис. 1. Фотографии вируса мозаики альтернантеры (а) и X-вируса картофеля (b), полученные с помощью электронного микроскопа

функционирования двух близкородственных видов вирусов сделало их привлекательными объектами исследования.

Возможные частоты сигнала вынужденного рассеяния мы оценивали исходя из указанных размеров вирионов. Известно, что для собственных частот колебаний стержня с распределенной массой, как модели вируса, существует несколько видов колебаний: продольные, поперечные, крутильные. Формула для собственных частот продольных колебаний стержня:

$$\nu_k = \frac{k}{2l} \sqrt{\frac{E}{\rho}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где l – длина стержня, E , ρ – модуль Юнга и плотность материала стержня соответственно. Однако вирусы имеют в своей морфологии различные структурные группы с отличными от других механическими характеристиками, поэтому в формуле для собственных частот вируса как единого целого было бы правильно, на наш взгляд, использовать средние значения модуля Юнга $\langle E \rangle$ и плотности $\langle \rho \rangle$. Тогда формулу (1) можно переписать так:

$$\nu_k = \frac{k}{2l} \sqrt{\frac{\langle E \rangle}{\langle \rho \rangle}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

В работе [7] для X-вируса картофеля были определены геометрические размеры (рис. 1b). Вирионы представляют собой гибкие нити с модальными длинами l в диапазоне 470–580 нм [6]. С использованием атомно-силового микроскопа, для данного вируса был измерен средний модуль Юнга $\langle E \rangle$, который оказался равен $8 \cdot 10^8$ Па [8]. Среднюю плотность можно рассчитать исходя из известной молекулярной массы $M_r = 5.8 \cdot 10^{-20}$ кг и геометрических размеров вириона – его объема:

$$\langle \rho \rangle = \frac{M_r}{V} \cong 850 \text{ кг/м}^3.$$

Тогда для собственных частот, если вместо средней плотности будет отношение молекулярной массы вириона к его объему:

$$\nu_k = \frac{k}{2l} \sqrt{\frac{\langle E \rangle}{M_r}} V, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

И основная частота колебаний ($k = 1$) равна:

$$\nu_k = \frac{k}{2l} \sqrt{\frac{\langle E \rangle}{M_r}} V \cong 1 \text{ ГГц.}$$

Правый множитель в формуле собственных частот:

$$c = \sqrt{\frac{\langle E \rangle}{M_r}} V \cong 1100 \text{ м/с}$$

является скоростью звука в механической модели вируса. Используя (3), можно оценить частоты следующих четырех гармоник как 2–5 ГГц с шагом ~ 1 ГГц.

Суспензии вирусов с концентрацией $C_{\text{altMV}} = 8.8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (ВМАльт) и $C_{\text{PVX}} = 6.6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (ХВК) были залиты в идентичные кварцевые кюветы Cell, рабочей длиной 20 мм. Кюветы поочередно размещали на установке (рис. 2). Излучение второй гармоники YAG: Nd³⁺ лазера, работающего в одностороннем режиме (длина волны излучения $\lambda = 532 \text{ нм}$, ширина линии излучения $\Delta\nu \sim 0.005 \text{ см}^{-1}$; длительность импульса излучения $t \sim 10 \text{ нс}$, энергия в импульсе E_p – до 25 мДж; нестабильность по энергии импульса $\sim 5\text{--}7\%$) фокусировали линзой f_1 с фокусным расстоянием $\sim 15 \text{ мм}$ в середину кюветы Cell. Возбуждаемое в кювете вынужденное рассеяние поступало для регистрации на интерферометр Фабри–Перо (F-P₁, область дисперсии 0.5 см^{-1}). После интерферометра оптический сигнал попадал на CMOS камеру и затем обрабатывался на компьютере

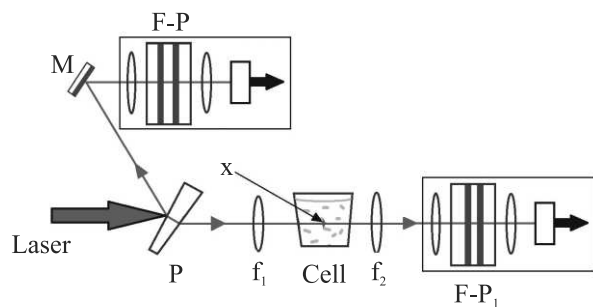


Рис. 2. (Цветной онлайн) Принципиальная схема измерений. Laser – одночастотный лазер; Cell – кювета со скошенными окнами с исследуемым веществом; $f_1 = 15$ мм, $f_2 = 30$ мм – софокусные линзы; x – область перетяжки лазерного пучка в середине кюветы; P – клиновидная поворотная пластина; M – глухое поворотное зеркало; F-P₁ – интерферометр Фабри–Перо с оптической системой, предназначенный для регистрации спектров ВКР; F-P – интерферометр Фабри–Перо с оптической системой, предназначенный для контроля спектра излучения лазера

в программной среде LABVIEW. Спектральный состав излучения лазера контролировали с помощью интерферометра Фабри–Перо (F-P, область дисперсии 1 см^{-1}). В процессе измерений энергию лазерного импульса поддерживали на уровне ~ 23 мДж. Геометрия установки была одинакова для всего цикла измерений. Измерения проводили при комнатной температуре.

Результаты измерений. Установлено, что в спектре излучения, распространяющегося “вперед”, появились дополнительные линии, которые мы интерпретировали как линии низкочастотного вынужденного комбинационного рассеяния (табл. 1):

Таблица 1. Результаты измерений спектров ВКР частот вирусов

Наименование вируса	Величина сдвига частоты вынужденного рассеяния, ГГц				
	ВМАльт	1.5	4.7	5.1	8.7
ХВК	2.9	4.4		9.3	11.3

Характерные спектры, полученные с помощью интерферометра F-P₁, приведены на рис. 3а, б. Из этих рисунков видно, что некоторые спектральные линии, несмотря на то, что они мало выделяются на уровне шумов, стабильно повторяются в разных порядках интерференции, в отличие от шумовых составляющих. Поэтому мы идентифицировали данные линии как линии ВКР.

Расхождение расчетных и измеренных результатов можно объяснить следующим образом. Сложная биологическая конструкция вириона предпола-

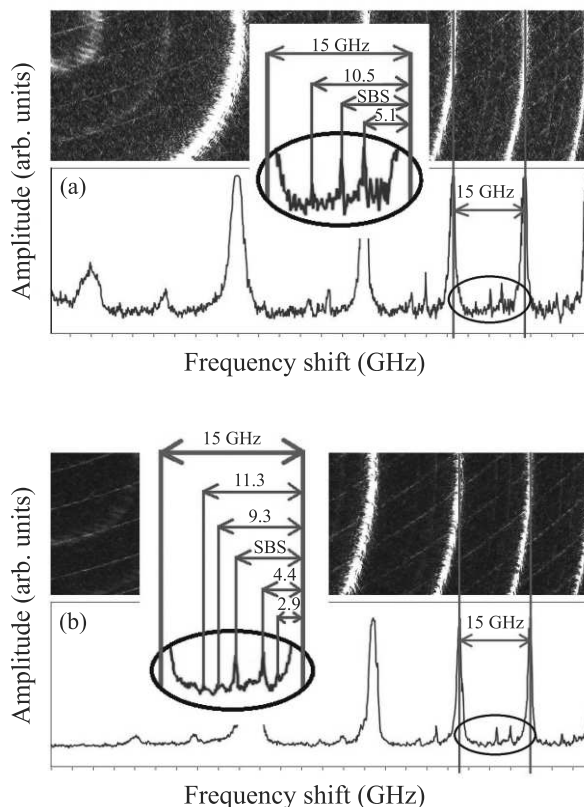


Рис. 3. (Цветной онлайн) Примеры спектров ВКР в суспензиях вирусов, полученные с помощью интерферометра Фабри–Перо. На вставках: 15 ГГц – область дисперсии интерферометра; SBS – ВРМБ – “вперед” – линия вынужденного рассеяния Манделштама–Бриллюэна [12]. (а) – Интерферограмма спектра вынужденного рассеяния в суспензии вируса ВМАльт. Здесь на вставке: 5.1; 10.5 ГГц – линии ВКР. (б) – Интерферограмма спектра вынужденного рассеяния в суспензии вируса ХВК. Здесь на вставке: 2.9; 4.4; 9.3; 11.3 ГГц – линии ВКР

гает пространственные неоднородности его механических параметров. Поэтому использование средних значений динамических характеристик вирусной молекулы могло привести к отличию наблюдаемых в эксперименте собственных частот акустических колебаний и расчетных оценок. Далее, известно (например, [9–11]), что скорость звука в микробиологических объектах, в частности, в ДНК и лизосомах, лежит в пределах 1900–4200 м/с, поэтому наша оценка выглядит заниженной. Кроме того, расхождение может быть связано с тем, что физико-механические характеристики вириона в естественной или модельной (суспензия вирусов в Трис-НСI) среде отличны от свойств вириона, расположенного на подложке при его исследовании зондом атомно-силового микроскопа.

Заклучение. Проведенные эксперименты показали, что низкочастотное вынужденное комбинационное рассеяние позволяет эффективно исследовать спектры собственных частот наночастиц вирусов при их малых концентрациях в водных суспензиях, т.е. в нативной среде. Значения измеренных частот неплохо согласуются с простыми модельными расчетами, позволяющими в первом приближении провести отнесение частот к собственным модам колебаний аксиально-симметричного вируса, рассматриваемого как упругий стержень. Эксперименты показали, что два исследованных типа вируса, имеющих сходную морфологию и размеры, тем не менее имеют разные собственные моды акустических колебаний в диапазоне 1–15 ГГц, которые проявляются в спектрах ВКР, что позволяет рассматривать этот подход как перспективную методику в медицинских и биологических приложениях.

Работа была поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00172, 21-34-70004 мол_a_мос, Российского научного фонда # 22-22-00153.

1. V. Tcherniega, S.M. Pershin, A.F. Bunkin, E.K. Donchenko, O.V. Karpova, A.D. Kudryavtseva, V.N. Lednev, T.V. Mironova, M.A. Shevchenko, M.A. Stokov, and K.I. Zemskov, *Laser Phys. Lett.* **15**, 095603 (2018); <http://doi.org/10.1088/1612-202X/aad28d>.
2. A.F. Bunkin, M.A. Davydov, A.N. Fedorov, M.V. Arkhipenko, V.B. Oshurko, and S.M. Pershin, *JETP Lett.* **113**(11), 733 (2021); DOI 10.1134/S0021364021110047.
3. M.V. Arkhipenko, A.F. Bunkin, M.A. Davydov, O.V. Karpova, V.B. Oshurko, S.M. Pershin, V.N. Streltsov, and A.N. Fedorov, *JETP Lett.* **109**, 578 (2019); DOI 10.1134/S0370274X19090054.
4. O.V. Karpova, M.V. Arkhipenko, S.M. Pershin, M.A. Karpov, A.D. Kudryavtseva, T.V. Mironova, V.I. Savichev, M.A. Shevchenko, N.V. Tcherniega, and S.F. Umanskaya, *Journal of Russian Laser Research* **42**(1), 106 (2021); DOI 10.1007/s10946-020-09935-0.
5. E.K. Donchenko, E.V. Pechnikova, M.Yu. Mishyna, T.I. Manukhova, O.S. Sokolova, N.A. Nikitin, J.G. Atabekov, and O.V. Karpova, *PloS one* **12**(8), e0183824 (2017); doi.org/10.1371/journal.pone.0183824.
6. E. Petrova, N. Nikitin, A. Protopopova, M. Arkhipenko, I. Yaminskii, O. Karpova, and J. Atabekov, *Biochimie* **95**(12), 2415 (2013); DOI 10.1016/j.biochi.2013.09.004.
7. J. Atabekov, E. Dobrov, O. Karpova, and N. Rodionova, *Molecular plant pathology* **8**(5), 667 (2007); DOI 10.1111/j.1364-3703.2007.00420.x.
8. А.Д. Сушко, Е.В. Дубровин, И.В. Яминский, Ю.Ф. Дрыгин, *Наноиндустрия* **6** (2008).
9. M.B. Hakim, S. Lindsay, and J. Powell, *Biopolymers* **23**(7), 1185 (1984); <https://doi.org/10.1002/bip.360230704>.
10. S. Speziale, F. Jiang, C.L. Caylor, S. Kriminski, C.-S. Zha, R.E. Thorne, and T.S. Duffy, *Biophys J.* **85**(5), 3202 (2003); DOI 10.1016/S0006-3495(03)74738-9.
11. M.R. Johnson and G.J. Kearley, *Experimental Methods in the Physical Sciences* **44**, 415 (2013); <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-398374-9.00007-3>.
12. V.S. Gorelik, A.F. Bunkin, M.A. Davydov, A.N. Fedorov, S.M. Pershin, A.Yu. Pyatyshev, and M. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 141101 (2020); DOI 10.1063/5.0024816.

Текущий авторский указатель томов 114–115 ¹⁾

EDN: drvylq

- Alekseev P. A. **114**, 608 (528)
Astafiev A. A. **114**, 740 (665)
Barash Yu. S. **115**, 304 ()
Batulin R. G. **115**, 108 ()
Belik A. A. **114**, 627 (556)
Bera M. K. **115**, 448 ()
Boroun G. R. **114**, 3 (1)
Cheng H. **114**, 435 (371)
Cholakh S. O. **114**, 627 (556)
Danilov A. N. **114**, 351 (303)
Demyanova A. S. **114**, 351 (303)
Deviatov E. V. **115**, 304 ()
Dickmann S. **114**, 657 (585)
Dimri A. K. **115**, 448 ()
Dmitriev S. V. **114**, 351 (303)
Feng Z. -B. **114**, 358 (314)
Fujimori A. **114**, 627 (556)
Goncharov S. A. **114**, 351 (303)
Guo J. **114**, 608 (528)
Guo X. **114**, 435 (371)
Han M. **114**, 435 (371)
Iorsh I. V. **114**, 154 (124)
Ioselevich A. S. **114**, 41 (45)
Irkhin V. Yu. **114**, 625 (551)
Janseitov D. M. **114**, 351 (303)
Jia T. **114**, 435 (371)
Kalenkov M. S. **114**, 659 (593)
Kaysin B. D. **114**, 657 (585)
Kiiamov A. G. **115**, 108 ()
Kolesnikov N. N. **115**, 304 ()
Kolodny S. A. **114**, 154 (124)
Korotin M. A. **114**, 346 (296)
Kozin V. K. **114**, 154 (124)
Kukhareenko A. I. **114**, 627 (556)
Kurmaev E. Z. **114**, 627 (556)
Kuznetsov M. D. **115**, 108 ()
Lebed A. G. **114**, 551 (479);
115, 392 ()
Liang S. **114**, 365 (326)
Likhovid N. A. **114**, 4 (8)
Liu X. **114**, 435 (371)
Minayeva S. A. **114**, 740 (665)
Mohammadpour H. **114**, 777 (707)
Nadtochenko V. A. **114**, 740 (665)
Ogloblin A. A. **114**, 351 (303)
Pantuev V. S. **114**, 4 (8)
Parmar A. **115**, 448 ()
Peshcherenko N. S. **114**, 41 (45)
Qiu H. **114**, 435 (371)
Savchenkov P. S. **114**, 608 (528)
Shakhov A. M. **114**, 740 (665)
Shorokhov A. S. **114**, 787 (719)
Shvetsov O. O. **115**, 304 ()
Sidorov V. A. **114**, 608 (528)
Skryabin Yu. N. **114**, 625 (551)
Smirnova D. A. **114**, 787 (719)
Song F. **114**, 365 (326)
Starastin V. I. **114**, 351 (303)
Streltsov S. V. **114**, 627 (556)
Sun L. **114**, 608 (528)
Taran L. S. **114**, 627 (556)
Tayurskii D. A. **115**, 108 ()
Timonina A. V. **115**, 304 ()
Ustinov A. S. **114**, 787 (719)
Volovik G. E. **114**, 273 (236);
115, 306 ()
Yan R. -Y. **114**, 358 (314)
Zaikin A. D. **114**, 659 (593)
Zainullina V. M. **114**, 346 (296)
Zakhvataev V. E. **114**, 400 (362)
Zhang M. **114**, 365 (326)
Zhang R. **114**, 435 (371)
Zhidkov I. S. **114**, 627 (556)
Абеди С. **114**, 486 (423)
Аверкиев Н. С. **114**, 383 (347)
Агамалян М. А. **115**, 322 ()
Агафонцев Д. С. **114**, 67 (71)
Агеев Э. И. **114**, 749 (681);
115, 213 ()
Аксенов М. Д. **114**, 53 (59)
Аксенов С. Н. **114**, 802 (742)
Алексеев В. А. **114**, 60 (65)
Алешин А. Н. **115**, 10 ()
Алешин П. А. **115**, 10 ()
Алиев В. Ш. **115**, 89 ()
Андреева М. С. **114**, 520 (451)
Андреев И. В. **114**, 669 (616)
Андрианов А. В. **115**, 10 ()
Андрианов Е. С. **114**, 43 (51)
Аникин А. А. **114**, 212 (180)
Анисимов А. Н. **114**, 323 (274);
114, 533 (463)
Арбузов А. Б. **115**, 417 ()
Аронин А. С. **115**, 308 ()
Арсланов Т. Р. **115**, 218 ()
Архипов М. В. **114**, 156 (129);
Архипов М. В. **114**, 298 (250);
115, 3 ()
Архипов Р. М. **114**, 156 (129);
Архипов Р. М. **114**, 298 (250);
115, 3 ()
Асадчиков В. Е. **114**, 674 (620)
Астахов Г. В. **114**, 323 (274)
Афонин Г. В. **115**, 110 ()
Бабенко П. Ю. **114**, 13 (18)
Бабунц Р. А. **114**, 533 (463)
Бабушкин И. **114**, 298 (250)
Багаев В. С. **114**, 96 (98)
Бакаров А. К. **114**, 486 (423)
Баранов П. Г. **114**, 323 (274);
114, 533 (463)
Батулин Р. Г. **115**, 190 ()
Башарин А. А. **114**, 833 (771)
Белозеров Е. И. **114**, 474 (412)
Белослудов В. Р. **115**, 144 ()
Белослудов Р. В. **115**, 144 ()
Белотелов В. И. **115**, 224 ()
Бельская Н. А. **114**, 89 (92)
Бержанский В. Н. **115**, 224 ()
Бессонов В. О. **114**, 360 (321)
Бибичева С. А. **114**, 147 (117)
Благов А. Е. **115**, 170 ()
Бобров А. А. **114**, 604 (524)
Богач А. В. **115**, 150 ()
Богданова Н. А. **114**, 391 (354)
Богданов Ю. И. **114**, 391 (354)
Богословский Н. А. **114**, 383 (347)
Божко Ю. Ю. **115**, 144 ()
Болдырев К. Н. **115**, 40 ()
Борисенко А. С. **114**, 53 (59);
Борисенко А. С. **114**, 291 (243);
114, 553 (486)
Борисова С. Д. **114**, 82 (85)
Борисов А. Э. **115**, 270 ()
Бочкарев С. Г. **114**, 233 (200)
Бражкин В. В. **114**, 541 (470)
Бреев И. Д. **114**, 323 (274);
114, 533 (463)
Брискина Ч. М. **114**, 596 (517)
Бронин С. Я. **114**, 643 (572)
Бундакова А. П. **114**, 533 (463)
Бутылкин В. С. **114**, 586 (507)
Буцько В. Г. **115**, 47 ()
Быков А. А. **114**, 486 (423)
Быченко В. Ю. **114**, 233 (200);
114, 650 (579)
Валеев Б. Ю. **115**, 103 ()
Вальков В. В. **114**, 812 (751)
Варнаков С. Н. **114**, 192 (163)
Вартанян Т. А. **114**, 60 (65)
Василик В. А. **114**, 742 (674)
Васильев П. П. **115**, 35 ();
115, 424 ()
Васин К. В. **115**, 190 ();
115, 420 ()
Вахитов Р. М. **115**, 123 ()
Вдовин Е. Е. **114**, 366 (332)
Вейшторт И. П. **114**, 323 (274)
Вершков В. А. **115**, 360 ()
Винокур В. М. **114**, 72 (76)
Виткалов С. А. **114**, 486 (423)
Вихров Е. В. **114**, 643 (572)
Вишнякова Г. А. **114**, 291 (243)
Вовченко И. В. **114**, 43 (51)
Волков В. А. **115**, 163 ()
Волков М. К. **114**, 199 (167);
114, 353 (309)
Волков Ю. О. **114**, 674 (620)
Воробьев Н. С. **114**, 263 (227)
Воронин А. А. **115**, 437 ()
Высоцкий М. И. **115**, 67 ()

¹⁾В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 114(1)–114(12).

- Габбасов Б. Ф. **115**, 190 ()
 Гаврилкин С. Ю. **114**, 89 (92)
 Гаврилук А. Г. **114**, 802 (742)
 Газизов А. Р. **114**, 756 (687)
 Гайдар С. М. **115**, 417 ()
 Гайнутдинов Р. Х. **114**, 221 (188)
 Галахов В. Р. **114**, 546 (475)
 Гамзатов А. Г. **115**, 218 ()
 Гареева З. В. **114**, 250 (215)
 Гарифуллин А. И. **114**, 221 (188)
 Гарифьянов Н. Н. **114**, 818 (757)
 Гартман А. Д. **114**, 509 (441)
 Гелаш А. А. **115**, 51 ()
 Гец К. В. **115**, 144 ()
 Глазкова Д. А. **115**, 241 ();
115, 315 ()
 Глезер А. М. **115**, 110 ()
 Гоголев А. С. **115**, 170 ()
 Годунов С. И. **115**, 67 ()
 Гожев Д. А. **114**, 233 (200)
 Головенчиц Е. И. **115**, 262 ()
 Головизин А. А. **114**, 291 (243)
 Голубев В. Г. **114**, 526 (456)
 Голяшов В. А. **115**, 315 ()
 Горан А. В. **114**, 486 (423)
 Горбунов А. В. **114**, 479 (417)
 Горчаков А. В. **114**, 304 (256)
 Градусов В. А. **114**, 6 (11)
 Грашин С. А. **115**, 360 ()
 Григорьев А. Д. **114**, 560 (493)
 Григорьев П. Д. **114**, 560 (493)
 Грищенко В. А. **114**, 498 (433);
115, 89 ()
 Гришаков К. С. **114**, 172 (143)
 Гришаков К. С. **115**, 457 ()
 Грызунова Н. Н. **114**, 333 (284)
 Гудин С. А. **115**, 218 ()
 Гудовских А. С. **115**, 213 ()
 Гурин А. С. **114**, 533 (463)
 Гусаков Е. З. **114**, 167 (138)
 Гусев А. А. **115**, 47 ()
 Гусев А. И. **114**, 185 (156)
 Гусев Н. С. **114**, 526 (456)
 Гусев С. А. **114**, 526 (456)
 Давыдов С. Ю. **114**, 372 (337)
 Данилов П. А. **114**, 147 (117);
115, 287 ()
 Дворецкая Л. Н. **114**, 749 (681)
 Дворецкий С. А. **115**, 230 ()
 Дегтяренко Н. Н. **115**, 457 ()
 Дедков Г. В. **114**, 779 (713)
 Демидов С. В. **114**, 723 (649)
 Демин В. А. **115**, 184 ()
 Демишев С. В. **115**, 150 ()
 Денисов Е. А. **114**, 372 (337)
 Дербезов И. А. **114**, 72 (76)
 Дзедзисашвили Д. М. **114**, 339 (289)
 Диеп Х. Т. **114**, 610 (536)
 Долганов В. К. **115**, 236 ()
 Долганов П. В. **115**, 236 ()
 Дормидонов А. Е. **115**, 15 ()
 Доценко Е. **114**, 502 (440)
 Драбинский М. А. **115**, 360 ()
 Дресвянкин Д. Н. **114**, 824 (763)
 Дроздов К. А. **114**, 742 (674)
 Дрофа М. А. **114**, 377 (341)
 Дубинина Т. В. **114**, 742 (674)
 Дубинин С. С. **114**, 24 (29)
 Дураков Д. Е. **114**, 72 (76)
 Дюгаев А. М. **114**, 560 (493)
 Дюжева Т. И. **114**, 541 (470)
 Елисеев Л. Г. **115**, 360 ()
 Еремин Е. В. **114**, 89 (92)
 Еремин М. В. **114**, 31 (35);
 Еремин М. В. **115**, 190 ();
115, 420 ()
 Ермаков Ю. А. **114**, 674 (620)
 Есеев М. К. **114**, 444 (387)
 Естюнин Д. А. **115**, 241 ();
115, 315 ()
 Ефремов А. В. **114**, 546 (475)
 Жаднов Н. О. **114**, 291 (243)
 Жаховский В. В. **115**, 20 ();
115, 80 ()
 Жданов Р. К. **115**, 144 ()
 Желтиков А. М. **114**, 520 (451)
 Желтиков А. М. **115**, 353 ();
115, 437 ()
 Жемчугов Е. В. **115**, 67 ()
 Жидовцев Н. А. **115**, 71 ()
 Жукова М. О. **115**, 3 ()
 Журавлев А. С. **114**, 474 (412)
 Заболотных А. А. **115**, 163 ()
 Заварцев Ю. Д. **115**, 394 ()
 Загитова А. А. **114**, 474 (412)
 Задорожная Л. А. **114**, 596 (517)
 Зайцев-Зотов С. В. **114**, 36 (40)
 Заливако И. В. **114**, 53 (59);
 Заливако И. В. **114**, 291 (243);
114, 553 (486)
 Залозная Е. Д. **115**, 15 ()
 Залялотдинов Т. А. **114**, 212 (180)
 Захарян А. А. **115**, 322 ()
 Звездин А. К. **115**, 224 ()
 Зегря А. Г. **114**, 263 (227);
114, 680 (625)
 Зегря Г. Г. **114**, 263 (227);
114, 680 (625)
 Зеленер Б. Б. **114**, 604 (524);
114, 643 (572)
 Зеленер Б. В. **114**, 643 (572)
 Земцов И. А. **115**, 360 ()
 Зибров И. П. **114**, 541 (470)
 Зиновьев А. Н. **114**, 13 (18)
 Зипунова Е. В. **115**, 176 ()
 Зиятдинова М. З. **114**, 228 (195)
 Зуев Д. А. **114**, 749 (681);
115, 213 ()
 Зыбцев С. Г. **114**, 36 (40)
 Зябловский А. А. **114**, 43 (51)
 Иванов А. А. **115**, 437 ()
 Иванова А. И. **114**, 802 (742)
 Иванов А. В. **115**, 176 ()
 Иванов К. Е. **114**, 661 (609)
 Изюров В. И. **114**, 24 (29)
 Иногамов Н. А. **115**, 20 ();
115, 80 ()
 Исаев Т. А. **114**, 493 (429)
 Исмагилов А. О. **115**, 3 ()
 Исхакзай Просвирин Р. М. Х. И. П.
115, 89 ()
 Иудин В. А. **115**, 213 ()
 Ишханиян А. М. **115**, 401 ()
 Казак Н. В. **114**, 89 (92)
 Казанцев Ю. Н. **114**, 586 (507)
 Кандидов В. П. **115**, 15 ()
 Каневский В. М. **114**, 596 (517)
 Капгарь Л. П. **114**, 579 (501)
 Каркарьян Е. К. **115**, 67 ()
 Карпова А. А. **114**, 263 (227)
 Касахара Й. **114**, 18 (23)
 Катин К. П. **114**, 172 (143)
 Кауль А. Р. **115**, 218 ()
 Кац Е. И. **115**, 236 ()
 Квашнин А. Г. **115**, 322 ()
 Квашнин Д. Г. **115**, 103 ()
 Квон З. Д. **114**, 114 (110);
 Квон З. Д. **114**, 377 (341);
115, 230 ()
 Кисленко В. А. **114**, 311 (263)
 Кисленко С. А. **114**, 311 (263)
 Китаева Г. Х. **114**, 635 (565)
 Киямов А. Г. **115**, 190 ()
 Климовских И. И. **115**, 315 ()
 Клумов Б. А. **114**, 467 (406);
115, 117 ()
 Кобелев Н. П. **115**, 110 ();
115, 308 ()
 Ковалев М. С. **114**, 147 (117);
115, 287 ()
 Ковальчук М. В. **115**, 170 ()
 Кожокарь М. В. **114**, 833 (771)
 Козлов Д. А. **115**, 230 ()
 Колачевский Н. Н. **114**, 53 (59);
 Колачевский Н. Н. **114**, 291 (243);
114, 553 (486)
 Колмычек И. А. **114**, 526 (456);
114, 727 (653)
 Компанец В. О. **115**, 15 ()
 Кончаков Р. А. **115**, 308 ()
 Коржов В. А. **115**, 170 ()
 Коробейщиков Н. Г. **114**, 304 (256)
 Коровушкин М. М. **114**, 339 (289)
 Королева А. В. **115**, 315 ()
 Косов А. Д. **114**, 742 (674)
 Костикова Е. К. **114**, 372 (337)
 Кох К. А. **115**, 315 ()
 Кочаровская О. А. **114**, 789 (729)
 Кочарян В. Р. **115**, 170 ()
 Крайнов В. П. **115**, 401 ()
 Красиков К. М. **115**, 150 ()
 Красин Г. К. **114**, 147 (117)
 Крафтмахер Г. А. **114**, 586 (507)
 Кретова М. А. **115**, 110 ()
 Кривобок В. С. **114**, 96 (98)
 Крушин В. А. **115**, 360 ()
 Крылов И. В. **114**, 742 (674)
 Крючков Д. С. **114**, 291 (243)
 Кудеяров К. С. **114**, 291 (243)
 Кудряшов С. И. **114**, 147 (117);
115, 287 ()
 Кузнецов К. А. **114**, 635 (565)
 Кузнецов Е. А. **114**, 67 (71)
 Кузьмин Е. В. **115**, 287 ()

- Кузьмичева Т. Е. **114**, 685 (630)
 Кузьмичев С. А. **114**, 685 (630)
 Куковицкий Е. Ф. **115**, 270 ()
 Кукушки И. В. **114**, 328 (279)
 Кукушкин И. В. **114**, 474 (412);
114, 669 (616)
 Кулеева Н. А. **115**, 444 ()
 Кулик Л. В. **114**, 474 (412);
114, 479 (417)
 Кумамото А. **114**, 18 (23)
 Кустов П. Н. **115**, 213 ()
 Кутовой С. А. **115**, 394 ()
 Кучинский Э. З. **115**, 444 ()
 Кэмпфер Б. **114**, 579 (501)
 Ланин А. А. **115**, 437 ()
 Ларин А. О. **114**, 749 (681)
 Ларионов А. В. **114**, 479 (417)
 Латышев А. В. **114**, 114 (110)
 Лахин В. П. **115**, 360 ()
 Лебедев В. Г. **115**, 256 ()
 Левков Д. Г. **114**, 723 (649)
 Левченко А. О. **115**, 287 ()
 Леднев В. Н. **115**, 287 ()
 Леонтьев А. А. **114**, 635 (565)
 Леонтьев А. В. **114**, 818 (757)
 Леонтьев А. П. **114**, 727 (653)
 Лихачев К. В. **114**, 323 (274)
 Ли Я. **115**, 437 ()
 Лобок М. Г. **114**, 650 (579)
 Лосев А. С. **115**, 59 ()
 Лукичев В. Ф. **114**, 391 (354)
 Лункин А. В. **115**, 328 ()
 Лысенко С. Е. **115**, 360 ()
 Любутин И. С. **114**, 802 (742)
 Лященко С. А. **114**, 192 (163)
 Магадеев Е. Б. **115**, 123 ()
 Магарилл Л. И. **114**, 78 (81)
 Магомедов М. А. **114**, 762 (693)
 Мазагаева М. К. **114**, 762 (693)
 Майдыковский А. И. **114**,
 526 (456);
114, 727 (653)
115, 297 ()
 Майзлах А. А. **114**, 36 (40)
 Майлыбаев А. А. **114**, 67 (71)
 Макарова А. **114**, 546 (475)
 Макаров А. С. **115**, 110 ();
115, 308 ()
 Макарова Т. П. **115**, 315 ()
 Макаров Г. Н. **115**, 292 ()
 Макаров Д. Н. **114**, 444 (387)
 Максимова О. А. **114**, 192 (163)
 Малышева И. В. **114**, 727 (653)
 Мальцев В. П. **114**, 586 (507)
 Мамин Р. Ф. **114**, 818 (757)
 Мамонов Е. А. **115**, 297 ()
 Мамрашев А. А. **114**, 699 (643)
 Маркелова М. Н. **115**, 218 ()
 Мартовицкий В. П. **114**, 147 (117)
 Маслаков К. И. **114**, 661 (609)
 Маслов М. М. **114**, 172 (143)
 Матвеев В. И. **114**, 444 (387)
 Матвеев О. В. **115**, 379 ()
 Махмудиан М. М. **114**, 620 (545)
 Мельников А. А. **115**, 40 ()
 Мельников А. В. **115**, 360 ()
 Меньшов В. Н. **114**, 768 (699)
 Мигаль Е. А. **115**, 431 ()
 Мильштейн А. И. **114**, 631 (561)
 Миронов А. Ю. **114**, 72 (76)
 Миронович А. А. **114**, 802 (742)
 Митетело Н. В. **115**, 297 ()
 Михайлова Ю. В. **115**, 213 ()
 Михайлов Н. Н. **114**, 377 (341);
115, 230 ()
 Михеев К. Е. **115**, 431 ()
 Мицкан В. А. **114**, 339 (289)
 Мкртчян А. Г. **115**, 170 ()
 Мнев П. Н. **115**, 59 ()
 Мовсисян А. Е. **115**, 170 ()
 Могилевский М. М. **114**, 18 (23);
115, 28 ()
 Могилук Т. И. **114**, 560 (493)
 Можаров А. М. **114**, 749 (681)
 Моисев С. А. **115**, 353 ()
 Моисеенко И. Л. **114**, 18 (23)
 Моргун Л. А. **115**, 270 ()
 Морозова М. А. **115**, 379 ()
 Морозов В. А. **114**, 680 (625)
 Морозов С. В. **114**, 366 (332)
 Москалок О. А. **115**, 10 ()
 Мохов Е. Н. **114**, 323 (274);
114, 533 (463)
 Мошкина Е. М. **114**, 89 (92)
 Музафарова М. В. **114**, 533 (463)
 Муравьев В. М. **114**, 669 (616)
 Мурзина Т. В. **114**, 526 (456);
 Мурзина Т. В. **114**, 727 (653);
115, 297 ()
 Мургазаев А. К. **114**, 762 (693)
 Мусабек Г. К. **114**, 515 (447)
 Мусина Л. И. **114**, 474 (412)
 Муслимов А. Э. **114**, 596 (517)
 Мутыгуллина А. А. **114**, 221 (188)
 Мухин И. С. **114**, 749 (681);
115, 213 ()
 Набиева Л. Я. **114**, 221 (188)
 Нагалок С. С. **114**, 323 (274)
 Напольский К. С. **114**, 727 (653)
 Наумов С. В. **114**, 24 (29);
 Наумов С. В. **114**, 179 (150);
114, 546 (475)
 Немец А. Р. **115**, 360 ()
 Нефедов Ю. А. **114**, 328 (279)
 Нечаев Ю. С. **114**, 372 (337)
 Низамов Б. А. **115**, 281 ()
 Николаев И. В. **114**, 304 (256)
 Николаев Н. Н. **114**, 631 (561)
 Николаев С. Н. **114**, 96 (98)
 Никонов С. А. **114**, 36 (40)
 Новиков В. А. **115**, 67 ()
 Новиков В. Б. **114**, 727 (653)
 Новиков Ю. Н. **114**, 498 (433)
 Номоконов Д. В. **114**, 486 (423)
 Носов А. П. **114**, 24 (29)
 Нургалиев М. Р. **115**, 360 ()
 Нурмухаметов А. Р. **114**, 31 (35);
115, 420 ()
 Овчинников С. Г. **114**, 89 (92);
114, 192 (163)
 Оглобличев В. В. **114**, 24 (29)
 Олейничук Е. А. **114**, 147 (117)
 Ольшанецкий Е. Б. **114**, 377 (341)
 Онищенко Е. Е. **114**, 96 (98)
 Осипов А. А. **115**, 339 ();
115, 411 ()
 Остриков С. А. **115**, 287 ()
 Павлов А. Е. **115**, 417 ()
 Павлов С. В. **114**, 311 (263)
 Пастор А. А. **114**, 60 (65)
 Пастухов В. П. **114**, 242 (208)
 Пахомов А. В. **114**, 156 (129);
 Пахомов А. В. **114**, 298 (250);
115, 3 ()
 Перевалов Т. В. **115**, 89 ()
 Перминов Н. С. **115**, 353 ()
 Перов Е. А. **115**, 80 ()
 Петин А. Н. **115**, 292 ()
 Петрова А. Е. **114**, 318 (269)
 Петрова Е. А. **115**, 213 ()
 Петров П. В. **114**, 383 (347)
 Петров Ю. В. **115**, 80 ()
 Пивоваров А. А. **114**, 199 (167);
114, 353 (309)
 Пискунов Ю. В. **114**, 24 (29)
 Пихлер Г. **115**, 346 ()
 Подливаев А. И. **114**, 172 (143);
115, 384 ()
 Покровский В. Я. **114**, 36 (40)
 Покрышкин Н. С. **114**, 515 (447)
 Половец С. Е. **115**, 150 ()
 Полулях С. Н. **115**, 224 ()
 Попов А. Ю. **114**, 167 (138)
 Попов З. И. **115**, 322 ()
 Потемкин Ф. В. **115**, 71 ();
115, 431 ()
 Почечуев М. С. **114**, 520 (451)
 Прекул А. Ф. **115**, 139 ()
 Прудковский П. А. **114**, 635 (565)
 Прудковский П. А. **114**, 204 (173)
 Пручкина А. А. **114**, 96 (98)
 Пудалов В. М. **115**, 270 ()
 Пушкин А. В. **115**, 431 ()
 Пширков М. С. **115**, 281 ()
 Радноньчев Е. В. **114**, 789 (729)
 Рамазанов М. К. **114**, 762 (693)
 Расковалов А. А. **115**, 51 ()
 Родякина Е. Е. **114**, 114 (110)
 Рожков А. В. **114**, 824 (763)
 Розанов А. Н. **115**, 67 ()
 Розанов Н. Н. **114**, 156 (129);
 Розанов Н. Н. **114**, 298 (250);
115, 3 ()
 Романенко Д. В. **115**, 379 ()
 Романцова Т. В. **114**, 18 (23)
 Ромашкина А. М. **114**, 526 (456)
 Рошин Б. С. **114**, 674 (620)
 Рубан В. П. **115**, 450 ()
 Руднев В. А. **114**, 6 (11)
 Румянцев Б. В. **115**, 431 ()
 Русина Г. Г. **114**, 82 (85)
 Русинов И. П. **114**, 768 (699)
 Рыжков М. С. **115**, 230 ()
 Рябова Л. И. **114**, 742 (674)
 Саакян С. А. **114**, 604 (524)

- Савенков Г. Г. **114**, 680 (625)
 Савицкий И. В. **115**, 437 ()
 Садовников С. И. **114**, 185 (156)
 Садовский М. В. **115**, 444 ()
 Садыков А. Ф. **114**, 24 (29)
 Садыков Р. А. **114**, 802 (742)
 Сазонов С. В. **114**, 102 (104);
 Сазонов С. В. **114**, 160 (132);
 Сазонов С. В. **114**, 437 (380);
115, 207 ()
 Салахов М. Х. **114**, 221 (188)
 Сальников С. Г. **114**, 631 (561)
 Санина В. А. **115**, 262 ()
 Сапожников М. С. **114**, 526 (456)
 Саргсян А. **115**, 346 ()
 Саркисян Д. **115**, 346 ()
 Саутенков В. А. **114**, 604 (524)
 Сафроненков Д. А. **114**, 635 (565)
 Сафронов К. Р. **114**, 360 (321)
 Сахин В. О. **115**, 270 ()
 Сбойчаков А. О. **114**, 824 (763)
 Сдвиженский П. А. **115**, 287 ()
 Седова М. В. **114**, 742 (674)
 Секербаев К. С. **114**, 515 (447)
 Селиванов Ю. Г. **115**, 40 ()
 Семенин Н. В. **114**, 553 (486)
 Семенов Н. Д. **114**, 669 (616)
 Семериков И. А. **114**, 53 (59);
114, 553 (486)
 Семук Е. Ю. **115**, 224 ()
 Сенков В. М. **114**, 228 (195)
 Сердобинцев П. Ю. **114**, 60 (65)
 Серебрянников Е. Е. **115**, 437 ()
 Сиддхартха Саксена С (Монту)
114, 802 (742)
 Скороходов А. М. **114**, 323 (274)
 Случанко Н. Е. **115**, 150 ()
 Смирнов Д. **114**, 546 (475)
 Смирнов Д. В. **114**, 242 (208)
 Смольников А. Г. **114**, 24 (29)
 Солин Н. И. **114**, 179 (150)
 Соловаров Н. К. **115**, 394 ()
 Соловьев Д. А. **114**, 212 (180)
 Соловьев Л. А. **114**, 89 (92)
 Соломонов Ю. С. **114**, 263 (227)
 Сория С. **115**, 297 ()
 Стенищев И. В. **114**, 833 (771)
 Степанов Е. А. **114**, 520 (451);
115, 437 ()
 Стишов С. М. **114**, 318 (269)
 Стремоухов С. Ю. **115**, 431 ()
 Стрыгин И. С. **114**, 486 (423)
 Сулейманова Д. З. **115**, 71 ()
 Сун Я. **115**, 213 ()
 Суханов А. А. **115**, 394 ()
 Суханова Е. В. **115**, 322 ()
 Спецуро Н. Г. **114**, 147 (117)
 Табачкова Н. Ю. **114**, 36 (40)
 Таланов Ю. И. **115**, 270 ()
 Тарасенко С. В. **115**, 94 ()
 Тарасов А. П. **114**, 596 (517)
 Тарасов В. Ф. **115**, 394 ()
 Таргонский А. В. **115**, 170 ()
 Таурбаев Е. Т. **114**, 515 (447)
 Тейтельбаум Г. Б. **115**, 270 ()
 Терещенко О. Е. **115**, 315 ()
 Тетерин А. Ю. **114**, 661 (609)
 Тетерин Ю. А. **114**, 661 (609)
 Тимофеев В. Б. **114**, 479 (417)
 Тимошенко В. Ю. **114**, 515 (447)
 Тихонов А. М. **114**, 674 (620)
 Ткаченко В. А. **114**, 114 (110)
 Ткаченко О. А. **114**, 114 (110)
 Токсумаков А. Н. **115**, 103 ()
 Троян И. А. **114**, 802 (742)
 Тсучия Ф. **114**, 18 (23)
 Турьянский А. Г. **114**, 228 (195)
 Удинцева М. С. **114**, 546 (475)
 Усольцев А. С. **115**, 270 ()
 Устинов А. С. **114**, 509 (441)
 Устинов Н. В. **114**, 437 (380)
 Утегулов Ж. Н. **114**, 515 (447)
 Фархтдинов Б. Р. **114**, 723 (649)
 Фастовец Д. В. **114**, 391 (354)
 Федоров М. В. **114**, 311 (263)
 Федотов А. Б. **114**, 520 (451);
115, 437 ()
 Федотов И. В. **114**, 520 (451)
 Федюхин Л. А. **114**, 304 (256)
 Федянин А. А. **114**, 360 (321);
 Федянин А. А. **114**, 509 (441);
115, 157 ()
 Филипов В. Б. **115**, 150 ()
 Филипов А. В. **115**, 197 ()
 Фишер П. С. **114**, 586 (507)
 Фомин И. А. **114**, 269 (232)
 Форгова С. В. **115**, 80 ()
 Фрейман В. М. **114**, 263 (227)
 Хабанов Ф. О. **115**, 360 ()
 Хабарова К. Ю. **114**, 53 (59);
 Хабарова К. Ю. **114**, 291 (243);
114, 553 (486)
 Хайрулин И. Р. **114**, 789 (729)
 Ханин Ю. Н. **114**, 366 (332)
 Ханнанов Б. Х. **115**, 262 ()
 Харинцев С. С. **114**, 756 (687)
 Харитонов А. В. **114**, 756 (687)
 Харчев Н. К. **115**, 360 ()
 Хачатурова Т. А. **115**, 47 ()
 Хилков С. А. **115**, 176 ()
 Хисамеева А. Р. **114**, 328 (279)
 Хомский Д. И. **115**, 444 ()
 Хоник В. А. **115**, 110 ();
115, 308 ()
 Хорошилов А. Л. **115**, 150 ()
 Хохлов В. А. **115**, 20 ()
 Храпак А. Г. **114**, 615 (540)
 Храпак С. А. **114**, 615 (540)
 Худайбердиев Д. А. **115**, 230 ()
 Ху М. **115**, 437 ()
 Цзизао Ц. Ч. **115**, 110 ()
 Пышкин А. Н. **115**, 3 ()
 Чаплик А. В. **114**, 78 (81);
114, 620 (545)
 Чаповский П. Л. **114**, 699 (643)
 Чекалин С. В. **115**, 15 ();
115, 40 ()
 Чекерес О. С. **115**, 59 ()
 Чен Л. -Дж. **115**, 144 ()
 Чен С. М. **114**, 250 (215)
 Ченцов С. И. **114**, 96 (98)
 Чень Ц. **115**, 287 ()
 Черетаева А. О. **114**, 372 (337)
 Чернозатонский Л. А. **115**, 103 ();
115, 184 ()
 Чернышов А. А. **114**, 18 (23)
 Чернышов А. А. **115**, 28 ()
 Черосов М. А. **115**, 190 ()
 Чибирев А. О. **114**, 818 (757)
 Чиглинцев Э. О. **114**, 291 (243)
 Чирвоный В. С. **114**, 515 (447)
 Чугуевский В. И. **114**, 833 (771)
 Чугунин Д. В. **114**, 18 (23);
115, 28 ()
 Чулков Е. В. **114**, 82 (85);
114, 768 (699)
 Чупраков С. А. **114**, 24 (29)
 Шабдан Е. **114**, 515 (447)
 Шавров В. Г. **115**, 94 ()
 Шамин С. Н. **114**, 546 (475)
 Шарофуллин И. Ф. **114**, 610 (536)
 Шашков Е. В. **114**, 263 (227)
 Шелухин Д. А. **115**, 360 ()
 Шепелев В. В. **115**, 80 ()
 Шергин А. П. **114**, 13 (18)
 Шикин А. М. **115**, 241 ();
115, 315 ()
 Шилкин Д. А. **115**, 157 ()
 Ширделкавар А. **114**, 221 (188)
 Шицевалова Н. Ю. **115**, 150 ()
 Шишков В. Ю. **114**, 43 (51)
 Шорохов А. С. **114**, 509 (441)
 Шпатаковская Г. В. **114**, 798 (737)
 Шурыгина Н. А. **114**, 372 (337)
 Щеголихина Н. И. **115**, 139 ()
 Щепетильников А. В. **114**,
 328 (279)
 Элиович Я. А. **115**, 170 ()
 Юдин В. Е. **115**, 10 ()
 Юманс Д. Р. **115**, 59 ()
 Юсупов Р. **115**, 190 ()
 Яковлева В. В. **114**, 323 (274)
 Яковлев И. А. **114**, 192 (163)
 Яковлев С. Л. **114**, 6 (11)
 Якунин В. Г. **114**, 515 (447)
 Яревский Е. А. **114**, 6 (11)
 Яржемский В. Г. **114**, 661 (609)
 Ярошевич А. С. **114**, 114 (110)
 Ярошенко В. В. **115**, 213 ()
 Ясников И. С. **114**, 333 (284)

Информация для авторов

EDN: dsdgyr

Журнал “Письма в ЖЭТФ” (и его англоязычная версия “JETP Letters”) публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.
- Миниобзоры на наиболее актуальные “горячие” темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.
- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

“Письма в ЖЭТФ” является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках¹⁾. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В “JETP Letters” все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК “Наука/Интерпериодика”. Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двухколоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер миниобзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи²⁾, с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF-8³⁾, кодировка KOI8-R⁴⁾).

Статьи в редакцию можно направлять

- по электронной почте letters@kapitza.ras.ru – направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (.ps), EncapsulatedPostScript (.eps) или PaintBrush (.pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроенными рисунками.
- по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, “Письма в ЖЭТФ” – два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, может быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

¹⁾<http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml#sub1>

²⁾<http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/example.tex>

³⁾<http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/jetpl.cls>

⁴⁾<http://www.jetpletters.ru/tex/koi/jetpl.cls>

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов или членов Редколлегии.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу, с учетом мнения рецензентов. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала “JETP Letters”, наш журнал “Письма в ЖЭТФ” с середины 2016 года лишен возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в “Письмах в ЖЭТФ” расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале “JETP Letters”.

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — *Учреждения, где работают авторы (включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов)*

Дата поступления

Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. V. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP **71**, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из “Писем в ЖЭТФ” в “JETP Letters” все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторы, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются “on-line” в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно найти на WWW-странице “Писем в ЖЭТФ” (<http://www.jetpletters.ru/>).

Дополнительный материал

Журнал “Письма в ЖЭТФ” предоставляет авторам возможность публикации **Дополнительного материала**. **Дополнительный материал**, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В **Дополнительный материал** помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. **Дополнительный материал** не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается **на английском языке** в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы **Дополнительного материала** могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано “Дополнительный материал”. В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла **Дополнительного материала** совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано “Дополнительный материал к статье {название статьи}”. Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами **Дополнительный материал** рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка **Дополнительного материала** ответственность ложится на авторов.

Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес **Дополнительного материала** приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}

Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

Дополнительный материал не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение **Дополнительного материала** должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

Комментарии в журнале “Письма в ЖЭТФ”

Журнал “Письма в ЖЭТФ” публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария – если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)⁵⁾.

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его ошибочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

⁵⁾<http://www.jetpletters.ru/ru/supp.shtml>

Миниобзоры

Журнал «Письма в ЖЭТФ» в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал «заказные» мини-обзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РФН. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению миниобзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров – см. на

<http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml>

Миниобзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

Содержание
Том 115, выпуск 7
Поля, частицы, ядра

Осипов А.А. π^0 - η - η' смешивание в теории с четырехкварковыми взаимодействиями 411

Астрофизика и космология

Арбузов А.Б., Гайдар С.М., Павлов А.Е. Статический казимировский конденсат биспинорного поля во вселенной Фрийдмана 417

Оптика, лазерная физика

Васин К.В., Еремин М.В., Нурмухаметов А.Р. К теории оптического диода на ионах железа в $\text{FeZnMo}_3\text{O}_8$ 420

Васильев П.П. Режим сильной связи и осцилляции Раби в $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ гетероструктурах как следствие конденсации электронно-дырочных пар при комнатной температуре 424

Румянцев Б.В., Михеев К.Е., Пушкин А.В., Мигаль Е.А., Стремоухов С.Ю., Потемкин Ф.В. Генерация оптических гармоник при взаимодействии высокоинтенсивного (до 10^{14} Вт/см²) фемтосекундного лазерного излучения среднего ИК диапазона лазерной системы на кристалле Fe:ZnSe с плотной ламинарной газовой струей 431

Савицкий И.В., Степанов Е.А., Ланин А.А., Воронин А.А., Серебрянников Е.Е., Иванов А.А., Ху М., Ли Я., Федотов А.Б., Желтиков А.М. Измерение временной структуры поля и фазы несущей однопериодных импульсов ближнего и среднего инфракрасного диапазона . 437

Конденсированное состояние

Кучинский Э.З., Кулеева Н.А., Хомский Д.И., Садовский М.В. Эффект Холла в легированном моттовском диэлектрике: DMFT-приближение 444

Parmar A., Dimri A.K., Vera M.K. A quantum dynamical approach to various scattering mechanisms and their influences on thermal conductivity of Sr- and Zn-doped La_2CuO_4 high temperature superconductor cuprate 448

Рубан В.П. Прямая и обратная прецессия массивного вихря в бинарном бозе-конденсате 450

Гришаков К.С., Дегтяренко Н.Н. Полуметаллическая метастабильная твердая атомарная фаза азота 457

Содержание

Том 115, выпуск 8

Поля, частицы, ядра

Kotikov A.V. α_s in DIS scheme 467

Хоперский А.Н., Надолинский А.М. Тормозное излучение при нерезонансном неупругом рассеянии фотона атомным ионом 469

Оптика, лазерная физика

Потылицын А.П., Алексеев Б.А., Вуколов А.В., Шевелев М.В., Балдин А.А., Блеко В.В., Каратаев П.В., Кубанкин А.С. Монохроматическое оптическое излучение Вавилова–Черенкова умеренно релятивистских ионов в радиаторах с частотной дисперсией 474

Тотьменинов Е.М., Конев В.Ю., Климов А.И., Пегель И.В. Экспериментальная реализация способа генерации последовательности ультракоротких гигаваттных импульсов черенковского сверхизлучения с наносекундным периодом следования 479

Конденсированное состояние

Жуков А.А. Неоднородность протекания тока в нанопроводах InN высокого качества 484

Элиович Я.А., Овчинникова Е.Н., Козловская К.А., Жорнак М., Вайгель Т., Лудт К., Благов А.Е., Дмитриенко В.Е., Писаревский Ю.В., Ковальчук М.В. Возможность контролируемого влияния на атомно-кристаллическую структуру парателлурита с помощью возбуждения стоячей ультразвуковой волны 492

Volovik G.E. Quantum turbulence and Planckian dissipation 498

Король А.О., Капитан В.Ю., Пержу А.В., Падалко М.А., Капитан Д.Ю., Волотовский Р.А., Васильев Е.В., Рыбин А.Е., Овчинников П.А., Андрющенко П.Д., Макаров А.Г., Шевченко Ю.А., Ильюшин И.Г., Солдатов К.С. Вычисление основных состояний спиновых стекол с использованием ограниченной машины Больцмана 500

Курбанова Д.Р., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А. Фазовая диаграмма четырехвершинной модели Поттса с конкурирующими обменными взаимодействиями 505

Методы теоретической физики

Мишняков В., Супрун П. О дифференциальных уравнениях для диаграмм Фейнмана (Миниобзор) 512

Квантовая информатика

Богданов Ю.И., Богданова Н.А., Фастовец Д.В., Лукичев В.Ф. Исследование свойств когерентности и запутанности макроскопических квантовых интерферирующих альтернатив 520

Биофизика

Бункин А.Ф., Федоров А.Н., Давыдов М.А., Архипенко М.В., Никитин Н.А., Першин С.М. Вынужденное комбинационное рассеяние в суспензиях вируса мозаики альтернариды и X-вируса картофеля в диапазоне частот 1–15 ГГц	528
Текущий авторский указатель томов 114–115	532
Информация для авторов	536

