

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ЖУРНАЛ  
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ  
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 161, ВЫПУСК 5

МАЙ 2022

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Комментарий к статье «Достаточно ли состояний ловушек (Decoy state-метода) для гарантии секретности ключей в квантовой криптографии?» С. Н. Молоткова, К. С. Кравцова, М. И. Рыжкина и к поправке к этой статье ..... Кронберг Д. А., Киктенко Е. О., Трушечкин А. С., Федоров А. К. 627
- Законы дисперсии четырехуровневого атома с эквидистантным энергетическим спектром при высоком уровне возбуждения ..... Коровой О. В. 631
- Оптические релаксационные явления в парах рубидия, помещенных в кювету с антирелаксационным покрытием при бихроматическом лазерном облучении ... Атутов С. Н., Сорокин В. А. 652
- Лазерная накачка щелочных атомов в условиях сохранения спинового состояния ядра при столкновениях в газовой ячейке ..... Баранцев К. А., Литвинов А. Н., Пазгалёв А. С., Вершовский А. К. 657
- Безызлучательный переход  ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$  и  ${}^1\tilde{E} \rightarrow {}^3A_2$  в  $NV^-$ -центре в алмазе ... Белоусов Ю. М. 668
- Генерация оптических частотных гребенок в оптическом микрорезонаторе на длине волны 780 нм в режиме затягивания при накачке лазерным диодом ..... Шитиков А. Е., Волошин А. С., Горелов И. К., Лоншаков Е. А., Миньков К. Н., Дмитриев Н. Ю., Кондратьев Н. М., Лобанов В. Е., Биленко И. А. 683
- Электростатическое взаимодействие заряженного диэлектрического шара с плоской заряженной границей однородных диэлектриков ..... Филиппов А. В. 691

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

## ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Эффективный показатель преломления двумерных пористых композитов .....	702
..... Родионов С. А., Мерзликин А. М.	
Влияние атомов Со на электронную структуру топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ и $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ...	711
..... Макарова Т. П., Естюнин Д. А., Фильнов С. О., Глазкова Д. А., Пудиков Д. А., Рыбкин А. Г., Гогина А. А., Алиев З. С., Амирасланов И. Р., Мамедов Н. Т., Кох К. А., Те- рещенко О. Е., Шикин А. М., Отроков М. М., Чулков Е. В., Климовских И. И.	

## ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Невзаимность распространения обменно-дипольных спиновых волн в двуслойных магнитных пленках со скрещенной намагниченностью слоев .....	720
..... Пойманов В. Д., Кругляк В. В.	
Влияние электрического тока на спиновую поляризацию электронов в материалах с неоднородной намагниченностью .....	737
..... Бебенин Н. Г.	
Частота спин-трансферного наноосциллятора на основе перпендикулярной туннельной наногетероструктуры с ненулевой эллиптичностью .....	746
..... Шубин Ю. Н., Машаев М. Х., Ведяев А. В., Стрелков Н. В.	
Структуры основного состояния модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле .....	753
..... Бадиев М. К., Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Магомедов М. А.	

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Равновесные киральные краевые токи спиновых подуровней Ландау .....	760
..... Дорожкин С. И.	

## СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Диагностика микрочастиц на поверхности воды .....	767
..... Лебедева Е. В., Дюгаев А. М., Григорьев П. Д.	

# КОММЕНТАРИЙ К СТАТЬЕ «ДОСТАТОЧНО ЛИ СОСТОЯНИЙ ЛОВУШЕК (DECOY STATE-МЕТОДА) ДЛЯ ГАРАНТИИ СЕКРЕТНОСТИ КЛЮЧЕЙ В КВАНТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ?»

## С. Н. МОЛОТКОВА, К. С. КРАВЦОВА, М. И. РЫЖКИНА И К ПОПРАВКЕ К ЭТОЙ СТАТЬЕ

*Д. А. Кронберг<sup>a,b,c\*</sup>, Е. О. Киктенко<sup>a,b,d</sup>, А. С. Трушечкин<sup>a,b,d</sup>, А. К. Федоров<sup>d</sup>*

<sup>a</sup> Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

<sup>b</sup> Российский квантовый центр  
143025, д. Сколково, Москва, Россия

<sup>c</sup> Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)  
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

<sup>d</sup> Кафедра математики и Центр квантовых коммуникаций НТИ,  
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»  
119049, Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 мая 2021 г.,  
после переработки 20 ноября 2021 г.  
Принята к публикации 21 ноября 2021 г.

В статье [1] утверждается, что метод обманных состояний (“decoy state method”, другой перевод на русский язык — «метод состояний-ловушек») в протоколе квантовой криптографии BB84 завышает достижимую скорость генерации секретного ключа и потому генерируемый ключ фактически не является секретным. Это утверждение является результатом ошибки, которую авторы статьи признали в поправке [2], однако там также были допущены неверные утверждения. Таким образом, неправильные утверждения в работах [1, 2] привели к неверным выводам.

DOI: 10.31857/S0044451022050017  
EDN: DSGFLZ

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Основной результат статьи [1] выражается в неравенстве (30) и графиках на рис. 2, в которых сравниваются достижимые длины (эквивалентно — достижимые скорости генерации) секретного ключа, рассчитанные для атаки расщеплением по числу фотонов (обычно рассматриваемой в методе обманных состояний) и для альтернативной атаки светоделителем. На основании этого неравенства и этих графиков утверждается, что первая величина больше второй, т. е. метод обманных состояний в настоящем виде завышает достижимую скорость генерации секретного ключа. Однако в неравенстве (30)

скорость генерации секретного ключа, рассчитанная для атаки расщеплением по числу фотонов, вычислена неверно: перед  $1 - h(e_1)$  должен присутствовать множитель  $Q_1(\mu)/Q(\mu)$  — ср. с формулой (9), которая записана правильно. Авторы признали это в поправке к статье [2], но допустили ряд новых неверных утверждений, итогом чего явился вывод о неполноте доказательства стойкости для метода обманных состояний.

### 2. ВОПРОС ЗАВИСИМОСТИ МЕТОДА ОБМАННЫХ СОСТОЯНИЙ ОТ МОДЕЛЬНЫХ ПРЕДПОЛОЖЕНИЙ

Как в работе [1], так и в поправке [2] утверждается, что в методе обманных состояний используются модельные предположения о параметрах канала и

\* E-mail: dmitry.kronberg@gmail.com

детекторов. Так, в частности, в статье-поправке [2] говорится: «... Оценка информации подслушивателя, в отличие от Decoy state-оценок, не содержит никаких модельных предположений о параметрах канала и детекторов (квантовой эффективности  $\eta$ , вероятности  $p_d$  темновых шумов)». В статье [3] говорится о том же: «Протокол Decoy State явно использует предположения о свойствах лавинных однофотонных детекторов, так как в протоколе требуется отличать состояния ослабленного лазерного излучения с разным средним числом фотонов, что неприемлемо, поскольку свойства детектора, например, квантовая эффективность, могут флуктуировать в процессе регистрации квантовых состояний, т. е. в формулу для длины секретного ключа напрямую входят квантовая эффективность однофотонных детекторов, что неприемлемо, поскольку квантовая эффективность флуктурует со временем». Однако на самом деле в методе обманных состояний легитимные пользователи не опираются на знание этих характеристик, а оценивают их исходя из наблюдаемых параметров.

Метод обманных состояний используется для оценки величин  $Y_k$ . В статье [4] (в которой излагается метод обманных состояний и на которую ссылаются и авторы статьи [1])  $Y_k$  определяется как условная вероятность того, что на приемной стороне сработает один из детекторов, при условии, что на стороне отправителя посылка содержала  $k$  фотонов. В разд. 4 статьи [1] дается вместо этого другое определение: «Пусть  $Y_k$  — условная вероятность того, что подслушиватель оставит данное среднее число фотонов  $k$  в посылке, которое будет доставлено на приемную сторону для детектирования, возможно через идеальный без потерь канал связи». Но, как видно из определения работы [4], величина  $Y_k$  на самом деле учитывает не только действия перехватчика, но и характеристики оборудования легитимных пользователей: показатель затухания в оптоволоконной линии связи, неполную эффективность детекторов, показатель темновых шумов и т. д. — все эти эффекты учитываются в оценке  $Y_k$ . Никакие модельные предположения при этом не используются ввиду общности определения  $Y_k$ .

Также заметим, что в статье [1] индекс  $k$  в величине  $Y_k$  интерпретируется как количество фотонов, оставляемое подслушивателем, а не как количество фотонов в посылке отправителя. Помимо этого, при определении величин  $Q_k(\mu)$ , характеризующих совместную вероятность отправки  $k$  фотонов и срабатывания детектора на приемной стороне, в правой части формулы (7), в которой введены эти величи-

ны, не должно быть экспонент, стоящих перед знаком суммы, так как они должны входить в величины  $Q_k(\mu)$  и  $Q_k(\nu_i)$ , соответственно. В принципе, определения могут отличаться от соответствующих определений в основных работах по методу обманных состояний, однако это должно приводить к другому выражению для длины секретного ключа (9) в [1].

После формулы (13) статьи [1] авторы пишут: «Если лавинный детектор на приемной стороне имеет не единичную квантовую эффективность, то в этом случае в формулах (7), (8), (10)–(13) нужно провести замену  $\mu \rightarrow \eta\mu$ ». Аналогично далее в разд. 6 говорится, что эти интенсивности надо умножить на коэффициент прохождения канала связи  $T(L)$ . Однако в величине

$$Q_k(\mu) = e^{-\mu} \frac{\mu^k}{k!} Y_k \quad (1)$$

интенсивность  $\mu$  участвует только в качестве вероятности испускания  $k$  фотонов на передающей стороне, и она не зависит от затухания в линии связи, поэтому в этом выражении никакие члены не следует умножать на  $\eta T(L)$ . Все потери в канале связи и детекторах, а также действия перехватчика, включены в параметр  $Y_k$ , который зависит от числа фотонов  $k$ , но не зависит от интенсивности  $\mu$ . Выражения для  $Y_k$  в условиях отсутствия перехвата действительно будут содержать показатель затухания канала:

$$Y_k \approx p_d + \eta_k = p_d + 1 - (1 - \eta T(L))^k. \quad (2)$$

Здесь мы сначала следуем обозначениям [4] (формулы (5)–(7)), где  $\eta_k$  — вероятность доставки и детектирования состояния с  $k$  фотонами, а затем переходим к обозначениям [1] и выражаем  $\eta_k$  через показатель затухания  $T(L)$  и эффективность детекторов  $\eta$ . Как видно, только  $Y_k$  зависят от затухания в линии связи и показателей оборудования. Скорость генерации секретного ключа (выражение (9) в работе [1]) включает величины  $Y_1$  и  $e_1$ , которые и оцениваются в методе обманных состояний.

Формулы (29) в статье [1] должны записываться следующим образом:

$$Y_1 \approx p_d + \eta T(L), \quad (3)$$

$$e_1 = \frac{p_d}{2Y_1}. \quad (4)$$

Смысл формулы (3) состоит в том, что один из детекторов приемной стороны срабатывает, либо если произошло темновое срабатывание, либо фотон



не поглотился в канале связи или детекторе и привел к срабатыванию детектора. Вероятность темного срабатывания —  $p_d$ , вероятность непоглощения фотона —  $\eta T(L)$ ,  $T(L) = 10^{-\delta L/10}$  — коэффициент прохождения в линии связи длины  $L$ ,  $\delta$  — удельный коэффициент потерь. Совместная вероятность этих двух событий пренебрежимо мала. Как и в [1], мы предполагаем, что ошибки возникают только из-за темнового шума, а оптическая схема приемной стороны настроена идеально.

Доля ошибок в позициях, полученных из однофотонных посылок, равна отношению вероятности ошибочного приема однофотонной посылки  $p_d/2$  к общей вероятности приема однофотонной посылки  $Y_1$ . То, что вторая формула в (29) неверна, можно понять и по тому, что если  $p_d > 2\eta$ , то доля ошибок получается больше единицы, а величина  $h(e_1)$  не определена вовсе, поскольку содержит член  $\log(1 - e_1)$ . Напротив, правая часть (4) не может быть больше  $1/2$ , как видно из (3). Отметим, что условие  $p_d > 2\eta$  вряд ли может выполняться на практике, но формально ничему не противоречит. К тому же, перед формулой (29) авторы пишут: «При малых  $\eta_{1,2} \rightarrow 0$  получаем».

Отметим, что первая формула в (29) дублирует формулу (7) из работы [4], однако в статье [1] под  $\eta$  подразумевается эффективность детектора на приемной стороне, а потери в линии связи и детекторах равны  $\eta T(L)$ , тогда как в [4] через  $\eta$  описываются общие потери в детекторах и линии связи, что можно видеть в формулах (5) и (6) в [4].

### 3. НЕКОРРЕКТНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ХОЛЕВО

Во Введении к основной статье [1] говорится: «В данной работе построен явный пример простой атаки со светоделителем, при которой длина секретного ключа получается принципиально меньше, чем по Decoy state-методу», при этом в статье-поправке [2] уже не предлагается конструктивных примеров атаки, однако повторяются утверждения о недоказанной стойкости метода обманных состояний.

В статье-поправке [2] было отмечено, что в основной формуле (30) исходной статьи [1] пропущен ключевой множитель. Однако этот множитель ошибочно указан как  $e^{-\mu}$  (где  $\mu$  — среднее число фотонов в информационных посылках). На самом деле это множитель  $Q_1(\mu)/Q(\mu)$ , который соответствует доле испущенных однофотонных посылок среди зарегистрированных на приемной стороне, в то время как множитель  $e^{-\mu}$  есть доля вакуумных посылок среди информационных посылок.

Далее в статье-поправке в качестве оценки информации противника используется величина Холево исходного ансамбля состояний. Эта оценка названа консервативной. Однако в общем случае эта величина не является ни консервативной, ни достижимой оценкой информации противника о ключе. Разберем оба этих утверждения.

В статье-поправке [2] справедливо утверждает-ся про величину Холево: «Данная граница включает в себя информацию от всех компонент состояния: однофотонных, двухфотонных и т. д.». Таким образом, авторы признают, что эта оценка для противника достижима, только когда он забирает себе, в частности, все однофотонные посылки. Но в этом случае однофотонные посылки уже не дойдут до приемной стороны, и метод обманных состояний даст строго нулевую длину ключа, поэтому в статье-поправке авторы некорректно сравнивают длины ключей. Применение оценки на основе величины Холево игнорирует основной результат квантовой криптографии: доказательство стойкости протокола BB84 в однофотонном случае, так как в этой оценке полагается, что противник получает всю информацию о ключе из однофотонных посылок, но при этом эти посылки доходят до приемной стороны без превышения критической доли ошибок. В частности, величина Холево выходного ансамбля состояний в протоколе BB84 со строго однофотонным источником равна единице (т. е. максимально возможному значению), но, тем не менее, протокол, как хорошо известно, является стойким. Таким образом, величина Холево в общем случае не является достижимой для противника.

Также эта величина не является в общем случае и консервативной оценкой, т. е. оценкой сверху информации противника о ключе. А именно, информация противника об одном бите сырого ключа может быть и больше величины Холево исходного ансамбля вследствие постселекции, что не учитывается авторами. В качестве примера допустим, что легитимные стороны используют источник с пуассоновской статистикой числа фотонов и не применяют метод обманных состояний. Тогда, если противник проводит атаку расщеплением по числу фотонов с блокировкой однофотонных посылок, он получает полную информацию о ключе. Таким образом, его информация превосходит величину Холево исходного ансамбля состояний (которая с учетом вакуумных посылок равна  $1 - e^{-\mu}$ , т. е. меньше единицы). Постселекция заключается в данном случае в отбрасывании тех позиций, в которых приемная сторона не зарегистрировала фотон. Следовательно, ис-

пользование величины Холево исходного ансамбля для оценки информации противника относительно ансамбля после постселекции некорректно.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подробное описание метода обманных состояний можно найти, например, в работах [4, 5]. Важно лишь в очередной раз отметить, что уязвимости в рамках стандартной используемой модели в методе обманных состояний отсутствуют.

Таким образом, в данном Комментарии показано, что результаты статьи [1] основаны на неверном понимании метода обманных состояний, а именно, утверждении, что метод зависит от модельных предположений о канале связи и детекторах, а также на неверном учете затухания.

В статье-поправке [2] некорректно используется величина Холево для оценки информации противника, что приводит к неверному выводу о недоказанной стойкости метода обманных состояний. Фак-

тически, эти рассуждения игнорируют основной результат квантовой криптографии о стойкости протокола BB84 со строго однофотонными посылками, поскольку применяемая оценка допускает, что информация об однофотонных посылках полностью известна противнику.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. С. Н. Молотков, К. С. Кравцов, М. И. Рыжкин, ЖЭТФ **155**, 636 (2019).
2. С. Н. Молотков, К. С. Кравцов, М. И. Рыжкин, ЖЭТФ **156**, 379 (2019).
3. К. А. Балыгин, В. И. Зайцев, А. Н. Климов и др., Письма в ЖЭТФ **105**, 570 (2017).
4. X. Ma, B. Qi, Y. Zhao, H.-K. Lo, Phys. Rev. A **72**, 012326 (2005).
5. А. С. Трушечкин, Е. О. Киктенко, Д. А. Кронберг, А. К. Федоров, УФН **191**, 93 (2021).

# ЗАКОНЫ ДИСПЕРСИИ ЧЕТЫРЕХУРОВНЕВОГО АТОМА С ЭКВИДИСТАНТНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ ПРИ ВЫСОКОМ УРОВНЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

*О. В. Коровай\**

*Приднестровский государственный университет им. Т. Г. Шевченко  
MD-3300, Тирасполь, Молдова*

Поступила в редакцию 28 июля 2021 г.,  
после переработки 21 октября 2021 г.  
Принята к публикации 22 октября 2021 г.

Получен закон дисперсии для системы четырехуровневых атомов с эквидистантным энергетическим спектром, взаимодействующих с резонансным лазерным излучением, с учетом трех последовательных однофотонных оптически разрешенных переходов, двух двухфотонных переходов, а также прямого трехфотонного перехода. Показано, что закон дисперсии состоит из четырех поляритонных ветвей. С использованием приближения заданной плотности фотонов предсказываются эффекты расталкивания и притяжения ветвей закона дисперсии, их пересечение, самосогласованное изменение силы связи фотонов с атомами.

DOI: 10.31857/S0044451022050029

EDN: DSHOEX

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение явлений взаимодействия лазерного излучения с веществом в различных структурах ограниченной размерности позволяет развивать нелинейную спектроскопию как инструмент для исследования неравновесной квантовой динамики [1, 2]. В большинстве работ [3–8] изучены явления, обусловленные сильной связью — особым режимом взаимодействия фотонов с материальными возбуждениями среды, проявляющимся в когерентных колебаниях энергии между материей и фотонной подсистемой. Наличие такого взаимодействия может привести к обнаружению новых химических и физических свойств и, следовательно, к развитию передовых исследований во многих областях: бозе-эйнштейновской конденсации, оптики когерентного излучения, поляритонной генерации, сверхтекучести в системе экситон-поляритонов в микрорезонаторах, квантовой обработки информации и др. При этом большой интерес представляет установление общности или различий между такими понятиями, как частота нутации либо частота осцилляций Раби в системе экситонов Ванье–Мотта и ва-

куумное раби-расщепление ансамблем изолированных двухуровневых атомов либо системой экситонов Френкеля в условиях сильной связи фотонов с материальными возбуждениями. В ряде работ исследуются поляритонные состояния в микрорезонаторах, где энергии экситонов Френкеля в органических квантовых ямах и экситонов Ванье–Мотта в неорганических квантовых ямах смешиваются с оптической модой микрорезонатора, что приводит к взаимодействию экситонов между собой, результатом взаимодействия является образование связанных гибридных поляритонов [9, 10]. В работе [11] изучены оптические свойства триплетного гибрида (полупроводник–органика–полупроводник), имплантированного в микрополости, и законы дисперсии в зависимости от значений частот Раби. В [12] представлены результаты исследования нелинейных явлений, обусловленных наличием поляритонных резонансов в нелинейной среде, состоящей из  $N$  ангармонических многоуровневых систем, сильно связанных с микрорезонатором.

Нелинейно-оптические явления в четырех- и многоуровневых атомных системах исследовались в работах [13–18]. В четырехуровневых атомных системах хорошо изучены следующие нелинейно-оптические явления: когерентное управление нелинейным поглощением интенсивных лазерных полей

\* E-mail: olesya-korovai@mail.ru

[19], природа интерференции между пиками Аутлера–Таунса (или одетыми состояниями) [20], динамика экситон-светового поля плоского ансамбля квантовых точек, встроенных в фотонный резонатор [21], возникновение в законе дисперсии дополнительных поляритонных ветвей, обусловленных образованием биэкситонных и триэкситонных состояний в связанных тримерах и тетрамерах [22, 23], спектр пропускания оптического резонатора, связанного с ансамблем холодных атомов Rb-85, закон дисперсии которого состоит из четырех поляритонных ветвей [24], формирование поляритонов темного состояния [25], влияние атомной когерентности на поглощение [26], нерезонансно управляемую конденсацию и генерацию поляритонов в четырехуровневой системе, сформированной в сильно связанной двойной микрорезонаторной структуре [27].

При этом в теоретических и экспериментальных исследованиях учитывались однофотонные индуцированные переходы между последовательными парами соседних уровней под действием света, как это представлено в теории каскадных лазеров. Вместе с тем в атомных четырехуровневых системах возможны многофотонные переходы: двухфотонные переходы — между первым и третьим уровнями, вторым и четвертым уровнями, трехфотонный переход между первым и четвертым уровнями. В ряде работ изучалось влияние многофотонных процессов в системах лестничного типа на различные оптические явления — трехфотонное лазерное возбуждение четырехуровневой системы ридберговских атомов [28], трехфотонная когерентность ридберговского состояния в доплеровской расширенной четырехуровневой атомной системе атомов Rb-85 с резонансным микроволновым полем [29], экспериментальное различие расщепления Аутлера–Таунса от электромагнитно-индуцированной прозрачности при учете двухфотонного резонанса [30], сильная фотонная блокада одиночного атома в резонаторе, которая увеличивает расщепление одетого состояния между верхней и нижней поляритонными ветвями из-за учета взаимодействия между квантовой интерференцией и усиленным вакуумным расщеплением Раби [31], двухфотонная резонансная флуоресценция трансмона, сильно связанного с волноводом [32]. Известно, что в трехуровневой системе имеют место индуцированные светом однофотонные переходы из основного состояния кристалла в экситонное и из экситонного в биэкситонное, а также прямой двухфотонный переход из основного состояния кристалла на биэкситонный уровень, характеризующиеся гигантскими силами осцилля-

тора по сравнению с экситонным переходом [33]. В работе [34] представлены результаты исследования двухимпульсного взаимодействия с экситонами и биэкситонами в условиях мощной накачки в области М-полосы люминесценции. В работе [35] изучено влияние двухфотонных процессов на поглощение в системе экситонов и биэкситонов при двухимпульсном взаимодействии, которое проявляется в наблюдении несимметричного расщепления Аутлера–Таунса, а учет процессов квантовой интерференции приводит к исчезновению эффекта Аутлера–Таунса при определенных значениях величин полей падающих импульсов. Предсказана возможность управления спектром поглощения при помощи изменения интенсивности полей и расстроек резонанса. В работах [36, 37] представлены результаты исследования законов дисперсии поляритонного типа для трехуровневого атома с эквидистантным и неэквидистантным энергетическими спектрами при учете двухфотонного перехода. Закон дисперсии неэквидистантного четырехуровневого атома с одновременным учетом однофотонных, двухфотонных и трехфотонных переходов изучен в работе [38]. Из представленного краткого обзора литературы видно, что исследование особенностей протекания когерентных нелинейных оптических явлений при одновременном учете однофотонных и многофотонных процессов вызывает интерес как с теоретической, так и с прикладной точки зрения из-за реализации возможности контроля и управления процессами поглощения и взаимодействия света с материальными возбуждениями среды и вследствие этого является актуальной задачей.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Ниже представлены результаты исследований закона дисперсии четырехуровневых атомов с эквидистантным энергетическим спектром, взаимодействующих с фотонами ультракороткого импульса резонансного лазерного излучения. Пусть на среду, состоящую из четырехуровневых атомов с разностью энергии  $\hbar\omega_0$  между соседними двумя уровнями, падает ультракороткий импульс резонансного лазерного излучения с частотой  $\omega_c$  (рис. 1). Предполагается, что длительность импульса намного меньше времени релаксации атомов. В этом случае процессами релаксации можно пренебречь, так как они не успевают срабатывать за время действия импульса. Под действием фотонов этого импульса в

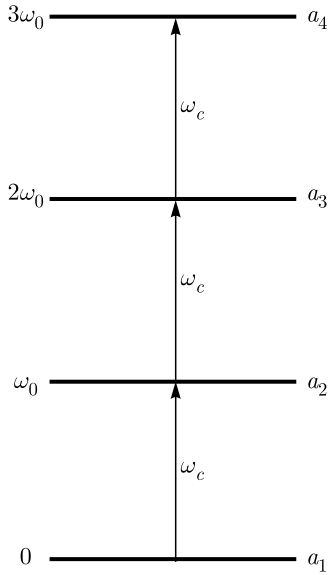


Рис. 1. Схема эквидистантного энергетического спектра четырехуровневого атома, взаимодействующего с фотонами с частотами  $\omega_c$

атомной системе возникают однофотонные оптически разрешенные переходы между последовательно расположенными парами уровней  $1 \rightleftharpoons 2$ ,  $2 \rightleftharpoons 3$  и  $3 \rightleftharpoons 4$  и одновременно с ними оптически разрешенные прямые двухфотонные переходы между уровнями  $1 \rightleftharpoons 3$  и  $2 \rightleftharpoons 4$ , а также трехфотонный переход  $1 \rightleftharpoons 4$ . Насколько нам известно, до сих пор не рассматривалось одновременное действие однофотонного, двухфотонного и трехфотонного или хотя бы однофотонного и двухфотонного процессов. Переходы между уровнями  $1 \rightleftharpoons 2$ ,  $2 \rightleftharpoons 3$  и  $3 \rightleftharpoons 4$  здесь рассматриваются как каскадные переходы между уровнями 1, 2, 3 и 4, тогда как прямые двухфотонные переходы между уровнями  $1 \rightleftharpoons 3$  и  $2 \rightleftharpoons 4$  происходят через виртуальный уровень, а трехфотонный переход — через два виртуальных уровня.

Отметим, что в полупроводниках существуют два последовательных каскадных оптически разрешенных однофотонных перехода — переход из основного состояния кристалла в экситонное и затем оптическая конверсия экситонов в биэкситоны под действием одних и тех же фотонов [33]. Вместе с тем детально изучен процесс прямого двухфотонного возбуждения биэкситона из основного состояния кристалла [39]. Процессы оптической конверсии и двухфотонного возбуждения характеризуются гигантскими силами осциллятора. Однако одновременный учет трех процессов под действием одних и тех же фотонов отсутствует, хотя экспериментальное и теоретическое исследование каждого из

процессов в отдельности проводилось многократно.

Гамильтониан взаимодействия фотонов с четырехуровневыми атомами можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \hat{H}_{int} = & -g_{12} \hat{a}_1^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a}_2 - g_{12}^* \hat{a}_2^\dagger \hat{c} \hat{a}_1 - g_{23} \hat{a}_2^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a}_3 - \\ & - g_{23}^* \hat{a}_3^\dagger \hat{c} \hat{a}_2 - g_{34} \hat{a}_3^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a}_4 - g_{34}^* \hat{a}_4^\dagger \hat{c} \hat{a}_3 - \\ & - g_{13} \hat{a}_1^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a}_3 - g_{13}^* \hat{a}_3^\dagger \hat{c} \hat{c} \hat{a}_1 - g_{24} \hat{a}_2^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a}_4 - \\ & - g_{24}^* \hat{a}_4^\dagger \hat{c} \hat{c} \hat{a}_2 - g_{14} \hat{a}_1^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a}_4 - g_{14}^* \hat{a}_4^\dagger \hat{c} \hat{c} \hat{c} \hat{a}_1, \quad (1) \end{aligned}$$

где  $\hat{a}_i$  ( $\hat{a}_i^\dagger$ ) ( $i = 1-4$ ) — оператор уничтожения (рождения) атома на уровне  $i$  (отсчет энергии атомов на возбужденных уровнях  $i = 2, 3, 4$  начинается с первого уровня, так что собственная энергия атома на уровне  $i$  равна  $\hbar\omega_0(i-1)$ ),  $\hat{c}$  ( $\hat{c}^\dagger$ ) — оператор уничтожения (рождения) фотона с частотой  $\omega_c$ ;  $g_{12}$ ,  $g_{23}$  и  $g_{34}$  — константы разрешенных оптических однофотонных переходов между последовательными парами уровней атома,  $g_{13}$  и  $g_{24}$  — константы двухфотонных оптически разрешенных переходов и  $g_{14}$  — константа трехфотонного перехода с уровня 1 на уровень 4,  $g_{ik}$  ( $i = 1-3$ ,  $k = 1-4$ ) — комплексно-сопряженные константы разрешенных оптических переходов соответственно.

Используя (1), легко получить гейзенберговские уравнения движения для операторов  $\hat{a}_i$  ( $i = 1-4$ ) и  $\hat{c}$ , после усреднения которых в приближении среднего поля (mean field approximation) приходим к системе нелинейных эволюционных уравнений для амплитуд  $a_i = \langle \hat{a}_i \rangle$  ( $i = 1-4$ ) и  $c = \langle \hat{c} \rangle$ :

$$\begin{aligned} i\dot{a}_1 = & -g_{12}c^*a_2 - g_{13}c^*a_3 - g_{14}c^*c^*a_4, \\ i\dot{a}_2 = & \omega_0a_2 - g_{12}^*a_1c - g_{23}c^*a_3 - g_{24}c^*c^*a_4, \\ i\dot{a}_3 = & 2\omega_0a_3 - g_{23}^*a_2c - g_{34}c^*a_4 - g_{13}^*a_1cc, \\ i\dot{a}_4 = & 3\omega_0a_4 - g_{34}^*a_3c - g_{24}^*a_2cc - g_{14}^*a_1ccc, \\ i\dot{c} = & \omega_c c - g_{12}a_1^*a_2 - g_{23}a_2^*a_3 - g_{34}a_3^*a_4 - \\ & - 2g_{13}a_1^*c^*a_3 - 2g_{24}a_2^*c^*a_4 - 3g_{14}a_1^*c^*c^*a_4. \end{aligned} \quad (2)$$

Найдем дисперсионное уравнение системы в окрестности частоты  $\omega_0$  второго уровня атома. Беря за основу уравнение для  $\dot{a}_2$ , видим, что скорость изменения амплитуды  $a_2$  определяется выражениями  $a_1c$ ,  $c^*a_3$  и  $c^*c^*a_4$ . Слагаемое с  $a_1c$  описывает вклад в скорость изменения амплитуды  $a_2$  за счет гибели атома на уровне 1 и фотона с энергией  $\hbar\omega_c$ , в результате чего атом переходит на уровень 2. Слагаемое с  $c^*a_3$  описывает процессы гибели атома на уровне 3 с образованием фотона на частоте  $\omega_c$ , в результате чего атом переходит на уровень 2. Аналогично, слагаемое с  $c^*c^*a_4$  описывает процесс гибели атома на уровне 4 с образованием

двух фотонов с частотой  $\omega_c$  и переходом атома на уровень 2. Соответствующие им операторы  $\hat{a}_1\hat{c}$ ,  $\hat{c}^\dagger\hat{a}_3$  и  $\hat{c}^\dagger\hat{c}^\dagger\hat{a}_4$  описывают состояния с квазиэнергиями  $\hbar\omega_c$ ,  $\hbar(2\omega_0 - \omega_c)$  и  $\hbar(3\omega_0 - 2\omega_c)$ , равными энергии  $\hbar\omega_0$  атома на втором уровне. Следовательно, состояние атома на уровне 2, а также реплика возбужденного состояния 3, сдвинутая вниз на энергию фотона  $\hbar\omega_c$  и реплика возбужденного состояния 4, сдвинутая вниз на энергию двух фотонов, вырождены по энергии.

Используя (2), получаем для амплитуд  $a_1c$ ,  $c^*a_3$  и  $c^*c^*a_4$  следующие уравнения:

$$\begin{aligned} i(a_1\dot{c}) &= \omega_c(a_1c) - g_{12}c^*ca_2 - g_{13}c^*c^*ca_3 - \\ &- g_{34}a_1a_3^*a_4 - g_{14}c^*c^*ca_4 - g_{12}a_1a_1^*a_2 - \\ &- g_{23}a_1a_2^*a_3 - 2g_{13}a_1^*a_1c^*a_3 - 2g_{24}a_1a_2^*c^*a_4 - \\ &- 3g_{14}a_1^*a_1c^*c^*a_4, \\ i(a_3\dot{c}^*) &= (2\omega_0 - \omega_c)(c^*a_3) + g_{12}^*a_1a_2^*a_3 + \\ &+ g_{23}^*a_2a_3^*a_3 + g_{34}^*a_4^*a_3a_3 + 2g_{13}^*a_1ca_3^*a_3 + \\ &+ 2g_{24}^*a_2ca_4^*a_3 + 3g_{14}^*a_1cca_4^*a_3 - g_{23}^*c^*a_2c - \\ &- g_{34}c^*c^*a_4 - g_{13}^*cca_1, \\ i(c^*\dot{c}^*a_4) &= (3\omega_0 - 2\omega_c)(c^*c^*a_4) + 2g_{12}^*a_1a_2^*c^*a_4 + \\ &+ 2g_{23}^*a_2a_3^*c^*a_4 + 2g_{34}^*a_3a_4^*a_4c^* + 4g_{13}^*a_1cc^*a_3^*a_4 + \\ &+ 4g_{24}^*a_2a_4^*cc^*a_4 + 6g_{14}^*a_1ccc^*a_4^*a_4 - g_{34}^*c^*c^*ca_3 - \\ &- g_{14}^*c^*c^*cca_1 - g_{24}^*c^*c^*cca_2. \end{aligned} \quad (3)$$

Далее будем считать, что амплитуды фотонов  $c$  намного превосходят амплитуды атомов на соответствующих уровнях ( $c \gg a_1, a_2, a_3, a_4$ ). В этом приближении все слагаемые в последнем уравнении в (2), кроме первого, исчезающе малы и ими можно пренебречь. Тогда решение этого уравнения имеет простой вид  $c = c_0 \exp(-i\omega t)$ , где  $c_0$  — начальное значение амплитуды фотонов. Таким образом, видно, что огибающая функции  $c(t)$  в приближении заданной плотности фотонов не изменяется со временем:

$$|c|^2 = |c_0|^2 \equiv f_0 = \text{const.}$$

Пренебрегая исчезающе малыми слагаемыми в (3), получаем следующую систему линейных уравнений:

$$\begin{aligned} i\dot{a}_2 &= \omega_0a_2 - g_{12}^*(a_1c) - g_{23}(c^*a_3) - \\ &- g_{24}(c^*c^*a_4), \\ i(a_1\dot{c}) &= \omega_c(a_1c) - g_{12}f_0a_2 - g_{13}f_0(c^*a_3) - \\ &- g_{14}f_0(c^*c^*a_4), \\ i(a_3\dot{c}^*) &= (2\omega_0 - \omega_c)(c^*a_3) - g_{23}^*f_0a_2 - \\ &- g_{34}(c^*c^*a_4) - g_{13}^*f_0(a_1c), \\ i(c^*\dot{c}^*a_4) &= (3\omega_0 - 2\omega_c)(c^*c^*a_4) - \\ &- g_{34}^*f_0(c^*a_3) - g_{24}^*f_0^2a_2 - g_{14}^*f_0^2(a_1c), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $f_0$  — (заданная) плотность фотонов. Решения системы (4) будем искать в виде  $a_2, a_1c, c^*a_3, c^*c^*a_4 \sim \exp(-i\omega t)$ , где  $\omega$  — собственная частота атомных поляритонов. Тогда для стационарных амплитуд получаем алгебраическую систему уравнений:

$$\begin{aligned} (\omega - \omega_0)a_2 + g_{12}^*(a_1c) + g_{23}(c^*a_3) + \\ + g_{24}(c^*c^*a_4) &= 0, \\ (\omega - \omega_c)a_1c + g_{12}f_0a_2 + g_{13}f_0(c^*a_3) + \\ + g_{14}f_0(c^*c^*a_4) &= 0, \\ (\omega - 2\omega_0 + \omega_c)c^*a_3 + g_{23}^*f_0a_2 + \\ + g_{34}(c^*c^*a_4) + g_{13}^*f_0(a_1c) &= 0, \\ (\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c)c^*c^*a_4 + g_{34}^*f_0(c^*a_3) + \\ + g_{24}^*f_0^2a_2 + g_{14}^*f_0^2(a_1c) &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

детерминант которой

$$\begin{vmatrix} \omega - \omega_0 & g_{12}^* & g_{23} & g_{24} \\ g_{12}f_0 & \omega - \omega_c & g_{13}f_0 & g_{14}f_0 \\ g_{23}^*f_0 & g_{13}^*f_0 & \omega - 2\omega_0 + \omega_c & g_{34} \\ g_{24}^*f_0^2 & g_{14}^*f_0^2 & g_{34}^*f_0 & \omega - 3\omega_0 + 2\omega_c \end{vmatrix} = 0 \quad (6)$$

представляет собой закон дисперсии взаимодействующих атомов с эквидистантным энергетическим спектром в окрестности частоты  $\omega_0$  нижайшего возбужденного уровня атома в приближении заданной плотности фотонов. Раскрывая детерминант (6) и полагая константы  $g_{ik} = |g_{ik}| \exp(i\varphi_{ik})$ , получаем уравнение четвертой степени для определения частот  $\omega$  атомных поляритонов:

$$\begin{aligned} (\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\ - \Omega_{12}^2(\omega - 2\omega_0 + \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\ - \Omega_{23}^2(\omega - \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \Omega_{34}^2(\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c) - \\ - \Omega_{13}^2(\omega - \omega_0)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\ - \Omega_{24}^2(\omega - \omega_c)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) - \\ - \Omega_{14}^2(\omega - \omega_0)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) + \\ + \Omega_{12}^2\Omega_{34}^2 + \Omega_{23}^2\Omega_{14}^2 + \Omega_{13}^2\Omega_{24}^2 + \\ + 2\Omega_{13}\Omega_{34}\Omega_{14}(\omega - \omega_0) \cos \Theta_1 + \\ + 2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) \cos \Theta_2 + \\ + 2\Omega_{12}\Omega_{14}\Omega_{24}(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) \cos \Theta_4 + \\ + 2\Omega_{23}\Omega_{34}\Omega_{24}(\omega - \omega_c) \cos \Theta_3 - \\ - 2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}\Omega_{14} \cos(\Theta_1 + \Theta_2) - \\ - 2\Omega_{12}\Omega_{13}\Omega_{23}\Omega_{34} \cos(\Theta_1 - \Theta_4) - \\ - 2\Omega_{23}\Omega_{14}\Omega_{13}\Omega_{24} \cos(\Theta_1 - \Theta_3) = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Omega_{12}^2 &= g_{12}^2 f_0, & \Omega_{23}^2 &= g_{23}^2 f_0, & \Omega_{34}^2 &= g_{34}^2 f_0, \\ \Omega_{13}^2 &= g_{13}^2 f_0^2, & \Omega_{24}^2 &= g_{24}^2 f_0^2, & \Omega_{14}^2 &= g_{14}^2 f_0^3 \end{aligned} \quad (8)$$

— частоты Раби для дипольно-разрешенных оптических переходов, каждая из которых пропорциональна матричному элементу соответствующего перехода и плотности фотонов для однофотонного перехода, квадрату плотности фотонов для двухфотонного перехода и кубу плотности фотонов для трехфотонного перехода, а  $\Theta_i$  ( $i = 1-4$ ) — разности фаз, выражения для которых имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \Theta_1 &= \varphi_{12} + \varphi_{24} - \varphi_{14}, & \Theta_2 &= \varphi_{12} + \varphi_{23} - \varphi_{13}, \\ \Theta_3 &= \varphi_{23} + \varphi_{34} - \varphi_{24}, & \Theta_4 &= \varphi_{12} + \varphi_{24} - \varphi_{14}. \end{aligned} \quad (9)$$

Из (7) видно, что закон дисперсии атомных поляритонов может иметь четыре действительных корня, которые описывают четыре дисперсионные ветви в зависимости от частоты фотонов  $\omega_c = ck$ , где  $k$  — волновой вектор. Форма и положение ветвей закона дисперсии существенно определяются частотами Раби (8), квадраты которых, в свою очередь, определяются плотностью фотонов в степени, равной кратности многофотонного перехода (первой, второй и третьей степени соответственно). Второе, третье и четвертое слагаемые в (7) пропорциональны квадратам соответствующих частот Раби либо квадрату модуля соответствующего матричного элемента перехода. Эти три слагаемых описывают последовательные, независимые вклады каждого из однофотонных переходов (между уровнями  $1 \leftrightarrow 2$ ,  $2 \leftrightarrow 3$ ,  $3 \leftrightarrow 4$ ) в дисперсионном уравнении. При этом знаки (либо фазы) соответствующих констант взаимодействия по отношению к другим константам не играют роли. Пятое и шестое слагаемые в (7) описывают последовательные, независимые вклады каждого из двухфотонных переходов (между уровнями  $1 \leftrightarrow 3$  и  $2 \leftrightarrow 4$  соответственно). Седьмое слагаемое описывает вклад прямого трехфотонного перехода между уровнями  $1 \leftrightarrow 4$ . Слагаемые с одиннадцатого по четырнадцатое пропорциональны произведениям трех частот Раби (трех констант взаимодействия). Их появление обусловлено одновременным действием (квантовой интерференцией) трех процессов. Если хотя бы одна из констант взаимодействия равна нулю, то эти слагаемые отсутствуют. При этом учет знаков между констан-

тами взаимодействия (фазовых соотношений) играет важную роль, так как закон дисперсии зависит еще и от разности фаз между константами соответствующих оптических процессов. Последние четыре слагаемые учитывают вклад в дисперсионное соотношение квантовой интерференции четырех процессов. Здесь важны корреляции между четырьмя константами взаимодействия, обусловленные четырехчастичными процессами. Слагаемые с разностью фаз в (7) являются следствием когерентности процесса взаимодействия фотонов с атомами. По этой причине экспериментальное установление особенностей поведения закона дисперсии при одновременном учете всех оптических переходов может способствовать установлению фазовых соотношений между различными константами взаимодействия. В дисперсионном уравнении (7) содержатся девять частотных параметров  $\omega$ ,  $\omega_0$ ,  $\omega_c$ ,  $\Omega_{12}$ ,  $\Omega_{23}$ ,  $\Omega_{34}$ ,  $\Omega_{13}$ ,  $\Omega_{24}$ ,  $\Omega_{14}$  и разности фаз  $\Theta_i$  ( $i = 1-4$ ). Далее частоты  $\omega$ ,  $\omega_0$ ,  $\omega_c$ ,  $\Omega_{23}$ ,  $\Omega_{34}$ ,  $\Omega_{13}$ ,  $\Omega_{24}$ ,  $\Omega_{14}$  нормируем на самую низкую частоту Раби  $\Omega_{12}$ . Частоты  $\omega$ ,  $\omega_0$ ,  $\omega_c$  в полупроводниках порядка  $10^{15} \text{ с}^{-1}$ , тогда как значения частот Раби  $\Omega_{12}$ ,  $\Omega_{23}$ ,  $\Omega_{34}$ ,  $\Omega_{13}$ ,  $\Omega_{24}$ ,  $\Omega_{14}$  на два-три порядка меньше. Кроме того, из общих соображений известно, что значения частот Раби приблизительно равны при умеренных уровнях возбуждения, а при низких (высоких) уровнях частоты многофотонных переходов  $\Omega_{13}$ ,  $\Omega_{24}$ ,  $\Omega_{14}$  меньше (больше) частот однофотонных переходов  $\Omega_{12}$ ,  $\Omega_{23}$ ,  $\Omega_{34}$ . Следовательно, с ростом плотности фотонов частоты Раби  $\Omega_{13}$ ,  $\Omega_{24}$ ,  $\Omega_{14}$  будут возрастать быстрее, чем частоты  $\Omega_{12}$ ,  $\Omega_{23}$ ,  $\Omega_{34}$ .

Если считать, что энергетический спектр атома ограничен тремя уровнями, то в этом случае все константы взаимодействия, обусловленные переходами на четвертый энергетический уровень, тождественно равны нулю. Таким образом, полагая в (7)  $\Omega_{14} = \Omega_{24} = \Omega_{34} = 0$ , приходим к следующему выражению, описывающему закон дисперсии эквидистантного трехуровневого атома, взаимодействующего с фотонами, в приближении заданной плотности фотонов:

$$\begin{aligned} &(\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) - \\ &- \Omega_{12}^2(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) - \Omega_{23}^2(\omega - \omega_c) - \\ &- \Omega_{13}^2(\omega - \omega_0) + 2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13} \cos \Theta = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\Theta$  — разность фаз, равная  $\Theta = \varphi_{12} + \varphi_{23} - \varphi_{13}$  [36, 37].

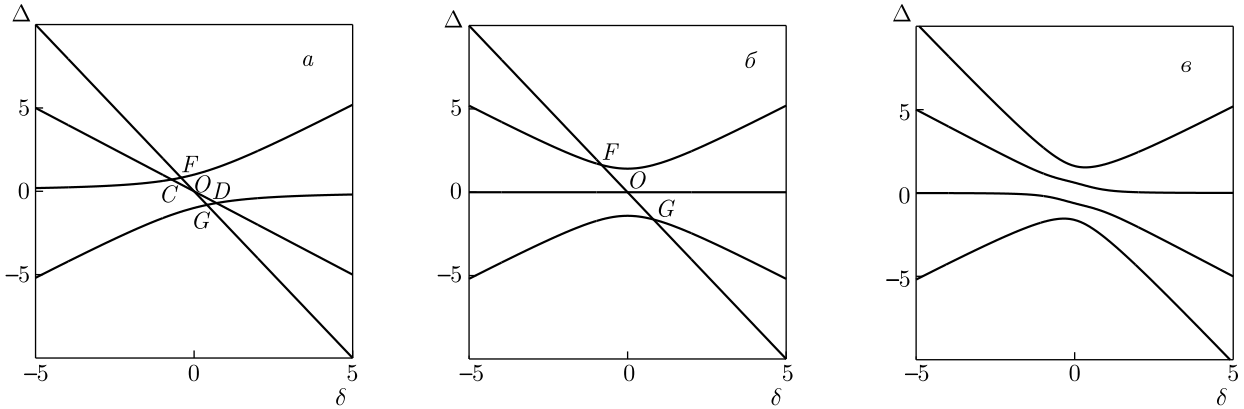


Рис. 2. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при значениях частот Раби без учета многофотонных переходов  $\Omega_{13} = \Omega_{24} = \Omega_{14} = 0$  при а)  $\Omega_{12} \neq 0, \Omega_{23} = \Omega_{34} = 0$ ; б)  $\Omega_{12} = \Omega_{23} \neq 0, \Omega_{34} = 0$ ; в)  $\Omega_{12} = \Omega_{23} = \Omega_{34} \neq 0$

### 3. ЗАКОН ДИСПЕРСИИ ЧЕТЫРЕХУРОВНЕВОГО АТОМА С ЭКВИДИСТАНТНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ

Рассмотрим подробнее особенности поведения закона дисперсии для четырехуровневого атома с эквидистантным энергетическим спектром. Собственные частоты второго, третьего и четвертого (возбужденных) уровней соответственно равны  $\omega_0, 2\omega_0$  и  $3\omega_0$ . Атом взаимодействует с фотонами одного и того же импульса с частотой  $\omega_c$ . Из (7) видно, что при  $\Omega_{23} = 0, \Omega_{34} = 0, \Omega_{24} = 0, \Omega_{13} = 0$  (предел двухуровневого атома) это уравнение распадается на три:

$$(\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c) - \Omega_{12}^2 = 0, \quad \omega - 2\omega_0 + \omega_c = 0, \\ \omega - 3\omega_0 + 2\omega_c = 0,$$

первое из которых представляет собой хорошо известное уравнение поляритонного типа, а второе и третье — дисперсию «голых» фотонов, не взаимодействующих со средой. Обе поляритоноподобные ветви закона дисперсии пересекаются с прямыми  $\omega - 2\omega_0 + \omega_c = 0, \omega - 3\omega_0 + 2\omega_c = 0$  в четырех точках (рис. 2а): с прямой  $\omega - 2\omega_0 + \omega_c = 0$  в точках

$$C \left( \omega - \Omega_{12}/\sqrt{2}, \omega + \Omega_{12}/\sqrt{2} \right),$$

$$D \left( \omega + \Omega_{12}/\sqrt{2}, \omega - \Omega_{12}/\sqrt{2} \right)$$

и с прямой  $\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c = 0$  в точках

$$F \left( \omega - \Omega_{12}/2\sqrt{3}, \omega + \Omega_{12}/2\sqrt{3} \right),$$

$$G \left( \omega + \Omega_{12}/2\sqrt{3}, \omega - \Omega_{12}/2\sqrt{3} \right),$$

кроме того, прямые имеют точку пересечения  $O(0,0)$  (рис. 2а). Если теперь положить, например,

$\Omega_{23} \neq 0$ , но  $\Omega_{34} = 0$  и  $\Omega_{13} = 0, \Omega_{24} = 0$ , т.е. если включить взаимодействие фотонов с атомом на переходе  $2 \leftrightarrow 3$ , то в этом случае уравнение (7) распадается на два независимых уравнения:

$$\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c = 0,$$

$$(\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) - \Omega_{12}^2(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) - \Omega_{23}^2(\omega - \omega_c) = 0.$$

Вырожденные по энергии точки пересечения ветвей  $C$  и  $D$  расщепляются благодаря взаимодействию фотонов с атомом на переходе  $2 \leftrightarrow 3$  и формируют три отдельные ветви закона дисперсии — верхнюю, среднюю и нижнюю, которые по-прежнему пересекаются прямой  $\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c = 0$  в трех точках: средняя ветвь в точке  $O(0,0)$ , а верхняя и нижняя поляритонные ветви в точках

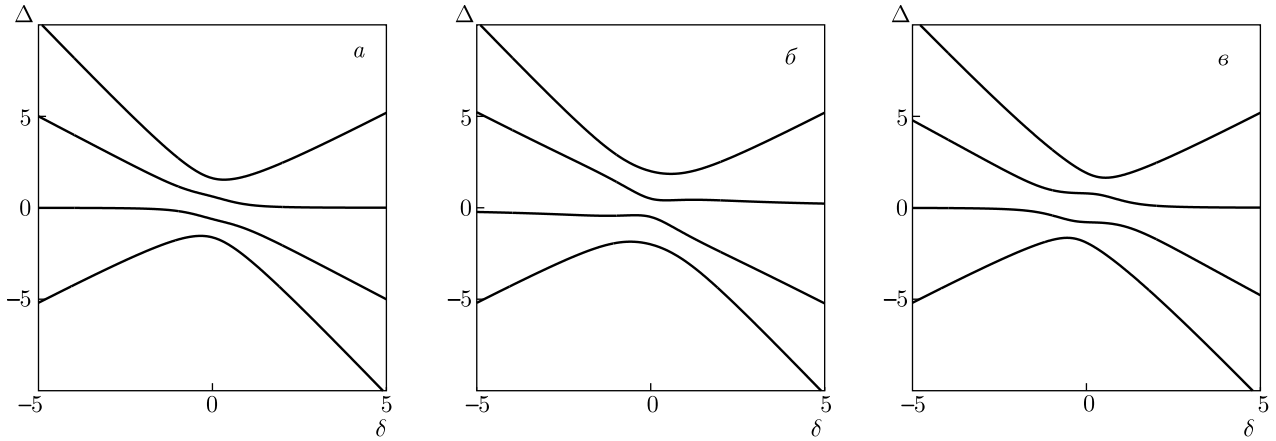
$$F \left( \omega + \sqrt{\frac{2}{3}(\Omega_{12}^2 + 3\Omega_{23}^2)}, \frac{1}{2}\omega - \sqrt{\frac{1}{6}(\Omega_{12}^2 + 3\Omega_{23}^2)} \right)$$

и

$$G \left( \omega - \sqrt{\frac{2}{3}(\Omega_{12}^2 + 3\Omega_{23}^2)}, \frac{1}{2}\omega + \sqrt{\frac{1}{6}(\Omega_{12}^2 + 3\Omega_{23}^2)} \right)$$

соответственно (рис. 2б). Верхняя и средняя ветви имеют экстремумы в окрестности точки  $F$ , а средняя и нижняя — в окрестности точки  $G$ . С ростом  $\Omega_{23}$  величины расщеплений растут и положения экстремумов изменяются. Если теперь положить, например,  $\Omega_{34} \neq 0$ , но  $\Omega_{24} = \Omega_{13} = 0$ , т.е. если включить взаимодействие фотонов с атомом на переходе  $3 \leftrightarrow 4$ , то в этом случае уравнение (7) не распадается на два независимых уравнения. Вырожденные по энергии точки пересечения ветвей  $F$  и  $G$  расщепляются благодаря взаимодействию фотона с атомом





**Рис. 3.** Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при значениях частот Раби без учета многофотонных переходов  $\Omega_{13} = \Omega_{24} = \Omega_{14} = 0$  при а)  $\Omega_{12} = \Omega_{23} = \Omega_{34} = 1$ ; б)  $\Omega_{12} = \Omega_{34} = 1, \Omega_{23} = 1.5$ ; в)  $\Omega_{12} = \Omega_{23} = 1, \Omega_{34} = 1.5$

на переходе  $3 \leftrightarrow 4$  и формируются четыре отдельные ветви закона дисперсии: верхняя, две средние и нижняя (рис. 2б). Верхняя и нижняя ветви закона дисперсии имеют экстремумы в окрестности точки  $O$ : верхняя — минимум, нижняя — максимум, и характеризуются наличием восходящих и нисходящих участков. Если частоты Раби однофотонных переходов равны  $\Omega_{12} = \Omega_{23} = \Omega_{34} = 1$ , то ветви закона дисперсии расположены зеркально симметрично (рис. 3а). Изменение значений  $\Omega_{23}$  (рис. 3б) и  $\Omega_{34}$  (рис. 3в) приводит к возникновению экстремумов средних ветвей и изменению расстояний между ветвями закона дисперсии и положений экстремумов верхней и нижней ветвей в зависимости от соотношения величин частот Раби однофотонных переходов.

Если теперь включить в рассмотрение взаимодействие атома с фотонами на оптически разрешенных двухфотонных переходах  $1 \leftrightarrow 3$  и  $2 \leftrightarrow 4$ , т. е. положить  $\Omega_{24} \neq 0$  и  $\Omega_{13} \neq 0$  и пренебречь четырехчастичной корреляцией  $\Omega_{12}\Omega_{13}\Omega_{23}\Omega_{34} \rightarrow 0$ , то уравнение (7) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
 & (\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\
 & - \Omega_{12}^2(\omega - 2\omega_0 + \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\
 & - \Omega_{23}^2(\omega - \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\
 & - \Omega_{34}^2(\omega - \omega_0)(\omega - \omega_c) - \\
 & - \Omega_{13}^2(\omega - \omega_0)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\
 & - \Omega_{24}^2(\omega - \omega_c)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) + \\
 & + \Omega_{12}^2\Omega_{34}^2 + \Omega_{23}^2\Omega_{14}^2 + \Omega_{13}^2\Omega_{24}^2 + \\
 & + 2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) \cos \Theta_2 + \\
 & + 2\Omega_{23}\Omega_{34}\Omega_{24}(\omega - \omega_c) \cos \Theta_3 = 0. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Используя (7), можно получить явные решения уравнения четвертой степени в виде зависимости  $\omega(\omega_c)$ . Однако более удобным оказывается исследование обратной функции  $\omega_c(\omega)$ . Из (7) легко получить выражение

$$\omega_c = \omega - \frac{F(\omega)}{G(\omega)}, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned}
 F(\omega) = & \Omega_{12}^2(\omega - 2\omega_0 + \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) + \\
 & + \Omega_{13}^2(\omega - \omega_0)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) + \\
 & + \Omega_{14}^2(\omega - \omega_1)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) - \\
 & - \Omega_{12}^2\Omega_{34}^2 - \Omega_{23}^2\Omega_{14}^2 - \Omega_{13}^2\Omega_{24}^2 - \\
 & - 2\Omega_{13}\Omega_{34}\Omega_{14}(\omega - \omega_0) \cos \Theta_1 - \\
 & - 2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) \cos \Theta_2 - \\
 & - 2\Omega_{12}\Omega_{14}\Omega_{24}(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) \cos \Theta_4 + \\
 & + 2\Omega_{12}\Omega_{23}\Omega_{13}\Omega_{14} \cos(\Theta_1 + \Theta_2) + \\
 & + 2\Omega_{12}\Omega_{13}\Omega_{23}\Omega_{34} \cos(\Theta_1 - \Theta_4) + \\
 & + 2\Omega_{23}\Omega_{14}\Omega_{13}\Omega_{24} \cos(\Theta_1 - \Theta_3), \quad (12a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G(\omega) = & (\omega - \omega_0)(\omega - 2\omega_0 + \omega_c)(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \\
 & - \Omega_{23}^2(\omega - 3\omega_0 + 2\omega_c) - \Omega_{34}^2(\omega - \omega_0) - \\
 & - \Omega_{24}^2(\omega - 2\omega_0 + \omega_c) + \\
 & + 2\Omega_{23}\Omega_{34}\Omega_{24} \cos \Theta_3. \quad (12b)
 \end{aligned}$$

Видно, что поведение функции  $\omega_c(\omega)$  будет определяться корнями знаменателя  $G(\omega)$ , который представляет собой кубическое уравнение  $G(\omega) = 0$  относительно  $\omega$ . При этом корни знаменателя будут являться полюсами функции  $\omega_c(\omega)$ , положение которых будет изменяться в зависимости от значений параметров системы, где второе слагаемое (12b)

описывает взаимодействие импульса на частоте  $\omega_c$  с атомами с квазиэнергией  $\hbar(3\omega_0 - \omega_c)$  с частотой Раби  $\Omega_{23}$  (переход  $2 \rightleftharpoons 3$ ), третье слагаемое (12b) — с атомами с квазиэнергией  $\hbar(\omega_0 - \omega_c)$  на переходе  $3 \rightleftharpoons 4$  с частотой Раби  $\Omega_{34}$ , четвертое слагаемое (12b) — с атомами с квазиэнергией  $\hbar(2\omega_0 - \omega_c)$  на переходе  $2 \rightleftharpoons 4$  с частотой Раби  $\Omega_{24}$ , наличие этого слагаемого приводит к керровскому сдвигу уровней, пятое слагаемое представляет собой квантовую интерференцию трех процессов. Второе и третье слагаемые описывают однофотонные переходы, тогда как четвертое слагаемое — это следствие учета двухфотонного перехода  $2 \rightleftharpoons 4$ . Положение корней знаменателя, которые являются аналогами поперечных частот теории экситон-поляритонов, т. е. расщепление первого возбужденного уровня атома, определяется тремя частотами Раби и разностью фаз  $\Theta_3$ . Что касается слагаемых числителя (12a), которые также пропорциональны квадрату и кубу плотности фотонов падающего импульса, то их наличие приводит к деформации и смещению уровня, но не приводит к возникновению дополнительного расщепления первого возбужденного уровня атома.

Рассмотрим случай точного резонанса  $\omega_0 - \omega_c = 0$ , тогда выражение (12) можно записать в виде

$$\omega_c = \omega - \frac{A}{\omega - \omega_1} - \frac{B}{\omega - \omega_2} - \frac{C}{\omega - \omega_3}. \quad (13)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \omega_1 &= -\frac{a}{3} + 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\alpha}{3}\right), \\ \omega_{2,3} &= -\frac{a}{3} + 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\alpha \pm \pi}{3}\right), \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= -\frac{q}{2\sqrt{-(p/3)^3}}, \\ p &= -\frac{1}{3}a^2 + b, \quad q = \frac{2}{27}a^3 - \frac{1}{3}ab + c, \end{aligned}$$

$a, b, c$  — коэффициенты уравнения (7) при соответствующих степенях  $\omega$ .

Введем в рассмотрение нормированные расстройки резонансов  $\Delta, \delta$ :

$$\omega - \omega_0 = \Omega_{12}\Delta, \quad \Omega_2\delta = \omega_c - \omega_0,$$

и частоты Раби

$$\begin{aligned} \omega_{23} &= \frac{\Omega_{23}}{\Omega_{12}}, \quad \omega_{34} = \frac{\Omega_{34}}{\Omega_{12}}, \quad \omega_{13} = \frac{\Omega_{13}}{\Omega_{12}}, \\ \omega_{24} &= \frac{\Omega_{24}}{\Omega_{12}}, \quad \omega_{14} = \frac{\Omega_{14}}{\Omega_{12}}, \end{aligned}$$

тогда

$$\begin{aligned} \omega - \omega_c &= \Omega_{12}(\Delta - \delta), \\ \omega - 2\omega_0 + \omega_c &= \Omega_{12}(\Delta + \delta), \\ \omega - 3\omega_0 + 2\omega_c &= \Omega_{12}(\Delta + 2\delta). \end{aligned} \quad (15)$$

С учетом нормированных величин (15) дисперсионное уравнение (7) может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \Delta^4 + 2\delta\Delta^3 - (\omega_{23}^2 + \omega_{34}^2 + \omega_{13}^2 + \omega_{14}^2 + \delta^2 + 1)\Delta^2 + \\ + ((\omega_{34}^2 - \omega_{23}^2 - 2\omega_{13}^2 - \omega_{14}^2 - 3)\delta - \\ - 2\delta^3 + 2\omega_{13}\omega_{34}\omega_{14} \cos \Theta_1 + \\ + 2\omega_{23}\omega_{13} \cos \Theta_2 + 2\omega_{14}\omega_{24} \cos \Theta_4 + \\ + 2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24} \cos \Theta_3)\Delta + (\omega_{23}^2 + \omega_{24}^2 - 2)\delta^2 + \\ + 4(\omega_{23}\omega_{13} \cos \Theta_2 + 2\omega_{14}\Omega_{24} \cos \Theta_4 - \\ - 2\omega_{23}\omega_{34}\omega_{24} \cos \Theta_3)\delta - \\ - 2\omega_{23}\omega_{13}\omega_{14} \cos(\Theta_1 + \Theta_2) - \\ - 2\omega_{13}\omega_{23}\omega_{34} \cos(\Theta_1 - \Theta_4) - \\ 2\omega_{23}\omega_{14}\omega_{13}\omega_{24} \cos(\Theta_1 - \Theta_3) + 2 = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Используя уравнение четвертой степени (16), изучим его решения как функцию  $\Delta(\delta)$  при постоянных значениях параметров — нормированных частот Раби  $\omega_{23}, \omega_{34}, \omega_{13}, \omega_{24}, \omega_{14}$  и разностей фаз  $\Theta_i$  ( $i = 1-4$ ).

Для оценки и анализа природы корней уравнения (16) используем подход, развитый в работе [40], из которого видно, что все четыре корня  $\Delta_i$  ( $i = 1-4$ ) являются действительными и определяются выражениями [41]

$$\begin{aligned} \Delta_{1,2} &= -\frac{b}{4a} - S \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 - 2p + \frac{q}{S}}, \\ \Delta_{3,4} &= -\frac{b}{4a} + S \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 - 2p - \frac{q}{S}}, \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$p = \frac{8ac - 3b^2}{8a^2}, \quad q = \frac{b^3 - 4abc + 8a^2d}{8a^3},$$

$$S = \frac{1}{2}\sqrt{-\frac{2}{3}p + \frac{1}{3a}\left(Q + \frac{D_0}{Q}\right)},$$

$$Q = \sqrt[3]{\frac{D_1 + \sqrt{D_1^2 - 4D_0^3}}{2}},$$

$$D_0 = c^2 - 3bd + 12ae,$$

$$D_1 = 2c^3 - 9bcd + 27b^2e + 27ad^2 - 72ace,$$

$a, b, c, d, e$  — коэффициенты уравнения (16) при соответствующих степенях  $\Delta$ .

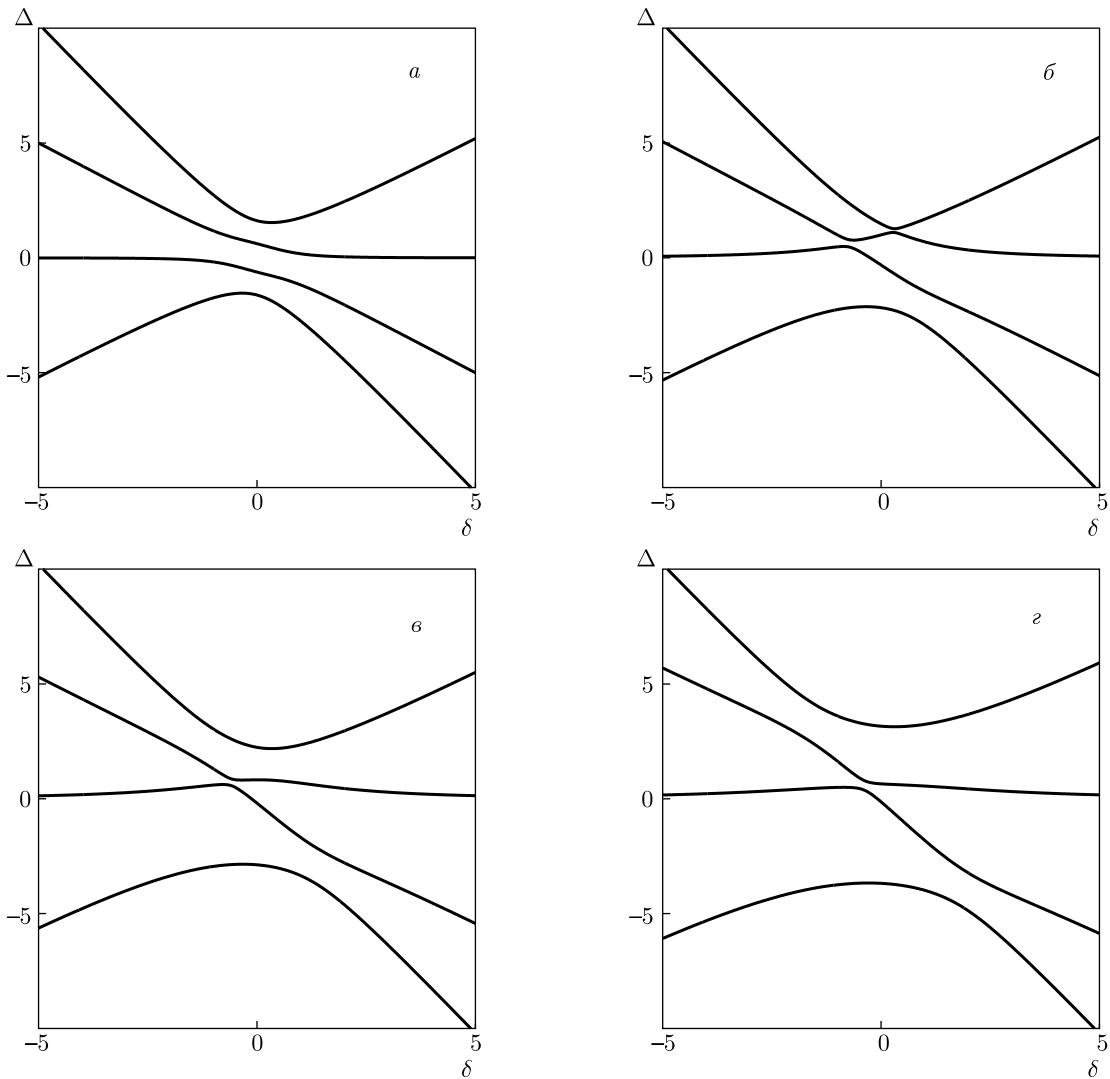
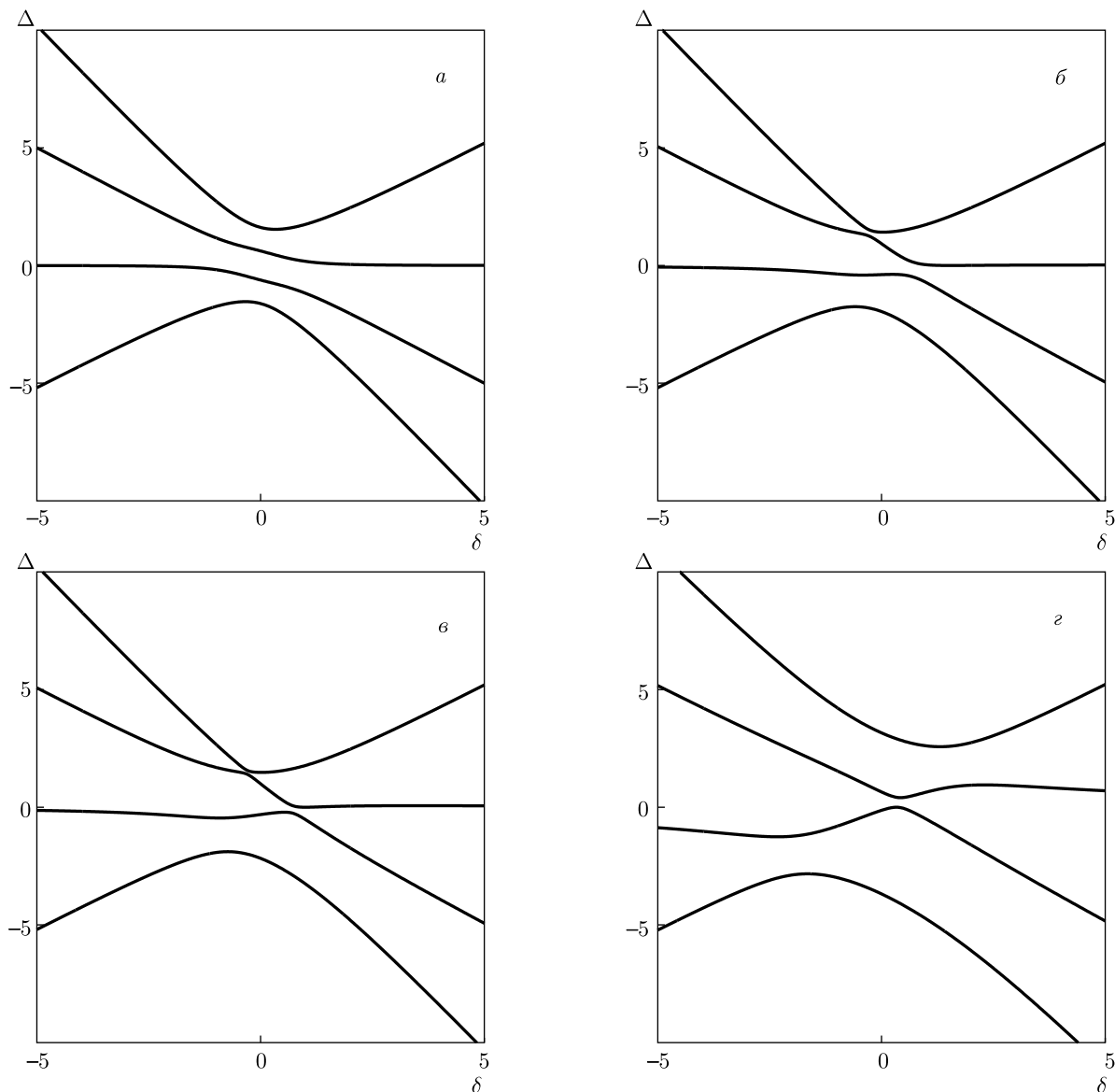


Рис. 4. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = 0$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{14} = \omega_{24} = 0$  при различных значениях  $\omega_{13}$ : 0 (а), 1 (б), 2 (в), 3 (г)

Рассмотрим простейший случай, положим разности фаз  $\Theta_i = 0$  ( $i = 1-4$ ) и изучим влияние многофотонных переходов на положение ветвей закона дисперсии. Будем считать, что  $\omega_{24} = \omega_{14} = 0$ , и будем изменять частоту двухфотонного перехода  $\omega_{13}$ . На рис. 4а видно, что при  $\omega_{13} = 0$  закон дисперсии состоит из четырех отдельных ветвей — верхняя и нижняя поляритонные ветви характеризуются наличием восходящих и нисходящих участков, а обе средние ветви убывают при увеличении расстройки резонанса  $\delta$ . Увеличение значения  $\omega_{13}$  приводит к сильному сближению верхней и средней ветвей в коротковолновой области  $\Delta > 0$  и средних ветвей в области  $\delta < 0$  (рис. 4б). При этом наблюдается изменение формы средних ветвей — у I средней ветви

наблюдается возникновение экстремумов (минимума и максимума), у II средней ветви появляется максимум (рис. 4в) (здесь и ниже на всех рисунках для удобства описания I средняя ветвь — это верхняя из средних, II средняя ветвь — нижняя из средних). Дальнейшее увеличение  $\omega_{13}$  приводит к исчезновению максимума I средней ветви, сильному сближению максимума и минимума средних ветвей между собой в области  $\Delta < 0$  (рис. 4г), одновременному расталкиванию верхней и I средней ветвей и одновременному смещению верхней и нижней ветвей в коротковолновую и длинноволновую области соответственно, при этом наблюдается сближение верхней и I средней ветвей в области  $\delta < 0$  и II средней и нижней ветвей в области  $\delta > 0$ . Зафиксируем



**Рис. 5.** Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = 0$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{14} = 0$  при различных значениях  $\omega_{24}$ : 0 (а), 0.65 (б), 1 (в), 3 (г)

$\omega_{13} = \omega_{14} = 0$  и будем изменять частоту двухфотонного перехода  $\omega_{24}$ . При  $\omega_{24} = 0$  расположение и форма ветвей закона дисперсии на рис. 5а совпадает с приведенными на рис. 4а. На рис. 5б видно, что при увеличении частоты Раби  $\omega_{24}$  наблюдается изменение формы I средней ветви и образование максимума, затем сближение минимума верхней ветви и максимума I средней ветви, расположенного в области  $\delta < 0$ , и возникновение области сближения между минимумом I средней ветви и максимумом II средней ветви в области  $\delta > 0$  (рис. 5в). Дальнейшее увеличение  $\omega_{24}$  (рис. 5г) приводит к возникновению

новых экстремумов обеих средних ветвей — минимума I средней ветви в области  $\delta > 0$  и максимума II средней ветви в области  $\delta < 0$ , и одновременно расталкиванию верхней и нижних ветвей в коротковолновую и длинноволновую области соответственно. Зафиксируем  $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$  и будем изменять частоту Раби трехфотонного перехода  $\omega_{14}$ . На рис. 6а при  $\omega_{14} = 0$  поведение ветвей закона дисперсии совпадает с приведенным на рис. 4а и рис. 5а. На рис. 6б видно, что при увеличении  $\omega_{14}$  происходит симметричное сближение средних ветвей, при этом I средняя ветвь характеризуется линейным участ-

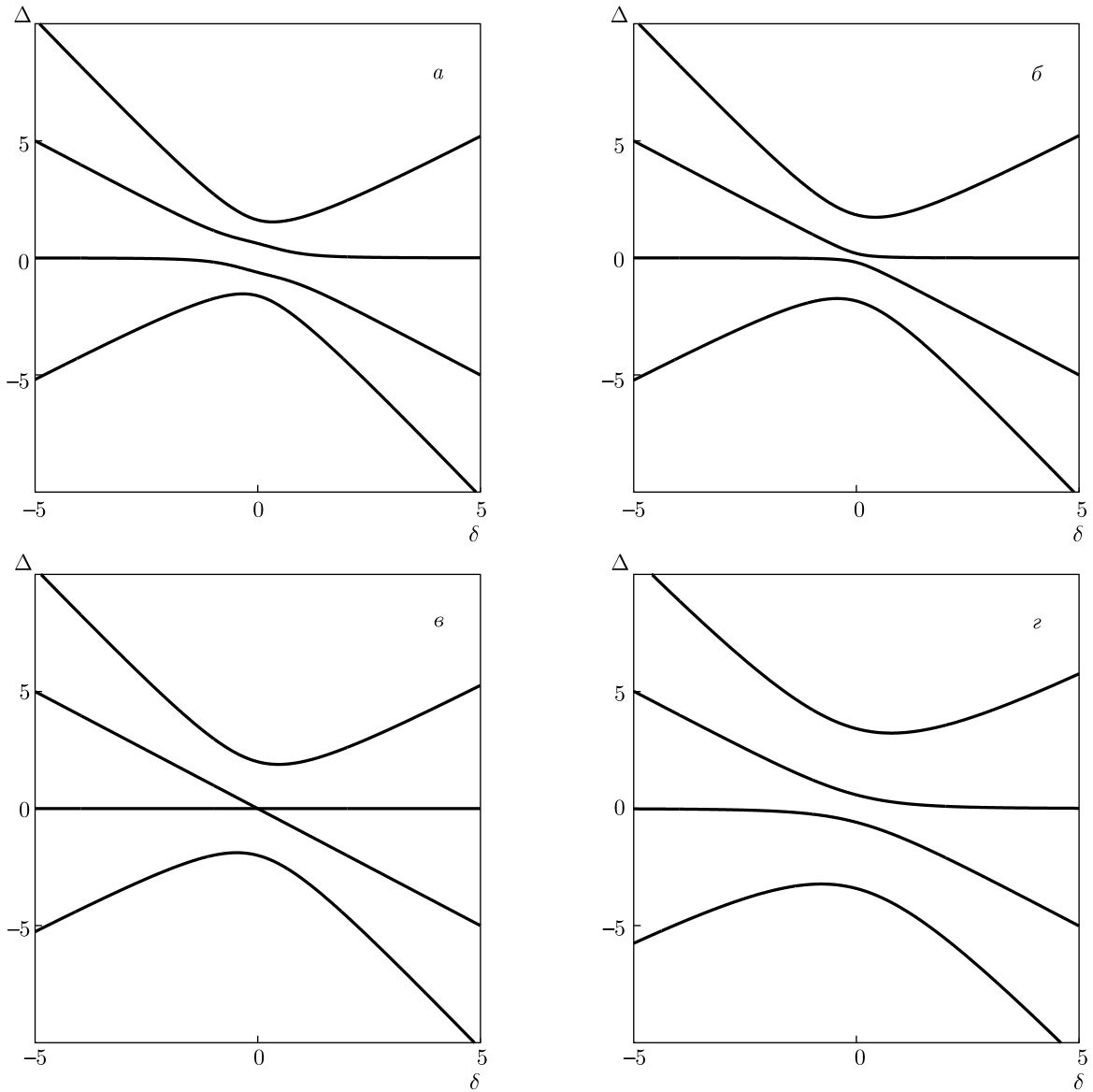


Рис. 6. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = 0$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{24} = 0$  при различных значениях  $\omega_{14}$ : 0 (а), 0.65 (б), 1 (в), 3 (г)

ком в области  $\delta > 0$ , а II средняя ветвь — линейным участком в области  $\delta < 0$ . При  $\omega_{14} = 1$  (рис. 6в) наблюдается пересечение средних ветвей в точке  $\delta = 0$  с изменением форм средних ветвей — они становятся прямыми, причем II средняя ветвь не зависит от  $\delta$ , дальнейшее увеличение параметра  $\omega_{14}$  приводит к расталкиванию средних ветвей (рис. 6г).

Если теперь положить  $\omega_{24} = \omega_{14} = 1$  и  $\omega_{13} = 0$ , на рис. 7а видно, что между верхней и обеими средними ветвями существует область сужения в окрестности  $\delta = 0$ . При увеличении частоты Раби двухфотонного перехода  $\omega_{13} = 1$  на рис. 7б видно, что уве-

личение параметра  $\omega_{13}$  приводит к возникновению экстремумов средних ветвей — максимуму I средней ветви и минимуму II средней ветви, и одновременно сильному сближению трех ветвей закона дисперсии — верхней и обеих средних в коротковолновой области  $\Delta > 0$  в окрестности точки  $\delta = 0$  с изменением формы ветвей. Затем при  $\omega_{13} = 1$  (рис. 7в) возникает пересечение трех ветвей закона дисперсии — верхней и обеих средних в точке  $\delta = 0$ , корень  $\Delta = 1$  уравнения (7) становится трехкратно вырожденным при точной расстройке резонанса  $\delta$ . Дальнейшее увеличение параметра  $\omega_{13}$  приводит к

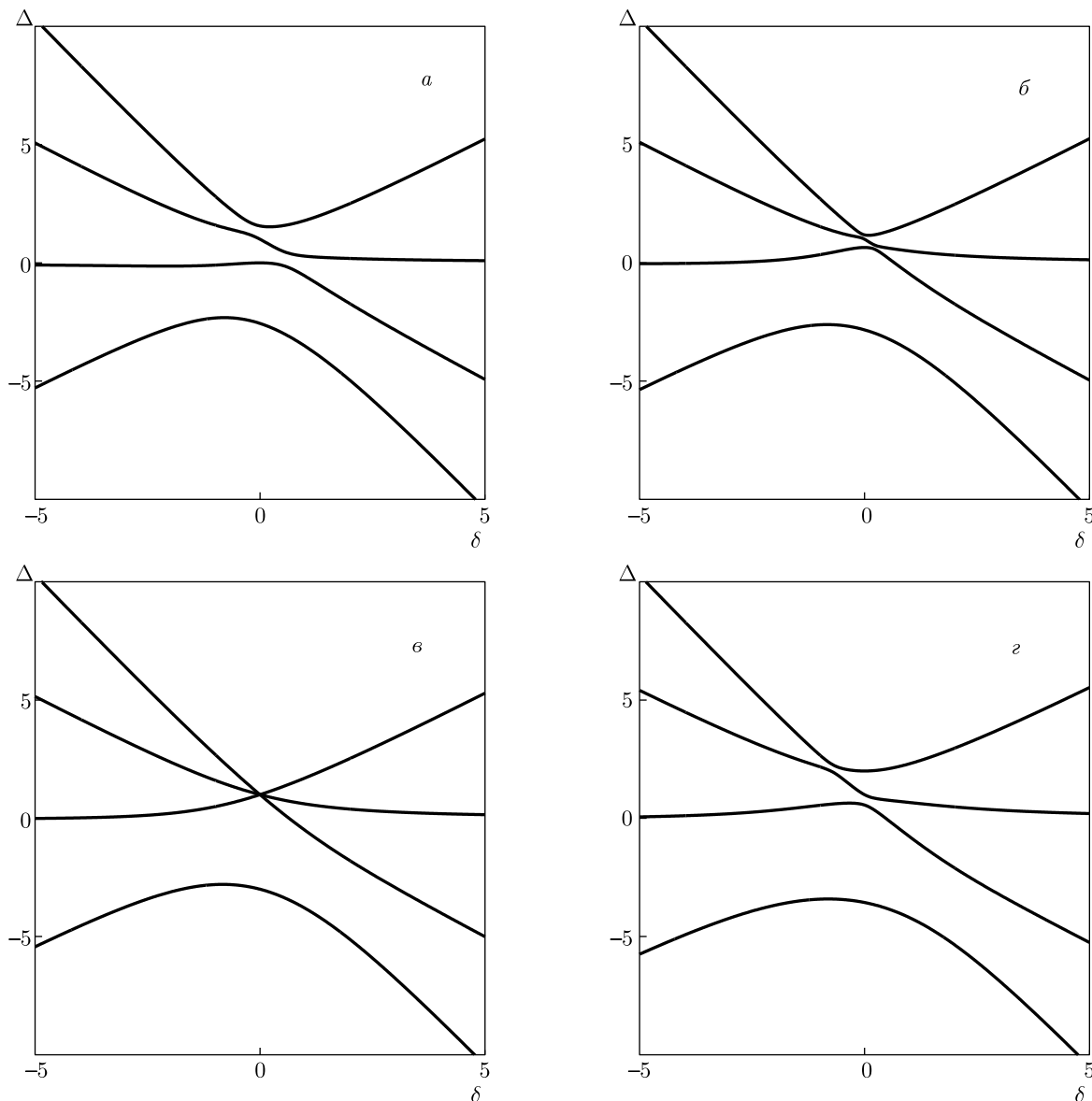


Рис. 7. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = 0$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{14} = \omega_{24} = 1$  при различных значениях  $\omega_{13}$ : 0 (а), 0.65 (б), 1 (в), 2 (г)

восстановлению структуры из четырех ветвей закона дисперсии, при этом наблюдается изменение формы верхней и средней ветвей — максимум верхней ветви смещается в область  $\delta < 0$ , наблюдается сближение верхней и I средней ветвей в области  $\delta < 0$  и обеих средних ветвей в окрестности точки  $\delta = 0$ , одновременно наблюдается расталкивание средних ветвей со смещением сужения между верхней и I средней ветвями в область  $\delta < 0$  и верхней и нижней поляритонных ветвей в коротковолновую и длинноволновую области соответственно (рис. 7з).

При  $\omega_{13} = \omega_{14} = 1, \omega_{24} \neq 0$  (рис. 8а) видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, I средняя ветвь характеризуется наличием экстремумов — максимума и минимума, и, следовательно, наличием восходящих и нисходящих участков, II средняя ветвь характеризуется максимумом, экстремумы обеих ветвей расположены в коротковолновой области  $\Delta > 0$ . Увеличение значения частоты Раби двухфотонного перехода  $\omega_{24}$  приводит к сильному сближению верхней и обеих средних ветвей (рис. 8б) и при  $\omega_{24} = 1$  наблюдается пересечение всех трех

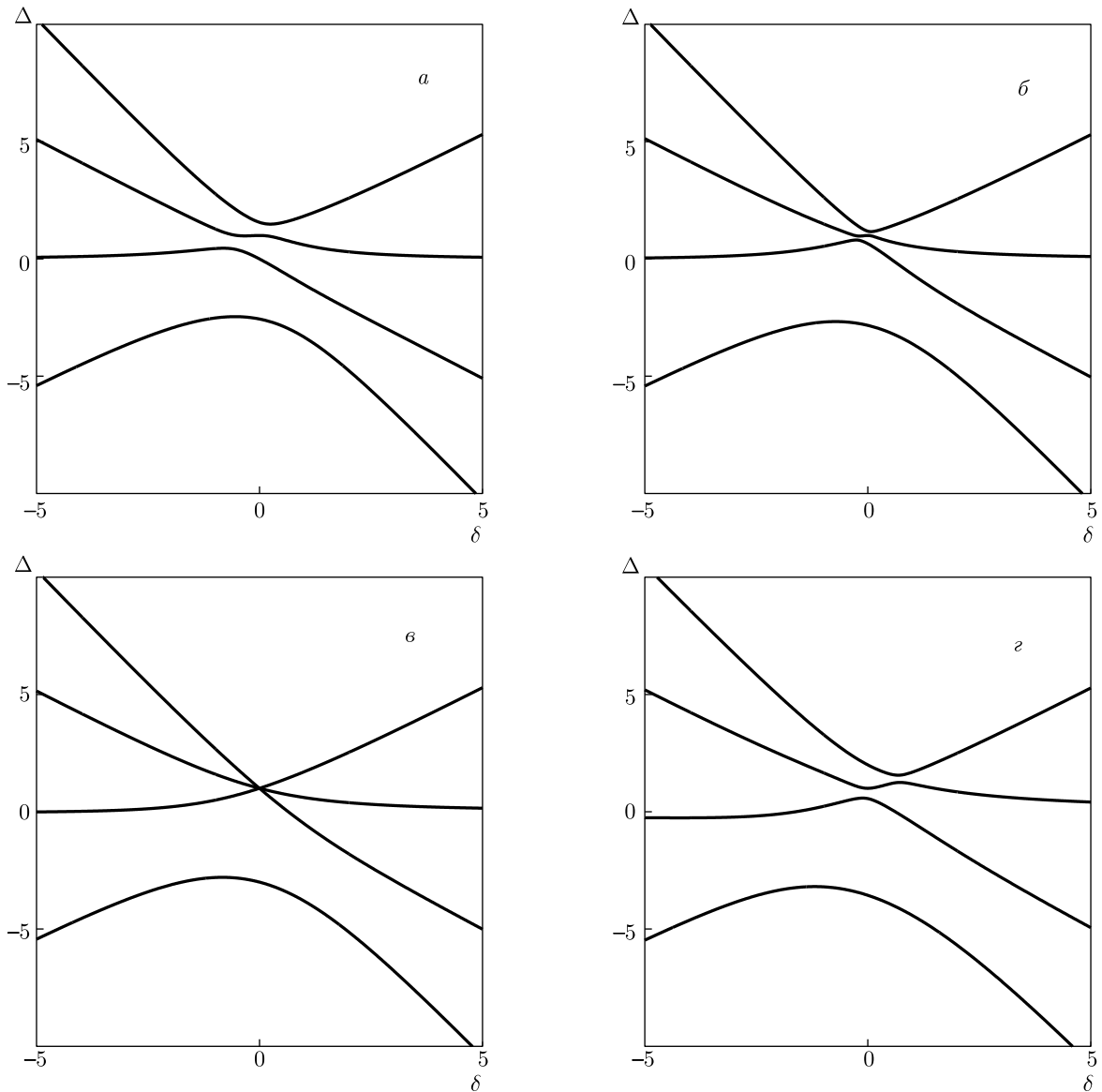


Рис. 8. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = 0$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{14} = 1$  при различных значениях  $\omega_{24}$ : 0 (а), 0.65 (б), 1 (в), 2 (г)

ветвей закона дисперсии — верхней и обеих средних, в точке  $\delta = 0$ , так как корень  $\Delta = 1$  уравнения (16) становится трехкратно вырожденным при отсутствии расстройки резонанса (рис. 8в). Отметим, что аналогичное поведение кривых закона дисперсии наблюдается и на рис. 7в. Дальнейшее увеличение параметра  $\omega_{24}$  приводит к восстановлению структуры из четырех ветвей, при этом наблюдается изменение формы верхней и средней ветвей — максимум верхней ветви смещается в область  $\delta > 0$ , наблюдается сближение верхней и I средней ветвей в области  $\delta > 0$  и обеих средних ветвей в окрестности точки  $\delta = 0$  (рис. 8г), наблюдаются расталкивание

средних ветвей со смещением сужения между верхней и I средней ветвями в область  $\delta > 0$  и смещение верхней и нижней поляритонных ветвей в коротковолновую и длинноволновую области соответственно.

При  $\omega_{13} = \omega_{24} = 1, \omega_{14} = 0$  (рис. 9а) видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, I средняя ветвь имеет убывающий характер с ростом расстройки резонанса  $\delta$ , II средняя ветвь характеризуется неярко выраженным максимумом и наблюдается область сужения между верхней и I средней ветвями. Увеличение значения частоты Раби трехфотонного перехода  $\omega_{14}$  приводит к сильному сбли-

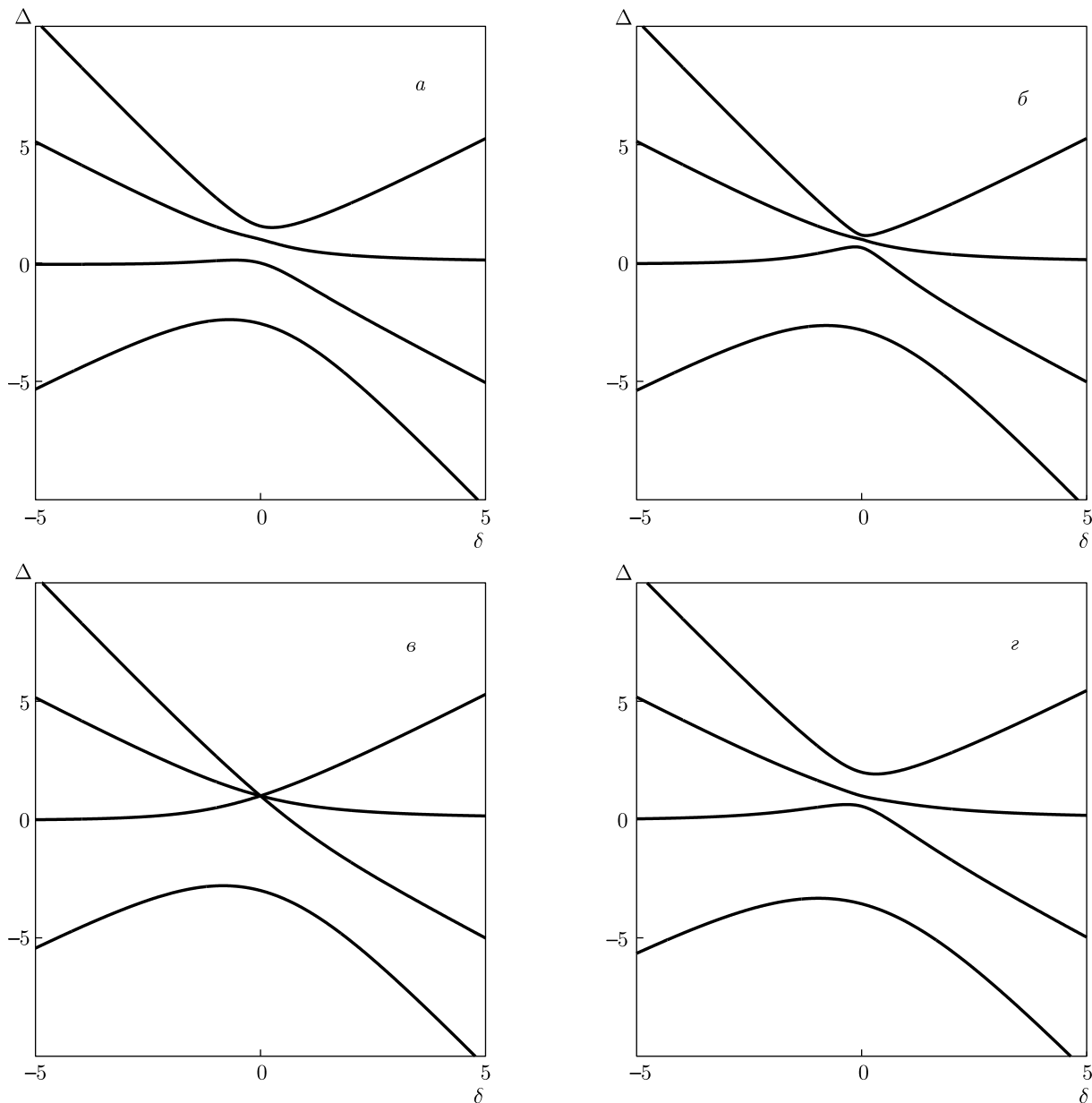


Рис. 9. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = 0$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{24} = 1$  при различных значениях  $\omega_{14}$ : 0 (а), 0.65 (б), 1 (в), 2 (г)

жению верхней и обеих средних ветвей (рис. 9б) и при  $\omega_{14} = 1$  наблюдается пересечение всех трех ветвей закона дисперсии — верхней и обеих средних, в точке  $\delta = 0$ , корень  $\Delta = 1$  уравнения (16) становится трехкратно вырожденным при отсутствии расстройки резонанса (рис. 9в). Отметим, что аналогичное поведение кривых закона дисперсии наблюдается и на рис. 7б, 8б. Дальнейшее увеличение параметра  $\omega_{14}$  приводит к восстановлению структуры из четырех ветвей, при этом наблюдается изменение формы П средней  $\delta$ -ветви — величина максимума с увеличе-

нием параметра  $\omega_{14}$  уменьшается, наблюдается расталкивание всех четырех ветвей закона дисперсии и смещение верхней и нижней поляритонных ветвей в коротковолновую и длинноволновую области соответственно (рис. 9г).

Рассмотрим поведение ветвей закона дисперсии  $\Delta(\delta)$  при  $\Theta_i = \pi/2$  ( $i = 1-4$ ) и изучим влияние многофотонных переходов. Если  $\omega_{24} = \omega_{14} = 0$ , а  $\omega_{13} = 0$  (рис. 10а), видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, зеркально симметрично расположенных относительно  $\delta$ , средние ветви ха-



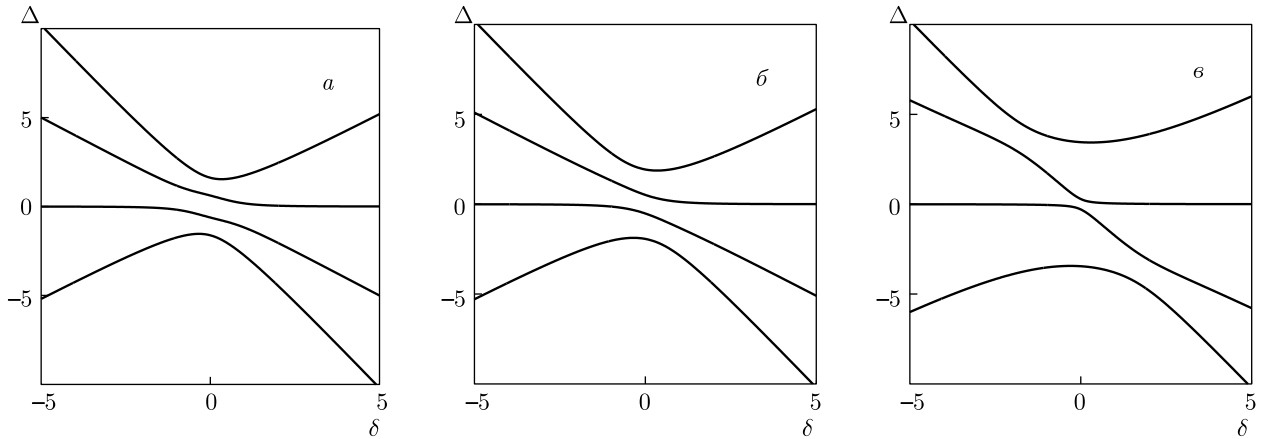


Рис. 10. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = \pi/2$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{24} = \omega_{14} = 0$  при различных значениях  $\omega_{13}$ : 0 (а), 1 (б), 3 (в)

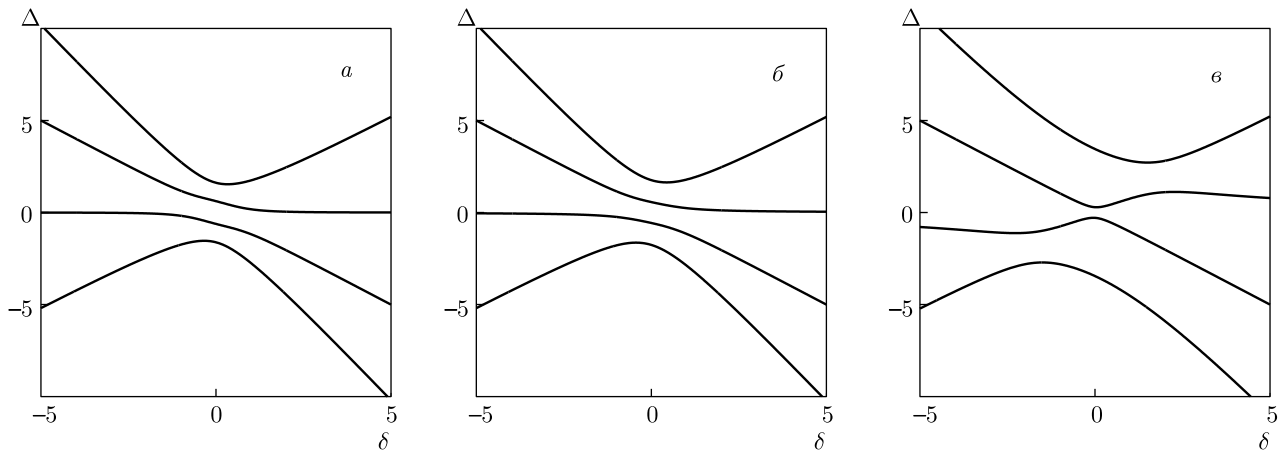


Рис. 11. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = \pi/2$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{14} = 1$  при различных значениях  $\omega_{24}$ : 0 (а), 0.65 (б), 3 (в)

рактируются наличием неярко выраженных экстремумов — I средняя ветвь максимума, а II средняя ветвь минимума, расположенных в окрестности  $\delta = 0$ . Увеличение параметра  $\omega_{13}$  приводит к исчезновению экстремумов средних ветвей и медленному их сближению друг с другом в окрестности  $\delta = 0$  (рис. 10б), при  $\omega_{13} = 2$  наблюдается изменение формы средних ветвей и появление области сужений между I средней и верхней ветвями в области  $\delta < 0$  и между II средней и нижней ветвями в области  $\delta > 0$ , сильное сближение средних ветвей в окрестности  $\delta = 0$  и симметричное расталкивание всех четырех ветвей закона дисперсии со смещением верхней и нижней поляритонных ветвей в коротковолновую и длинноволновую области соответственно (рис. 10в).

Если  $\omega_{13} = \omega_{14} = 0$ , а  $\omega_{24} = 0$  (рис. 11а), видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, симметрично расположенных относительно  $\delta$ , средние ветви характеризуются наличием неярко выраженных экстремумов — I средняя ветвь максимума, а II средняя ветвь минимума, расположенных в окрестности  $\delta = 0$ . Увеличение параметра  $\omega_{24}$  приводит к исчезновению экстремумов средних ветвей и медленному их сближению в окрестности  $\delta = 0$ , также наблюдается смещение максимума нижней ветви в область  $\delta < 0$ , минимума верхней ветви в область  $\delta > 0$  (рис. 11б). Дальнейшее увеличение  $\omega_{24}$  приводит к возникновению области сужения между средними ветвями при  $\delta = 0$  с изменением формы ветвей и появлением экстремумов (рис. 11в). Минимум I средней ветви и максимум II средней ветви силь-

но сближаются в окрестности  $\delta = 0$ , одновременно возникают области сужений между верхней ветвью и максимумом I средней ветви при  $\delta > 0$  и минимумом II средней ветви и максимумом нижней ветви при  $\delta < 0$  со смещением ветвей закона дисперсии в коротковолновую и длинноволновую области соответственно (рис. 11б).

Если  $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$ , а  $\omega_{14} = 0$  (рис. 12а), видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, зеркально симметрично расположенных относительно  $\delta$ , средние ветви характеризуются наличием неярко выраженных экстремумов — I средняя ветвь максимума, а II средняя ветвь минимума, расположенных в окрестности  $\delta = 0$ . Увеличение частоты Раби трехфотонного перехода  $\omega_{14}$  (рис. 12б) приводит к увеличению значений экстремумов средних ветвей и одновременному сближению минимума верхней и максимума I средней ветвей и максимума нижней и минимума II средней ветвей в окрестности  $\delta = 0$ . Затем увеличение параметра  $\omega_{14}$  приводит к возникновению симметричных относительно  $\delta$  пересечений верхней и I средней ветвей и нижней и II средней ветвей в точке  $\delta = 0$  (рис. 12в), ветви расталкиваются, структура из четырех ветвей закона дисперсии восстанавливается (рис. 12г), дальнейшее увеличение параметра  $\omega_{14}$  приводит к изменению формы ветвей закона дисперсии, исчезновению экстремумов средних ветвей и одновременному симметричному относительно  $\delta$  расталкиванию всех ветвей закона дисперсии и смещению в коротковолновую и длинноволновую области (рис. 12д).

Если  $\omega_{24} = \omega_{14} = 1$ , а  $\omega_{13} = 0$  (рис. 13а), видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, симметрично расположенных относительно  $\delta$ , средние ветви характеризуются наличием неярко выраженных экстремумов — I средняя ветвь максимума, а II средняя ветвь минимума, расположенных в окрестности  $\delta = 0$ . Увеличение частоты Раби  $\omega_{13}$  (рис. 13б) приводит к изменению формы средних ветвей и исчезновению экстремумов с одновременным сближением друг с другом в окрестности  $\delta = 0$ . При  $\omega_{13} = 2$  (рис. 13в) возникает пересечение средних ветвей в точке  $\delta = 0$ , одна из ветвей становится прямой и не зависит от  $\delta$ , появляются области сужений между верхней и I средней ветвями в области  $\delta < 0$  и II средней и нижней ветвями в области  $\delta > 0$ , а также происходит расталкивание ветвей и смещение ветвей закона дисперсии в коротковолновую и длинноволновую области (рис. 13г).

Если  $\omega_{13} = \omega_{14} = 1$ , а  $\omega_{24} = 0$  (рис. 14а), видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, сим-

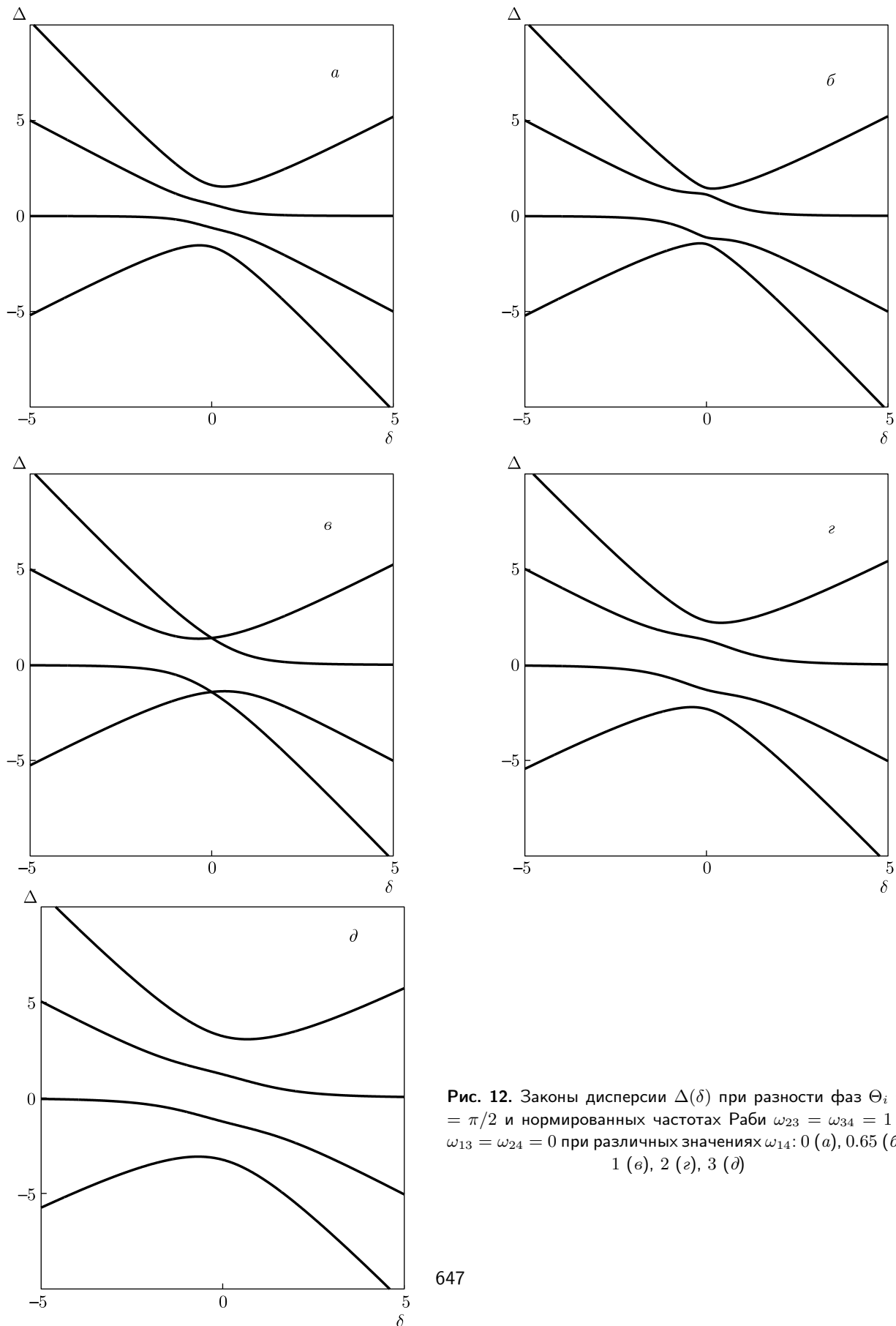
метрично расположенных относительно  $\delta$ , средние ветви характеризуются наличием неярко выраженных экстремумов — I средняя ветвь максимума, а II средняя ветвь минимума, расположенных в окрестности  $\delta = 0$ . Увеличение частоты Раби  $\omega_{24}$  (рис. 14б) приводит к изменению формы средних ветвей и исчезновению экстремумов с одновременным сближением друг с другом в окрестности  $\delta = 0$  (рис. 14в). При  $\omega_{13} = 2$  наблюдается пересечение средних ветвей в точке  $\delta = 0$  с изменением формы и возникновением экстремумов — минимума и максимума у обеих ветвей, и симметрично относительно  $\delta$  расталкивание средних ветвей, восстановление структуры закона дисперсии и возникновение областей сужений между верхней и I средней ветвями в области  $\delta > 0$  и II средней и нижней ветвями в области  $\delta < 0$  со смещением ветвей закона дисперсии в коротковолновую и длинноволновую области (рис. 14г).

Если  $\omega_{13} = \omega_{24} = 1$ , а  $\omega_{14} = 0$  (рис. 15а), видно, что закон дисперсии состоит из четырех ветвей, симметрично расположенных относительно  $\delta$ , средние ветви характеризуются наличием неярко выраженных экстремумов — I средняя ветвь максимума в области  $\delta > 0$ , а II средняя ветвь минимума в области  $\delta < 0$ , и наличием пересечения средних ветвей в точке  $\delta = 0$ . Увеличение частоты Раби трехфотонного перехода  $\omega_{14}$  приводит к изменению формы средних ветвей — исчезновению экстремумов и одновременному расталкиванию друг относительно друга (рис. 15б). Дальнейшее увеличение параметра  $\omega_{14}$  приводит к симметричному смещению ветвей закона дисперсии в коротковолновую и длинноволновую области (рис. 15в).

В случае, если разности фаз  $\Theta_i = \pi$  ( $i = 1-4$ ), поведение ветвей закона дисперсии аналогично случаю, описанному при  $\Theta_i = 0$ , с сохранением характера изменений в длинноволновой области  $\Delta < 0$ .

Таким образом, на рис. 15а видно, что при одновременном учете всех однофотонных процессов и обоих процессов двухфотонного возбуждения атома и при отсутствии трехфотонного процесса возбуждения возникает эффект пересечения двух средних ветвей закона дисперсии в точке  $\delta = 0$  при  $\Theta_i = \pi/2$  и при условии равенства нулю частот Раби  $\Omega_{12}, \Omega_{23}, \Omega_{23}, \Omega_{13}, \Omega_{24}, \Omega_{14} = 0$ .

При одновременном учете процессов двухфотонного и трехфотонного возбуждения атома (рис. 7в, 8в, 9в) возникают эффекты пересечения: трех ветвей — верхней и двух средних ветвей в коротковолновой области спектра при  $\Theta_i = 0$  либо нижней и двух средних ветвей закона дисперсии в длинновол-



**Рис. 12.** Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = \pi/2$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1$  и  $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$  при различных значениях  $\omega_{14}$ : 0 (*a*), 0.65 (*б*), 1 (*в*), 2 (*г*), 3 (*д*)

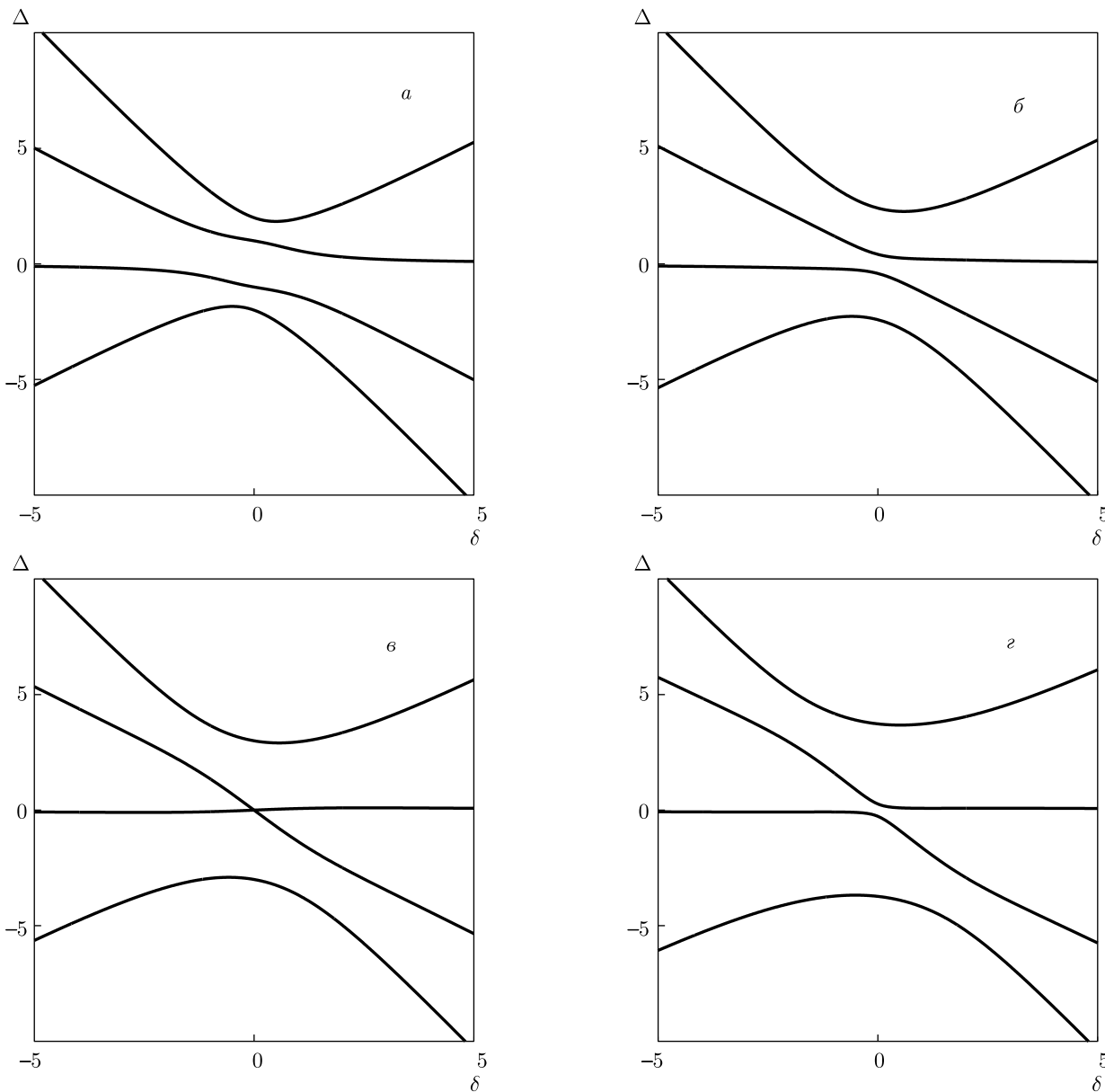
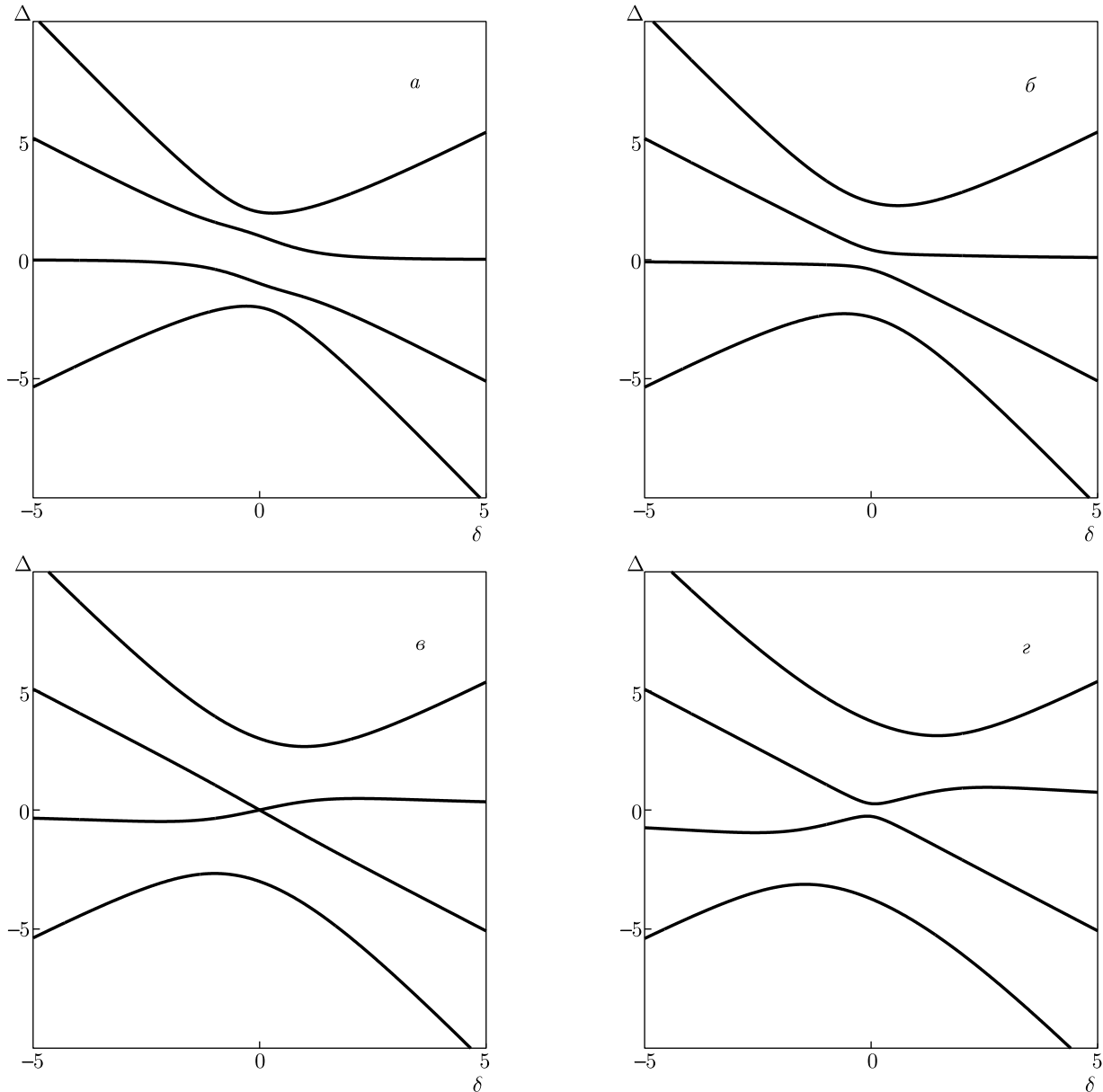


Рис. 13. Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = \pi/2$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{24} = \omega_{14} = 1$  при различных значениях  $\omega_{13}$ : 0 (а), 1 (б), 2 (в), 3 (г)

новой области при  $\Theta_i = \pi$ ; двух средних ветвей при  $\Theta_i = 0, \pi$  и  $\omega_{13} = \omega_{24} = \omega_{14} = 1$ , т.е. при условии равенства частот Раби  $\Omega_{12}, \Omega_{23}, \Omega_{23}, \Omega_{13}, \Omega_{24}$  и  $\Omega_{14}$ ; средних ветвей закона дисперсии в точке  $\delta = 0$  при  $\Theta_i = \pi/2$  и  $\omega_{13} = \omega_{14} = 1, \omega_{24} = 2$  или  $\omega_{24} = \omega_{14} = 1, \omega_{13} = 2$ , т.е. при условии равенства частот Раби  $\Omega_{23}, \Omega_{34}, \Omega_{13}, \Omega_{14}$  и отличной частоте двухфотонного перехода  $\Omega_{24}$  или  $\Omega_{34}, \Omega_{23}, \Omega_{24}, \Omega_{14}$  и отличной частоте двухфотонного перехода  $\Omega_{13}$ .

На рис. 12в видно, что учет трехфотонного процесса возбуждения атома при отсутствии двухфотонных процессов  $\omega_{13} = \omega_{24} = 0$  приводит к возникновению эффекта пересечений верхней и I средней, а также II средней и нижней поляритонных ветвей при  $\omega_{14} = 1$  и  $\Theta_i = \pi/2$  и при условии равенства частот Раби  $\Omega_{12}, \Omega_{23}, \Omega_{34}$  и  $\Omega_{14}$ . Наличие таких пересечений свидетельствует о существовании одной частоты нутационных колебаний при условии точ-

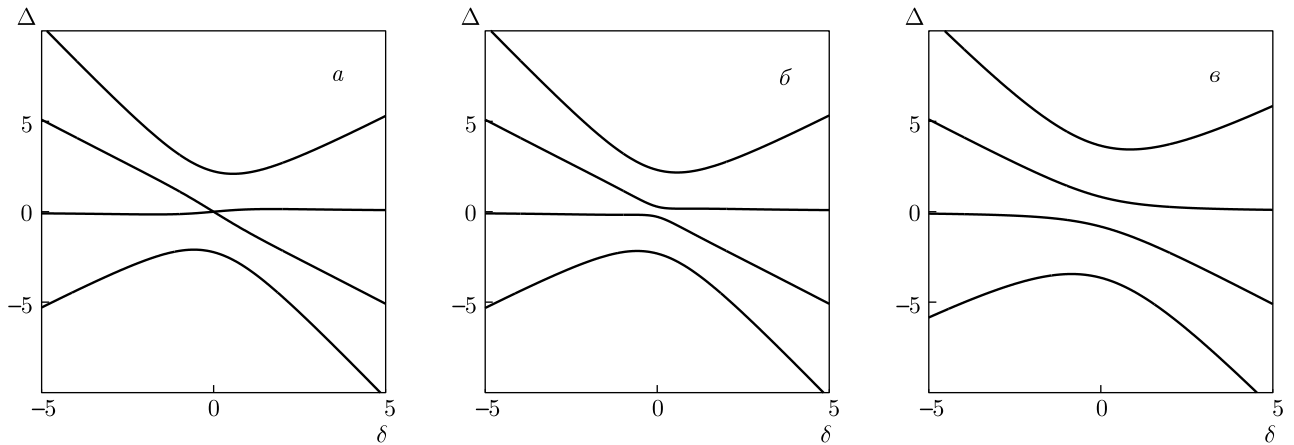


**Рис. 14.** Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = \pi/2$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{14} = 1$  при различных значениях  $\omega_{24}$ : 0 (а), 1 (б), 2 (в), 3 (г)

ной расстройки резонанса  $\delta = 0$ . Если рассмотреть случай, когда включены в рассмотрение взаимодействие атома с фотонами на оптически разрешенных двухфотонных переходах  $1 \leftrightarrow 3$  и  $2 \leftrightarrow 4$ , т.е.  $\omega_{24} \neq 0$  и  $\omega_{13} \neq 0$ , и пренебречь четырехчастичной корреляцией, описанной уравнением (9), то можно сделать вывод, что важную роль в поведении ветвей закона дисперсии играют процессы корреляции между константами взаимодействия всех учтенных переходов, обусловленные четырехчастичными процессами. Анализ уравнения (9) показал, что отсутствие этого слагаемого приводит к исчезновению эффек-

тов пересечения ветвей закона дисперсии и изменение интенсивности излучения приводит к спектральному смещению уровней.

Наличие эффектов сближения и расталкивания ветвей и пересечения ветвей закона дисперсии при изменении значений частот Раби многофотонных переходов  $\Omega_{13}, \Omega_{24}, \Omega_{14}$  можно интерпретировать как изменение силы связи фотонов с атомом. Таким образом, перенормировка энергетического спектра поляритонов ярко проявляется в эффекте возникновения сильной связи в длинноволновой (коротковолновой) области и ослаблении в коротковолновой



**Рис. 15.** Законы дисперсии  $\Delta(\delta)$  при разности фаз  $\Theta_i = \pi/2$  и нормированных частотах Раби  $\omega_{23} = \omega_{34} = 1, \omega_{13} = \omega_{24} = 1$  при различных значениях  $\omega_{14}$ : 0 (а), 0.65 (б), 3 (в)

(длинноволновой) области в зависимости от частоты  $\omega_0$ . Это указывает также на смещение актуальных точек  $k$ -пространства. Эффект пересечения ветвей закона дисперсии можно, по-видимому, наблюдать экспериментально, если изменять интенсивность излучения — это приведет к изменению силы связи фотона с атомом и к спектральному смещению уровней. Отмеченные особенности можно интерпретировать как изменение силы связи фотона с атомом на переходе  $1 \leftrightarrow 2$ .

Таким образом, структура ветвей закона дисперсии существенно определяется волновым вектором  $k = \omega_c/c$  падающего из вакуума излучения. Собственные частоты четырех ветвей поляритонов  $\tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2, \tilde{\omega}_3, \tilde{\omega}_4$  являются корнями уравнения (7), существенно зависят от интенсивности падающего излучения и определяют частоты нутации  $\tilde{\Omega}_{12}, \tilde{\Omega}_{23}, \tilde{\Omega}_{34}, \tilde{\Omega}_{13}, \tilde{\Omega}_{24}, \tilde{\Omega}_{14}$  (новые частоты Раби) поляритонов, которые описываются выражениями

$$\tilde{\Omega}_{12} = \tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_2, \quad \tilde{\Omega}_{23} = \tilde{\omega}_2 - \tilde{\omega}_3, \quad \tilde{\Omega}_{34} = \tilde{\omega}_3 - \tilde{\omega}_4,$$

$$\tilde{\Omega}_{13} = \tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_3, \quad \tilde{\Omega}_{24} = \tilde{\omega}_2 - \tilde{\omega}_4, \quad \tilde{\Omega}_{14} = \tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_4.$$

Если собственные частоты, например, верхнего  $\tilde{\omega}_1$  и первого среднего  $\tilde{\omega}_2$  поляритонов совпадают, то частота нутации  $\tilde{\Omega}_{12} = 0$  и, следовательно,  $\tilde{\Omega}_{23} = \tilde{\Omega}_{13}$ . Если совпадают собственные частоты второго  $\tilde{\omega}_2$  и третьего  $\tilde{\omega}_3$  поляритонов, то  $\tilde{\Omega}_{23} = 0$ , а частоты нутации  $\tilde{\Omega}_{13} = \tilde{\Omega}_{24}$ . Если совпадают собственные частоты третьего  $\tilde{\omega}_3$  и четвертого  $\tilde{\omega}_4$  поляритонов, то  $\tilde{\Omega}_{34} = 0$ , а частоты  $\tilde{\Omega}_{13} = \tilde{\Omega}_{14}$  и т. д. В этом случае процесс нутации не является результатом биеения между четырьмя поляритонными ветвями, а представляет собой нутационные колебания на соответствующих частотах.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что в статье представлены результаты теоретического исследования особенностей поведения закона дисперсии атомных поляритонов для четырехуровневого атома с эквидистантным энергетическим спектром, взаимодействующего с фотонами ультракороткого импульса резонансного лазерного излучения с частотой  $\omega_c$ , при одновременном учете трех последовательных однофотонных переходов и многофотонных переходов — двухфотонных и трехфотонного, в приближении заданной плотности фотонов. Показано, что закон дисперсии поляритонов в окрестности второго уровня (первого возбужденного) состоит из четырех ветвей, положение и форма которых определяются шестью частотами Раби указанных оптических переходов. Непосредственный учет многофотонных переходов, наряду с однофотонными, приводит к зависимости закона дисперсии атомных поляритонов от квантовых параметров — разностей фаз. Найдены значения параметров системы, при которых возможно пересечение ветвей закона дисперсии. Результаты исследования генерации и способов управления оптическим спектром, обусловленным когерентным взаимодействием атома и фотонов с образованием атомных поляритонов, играют принципиально важную роль в создании современных устройств квантовой оптоэлектроники и могут быть использованы в практических приложениях квантовых вычислений и оптической обработки информации.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. C. W. Gardiner and M. J. Collett, Phys. Rev. A **31**, 3761 (1985).

2. D. A. Steck, *Quantum and Atom Optics*, available online at <http://steck.us/teaching> (revision 0.13.4, 24 September 2020).
3. H. Deng, H. Haug, and Y. Yamamoto, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1489 (2010).
4. I. Carusotto and C. Ciuti, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 299 (2013).
5. Y. Kasprzak, M. Richard, S. Kindermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. M. J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymanska, R. Andre, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Littlewood, B. Deveaud, and L. S. Dang, *Nature* **443**, 409 (2006).
6. R. Balili, V. Hartwell, D. Snoke, L. Pfeiffer, and K. West, *Science* **316**, 1007 (2007).
7. A. Kogar, M. S. Rak, S. Vig, A. A. Husain, F. Flicker, Y. I. Joe, L. Venema, G. J. MacDougall, T. C. Chiang, E. Fradkin, Y. van Vezel, and P. Abbamonte, *Science* **358**, 1314 (2017).
8. F. Ge, X. Han, and J. Xu, *Laser Photon. Rev.* **15**, 2000514 (2021).
9. V. Agranovich, H. Benisty, and C. Weisbuch, *Sol. St. Comm.* **102**, 631 (1997).
10. О. А. Дубовский, В. М. Агранович, *ФТТ* **58**, 1371 (2016).
11. О. А. Дубовский, В. М. Агранович, *ЖЭТФ* **155**, 963 (2019).
12. R. F. Ribeiro, J. A. Campos-Gonzales-Angulo, N. C. Giebink, W. Xiong, and J. Yuen-Zhou, arXiv:2006.08519v1 [physics.chem-ph].
13. М. Л. Тер-Микаелян, *УФН* **167**, 1249 (1997).
14. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *УФН* **124**, 619 (1978).
15. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *УФН* **169**, 753 (1999).
16. Э. Г. Канеян, *Научные труды НУАСА III(5)*, 144 (2014).
17. S. N. Sandhya, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **40**, 837 (2007).
18. G. Solookinejad, M. Jabbari, M. Nafar, E. Ahmadi Sangachin, and S. H. Asadpour, *Int. J. Theor. Phys.* **58**, 1359 (2019).
19. P. Kumar and Sh. Dasgupta, *Phys. Rev. A* **94**, 023851 (2016).
20. E. O. Nyakang'o, D. Shylla, K. Indumathi et al., *Eur. Phys. J. D* **74**, 187 (2020).
21. T. M. Autry, G. Nardin, C. L. Smallwood, K. Silverman, D. Bajoni, A. Lemaître, S. Bouchoule, J. Bloch, and S. Cundif, arXiv:2004.10845v1.
22. E. D. Valle, S. Zippilli, F. P. Laussy, A. Gonzalez-Tudela, G. Morigi, and C. Tejedor, *Phys. Rev. B* **81**, 035302 (2010).
23. S. M. Yoshida, S. Endo, J. Levinsen, and M. M. Parish, *Phys. Rev. X* **8**, 011024 (2018).
24. Z. Tan, L. Wang, M. Liu, Y. Zhu, J. Wang, and M. Zhan, arXiv:1901.00127v1.
25. F. E. Zimmer, J. Otterbach, R. G. Unanyan et al., *Phys. Rev. A* **77**, 063823 (2008).
26. B. K. Dutta and P. Panchadhyayee, *Laser Phys.* **28**, 045201 (2018).
27. K. Sawicki, T. J. Sturges, M. Ściesiek, T. Kazmierczuk, K. Sobczak, A. Golnik, W. Pacuski, and J. Suffczyński, *Nanophotonics* **10**, 2421 (2021).
28. Е. А. Якшина, Д. Б. Третьяков, В. М. Энтин, И. И. Бегеров, И. И. Рябцев, *КЭ* **48**, 10, 886 (2018).
29. H. M. Kwak, T. Jeong, Y. -S. Lee, and H. S. Moon, *Opt. Comm.* **380**, 168 (2016).
30. S. K. Nath, V. Naik, A. Chakrabarti, and A. Ray, *J. Opt. Soc. Amer. B* **36**, 2610 (2019).
31. J. Tang, Yu. Deng, and C. Lee, *Phys. Rev. Appl.* **12**, 044065 (2019).
32. S. Gasparinetti, J.-C. Besse, M. Pechal, R. D. Buijs, C. Eichler, H. J. Carmichael, and A. Wallraff, *Phys. Rev. A* **100**, 033802 (2019).
33. П. И. Хаджи, *Нелинейные оптические процессы в системе экситонов и биэкситонов в полупроводниках*, Штинца, Кишинев (1985), с. 209.
34. П. И. Хаджи, Л. Ю. Надькин, Д. А. Марков, *ФТТ* **60**, 660 (2018).
35. Л. Ю. Надькин, О. В. Коровай, Д. А. Марков, *Опт. и спектр.* **3**, 272 (2021).
36. П. И. Хаджи, О. В. Коровай, Л. Ю. Надькин, *ЖЭТФ* **155**, 620 (2019).
37. П. И. Хаджи, О. В. Коровай, Л. Ю. Надькин, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 623 (2018).
38. О. В. Коровай, *ЖЭТФ* **160**, 620 (2021).
39. П. И. Хаджи, Л. Ю. Надькин, *КЭ* **36**, 415 (2018).
40. M. D. Yacoub and G. Fraidenraich, *Math. Gazette* **96(536)**, 271 (2012).
41. W. F. Carpenter, *Math. Magazine* **39**, 28 (1966).

# ОПТИЧЕСКИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ПАРАХ РУБИДИЯ, ПОМЕЩЕННЫХ В КЮВЕТУ С АНТИРЕЛАКСАЦИОННЫМ ПОКРЫТИЕМ ПРИ БИХРОМАТИЧЕСКОМ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ

*С. Н. Атуттов, В. А. Сорокин\**

*Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 2 августа 2021 г.,  
после переработки 16 октября 2021 г.  
Принята к публикации 23 ноября 2021 г.

В ячейках с парами рубидия изучены особенности возбуждения долго затухающей флуоресценции при различных геометрических конфигурациях пучков бихроматического лазерного излучения. Проведенные эксперименты показывают, что для возникновения долго затухающей флуоресценции обязательно прямое взаимодействие атомов как с пучком накачки, так и с зондирующим пучком, находящимися в резонансе с трехуровневой  $\Lambda$ -схемой, образованной переходами с  $5^2P_{1/2}$  на подуровни основного состояния  $5^2S_{1/2}$   $F = 3$  и  $5^2S_{1/2}$   $F = 2$ . Показано, что для возникновения данной особенности флуоресценции не обязательно пространственное совмещение пучка накачки и пробного пучка, что подтверждает представление о связи долго затухающей флуоресценции с возникновением долгоживущего поляризованного состояния атомов рубидия, не разрушающегося при столкновениях со стенками кюветы, покрытыми церезином, около 40 раз.

DOI: 10.31857/S0044451022050030  
EDN: DSKHCl

Изучение оптических свойств паров рубидия в последнее время приобрело значительную актуальность из-за перспектив создания прецизионных атомных стандартов времени [1–3], а также других квантовых устройств, использующих долгоживущие поляризованные состояния атомов рубидия [4, 5]. С целью увеличения времени жизни поляризованных состояний, которые могут разрушаться при столкновениях атомов со стенками кюветы, используются различные антирелаксационные покрытия на основе предельных углеводородов: парафин, церезин [6]. В последнее время обнаружены покрытия, еще больше увеличивающие время жизни поляризованных состояний щелочных металлов на основе высокомолекулярных алкенов — углеводородов с одной двойной связью.

При создании компактных атомных часов большое значение имеет энергопотребление. И если в первых работах применялся двойной радиооптиче-

ский резонанс, то в настоящее время все больше применяется бихроматическое лазерное излучение. При определенных условиях бихроматическое лазерное излучение способно создать резонанс когерентного пленения населенности (КПН) [7–9] между подуровнями основного состояния, расщепленными из-за взаимодействия спина ядра с орбитальным моментом и спином электрона. Главное условие резонанса КПН — это совпадение разности частот бихроматического лазерного излучения со сверхтонким расщеплением основного состояния, которое является частотным репером для атомных частот. Обнаруживается резонанс КПН по явлению индуцированной оптической прозрачности, поскольку при КПН возникает невзаимодействующая с бихроматическим лазерным излучением когерентная суперпозиция сверхтонких подуровней основного состояния.

В связи с повышенным интересом к взаимодействию паров щелочных металлов с бихроматическим лазерным излучением представляют интерес и другие аспекты такого взаимодействия без целенаправленного создания КПН. Ранее в работе [10] было обнаружено долгое затухание флуоресценции паров

\* E-mail: vlad\_sorokin@ngs.ru



рубидия в сферической ячейке специальной конструкции с резиновым покрытием, не имеющей источника паров рубидия со свободной металлической поверхностью [11]. В работе [10] одно достаточно интенсивное лазерное излучение накачки имело фиксированную частоту, резонансную одному из переходов между сверхтонкими компонентами основного состояния ( $5^2S_{1/2}$ ) и возбужденного состояния ( $5^2P_{1/2}$ ) в парах естественной смеси изотопов  $^{85}\text{Rb}$  и  $^{87}\text{Rb}$ . Второе интенсивное зондирующее лазерное излучение модулировалось по частоте по треугольному закону. Диапазон частотной модуляции был около 9 ГГц, он перекрывал спектральный интервал, в котором расположены все разрешенные электродипольные переходы между сверхтонкими подуровнями состояний  $5^2P_{1/2}$  и  $5^2S_{1/2}$ . Период частотной модуляции мог регулироваться от 3 до 10 мс. Долгое затухание флуоресценции паров рубидия накладывалось на спектр флуоресценции и стартовало в момент времени, когда излучение накачки и зондирующее излучение были в резонансе с трехуровневой  $\Lambda$ -схемой уровней, с верхним состоянием  $5^2P_{1/2}$  и нижними уровнями, образованными из-за сверхтонкого расщепления основного состояния.

В настоящей работе представлены результаты серии экспериментов, аналогичных описанным в работе [10], но выполненных при различных конфигурациях лазерных пучков по отношению к кювете. Применялась сферическая ячейка диаметром 12 см. Сфера соединена с трубкой диаметром 8 мм и длиной 20 см. Внутренние стенки сферы и трубки были покрыты резином. В конце трубки помещался кусочек рубидия. Для генерации зондирующего излучения и излучения накачки использовалось два полупроводниковых одночастотных DFB-лазера. Частота генерации лазеров в широком диапазоне перестраивалась температурой. Для точной настройки частоты излучения накачки и частотной модуляции зондирующего лазера применялось изменение тока возбуждения.

Частота излучения лазера накачки мощностью около 50 мВт настраивалась в резонанс с переходом  $5^2P_{1/2}-5^2S_{1/2}$  ( $F = 3$ ) изотопа  $^{85}\text{Rb}$ . Второе интенсивное зондирующее лазерное излучение мощностью около 30 мВт модулировалось по частоте по треугольному закону. Диапазон частотной модуляции был такой же, как в [10], и также перекрывал спектральный интервал, в котором расположены все разрешенные электродипольные переходы между сверхтонкими подуровнями состояний  $5^2P_{1/2}$  и  $5^2S_{1/2}$  для обоих изотопов рубидия. Период частотной модуляции также мог регулироваться от 3

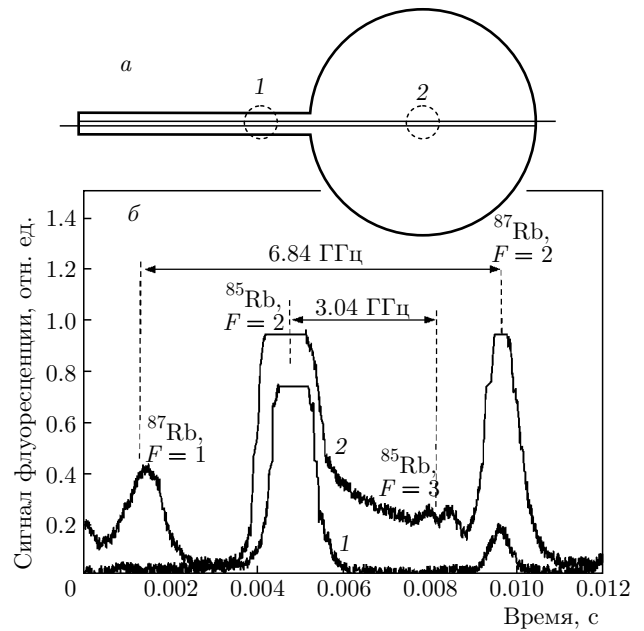


Рис. 1. Схема измерений (а) и сигналы флуоресценции паров рубидия (б) при коллинеарном встречном распространении зондирующего излучения и излучения накачки. График 1 зарегистрирован в капилляре (зона 1), график 2 соответствует центру шара (зона 2)

до 10 мс. При регистрации интенсивности флуоресценции в результате периодического сканирования частоты зондирующего излучения графики развертки во времени сигнала представляли собой спектры флуоресценции паров рубидия. При некоторых геометрических конфигурациях зондирующего излучения и излучения накачки было зарегистрировано долгое затухание флуоресценции паров рубидия, которое накладывалось на спектр флуоресценции и стартовало в момент времени, когда зондирующее излучение было в резонансе с переходом ( $5^2S_{1/2}$ ,  $F = 3$  и  $5^2S_{1/2}$ ,  $F = 2$ ), т.е. когда оба излучения были в резонансе с трехуровневой  $\Lambda$ -схемой, образованной переходами с  $5^2P_{1/2}$  на подуровни основного состояния  $5^2S_{1/2}$ ,  $F = 3$  и  $5^2S_{1/2}$ ,  $F = 2$ .

На рис. 1а приведена схема измерения сигнала флуоресценции, в которой ячейка с парами рубидия состоит из шарообразной части диаметром 12 см и относительно тонкой трубки диаметром 8 мм и длиной 20 см. Изнутри ячейка покрыта резином. В дальнем от шара конце трубки помещен кусочек металлического рубидия. Излучение накачки распространяется справа налево со стороны шара. Параллельно излучению накачки и ему навстречу распространяется зондирующее излучение. Фотодатчик для регистрации флуоресценции распола-

гался непосредственно перед стенкой колбы и мог располагаться в разных зонах. В качестве фотодатчика использовался кремниевый фотодиод ФД-24К и схема преобразования тока фотодиода в напряжение, обеспечивающая высокую линейность отклика фотодатчика. Графики сигнала флуоресценции в зависимости от момента времени наблюдения, связанного с частотой зондирующего излучения при частотной модуляции по треугольному закону для двух зон регистрации, представлены на рис. 1б. Фактически на рис. 1б приведены графики флуоресценции для половины периода частотной модуляции зондирующего излучения. Зоне капилляра (зона 1 на рис. 1а) соответствует график 1 на рис. 1б. Для центра шарообразной части (зона 2 на рис. 1а) сигнал флуоресценции представлен графиком 2 на рис. 1б. График 2 заметно отличается от графика 1 тем, что даже на качественном уровне на нем отчетливо видна медленно затухающая компонента сигнала флуоресценции. Старт этой компоненты сигнала, как уже отмечалось выше, начинается в момент, когда оба лазерных излучения резонансны трехуровневой  $\Lambda$ -схеме уровней  $^{85}\text{Rb}$ .

Опыт, результаты которого демонстрирует рис. 1, не кажется вполне «чистым», поскольку излучение флуоресценции переотражалось и рассеивалось на стенках кюветы и на церезиновом покрытии и в регистрируемый сигнал могло вносить вклад излучение от различных областей ячейки. Поэтому на следующем этапе исследований опыт был модернизирован с целью уменьшения вклада рассеянного света в сигнал флуоресценции. Схема эксперимента представлена на рис. 2а. Луч лазера накачки (на рис. 2а он выше центра сферической части ячейки) и зондирующий луч (он ниже центра сферической части ячейки) направлены в трубку. При такой геометрии опыта уровень рассеянного света в сферической части ячейки существенно снизился. Хорошо видно, что спектр флуоресценции, снятый в зоне 1 (график 1 на рис. 2б), качественно совпадает с графиком 2 на рис. 1б. Он существенно отличается от спектра флуоресценции, снятого в зоне 2 (график 2 на рис. 2б). При открытом луче накачки спектр флуоресценции в зоне 2 (график 2 на рис. 2б) представляет собой главным образом долговременную особенность со слабым остатком линий поглощения изотопов рубидия. Спектр флуоресценции зоны 2 при закрытом пучке накачки (график 3 на рис. 2б) представляет собой четыре слабых, близких к уровню шума, пика, характерных для спектра поглощения изотопов рубидия, возникших, по-видимому, от действия остаточного

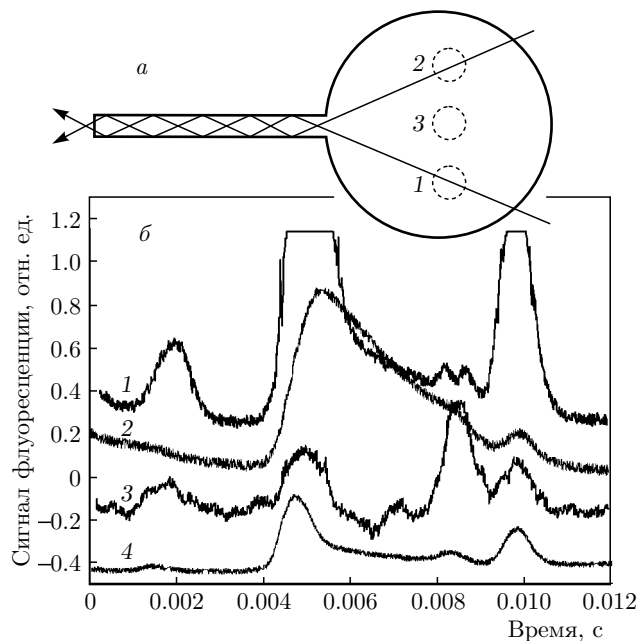


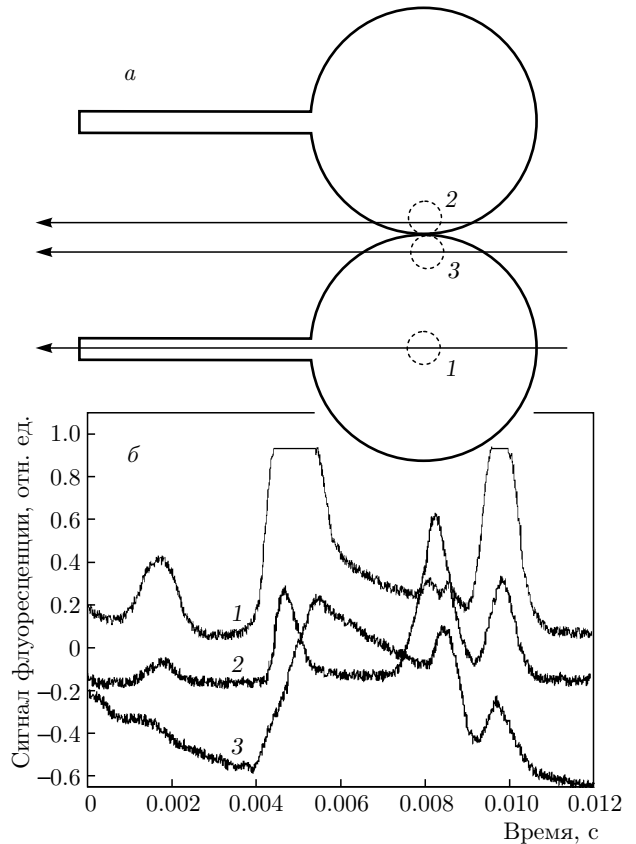
Рис. 2. Схема измерений (а) и сигналы флуоресценции паров рубидия (б) при косом распространении зондирующего излучения (нижний луч) и излучения накачки (верхний луч). График 1 зарегистрирован в зоне 1, график 2 зарегистрирован в зоне 2, график 4 зарегистрирован в зоне 3. График 3 зарегистрирован в зоне 2 при отсутствии излучения накачки. График 4 — это сигнал флуоресценции из зоны 3, находящейся вне зоны действия лазерных полей

рассеянного зондирующего излучения. Этот же механизм возникновения слабых пиков вне зоны действия зондирующего излучения проявляется и на графике 2 на рис. 2б. График 4 на рис. 2б — это сигнал флуоресценции из зоны 3 (рис. 2а), находящейся вне зоны действия лазерных полей. Графики 1–4 на рис. 2б разнесены по вертикали, чтобы лучше были различимы спектрально-временные особенности сигнала флуоресценции изотопов рубидия. Шкала абсцисс на рис. 2б аналогична оси абсцисс на рис. 1б. Вертикальные масштабы графиков 2–4 на рис. 2б растянуты примерно в 10 раз. Также регистрировался сигнал флуоресценции и в зоне капилляра, как на рис. 1а, форма которого соответствовала графику 1 на рис. 1б.

Результаты, показанные на рис. 2, свидетельствуют о том, что при формировании сигнала флуоресценции участвуют не только лазерные поля (см. графики 2–4). Также свой вклад дает и излучение флуоресценции, возникающее в зонах 1 и 2. При этом следует обратить внимание, что в зоне 2 излучение накачки имеет фиксированную длину волны. В зоне 3 излучение от обоих лазеров отсутствует.

При этом рассеянного от стенок света в ячейке не наблюдается, что проверялось сильной отстройкой длин волн лазерных пучков от области резонансного поглощения рубидия. Наблюдение медленно затухающей части флуоресценции в зонах 2 и 3 свидетельствует об образовании поляризованных долгоживущих состояний на подуровнях основного состояния рубидия. Для формирования таких долгоживущих состояний требуются оба лазерных пучка. Об этом свидетельствует график 3, когда отсутствует пучок накачки.

Для выяснения роли поляризованных атомов в образовании медленно затухающей части сигнала флуоресценции был поставлен опыт в конфигурации, показанной на рис. 3а. В эксперименте использовались две одинаковые кюветы с одинаковым покрытием, состыкованные, как показано на рис. 3а, через оптический контакт, созданный между стенками обеих кювет с помощью глицерина. Свет флуоресценции мог проходить из одной кюветы в другую. Пробный луч проходил по оси нижней кюветы. Луч накачки пропусклся или около верхней стенки нижней кюветы, или около нижней стенки верхней кюветы. График 1 на рис. 3б отвечает регистрации сигнала флуоресценции из зоны 1 (см. рис. 3а), когда оба луча, пробный и накачки, проходят через одну нижнюю кювету. Форма сигнала весьма похожа на график 2 на рис. 1б и на график 1 на рис. 2б. При этом атомы рубидия имеют возможность взаимодействовать с обоими лазерными пучками. Это взаимодействие может быть как непосредственным из-за пролета атомов через оба лазерных пучка, так и через переизлученный свет. График 3 на рис. 3б отвечает регистрации сигнала флуоресценции из зоны 3 (см. рис. 3а), когда также оба луча, пробный и накачки, проходят через одну нижнюю кювету. Форма сигнала флуоресценции весьма похожа на график 2 на рис. 2б. При этом атомы рубидия также имеют возможность взаимодействовать и напрямую с обоими лазерными пучками, и через переизлученный свет. График 2 на рис. 3б отвечает регистрации сигнала флуоресценции из зоны 2 (см. рис. 3а), когда оба луча, пробный и накачки, проходят через разные кюветы. Форма сигнала флуоресценции весьма похожа на график 1 на рис. 1б при условии слабой оптической накачки. При этом атомы рубидия напрямую не взаимодействуют с обоими лазерными пучками, т. е. атомы, побывавшие в пробном пучке, не имеют возможности попасть в пучок накачки. Однако наличие в сигнале основных пиков флуоресценции свидетельствует о достаточно хорошем прохождении излучения из одной кюветы



**Рис. 3.** Схема измерений (а) и сигналы флуоресценции паров рубидия (б) при наличии зондирующего излучения (луч на оси нижней кюветы) и излучения накачки в одной кювете и в разных кюветах (верхние лучи). График 1 зарегистрирован в зоне 1, когда лучи накачки и зондирующий распространяются в одной кювете. График 2 зарегистрирован в зоне 2, когда лучи накачки и зондирующий распространяются в разных кюветах. График 3 зарегистрирован в зоне 3, когда лучи накачки и зондирующий распространяются в одной кювете

в другую. То есть атомы рубидия взаимодействуют с обоими лазерными пучками через переизлученный свет, но долговременной компоненты сигнала флуоресценции при этом не наблюдается.

Таким образом, результаты опытов свидетельствуют о том, что для возникновения долговременной компоненты сигнала флуоресценции необходимым условием является то, что атомы рубидия обязаны побывать и в пробном пучке, и в пучке накачки. Отсутствие пучка накачки в той же кювете, через которую проходит пробный луч, не приводит к возникновению долговременной компоненты сигнала флуоресценции. Удивительной, на наш взгляд, особенностью долгого затухания сигнала флуоресценции является необязательность пространствен-

ного совмещения пучка накачки и пробного пучка. Характерное время затухания сигнала флуоресценции может быть оценено в 10 мс. Время пролета атома рубидия от стенки до стенки при комнатной температуре составляет около 500 мкс. Тогда для формирования долговременной компоненты сигнала флуоресценции атом рубидия должен испытать около 40 столкновений со стенкой без разрушения поляризации основного состояния. В капилляре кюветы (см. рис. 1а, зона 1) время пролета на размере 8 мм составит около 33 мкс, и время затухания сигнала флуоресценции из-за формирования поляризованного состояния может быть оценено в величину менее 1.3 мс. И эта компонента сигнала в капилляре при наших экспериментальных условиях наблюдаться не будет.

Следует отметить, что отсутствие медленной флуоресценции наблюдалось в любом месте тонкой трубки, что позволяет определить число столкновений с антирелаксационным покрытием, которое разрушает поляризованное состояние рубидия и тем самым дает прямую информацию об антирелаксационных свойствах покрытия. По нашему мнению, если трубки сделать в виде конуса или ступенчатого конуса, то, перемещая зону наблюдения сигнала флуоресценции, можно найти диаметр цилиндрической области, где медленная флуоресценция пропадает. Для этой области, зная тепловую скорость атомов, легко определить число столкновений атомов со стенкой без разрушения поляризации и тем самым получить оценку качества антирелаксационного покрытия.

Практическое применение полученных результатов может относиться к проблеме создания сверхточных атомных часов с репером на парах рубидия, помещенных в ячейку с антирелаксационным покрытием. Точность хода таких часов зависит, в том числе, от времени жизни поляризованного состояния атомов. Поэтому измерение допустимого числа столкновений со стенками позволяет не только определять качество антирелаксационного покрытия,

но и давать рекомендации по допустимым размерам ячейки.

**Благодарности.** Авторы благодарны С. Л. Микерину за интерес к работе, полезные замечания и обсуждения.

**Финансирование.** Работа выполнена по проекту госзадания ИАиЭ СО РАН АААА-А21 121031700030-4 «Нелинейная фотоника структурированных сред (нелинейные преобразования частот, формирование поляризованных и когерентных состояний атомов)».

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. G. Robinson and C. E. Johnson, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 771 (1982).
2. A. Risley, S. Jarvis, and J. Vanier, *J. Appl. Phys.* **51**, 4571 (1980).
3. C. Rahman and H. G. Robinson, *IEEE J. Quant. Electron.* **23**, 452 (1987).
4. D. Budker and M. V. Romalis, *Nature Phys.* **3**, 227 (2007).
5. S. J. Smullin, I. M. Savukov, G. Vasilakis et al., *Phys. Rev. A* **80**, 033420 (2009).
6. E. B. Alexandrov, M. V. Balabas, D. Budker et al., *Phys. Rev. A* **66**, 042903 (2002).
7. E. Arimondo and G. Orriols, *Lett. Nuovo Cim.* **17**, 333 (1976).
8. G. Orriols, *Nuovo Cim. B* **53**, 1 (1979).
9. Б. Д. Агапьев, М. Б. Горный, Б. Г. Матисов и др., *УФН* **163**, 1 (1993).
10. S. N. Atutov, V. A. Sorokin, S. N. Bagayev et al., *Eur. Phys. J. D* **73**, 240 (2019).
11. S. N. Atutov, F. A. Benimetskiy, A. I. Plekhanov et al., *Eur. Phys. J. D* **71**, 12 (2017).

# ЛАЗЕРНАЯ НАКАЧКА ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ В УСЛОВИЯХ СОХРАНЕНИЯ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ ЯДРА ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ В ГАЗОВОЙ ЯЧЕЙКЕ

К. А. Баранцев<sup>a\*</sup>, А. Н. Литвинов<sup>a</sup>, А. С. Пазгалёв<sup>b</sup>, А. К. Вершовский<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
195251, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 16 сентября 2021 г.,  
после переработки 6 декабря 2021 г.  
Принята к публикации 6 декабря 2021 г.

Исследуется поляризация полного момента щелочных атомов в газовой ячейке с буферным газом при накачке одночастотным циркулярно поляризованным лазерным излучением. В математической модели учитывается движение атомов и столкновения, сохраняющие спин ядра при хаотизации момента внешней электронной оболочки, полная сверхтонкая и зеемановская структуры. Анализируются стационарное решение уравнений для матрицы плотности щелочных атомов и влияние на него доли неупругих столкновений, при которых происходит тушение атомного возбуждения. Исследуется вклад различных сверхтонких состояний в поляризацию щелочных атомов. Проводится сравнение результатов с результатами модели мгновенного перемешивания населенностей в возбужденном состоянии.

DOI: 10.31857/S0044451022050042  
EDN: DSLCKC

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитометрия, в первую очередь квантовая, является одним из наиболее прецизионных разделов современной физической метрологии. Измерение магнитного поля имеет широкое применение в таких областях, как геомагнетизм и геофизика [1–5], картирование магнитного поля Земли [6], физика космоса [7, 8], магнитокардиография и магнитоэнцефалография [9–11], проверка границ применимости фундаментальных физических законов [12, 13], океанография [14], дистанционное отслеживание движущихся магнитных микро- и наночастиц [15], в задачах гироскопии и навигации [16–18]. Каждая из перечисленных выше задач требует применения средств измерения магнитного поля, характеризующихся определенным сочетанием чувствительности, точности, быстродействия и пространственного разрешения. С этим связано разнообразие применяемых в магнитометрии средств и методов. В частно-

сти, для задач биологии и медицины основным требованием является сочетание высокой чувствительности и пространственного разрешения. До недавнего времени этому требованию удовлетворяли только сверхпроводящие интерференционные датчики SQUID. Однако подобные магнитометры имеют существенный недостаток — это необходимость поддерживать низкие температуры (единицы кельвинов) во время их работы. Поэтому используемые для задач магнитоэнцефалографии массивы датчиков SQUID являются крупногабаритными и дорогостоящими, а также лишены мобильности.

Оптическая накачка щелочных атомов позволяет получить неравновесную поляризацию спинов (ориентацию или выстраивание) в атомарном газе. Если на ансамбль ориентированных спинов воздействовать резонансным радиочастотным полем, то это приведет к изменению оптических свойств атомарной среды, причем резонансная частота определяется величиной локального магнитного поля. На этом принципе работают оптические квантовые магнитометры [19–24]. Более четверти века назад был сделан большой шаг вперед по повышению чувствительности таких магнитометров, в результате че-

\* E-mail: kostmann@yandex.ru

го она оказалась сопоставима с чувствительностью SQUID-магнитометров. При этом квантовые оптические магнитометры имеют существенное преимущество — они не требуют низких (гелиевых) температур, а могут эксплуатироваться при температурах порядка комнатных. Кроме того, объем чувствительного элемента оптического магнитометра может варьироваться (в зависимости от задачи) от десятых долей до тысяч кубических сантиметров. Благодаря этим особенностям, оптическим квантовым магнитометрам отводится особая роль в квантовой магнитометрии. Спектр их применений в последнее время непрерывно расширяется.

В работе [25] исследован магнитометр на атомах Cs с оптической накачкой в миниатюрной ячейке, содержащей буферный газ N<sub>2</sub>. Применение метода, основанного на разделении фаз накачки и детектирования по времени, позволяет анализировать свободную ларморовскую прецессию. Авторы работы [26] представили схему двухосевого магнитометра Ханле, использующего однопроходную схему, где лучи накачки и детектирования находятся под небольшим углом друг к другу. Магнитометр с оптической накачкой, работающий в режиме “light-shift dispersed M<sub>z</sub>”, представлен в работе [27]. Здесь авторам удалось при объеме магнитометра 50 мм<sup>3</sup> получить разрешение не хуже 10 фТл/Гц<sup>1/2</sup>. В работе [28] представлен компактный векторный атомный магнитометр на основе эллиптически поляризованного света. Авторам удалось достичь чувствительности магнитного поля 20 фТл/Гц<sup>1/2</sup> по оси *x*, 25 фТл/Гц<sup>1/2</sup> по оси *y* и 30 фТл/Гц<sup>1/2</sup> по оси *z* при использовании миниатюрной ячейки (4 × 4 × 4 мм<sup>3</sup>) с парами <sup>87</sup>Rb. В работе [29] сообщается о практическом подходе к измерению векторного биомagnetизма с помощью атомного магнитометра с оптической накачкой. В работе экспериментально продемонстрирована возможность применения такого магнитометра в магнитокардиографии и показано, что такой подход способен предоставить более полную информацию.

Одна из основных характеристик, определяющих чувствительность оптических квантовых магнитометров, — это степень поляризации атомов, которая может быть достигнута при оптической накачке щелочных атомов. Чем выше удастся создать поляризацию атомов, тем большей чувствительности магнитометра можно добиться при прочих равных параметрах. На степень поляризации влияют следующие процессы: взаимодействие щелочных атомов с лазерным излучением, столкновения щелочных атомов с буферным газом, между собой (в

том числе в ячейках без буферного газа) и со стенками ячейки. Так, в работе [30] авторами изучался механизм оптической ориентации в парах атомов цезия на D<sub>2</sub>-линии при комнатной температуре в парафиновой ячейке. Оптическая ориентация исследовалась, когда имели место оптическая накачка, нелинейная спиновая динамика и спин-обменные столкновения. Анализ процессов оптической накачки в атомах Cs на D<sub>1</sub>-линии при наличии спин-обменной релаксации проведен в работе [31].

Теоретическое исследование светового сдвига в атомах Cs при наличии релаксации, вызванной столкновениями активных атомов и буферных, а также активных между собой проведено в работе [32].

При оптической накачке проявляются и другие особенности [33,34], а именно, при столкновении активных атомов в возбужденном состоянии с атомами буферного газа электронный спин разрушается, а ядерный спин может сохраняться. Этот факт существенным образом влияет на достижение максимальной поляризации атомов. Таким образом, исследования оптической накачки щелочных атомов представляют прикладной интерес в области магнитометрии и позволяют глубже понять физику процессов на фундаментальном уровне.

В настоящей работе мы развиваем теорию оптической накачки щелочных атомов. Мы учитываем движение щелочных атомов, наличие сверхтонкой и зеемановской структур как основного, так и возбужденного состояний. При этом главным отличием данной работы от [35] является подход, в котором учитывается разрыв связи электрона с ядром во время столкновения, что существенно влияет на стационарное распределение населенностей и поляризацию щелочных атомов. В работе проанализированы стационарное распределение населенностей, формирующее поляризацию полного момента на различных сверхтонких подуровнях, а также влияние на поляризацию доли неупругих столкновений, при которых происходит безызлучательное тушение возбуждения щелочных атомов.

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим атом щелочного металла в поле плоской монохроматической волны, распространяющейся вдоль оси *z*. Вектор напряженности электрического поля волны есть

$$\mathbf{E}(z, t) = \mathbf{e}_p E_0 e^{-i(\omega t - kz)} + \text{c.c.}, \quad (1)$$

где  $E_0$  — комплексная амплитуда,  $\mathbf{e}_p$  — орт поляризации,  $\omega$  и  $k$  — частота и волновое число. Квантовое кинетическое уравнение для матрицы плотности в представлении Вигнера имеет вид [36]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_a} \cdot \nabla\right) \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)] + R\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) + S\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где  $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$  — атомная матрица плотности,  $\mathbf{p}$  — импульс,  $\mathbf{r}$  — координата,  $m_a$  — масса атома,  $R$  — оператор, описывающий спонтанный распад возбужденного состояния вследствие взаимодействия с вакуумным полем,  $S$  — столкновительный оператор, описывающий изменение импульса, внутренние переходы между сверхтонкими подуровнями и ударное тушение возбуждения при столкновениях атомов,  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  — гамильтониан, являющийся суммой оператора внутренней энергии атома в отсутствие лазерного излучения,

$$\hat{H}_0 = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n|, \quad (3)$$

учитывающего зеемановские сдвиги в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ , где  $\epsilon_n$  — энергии атомных уровней, и оператора взаимодействия в дипольном приближении и приближении вращающейся волны,

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} = -E_0 \sum_{e,g} (\mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{e}_p) e^{-i(\omega t - kz)} \times |e\rangle \langle g| + \text{H.c.} \quad (4)$$

Здесь индекс « $e$ » пробегает все зеемановские уровни сверхтонкой структуры возбужденного состояния ( $P_{1/2}$  для  $D_1$ -линии и  $P_{3/2}$  для  $D_2$ -линии), а « $g$ » — все зеемановские уровни основного состояния; в качестве базиса выберем собственные состояния оператора  $\hat{H}_0$ ,  $\mathbf{d}_{eg}$  — матричные элементы оператора дипольного момента.

Сведем задачу к одномерной, пользуясь приближением плоского фронта волны и тем, что, ввиду эффекта Доплера (без учета релятивистских эффектов), матрица плотности зависит только от продольной проекции импульса,  $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \hat{\rho}(v, z, t)$ , где  $v = p_z/m_a$  — компонента скорости вдоль оси  $z$ . Выделим в недиагональных элементах матрицы плотности (оптических когерентностях) быстроосциллирующий множитель на частоте внешнего поля:

$$\rho_{ge}(v, z, t) = \tilde{\rho}_{ge}(v, z, t) e^{i(\omega t - kz)}.$$

Пренебрегая диффузионными неоднородностями матрицы плотности у стенок ячейки и поглощением поля в среде (оптически тонкая среда),

положим производную по координате в левой части уравнения (2) равной нулю.

Запишем квантовое кинетическое уравнение (2) для оптических когерентностей:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge}(v, t) = \left[ i(kv - \delta_{eg}) - \frac{\gamma}{2} - \nu_{opt} \right] \tilde{\rho}_{ge}(v, t) - iE_0^* \sum_{g'} D_{g'e} \rho_{gg'}(v, t) + iE_0^* \sum_{e'} D_{ge'} \rho_{e'e}(v, t), \quad (5)$$

где  $D_{eg} = (\mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{e}_p)/\hbar$  — проекция матричного элемента оператора дипольного момента на орт поляризации,  $\delta_{eg} = \omega - \omega_{eg}$  — отстройка излучения от перехода  $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$ ,  $\gamma$  — скорость спонтанного распада возбужденного состояния,  $\nu_{opt}$  — ударная ширина оптического перехода.

Сечение взаимодействия момента электронной оболочки с моментом относительного движения сталкивающихся атомов велико по сравнению с сечением спин-обменного взаимодействия, поэтому распад оптических когерентностей при столкновениях происходит значительно чаще, чем распад низкочастотных когерентностей. Тогда, в предположении распада оптических когерентностей при каждом столкновении, в уравнении (5) приходный член интеграла столкновений будет отсутствовать.

Для интенсивностей, которые не превышают  $10 \text{ мВт/см}^2$ , скорость распада возбужденного состояния, вследствие процессов столкновительного тушения и спонтанного распада, превосходит скорость его заселения под действием лазерного поля, поэтому можно положить  $\rho_{ee} \ll \rho_{gg}$ , а распределение по скоростям населенностей нижних уровней и низкочастотных когерентностей максвелловским:

$$\rho_{gg}(v) = M(v) \rho_{gg}, \quad \rho_{gg'}(v) = M(v) \rho_{gg'}, \quad (6)$$

где  $M(v) = (\sqrt{\pi} v_T)^{-1} \exp(-v^2/v_T^2)$  — распределение Максвелла по проекции скорости,  $v_T = \sqrt{2k_B T/m_a}$  — наиболее вероятная скорость.

В этих предположениях проинтегрируем уравнение (5) по скорости и перейдем к редуцированным элементам матрицы плотности  $\rho_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\alpha\beta}(v) dv$ . Для этого выразим из уравнения (5) редуцированные оптические когерентности в стационарном случае:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}_{eg}(v) dv = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(v) dv}{i(\delta_{eg} - kv) - \Gamma_{opt}} E_0 \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g}. \quad (7)$$

Интеграл по скорости может быть взят аналитически:

$$W(\delta_{eg}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(v) dv}{i(\delta_{eg} - kv) - \Gamma_{opt}} = -\frac{\sqrt{\pi}}{kv_T} w\left(\frac{\delta_{eg} + i\Gamma_{opt}}{kv_T}\right), \quad (8)$$

где  $w(x) = \exp(-x^2)\text{erfc}(x)$  — комплексная функция ошибок,  $\Gamma_{opt} = \gamma/2 + \nu_{opt}$  — полная однородная ширина оптического перехода. Вещественная часть выражения (8) описывает форму линии поглощения на конкретном переходе  $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$ , которая представляет собой контур Фойгта, имеющий доплеровскую (порядка  $kv_T$ ) и однородную (порядка  $\Gamma_{opt}$ ) ширины.

Теперь запишем стационарные уравнения для остальных редуцированных по скорости элементов матрицы плотности, подставив в них найденные оптические когерентности (7):

$$0 = -|E_0|^2 \sum_g \left( D_{eg} W^*(\delta_{e'g}) \sum_{g'} D_{g'e'} \rho_{gg'} + D_{g'e'} W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} \right) + (i\omega_{e'e} - \gamma - \nu_Q) \rho_{ee'}, \quad (9)$$

$$0 = |E_0|^2 \sum_e \left( D_{ge} W(\delta_{eg'}) \sum_{g''} D_{eg''} \rho_{g''g'} + D_{eg'} W^*(\delta_{eg}) \sum_{g''} D_{g''e} \rho_{gg''} \right) + (i\omega_{g'g} - \Gamma_{rf}) \rho_{gg'}, \quad (10)$$

$$0 = |E_0|^2 \sum_e \left( D_{ge} W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} + \text{c.c.} \right) - \Gamma_{mix}^{(g)} (\rho_{gg} - \rho'_{gg}) + \nu_Q \rho'_{gg} + \gamma \sum_e P_{ge}^{(\gamma)} \rho_{ee}, \quad (11)$$

$$0 = -|E_0|^2 \sum_g \left( D_{ge} W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} + \text{c.c.} \right) - \Gamma_{mix}^{(e)} (\rho_{ee} - \rho'_{ee}) - (\gamma + \nu_Q) \rho_{ee}, \quad (12)$$

где  $P_{ge}^{(\gamma)}$  — матрица вероятностей спонтанных переходов  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$ , элементы которой вычисляются как

$$P_{ge}^{(\gamma)} = (2F_g + 1)(2J_e + 1) \times \left( C_{F_g, M_g, 1, q}^{F_e, M_e} \begin{Bmatrix} J_g & I & F_g \\ F_e & 1 & J_e \end{Bmatrix} \right)^2, \quad (13)$$

$C_{F_g, M_g, 1, q}^{F_e, M_e}$  — коэффициенты Клебша–Гордана,  $F_\alpha$  — полный момент атома,  $M_\alpha = -F_\alpha, \dots, F_\alpha$  — его проекция,  $q = M_e - M_g$ ,  $J_\alpha$  — момент электронной оболочки,  $I$  — спин ядра,  $\alpha = g, e$  — индекс, нумерующий все магнитные уровни сверхтонкой структуры соответственно основного и возбужденного состояний, фигурными скобками обозначен  $6j$ -символ.

Рассмотрим подробнее процессы, происходящие при столкновении щелочных атомов с другими щелочными атомами и буферным газом. Характерное время взаимодействия пары сталкивающихся атомов порядка  $10^{-12}$  с, что значительно меньше, чем время взаимодействия внешнего электрона атомов с ядром как в основном, так и в возбужденном состояниях (порядка  $10^{-10}$  с, определяется частотой сверхтонкого расщепления). Следовательно, при столкновении разрывается связь электрон–ядро, и эволюция состояния электрона происходит в основном под действием тонкого взаимодействия, связывающего орбитальный момент со спином электрона [37]. Если второй атом является буферным, такое взаимодействие приводит к хаотизации проекции момента электронной оболочки, поскольку буферный газ является «внешней средой» и его состояние не зависит от состояния щелочных атомов. При этом состояние ядра практически не изменяется.

Если же вторым атомом является другой щелочной атом, между ними происходит спин-обмен. Исход столкновения определяется самим квантовым состоянием пары щелочных атомов и должен описываться двухчастичной матрицей плотности [38]. В пренебрежении квантовыми корреляциями между различными щелочными атомами можно использовать одночастичное описание, однако уравнения для одночастичной матрицы плотности при этом будут нелинейными. А именно, константа спин-обмена зависит от матрицы плотности атомов. Действительно, если представить гипотетическую ситуацию, что все щелочные атомы находятся в одном состоянии (например, атомы  $^{87}\text{Rb}$  в основном состоянии с проекцией полного момента 2), то спин-обмен прекращается, что подтверждается экспериментом [39].

В данной работе мы ограничимся рассмотрением случая, когда концентрация атомов щелочного ме-



талла мала по сравнению с концентрацией буферного газа, так что скорость релаксации определяется исключительно столкновениями с буферными атомами. Это позволяет нам пренебречь нелинейными процессами при столкновениях щелочь–щелочь.

В нашей модели мы будем рассматривать следующие процессы при столкновении с атомом буферного газа.

1. Упругие столкновения, приводящие к хаотизации электронного момента при сохранении проекции спина ядра и орбитального квантового числа. Такие столкновения приводят к перемешиванию населенностей в основном (со скоростью  $\Gamma_{mix}^{(g)}$ ) и возбужденном (со скоростью  $\Gamma_{mix}^{(e)}$ ) состояниях. При таком столкновении обозначим изменение матрицы плотности как

$$\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}' \quad (14)$$

2. Неупругие столкновения, приводящие к переходу из возбужденного состояния в основное (со скоростью  $\nu_Q$ ) при хаотизации электронного момента и сохранении проекции спина ядра. Такие столкновения происходят, например, при использовании азота или других молекулярных газов в качестве буферного газа. При столкновении щелочной атом совершает безызлучательный переход с передачей энергии на колебательно-вращательные степени свободы молекулы азота. При таком столкновении имеем следующее изменение матрицы плотности:

$$\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}'^Q \quad (15)$$

Выше в уравнении (10)  $\Gamma_{rf} = \Gamma_{mix}^{(g)}/2$  — скорость разрушения низкочастотных когерентностей в основном состоянии вследствие описанных процессов.

Преобразования (14), (15) можно записать как действие оператора  $\Xi$  следующего вида:

$$\hat{\rho}' = \Xi\{\hat{\rho}\} = \hat{A}^T \left\{ \hat{\rho}_E^{(0)} \otimes \text{Sp}_E \left( \hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^T \right) \right\} \hat{A}, \quad (16)$$

где  $\hat{A}$  — матрица перехода из базиса полного момента атома, имеющего базисные векторы  $|F_\alpha M_\alpha\rangle$ , в базис состояний электронной оболочки и ядра с базисными векторами  $|m_\alpha \mu\rangle$ . Здесь  $m_\alpha = -J_\alpha, \dots, J_\alpha$  — проекция момента электрона,  $\mu = -I, \dots, I$  — проекция момента ядра. Разложение векторов базиса полного момента по векторам электронно-ядерного базиса имеет вид [40]

$$|F_\alpha M_\alpha\rangle = \sum_{m_\alpha, \mu} A_{F_\alpha, M_\alpha; m_\alpha, \mu} |m_\alpha \mu\rangle, \quad (17)$$

где элементы матрицы  $\hat{A}$  — коэффициенты Клебша–Гордана  $C_{J_\alpha, m_\alpha, I, \mu}^{F_\alpha, M_\alpha}$ :

$$A_{F_\alpha, M_\alpha; m_\alpha, \mu} = C_{J_\alpha, m_\alpha, I, \mu}^{F_\alpha, M_\alpha} \quad (18)$$

Матрица  $\hat{A}$  унитарна и вещественна, т. е. выполняется  $\hat{A}^{-1} = \hat{A}^+ = \hat{A}^T$ . Таким образом, преобразования матрицы плотности из базиса полного момента в электронно-ядерный базис и обратно имеют вид

$$\hat{\rho}_{NE} = \hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^T, \quad \hat{\rho} = \hat{A}^T \hat{\rho}_{NE} \hat{A}. \quad (19)$$

В выражении (16) в фигурных скобках стоит прямое произведение электронной матрицы плотности  $\hat{\rho}_E^{(0)}$  с хаотизированной проекцией электронного спина и ядерной матрицы плотности  $\hat{\rho}_N = \text{Sp}_E(\hat{\rho}_{NE})$  с сохраненной проекцией спина ядра.

Прямая подстановка выражения (16) в уравнения (11), (12) нецелесообразна для численного решения системы уравнений для матрицы плотности. Поскольку в выражении (16) все операции линейны, сам оператор  $\Xi$  также линеен. Его действие можно свести к умножению на матрицу вероятностей переходов, происходящих при столкновении. Для этого рассмотрим действие этого оператора на матрицы вида

$$\hat{\Delta}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$\hat{\Delta}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \dots$$

Для атома  $^{87}\text{Rb}$  матрица  $\hat{\Delta}_1$  соответствует нахождению атома с единичной вероятностью на уровне  $|F_g = 1, M_g = -1\rangle$ . Нумерация состояний идет по возрастанию проекции полного момента и снизу вверх по энергии сверхтонких состояний. Действие оператора  $\Xi$  на матрицу  $\hat{\Delta}_1$  дает

$$\Xi\{\hat{\Delta}_1\} = \begin{pmatrix} 5/16 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/16 & \dots \\ 0 & 1/16 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3/8 & 0 & \dots \\ \sqrt{3}/16 & 0 & 0 & 0 & 3/16 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Как видно из (21), при столкновении населенность распределяется по определенным уровням, а также возникают атомные когерентности, которых не было до столкновения. Выражение (21) иллюстрирует преобразование матрицы плотности одного атома при единичном акте столкновения. Необходимо помнить, что система квантовых кинетических

уравнений (9)–(12) записана для матрицы плотности, усредненной по большому числу столкновений [36], чтобы ее можно было считать непрерывно меняющейся величиной. Различные столкновения приводят к независимым фазовым добавкам в атомных когерентностях, поэтому усреднение по большому числу столкновений приведет к обнулению атомных когерентностей. Поэтому столкновения приводят к перераспределению населенностей и исчезновению когерентностей, наведенных электромагнитным полем.

Введем матрицу столкновительных переходов между состояниями  $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$ :

$$P_{ij} = \left( \Xi \{ \hat{\Delta}_j \} \right)_{ii}. \quad (22)$$

Диагональную часть матрицы плотности можно разложить по матрицам  $\hat{\Delta}_j$ :

$$\hat{\rho} = \sum_j \hat{\Delta}_j \rho_{jj}. \quad (23)$$

Теперь, используя (22), (23) и линейность оператора  $\Xi$ , можно записать преобразование диагональных элементов произвольной матрицы плотности:

$$\rho'_{ii} = \left( \Xi \left\{ \sum_j \hat{\Delta}_j \rho_{jj} \right\} \right)_{ii} = \sum_j P_{ij} \rho_{jj}. \quad (24)$$

Таким образом, действие оператора столкновений (16) на матрицу плотности свелось к линейной комбинации ее диагональных элементов.

При формировании матрицы  $\hat{P}$  используются выражения (22) и (16), где в качестве электронной матрицы плотности с хаотизированным электронным моментом,  $\hat{\rho}_E^{(0)}$ , берется диагональная матрица с равномерно распределенной населенностью на основном уровне при  $i, j \in [1, N_g]$ , на возбужденном уровне при  $i, j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$ , что соответствует преобразованию (14) при упругих столкновениях. Неупругие столкновения (15) описываются матричными элементами при  $j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$ ,  $i \in [1, N_g]$ , где в качестве  $\hat{\rho}_E^{(0)}$  берется диагональная матрица с равномерно распределенной населенностью на основном уровне. Переходы из основного в возбужденное состояние не происходят в рассматриваемом диапазоне температур, поэтому  $P_{ij} = 0$  для  $j \in [1, N_g]$ ,  $i \in [N_g + 1, N_g + N_e]$ . Здесь  $N_g$  и  $N_e$  — число уровней основного и возбужденного состояний.

Данную математическую модель легко свести к модели, не учитывающей сохранение спина ядра при

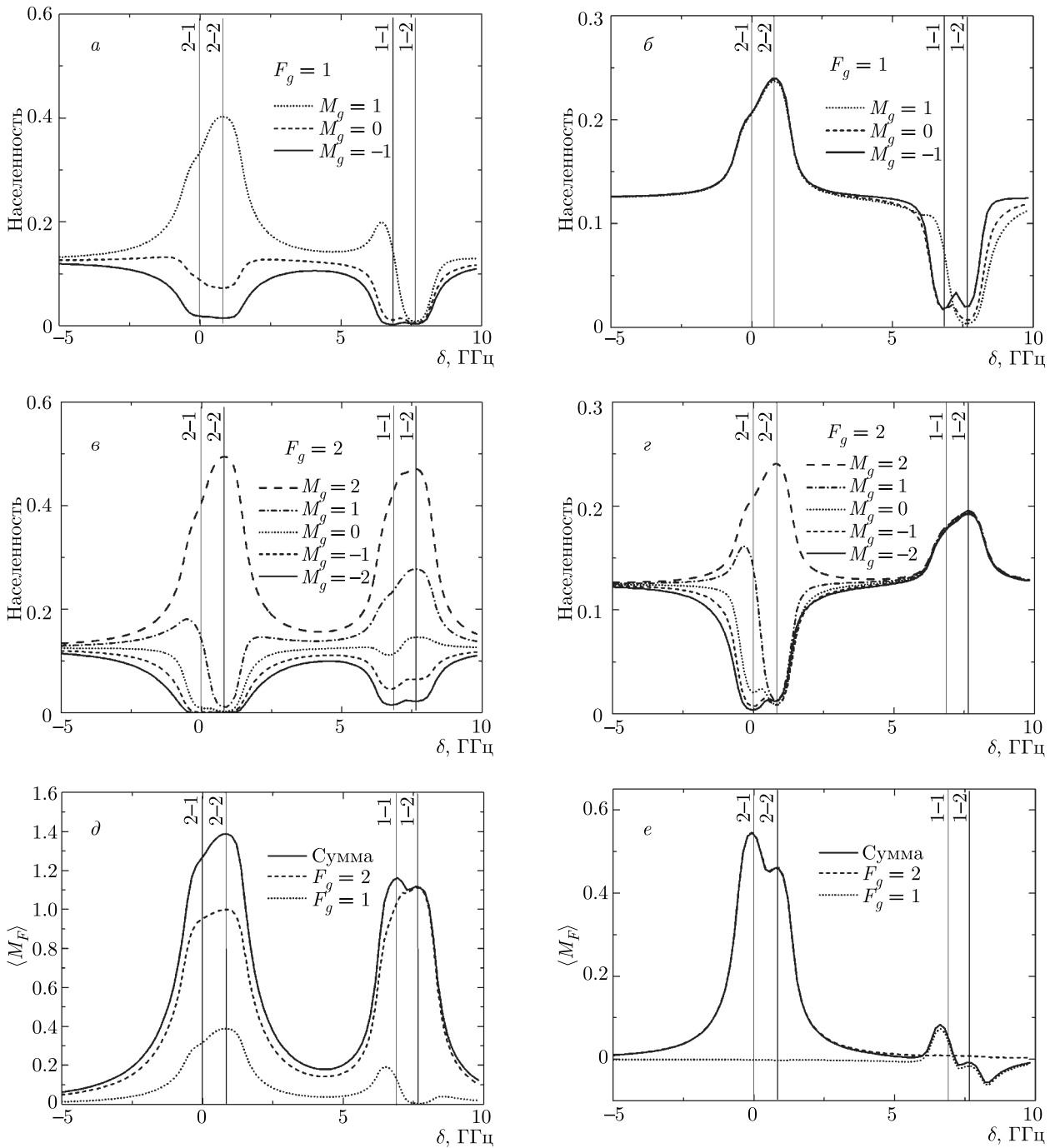
столкновениях. В такой модели при столкновениях населенности стремятся к равномерному распределению по уровням соответствующего мультиплета. Поскольку элементы матрицы  $\hat{P}$  имеют смысл вероятностей переходов при столкновениях, достаточно положить их одинаковыми. Так, при  $i, j \in [1, N_g]$  положим  $P_{ij} = 1/N_g$  (перемешивание вниз), при  $i, j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$  положим  $P_{ij} = 1/N_e$  (перемешивание вверх), а для неупругих столкновений  $j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$ ,  $i \in [1, N_g]$  возьмем  $P_{ij} = 1/N_g$ .

При разрушении как состояния спина ядра, так и состояния электронной оболочки очевидно, что перемешивание населенностей в возбужденном состоянии будет происходить быстрее, чем в случае сохранения спина ядра. Поэтому во многих работах (см., например, [35]) применяется еще более упрощенная модель мгновенного перемешивания в возбужденном состоянии. В этой модели при возбуждении атома происходит мгновенное равновероятное распределение населенности по верхнему мультиплету. При этом уже нет смысла учитывать верхние уровни по отдельности, а в системе (9)–(12) можно оставить лишь суммарную населенность верхнего мультиплета. В нашей модели, для перехода к модели мгновенного перемешивания, помимо замены матрицы столкновений  $\hat{P}$  нужно положить одинаковыми вероятности переходов при спонтанном распаде, т. е. элементы  $P_{ge}^{(\gamma)}$  матрицы спонтанных переходов.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим возбуждение  $D_1$ -линии атомов  $^{87}\text{Rb}$  узкополосным излучением  $\sigma^+$ -поляризации в газовой ячейке с буферным газом  $\text{N}_2$ . Далее будем анализировать решение стационарной системы уравнений для матрицы плотности (9)–(12) со столкновительным преобразованием (24), а также в модели мгновенного перемешивания, не учитывающей сохранение спина ядра при столкновениях.

На рис. 1а–г приведены зависимости населенностей подуровней основного состояния от отстройки  $\delta$  излучения от перехода  $|F_g = 2\rangle \leftrightarrow |F_e = 1\rangle$ . На горизонтальной шкале указаны характерные значения отстройки (вертикальные прямые), соответствующие четырем переходам между всеми комбинациями сверхтонких подуровней основного и возбужденного состояний. Поскольку имеет место неравенство  $\rho_{ee} \ll \rho_{gg}$ , определяющий вклад в спиновую поляризацию атомов дает распределение населенностей основного состояния.



**Рис. 1.** Зависимости населенностей основного состояния атома  $^{87}\text{Rb}$  и средней проекции полного момента от отстройки от перехода  $|F_g = 2\rangle \leftrightarrow |F_e = 1\rangle$  при возбуждении  $\sigma^+$ -поляризованным излучением при сохранении спина ядра (a, c, d) и в модели мгновенного перемешивания (b, e, e). Параметры: интенсивность излучения  $I_p = 0.1 \text{ мВт/см}^2$ , температура ячейки  $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ , буферный газ  $\text{N}_2$ , концентрация буферного газа  $n_{buf} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , доля тушащих столкновений  $x = 0.5$ , доля столкновений перемешивания возбужденного уровня  $y = 1$ , магнитное поле  $B = 0$

На рис. 1*д,е* приведено среднее значение проекции полного момента, пропорциональное поляризации, на сверхтонких подуровнях  $|F_g = 1\rangle$  (пунктирная кривая) и  $|F_g = 2\rangle$  (штриховая кривая), а также их сумма (сплошная кривая).

Левый столбец (рис. 1*а,в,д*) соответствует рассматриваемой модели, учитывающей сохранение спина ядра при столкновениях. В правом столбце (рис. 1*б,з,е*) приведены расчеты в модели мгновенного перемешивания.

Левые части графиков соответствуют действию лазерного поля, откачивающего атомы с уровня  $|F_g = 2\rangle$ . При этом уровень  $|F_g = 1\rangle$  значительно отстроен, и действие поля с него для рассматриваемого набора параметров пренебрежимо мало (доплеровское уширение  $kv_T \approx 300$  МГц, ударная ширина  $\Gamma_{opt} \approx 60$  МГц, что значительно меньше сверхтонкого расщепления внизу, равного примерно 6.8 ГГц). Те же рассуждения верны и для правых частей графиков, где поле откачивает атомы с уровня  $|F_g = 1\rangle$ .

### 3.1. Накачка с уровня $|F_g = 2\rangle$

Обсудим вначале схему накачки с уровня  $|F_g = 2\rangle$ , т.е. левые части графиков на рис. 1 в диапазоне отстроек от  $-5$  до  $3$  ГГц. В модели сохранения спина ядра, несмотря на отсутствие откачки лазерным полем, на уровне  $|F_g = 1\rangle$  наблюдается значительное заселение зеемановского подуровня с положительной проекцией полного момента (рис. 1*а*, пунктирная кривая) при том, что два других зеемановских подуровня обеднены по сравнению с равновесной населенностью  $1/8$ .

Это происходит вследствие ряда параллельно протекающих процессов. В первую очередь, происходит заселение верхних подуровней с преимущественно положительной проекцией полного момента под действием циркулярно поляризованного лазерного поля. Вверху происходит перемешивание населенностей при столкновениях со скоростью  $\Gamma_{mix}^{(e)} \approx 10$  МГц без перехода вниз, что приводит к уменьшению поляризации. Также имеют место два процесса распада вниз: спонтанный распад  $\gamma = 5.75$  МГц и безызлучательное тушение возбуждения при столкновениях с буферным газом,  $\nu_Q \approx 10$  МГц (см. уравнение (12)). Последние два процесса приводят к частичному переносу поляризации на уровень  $|F_g = 1\rangle$ , а также на зеемановский подуровень  $|F_g = 2, M_g = 2\rangle$ , который выступает в роли так называемого «кармана», т.е. состояния, в котором атомы скапливаются, не подвергаясь воздей-

ствию откачивающего излучения (рис. 1*в*, длинные штрихи).

Еще одним процессом, поляризующим состояние  $|F_g = 1\rangle$ , является перемешивание населенностей внизу при столкновениях атомов между собой, с буферным газом и со стенками ячейки со скоростью  $\Gamma_{mix}^{(g)} \approx 100$  Гц, что значительно меньше, чем перемешивание населенностей вверху. Однако этот процесс значительно влияет на стационарное распределение населенностей, поскольку для некоторых зеемановских подуровней является единственным каналом выкачки населенности. При этом происходит переход населенности из «кармана»  $|F_g = 2, M_g = 2\rangle$  преимущественно на зеемановский подуровень  $|F_g = 1, M_g = 1\rangle$  с переносом поляризации ядерного спина.

В модели мгновенного перемешивания (рис. 1*б,з,е*) мы видим существенные отличия результатов от результатов модели сохранения спина ядра. Главным образом, отличие обусловлено наличием в последней процесса переноса наведенной излучением поляризации из возбужденного состояния в основное. Этот процесс отсутствует в модели мгновенного перемешивания ввиду обнуления поляризации в возбужденном состоянии. Процесс перехода атома из возбужденного состояния в основное связан с изменением орбитального момента электрона, поэтому во время столкновения существенная доля поляризации ядра переносится в основное состояние. Также в этот перенос вносит вклад спонтанный распад, который частично сохраняет поляризацию из-за правил отбора.

На рис. 1*б* при накачке с уровня  $|F_g = 2\rangle$  зеемановские подуровни мультиплета  $|F_g = 1\rangle$  заселяются равномерно (все три кривые в левой части совпадают). Также с ними совпадает населенность, соответствующая «карману» состояния  $|F_g = 2\rangle$  (длинные штрихи на рис. 1*з*).

Как видно на рис. 1*д*, при откачке с уровня  $|F_g = 2\rangle$  модели сохранения спина ядра основной вклад в поляризацию дает состояние  $|F_g = 2\rangle$  благодаря заселению зеемановского «кармана» (штриховая кривая, левый пик) и частично дает вклад состояние  $|F_g = 1\rangle$  благодаря безызлучательному переносу поляризации с верхнего состояния и переносу поляризации с уровня  $|F_g = 2\rangle$  при столкновениях (пунктирная кривая, левый пик). В модели мгновенного перемешивания (рис. 1*е*) вклад состояния  $|F_g = 1\rangle$  равен нулю (пунктирная кривая) по причине его равномерного заселения.

### 3.2. Накачка с уровня $|F_g = 1\rangle$

Теперь рассмотрим случай откачки с уровня  $|F_g = 1\rangle$  (рис. 1, правая часть графиков в диапазоне отстроек от 5 до 10 ГГц). В модели сохранения спина ядра, в отличие от предыдущего случая, основной вклад в поляризацию здесь дает нерезонансный уровень  $|F_g = 2\rangle$  (в предыдущем случае основной вклад в поляризацию давал резонансный уровень), на котором происходит накопление населенности на зеемановских подуровнях с проекциями полного момента  $+1$  и  $+2$  и обеднение подуровней с проекциями  $-2$  и  $-1$  (рис. 1б). При настройке на уровень  $|F_e = 1\rangle$  частично возникает «карман» на подуровне  $|F_g = 1, M_g = 1\rangle$ , однако его вклад невелик, поскольку ширина линии поглощения сравнима со сверхтонким расщеплением вверху и происходит выкачка населенности на нерезонансный верхний сверхтонкий уровень  $|F_e = 2\rangle$  (имеет место частично разрешенная сверхтонкая структура возбужденного состояния).

Отметим, что, несмотря на отсутствие «карманов» в данном типе накачки с уровня  $|F_g = 1\rangle$ , значение средней проекции полного момента состояния  $|F_g = 2\rangle$  достигает большего значения (рис. 1д, штриховая кривая, правый пик), чем при накачке с уровня  $|F_g = 2\rangle$  (штриховая кривая, левый пик). В целом же, за счет вклада нерезонансного уровня, суммарная средняя проекция полного момента оказывается больше при накачке с уровня  $|F_g = 2\rangle$  (рис. 1в, сплошная кривая).

В модели мгновенного перемешивания обеднение состояния  $|F_g = 1\rangle$  происходит приблизительно одинаково для зеемановских подуровней (рис. 1б, правая часть). Заселение же зеемановских подуровней  $|F_g = 1\rangle$  при этом полностью равномерно (рис. 1з, правая часть). Таким образом, в данной модели и при данном типе накачки поляризация близка к нулю (рис. 1е, правая часть). При этом возникает небольшая отрицательная поляризация, что подробно обсуждалось в работе [35].

### 3.3. Анализ зависимости поляризации от доли тушащих столкновений

Как отмечено выше, большую роль в формировании поляризации играет перераспределение населенностей при столкновениях. Один из основных вкладов в распределение дает безызлучательный переход из возбужденного состояния в основное с сохранением проекции спина ядра (уравнение (11), слагаемое, пропорциональное  $\nu_Q$ ). Поэтому важно

точно определить значение частоты этого процесса  $\nu_Q$ . Из газокинетических законов нетрудно определить полную частоту столкновений  $\nu = n_{buf}\sigma u$ , где  $n_{buf}$  — концентрация буферного газа (концентрацией щелочных атомов можно пренебречь),  $\sigma \approx 5 \cdot 10^{-15}$  см<sup>2</sup> — газокинетическое сечение, которое может в первом приближении быть найдено как площадь круга с радиусом, равным сумме радиусов щелочного и буферного атомов,  $u$  — средняя относительная скорость атома щелочного металла и молекулы буферного газа. Частоту  $\nu_Q$  можно определить как долю  $x$  столкновений, при которых происходит безызлучательное тушение возбуждения по отношению к полной частоте столкновений:

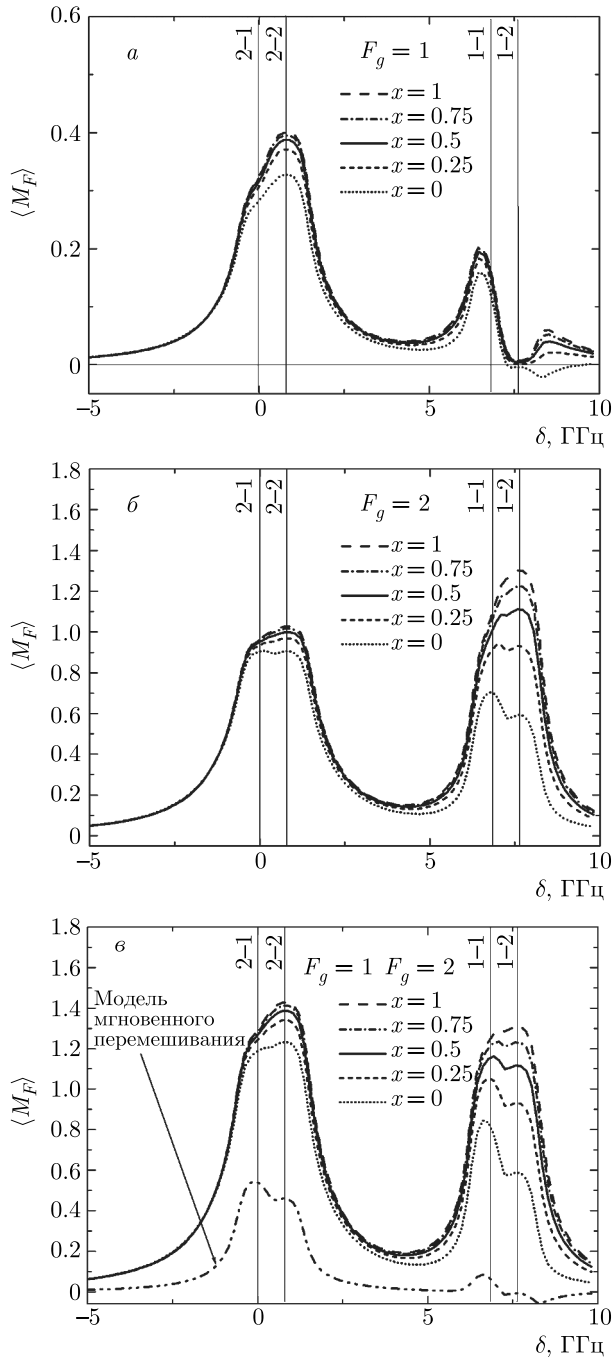
$$\nu_Q = x\nu, \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (25)$$

Значение  $x$  определяется типом буферного газа. Например, для азота  $x > 0$ , так как при столкновении есть ненулевая вероятность передачи энергии атомного возбуждения на колебательно-вращательные степени свободы молекулы N<sub>2</sub>. При построении графиков на рис. 1 из экспериментальных данных [34] было взято значение  $x = 0.5$ . Для других буферных газов, преимущественно атомарных, тушение возбуждения отсутствует или пренебрежимо мало,  $x \approx 0$  [41].

Величина  $x$  определяет долю от полной частоты столкновений, при которых происходит тушение возбуждения. Соответственно, при остальных столкновениях с частотой  $(1-x)\nu$  не происходит тушения, а атом остается в возбужденном состоянии. При этом в доле таких столкновений может происходить хаотизация электронной оболочки с сохранением ядерного спина, т.е. процесс (14) со скоростью  $\Gamma_{mix}^{(e)}$ . Таким образом, имеет место ограничение  $\Gamma_{mix}^{(e)} \leq (1-x)\nu$ . Введем долю  $y$  таких столкновений:

$$\Gamma_{mix}^{(e)} = y(1-x)\nu, \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (26)$$

Исследуем, как величина  $x$  влияет на среднюю проекцию полного момента. На рис. 2 в модели сохранения спина ядра приведены зависимости средней проекции полного момента на сверхтонких состояниях от отстройки при различных значениях доли  $x$  тушащих столкновений. При этом доля упругих столкновений, при которых происходит перемешивание вверху,  $y = 1$ . В целом происходит увеличение поляризации с ростом  $x$ , что обусловлено переносом поляризации из возбужденного состояния, в котором скорость перемешивания значительно больше, чем в основном. Наиболее значительно



**Рис. 2.** Зависимости средней проекции полного момента атома  $^{87}\text{Rb}$  на уровнях  $F_g = 1$  (а),  $F_g = 2$  (б) и их суммы (в) от отстройки при возбуждении  $\sigma^+$ -поляризованным излучением. Параметры те же, что на рис. 1

изменяется поляризация на уровне  $F_g = 2$  при возбуждении с уровня  $F_g = 1$  (рис. 2б, правый пик). На рис. 2в приведена также кривая в модели мгновенного перемешивания (штрихпунктирная кривая с двумя точками). Интересно отметить, что в этой

модели кривая не зависит от доли  $x$  тушащих столкновений. Это объясняется тем, что в возбужденном состоянии, вследствие мгновенного перемешивания, поляризация равна нулю, и ее перенос в основное состояние при столкновениях отсутствует.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе разработана стационарная математическая модель, описывающая возбуждение щелочных атомов монохроматическим лазерным излучением в газовой ячейке с буферным газом с целью расчета поляризации газа при возбуждении циркулярно поляризованным излучением. Проводится исследование влияния столкновений на средний полный момент атомов при учете разрыва связи внешней электронной оболочки с ядром в момент столкновения. Учтены полная сверхтонкая и зеемановская структуры основного и возбужденного состояний.

Рассмотрено формирование поляризации полного момента на различных сверхтонких уровнях при сканировании отстройки лазерного излучения. Особое внимание уделено влиянию доли неупругих столкновений, при которых происходит тушение возбуждения щелочных атомов и перенос поляризации из возбужденного состояния в основное.

Проведено сравнение результатов данной модели с упрощенной моделью, в которой не учитывается сохранение спина ядра при столкновениях, и сделано предположение о мгновенном перемешивании населенности в возбужденном состоянии.

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-29-10004).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. M. Manda and M. Korte, *Geomagnetic Observations and Models*, Springer (2011).
2. P. Qi, X. Geng, G. Liu et al., *J. Phys. B* **54**, 125001 (2021).
3. D. Sheng, A. R. Perry, S. P. Krzyzewski et al., *Appl. Phys. Lett.* **110**, 031106 (2017).
4. W. Neubauer, *Naturwissenschaften* **88**, 13 (2001).
5. N. Linford, *Rep. Progr. Phys.* **69**, 2205 (2006).
6. H.-G. Meyer, R. Stolz, A. Chwala, and M. Schulz, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, 1504 (2005).

7. H. Korth, K. Strohhahn, F. Tejada et al., *J. Geophys. Res. Space Phys.* **121**, 7870 (2016).
8. I. Fratter, J.-M. Leger, F. Bertrand et al., *Acta Astronaut.* **121**, 76 (2016).
9. A. Weis, *Europhys. News* **43**(3), 20 (2012).
10. H. Koch, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **11**, 49 (2001).
11. M. Hämmäläinen, R. Hari, R. J. Ilmoniemi et al., *Rev. Mod. Phys.* **65**, 413 (1993).
12. S. Afach, G. Bison, K. Bodek et al., *J. Appl. Phys.* **116**, 084510 (2014).
13. S. Pustelny, D. F. Kimball, C. Pankow et al., *Ann. Phys.* **525**, 659 (2013).
14. C. Deans, L. Marmugi, and F. Renzoni, *Appl. Opt.* **57**, 2346 (2018).
15. A. Soheilian, M. Ranjbaran, and M. M. Tehrani, *Sci. Rep.* **10**, 1294 (2020).
16. T. G. Walker and M. S. Larsen, *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **65**, 373 (2016).
17. А. К. Вершовский, Ю. А. Литманович, А. С. Пазгалёв, В. Г. Пешехонов, *Гироскопия и навигация* **26**, 55 (2018).
18. К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, *КЭ* **49**, 169 (2019).
19. W. Harper, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 169 (1972).
20. E. Alexandrov, M. Balabas, A. Pasgalev et al., *Laser Phys.* **6**(2), 244 (1996).
21. J. C. Allred, R. N. Lyman, T. W. Kornack, and M. V. Romalis, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 130801 (2002).
22. A. Weis, G. Bison, and A. S. Pasgalev, *Phys. Rev. A* **74**, 033401 (2006).
23. D. Budker and D. F. Jackson Kimball, *Optical Magnetometry*, Cambridge Univ. (2013).
24. E. Pulz, K.-H. Jäckel, and H.-J. Linthe, *Meas. Sci. Technol.* **10**, 1025 (1999).
25. D. Hunter, S. Piccolomo, J. D. Pritchard et al., *Phys. Rev. Appl.* **10**, 014002 (2018).
26. G. Le Gal, G. Lieb, F. Beato et al., *Phys. Rev. Appl.* **12**, 064010 (2019).
27. V. Schultze, B. Schillig, R. IJsselsteijn et al., *Sensors* **17**, 561 (2017).
28. J. Tang, Y. Zhai, L. Cao et al., *Opt. Express* **29**, 15641 (2021).
29. W. Zheng, S. Su, G. Zhang et al., *Biomed. Opt. Express* **11**, 649 (2020).
30. P. Bevington, R. Gartman, and W. Chalupczak, *Phys. Rev. A* **101**, 013436 (2020).
31. Y. Shi, T. Scholtes, Z. D. Grujić et al., *Phys. Rev. A* **97**, 013419 (2018).
32. Y. Chang, Y.-H. Guo, and J. Qin, *Phys. Rev. A* **99**, 063411 (2019).
33. W. Harper, Y.-Y. Jau, and T. G. Walker, *Optically Pumped Atoms*, Wiley, New York (2010).
34. Е. Н. Попов, В. А. Бобрикова, С. П. Воскобойников и др., *Письма в ЖЭТФ* **108**, 543 (2018).
35. К. А. Баранцев, А. Н. Литвинов, А. С. Пазгалёв, А. К. Вершовский, *ЖЭТФ* **159**, 231 (2021).
36. С. Г. Раутиан, Г. И. Смирнов, А. М. Шалагин, *Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул*, Наука, Новосибирск (1979).
37. F. A. Franz, *Phys. Rev.* **148**, 82 (1966).
38. Т. Л. Андреева, *ЖЭТФ* **54**, 641 (1968).
39. S. Appelt, A. Ben-Amar Baranga, A. R. Young, and W. Harper, *Phys. Rev. A* **59**, 2078 (1999).
40. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, Москва (2004).
41. F. A. Franz, *Phys. Lett. A* **27**, 457 (1968).

# БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$ И ${}^1\tilde{E} \rightarrow {}^3A_2$ В $NV^-$ -ЦЕНТРЕ В АЛМАЗЕ

Ю. М. Белоусов\*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Terra Quantum AG, 9400, Rorschach, Switzerland

Поступила в редакцию 12 октября 2021 г.,  
после переработки 12 октября 2021 г.  
Принята к публикации 15 ноября 2021 г.

Предложен механизм безызлучательного перехода между возбужденными уровнями энергии  $NV^-$ -центра в алмазе. Безызлучательный переход между уровнями спинового триплета и синглета возможен в результате спин-орбитального взаимодействия с одновременным возбуждением колебательных (вибронных) состояний кластера и возбуждением фононов решетки, поэтому может быть получен во втором порядке теории возмущений. Для описания процесса получены оператор спин-вибронного взаимодействия и отличные от нуля матричные элементы, обеспечивающие безызлучательные переходы. Получено, что матричные элементы пропорциональны интегралам перекрытия одночастичных электронных волновых функций. Показано, что скорости переходов  ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$  и  ${}^1\tilde{E} \rightarrow {}^3A_2$  определяются одинаковыми выражениями. Таким образом, рассматриваемые безызлучательные переходы объясняются не многофононным процессом, а возбуждением вибронных состояний атомов  $NV^-$ -центра. Численные оценки дают хорошее согласие с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0044451022050054  
EDN: DSOKIL

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В кристаллах алмаза существует большое количество точечных (примесных) дефектов, классификация и электронные свойства которых подробно изложены в обзоре [1]. Наибольший интерес среди них вызвал отрицательно заряженный вакансионный центр окраски, образованный азотом,  $NV^-$  [2, 3], с которым связаны возможности его применения в различных областях физики квантовых технологий. Приложения в основном связаны с наблюдаемыми оптическими переходами между электронными уровнями энергии центра. В частности, реализация квантовых вентиля и ключей для квантовой криптографии [4–7]. ЭПР-исследования показали, что основное состояние центра  $NV^-$  есть триплет, в котором суммарный спин электронов  $S = 1$  [1]. При этом разрешенный дипольный оптический переход из возбужденных состояний оказывается пря-

мым, т.е. происходит без испускания фонона. Оптический переход происходит в видимом диапазоне (637 нм) в соответствии с расстоянием между уровнями  $\Delta E = 1.950$  эВ [2]. Именно это свойство и определяет возможности использования центров  $NV^-$  в качестве кубитов. Теоретическим расчетам спектра и состояний вакансионного центра посвящено большое количество работ, которые хорошо представлены в обзоре [8]. В настоящее время свойства центра подробно изучены экспериментально и объяснены теоретически в разных приближениях как аналитически (см., например, работы [9–18]), так и численно с использованием метода функционала плотности (см., например, [19–21]).

Структура  $NV^-$ -центра была установлена с помощью ЭПР-экспериментов [1]. Центр образуется в результате замещения одного из узлов решетки атомом азота, если в соседнем с азотом узле образуется также вакансия. Азот представляет собой донорный центр. Таким образом, свободные связи трех соседних с вакансией атомов углерода образуют с тремя электронами азота насыщенные связи относительно центра, находящегося в узле-вакансии. Поскольку

\* E-mail: belousov.yum@phystech.edu



для связи азота с соседними атомами углерода требуются также три электрона, образовавшийся вакансионный центр имеет отрицательный заряд. Для описания свойств такого центра была предложена шестизлектронная модель [1]. В дальнейшем эта модель была развита в работе [9]. Симметрия вакансионного центра, который можно рассматривать как кластер из четырех связанных атомов, определяется группой  $C_{3v}$ , в соответствии с представлениями которой должны строиться электронные состояния.

Первые расчеты состояний и энергетического спектра вакансионного центра  $NV^-$  проводились путем построения слэтеровского детерминанта из молекулярных орбиталей неспаренных электронов трех атомов углерода и азота [1, 9, 16, 17]. В работе [9] рассматривались также состояния с двумя, четырьмя и шестью электронами. Расчеты вполне позволили объяснить качественно и количественно наблюдающуюся экспериментальную картину. Однако построение состояний, инвариантных относительно соответствующих преобразований группы симметрии  $C_{3v}$ , из общего слэтеровского детерминанта было весьма громоздким и не вполне эффективным при рассмотрении более тонких эффектов, в частности, влияния эффекта Яна – Теллера и деформаций на энергетический спектр возбужденных состояний. На наш взгляд, более эффективным и физически более адекватным оказался подход построения состояний центра из одноэлектронных базисных состояний группы  $C_{3v}$ , которые представляются суперпозициями молекулярных орбиталей всех шести электронов, образующих вакансионный центр [13, 14, 18, 19].

Согласно расчетам, основному уровню энергии соответствуют состояния с суммарным спином  $S = 1$  (спиновый триплет), которые преобразуются в соответствии с нечетным одномерным представлением группы  $A_2$ . Таким образом, этот терм обозначается как  ${}^3A_2$ . Существует также возбужденный уровень энергии со спином  $S = 1$ , состояния которого преобразуются согласно двумерному представлению группы  $E$ , и соответствующий терм обозначается как  ${}^3E$ . Между этими двумя уровнями энергии наблюдается оптический дипольный переход, соответствующий расстоянию  $\Delta E = 1.950$  эВ, как показано на рис. 1. Остальные возбужденные уровни энергии представляют собой спиновые синглеты. Первый возбужденный уровень соответствует двумерному представлению (терм  ${}^1E$ ) и представляет собой спиновый синглет, а следующий – четному одномерному представлению со спином  $S = 0$  и имеет обозначение  ${}^1A_1$ . Между этими уровнями энер-

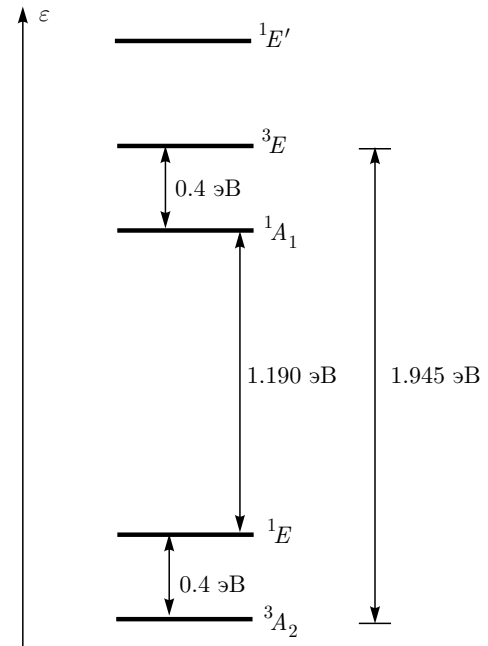


Рис. 1. Схема уровней энергии  $NV^-$ -центра

гии также наблюдается дипольный оптический переход, соответствующий расстоянию  $\Delta E = 1.190$  эВ. Очевидно, что оптическими дипольными переходами невозможно возбудить из основного состояния ни более низкий терм  ${}^1E$ , ни более высокий терм  ${}^1A_1$ . Однако с возбужденного спинового триплетного  ${}^3E$  возможны безызлучательные переходы на более низкий уровень  ${}^1A_1$ , а также переход  ${}^1E \rightarrow {}^3A_2$  с возбужденного синглетного уровня на основной уровень. Вероятность такого перехода рассчитывалась численно методом функционала плотности [22–24]. Однако в данных расчетах совершенно не выяснялся механизм передачи энергии, значительно превосходящей энергию возбуждения фона. Согласно численным расчетам [22], оба перехода должны сопровождаться выделением энергии примерно 0.4 эВ. Таким образом, физика данных безызлучательных переходов остается не выясненной полностью.

В данной работе мы проведем аналитический расчет скорости безызлучательного перехода между возбужденными уровнями с изменением суммарного спина терма. В энергетическом спектре вакансионного центра  $NV^-$  должны наблюдаться два таких перехода:  ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$  между возбужденными уровнями, а после излучательного перехода  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1E$  переход  ${}^1E \rightarrow {}^3A_2$  на основной уровень.

## 2. ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ НУЛЕВОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Безызлучательные переходы с изменением суммарного спина системы возможны только при наличии магнитных взаимодействий. В рассматриваемой системе имеются два типа магнитных взаимодействий: спин-орбитальное и магнитное диполь-дипольное. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие не изменяет суммарного спина электронов, но дает поправки к уровням энергии нулевого приближения, в котором учитываются только кулоновские взаимодействия. Поэтому нас будет интересовать только спин-орбитальное взаимодействие. Для построения эффективного гамильтониана взаимодействия и вычисления вероятности переходов с изменением суммарного спина необходимо прежде всего определить состояния, соответствующие уровням энергии вакансионного центра. Как отмечалось во Введении, за основу возьмем подход, в котором в качестве одноэлектронных состояний выбираются суперпозиции молекулярных орбиталей, соответствующих собственным векторам группы  $C_{3v}$ .

Как хорошо известно [25, 26], состояния четырех валентных электронов углерода  $(2s2p)^4$  определяются гибридованными  $s-p$ -суперпозициями (молекулярными орбиталями), которые образуют направленные химические связи. Суперпозицию можно записать в виде

$$|\psi_C\rangle = \alpha|2s\rangle + \beta|2p\rangle. \quad (1)$$

В  $NV^-$ -центре у каждого из трех атомов углерода три электрона образуют насыщенные химические связи с атомами в соседних узлах решетки, а один электрон остается с ненасыщенной связью. Свободная, ненасыщенная связь не вполне независима, поскольку в суперпозиции (1) в каждой орбитали проекция орбитального момента  $m$  определена на направление связи (локальной оси квантования), а состояния (волновые функции) определены относительно центра, находящегося на ядре углерода. При построении одноэлектронного состояния вакансионного центра проекция момента в  $p$ -состояниях определяется на единую, общую для всех электронов центра, ось квантования. Таким образом, необходимо выразить состояния с определенной проекцией момента на направление связи через состояния с определенной проекцией на общую ось квантования. В качестве оси квантования следует выбрать ось  $z$  параллельной оси симметрии  $C_3$ . Такой подход был успешно применен при расчете кинетики ради-

ационного дефекта, образованного отрицательными мюонами и пионами в алмазе [27–31].

У атома азота три электрона связаны по углеродным связям с соседями решетки. Ненасыщенная связь направлена по оси симметрии  $C_3$ , поэтому гибридованные одноэлектронные состояния электронов азота, образующих вакансионный центр  $NV^-$ , должны иметь вид

$$|\psi_N\rangle = \alpha_N|2s\rangle + \beta_N|2p, 0\rangle. \quad (2)$$

Здесь в состояниях азота  $|2p, 0\rangle$  представлена только проекция  $m = 0$  на общую для всей системы ось  $z \parallel C_3$ .

Центр дефекта — вакансия в узле решетки. Следовательно, нужно построить состояния «подвешенных» электронов, которые взаимодействуют между собой без кулоновского центра. Состояния нулевого приближения — слэтеровские детерминанты, состоящие из шести одноэлектронных состояний  $NV^-$ -центра. Поскольку роль невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$  играет кристаллическое поле, слэтеровские детерминанты должны быть собственными векторами (волновыми функциями) группы симметрии  $C_{3v}$ . Одночастичные состояния строятся из линейных комбинаций состояний трех ионов углерода,  $|\psi_C\rangle$ , и одного состояния иона азота,  $|\psi_N\rangle$ . Будем придерживаться обозначений, принятых в работах [13, 18, 19]. Для дальнейших вычислений необходимо записать эти результаты в удобном для нас виде.

Группа  $C_{3v}$  состоит из шести элементов, которые распределены по трем классам. В соответствии с этим у группы есть два одномерных,  $A_1$  (четное) и  $A_2$  (нечетное), представлений и одно двумерное представление  $E$ . Таким образом, неприводимые представления группы определяются четырьмя базисными векторами.

На оси  $z$ , параллельной оси симметрии  $C_3$ , расположено ядро азота N, как показано на рис. 2. Три атома углерода обозначим как  $a$ ,  $b$  и  $c$ . Ось  $x$  лежит в плоскости, проходящей через ось  $C_3$  и направление связи атома углерода  $c$ , состояние которого обозначим как  $|\psi_c\rangle$ . Два других одночастичных состояния обозначим соответственно как  $|\psi_a\rangle$  и  $|\psi_b\rangle$ . Заметим, что состояние иона азота  $|\psi_N\rangle$  инвариантно относительно всех преобразований группы, т. е. представляет собой инвариант. При преобразованиях поворота происходит замена  $a \rightarrow b \rightarrow c$ , а при отражениях — замены  $b \leftrightarrow c$ ,  $a \leftrightarrow b$ ,  $c \leftrightarrow a$ . Следовательно, линейная комбинация инвариантна:

$$|v\rangle = |\psi_a\rangle + |\psi_b\rangle + |\psi_c\rangle = \text{inv.}$$

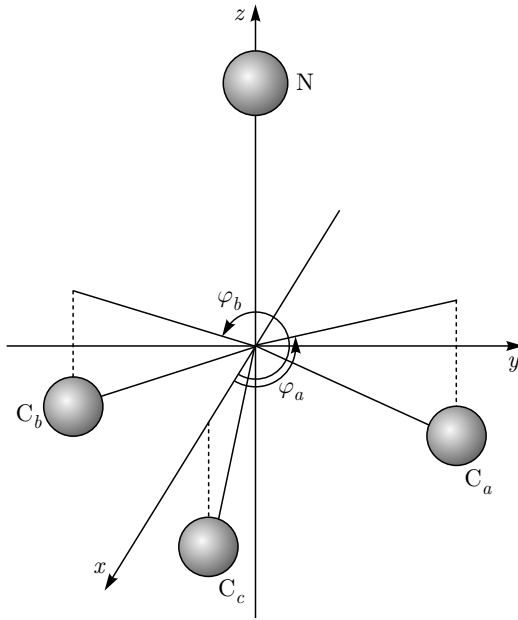


Рис. 2. Схема расположения атомов в кластере  $NV^-$ . Атом азота находится на оси  $C_3 \parallel z$

Таким образом, это и есть базисный вектор четного одномерного представления:  $|A_1\rangle = |v\rangle$ .

Базисный вектор нечетного одномерного представления  $A_2$  определяется линейной комбинацией в виде

$$|A_2\rangle = |\psi_N\rangle - \lambda|v\rangle \equiv |\psi_N\rangle - \lambda(|\psi_a\rangle + |\psi_b\rangle + |\psi_c\rangle). \quad (3)$$

Одночастичные углеродные состояния неортогональны, но в силу симметрии удовлетворяют соотношениям

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \langle\psi_b|\psi_c\rangle = \langle\psi_c|\psi_a\rangle = \mathcal{S}, \quad (4)$$

где  $\mathcal{S}$  — интеграл перекрытия. Таким образом, нормированный вектор  $|v\rangle$  имеет вид

$$|v\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 + 6\mathcal{S}}} (|\psi_a\rangle + |\psi_b\rangle + |\psi_c\rangle). \quad (5)$$

Соответственно,

$$\langle A_2|A_2\rangle = 1 - 2\lambda\langle\psi_N|v\rangle + \lambda^2 = 1.$$

Получаем два решения:  $\lambda = 0$  и  $\lambda = 2\langle\psi_N|v\rangle$ . Если в качестве базисного вектора представления  $A_2$  выбрать решение  $\lambda = 0$ , то базисный вектор нечетного представления совпадает с вектором  $|\psi_N\rangle$ . Однако при этом  $\langle A_1|\psi_N\rangle \neq 0$ , следовательно, выбор  $\lambda = 0$  не определяет решения задачи и необходимо выбрать второе значение  $\lambda = 2\langle\psi_N|v\rangle$ . Поскольку интеграл перекрытия  $\langle\psi_N|v\rangle \ll 1$ , при построении

собственных векторов можно приближенно считать, что  $\langle A_1|A_2\rangle = 0$ .

Таким образом, для одномерных представлений имеем следующие собственные векторы одночастичных состояний:

$$|A_1\rangle = |v\rangle, \quad |A_2\rangle \equiv |u\rangle = |\psi_N\rangle - \tilde{\lambda}|v\rangle, \quad (6)$$

при этом  $\tilde{\lambda} = \langle\psi_N|v\rangle$ .

Собственные векторы двумерного представления равны

$$|e_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{6(1-\mathcal{S})}} (2|\psi_c\rangle - |\psi_a\rangle - |\psi_b\rangle),$$

$$|e_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-\mathcal{S})}} (|\psi_a\rangle - |\psi_b\rangle). \quad (7)$$

Эти состояния выбираются в качестве одночастичных координатных частей состояний. Следовательно, имеем, что  $A_1$  и  $A_2$  — двукратно вырожденные (по спину) одночастичные уровни энергии,  $E_x$  и  $E_y$  — четырехкратно вырожденные. Итого, на имеющиеся одночастичные уровни энергии можем разместить восемь электронов. Шестичастичное (электронное) состояние совпадает с двухчастичным. Для шести электронов  $NV^-$ -центра можем записать конфигурацию как  $u^2v^2e_x^2e_y^2$ . При этом на одночастичных «орбиталях»  $u$  и  $v$  суммарный спин электронов  $S = 0$ , а на одночастичных двукратно вырожденных орбиталях  $e$  суммарный спин  $S = 0, 1$ . Здесь, по стечению обстоятельств, оказывается справедливым первое правило Хунда, и минимальную энергию имеют состояния с  $S = 1$ .

### 3. ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Во всех интересующих нас взаимодействиях будут участвовать одночастичные состояния незаполненных уровней энергии, т. е. в основной конфигурации  $u^2v^2e_xe_y$  только  $e_x$  и  $e_y$ . В возбужденных конфигурациях  $u^2ve_x^2e_y$  и  $u^2ve_xe_y^2$  будем рассматривать состояния соответственно  $ve_y$  и  $ve_x$ . Во всех случаях возможны четыре спиновых состояния: триплет с  $S = 1$  и синглет с  $S = 0$ .

Из основного уровня энергии  ${}^3A_2$  оптическим способом возбуждается уровень энергии  ${}^3E$ , который представляет собой также спиновый триплет. Экспериментальные результаты [8] показывают, что на возбужденном уровне остается только долгоживущее состояние с проекцией суммарного спина  $M_S = 0$ , а состояния с  $M_S = \pm 1$  безызлучательно переходят в состояния с  $M_S = 0$ . В возбужденной конфигурации  $u^2v^2e_xe_y$  возможны четыре состояния, уровень энергии  ${}^1E$  лежит ниже уровня  ${}^3E$ .

Поскольку наблюдается также оптический переход с уровня  ${}^1E$  на более низкий возбужденный уровень  ${}^1A_1$ , должен существовать безызлучательный переход между возбужденными состояниями с изменением суммарного спина  $S = 1 \rightarrow 0$ . Такой переход возможен в результате спин-орбитального взаимодействия. Итак, нас интересуют запрещенные в электрическом дипольном приближении переходы  ${}^3E \rightarrow {}^1E_1$  и  ${}^1A_1 \rightarrow {}^3A_2$  с изменением энергии примерно 0.4 эВ.

Для определения вероятности интересующих нас переходов необходимо выписать соответствующие состояния в удобном для дальнейших вычислений виде. Вначале определим состояния для основной конфигурации  $u^2v^2e_xe_y$ . Заметим, что при определении состояний задача о построении шести электронных состояний из гибридованных одночастичных  $sp$ -состояний эквивалентна построению состояний для двух вакансий. Поскольку во всех рассматриваемых конфигурациях одночастичное состояние  $u^2$  полностью заполнено, суммарный спин электронов на этой «электронной оболочке» равен нулю. Поэтому при дальнейших вычислениях все матричные элементы должны быть диагональны по этим квантовым числам.

В конфигурации, соответствующей основному  ${}^3A_2$  и двум первым возбужденным  ${}^1E$  и  ${}^1A_1$  уровням энергии, электронная оболочка  $v$  также полностью заполнена, поэтому ей соответствует суммарный спин  $S_{12} = 0$ . Суммарный спин  $S = 1$  возможен только для антисимметричных координатных частей состояния. Векторы состояний основного уровня энергии  ${}^3A_2$  с учетом спинов электронов имеют вид

$$|{}^3A_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|v\rangle|v\rangle(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle) \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_x\rangle|e_y\rangle - |e_y\rangle|e_x\rangle)|1, M_S\rangle, \quad (8)$$

где  $M_S = 0, \pm 1$ .

Для  $S = 0$  координатные части симметричны, и всего могут быть три линейно независимых состояния:

$$|e, e, +\rangle_1 = |\Phi_{A_1}(ee)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_x\rangle|e_x\rangle + |e_y\rangle|e_y\rangle), \\ |e, e, +\rangle_2 = |\Phi_{E,x}(ee)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_x\rangle|e_x\rangle - |e_y\rangle|e_y\rangle), \quad (9) \\ |e, e, +\rangle_3 = |\Phi_{E,y}(ee)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_x\rangle|e_y\rangle + |e_y\rangle|e_x\rangle).$$

В соответствии с этим для возбужденных уровней энергии основной конфигурации  $u^2v^2e_xe_y$  получаем следующие три состояния:

$$\begin{pmatrix} |{}^1A_1\rangle \\ |{}^1E, x\rangle \\ |{}^1E, y\rangle \end{pmatrix} = |v\rangle|v\rangle \frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}} \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |e_x\rangle|e_x\rangle + |e_y\rangle|e_y\rangle \\ |e_x\rangle|e_x\rangle - |e_y\rangle|e_y\rangle \\ |e_x\rangle|e_y\rangle + |e_y\rangle|e_x\rangle \end{pmatrix} \frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (10)$$

Здесь специально сохранены позиции координатных и спиновых частей для электронов в соответствующих состояниях (электронных оболочках).

Рассмотрим возбужденные состояния с конфигурацией  $ve^3 \rightarrow (ve)e^2$ . Запишем их, объединяя попарно, чтобы было удобно проследить за значением полного спина  $S$  в данной конфигурации. Имеем четыре возможных координатных состояния:

$$|v, e_x\rangle|e_x, e_y\rangle, \quad |v, e_y\rangle|e_x, e_y\rangle, \\ |v, e_x\rangle|e_y, e_y\rangle, \quad |v, e_y\rangle|e_x, e_x\rangle. \quad (11)$$

Легко видеть, что в состояниях как  $|e_x, e_x\rangle$ , так и  $|e_y, e_y\rangle$  суммарный спин  $S = 0$ , поэтому полный спин  $S = 1$  формируется в состояниях  $|v, e_{x,y}\rangle$ . В двух первых состояниях два электрона с одинаковой орбитальной частью обязательно имеют суммарный спин равный нулю, следовательно полный спин  $S = 1$  образуется из состояния  $|v\rangle$  и одного из состояний  $|e\rangle$ . Итак, получаем следующие шесть возможных состояний  ${}^3E$ :

$$|E_x, S = 1\rangle = \frac{|v\rangle|e_x\rangle - |e_x\rangle|v\rangle}{\sqrt{2}} \times \\ \times \begin{pmatrix} |+\rangle|+\rangle \\ (|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}} \\ |-\rangle|-\rangle \end{pmatrix} \times \\ \times |e_y\rangle|e_y\rangle \frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}} \quad (12)$$

и, соответственно,

$$|E_y, S = 1\rangle = \frac{|v\rangle|e_y\rangle - |e_y\rangle|v\rangle}{\sqrt{2}} \times \\ \times \begin{pmatrix} |+\rangle|+\rangle \\ (|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}} \\ |-\rangle|-\rangle \end{pmatrix} \times \\ \times |e_x\rangle|e_x\rangle \frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (13)$$

Для синглетов  ${}^1E'$  два состояния имеют вид

$$\begin{aligned}
 |E'_x, S = 0\rangle &= \frac{1}{2}(|v\rangle|e_x\rangle + |e_x\rangle|v\rangle) \times \\
 &\times (|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle)|e_y\rangle|e_y\rangle \frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |E'_y, S = 0\rangle &= \frac{1}{2}(|v\rangle|e_y\rangle + |e_y\rangle|v\rangle) \times \\
 &\times (|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle)|e_x\rangle|e_x\rangle \frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

#### 4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВАКАНСИОННОГО ЦЕНТРА С РЕШЕТКОЙ

Безызлучательный переход из спинового триплета в синглет и обратно определяется спин-орбитальным взаимодействием, но возможен благодаря передаче энергии решетке с испусканием фононов. В данном процессе следует рассматривать вакансионный центр как кластер, состоящий из четырех атомов. Таким образом, возбуждение фононов в решетке следует рассматривать как двухэтапный процесс, состоящий сперва в возбуждении колебательных состояний кластера, а затем в возбуждении колебаний решетки заряженным центром. При этом следует иметь в виду, что как колебания ядер атомов кластера, так и соответствующие деформации решетки определяются относительно центра вакансии. В результате деформации решетки изменяются волновые функции электронов вакансионного центра, что и определяет необходимое спин-вибронное взаимодействие. Для определения взаимодействия с колебаниями кластера нужно раскладывать гибридные состояния (1) по смещениям ядер относительно центра вакансии. Таким образом, поскольку весь дальнейший расчет пойдет относительно начала координат, помещенного в центр вакансии, волновые функции, входящие в гибридные состояния и определяющие линейные комбинации (6), следует записать также относительно общего начала координат. В данном разделе рассмотрим зависимость волновых функций электронов  $NV^-$ -центра от смещений, образующих его ядер относительно равновесного положения.

Будем считать, что волновые функции гибридного состояния определяются соответствующими волновыми функциями водородоподобного атома с эффективным зарядом  $\tilde{Z}$ . Такой выбор функций дает хорошее приближение, что подтверждается численными квантово-химическими расчетами [28]. Пусть  $\mathbf{R}_i$  — координата ядра  $i$ -го иона относительно центра вакансии, тогда координата электрона

в поле этого иона равна  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r} - \mathbf{R}_i$ , где  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор электрона относительно центра вакансии. Таким образом, волновые функции гибридных состояний (1) и (3) следует представлять в виде

$$\psi_i(\mathbf{r}_i) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i),$$

здесь индекс « $i$ » обозначает один из ионов ( $i = a, b, c$  или  $N$ ), образующих  $NV^-$ -центр.

Обозначим координату равновесного положения  $i$ -го ядра как  $\mathbf{R}_{0i}$ <sup>1</sup>. Тогда в аргументах волновых функций следует подставить  $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_{0i} + \mathbf{u}_i$ , где  $\mathbf{u}_i$  — вектор смещения соответствующего ядра. Теперь необходимо разложить выражения для волновых функций по смещениям ядер.

Представим волновые функции в виде

$$\psi(\mathbf{r}_i) = \psi_i^{(0)}(\mathbf{r}_i) + \delta\psi_i(\mathbf{r}_i), \tag{15}$$

где  $\psi_i^{(0)}(\mathbf{r}_i) = \psi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i})$ , а поправка  $\delta\psi_i(\mathbf{r}_i)$  к невозмущенной волновой функции зависит от смещения ядер относительно равновесного положения. Оставляя только линейные по смещениям ядер члены разложения волновых функций, получаем

$$\delta\psi_i(\mathbf{r}_i) = -\left(\mathbf{u}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right) \psi_i^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i}). \tag{16}$$

Мы здесь учли, что

$$|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i} - \mathbf{u}_i| = |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i}| - \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i}|}.$$

В силу центрального характера искажения решетки заряженным  $NV^-$ -центром основной вклад должны давать также радиальные колебания. Таким образом, в поправках к состояниям (16) будем считать, что основной вклад вносят радиальные смещения ядер  $u_r$ . Учитывая только радиальные смещения ядер, производную волновой функции следует брать только по радиальной переменной. Поскольку гибридные функции (1) и (3) представляют собой волновые функции электрона в центральном поле, производная берется только от радиальной части полной волновой функции. Таким образом,

$$\begin{aligned}
 \delta\psi_i(\mathbf{r}_i) &= -(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_i) \times \\
 &\times \left( \alpha \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{dR_{20}(r_i)}{dr_i} + \beta \frac{dR_{21}(r_i)}{dr_i} Y_{10}(\mathbf{n}_i) \right), \tag{17}
 \end{aligned}$$

<sup>1</sup> Заметим, что для всех ионов углерода  $R_{0a} = R_{0b} = R_{0c} = R_0$ .

где  $R_{20}$  и  $R_{21}$  — радиальные функции, а  $Y_{10}(\mathbf{n}_i)$  — сферическая функция единичного момента с проекцией на ось  $\mathbf{n}_i$ , равной нулю в соответствии с выражением (2), а параметры  $\alpha$  и  $\beta$  определены в (1).

Заметим, что скалярное произведение  $\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{u}_i$  при учете только радиальных смещений будет зависеть только от угла  $\theta_i$  в системе координат, связанной с кластером:

$$\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{u}_i = u_r \cos \theta_i = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}(\mathbf{n}_i) u_r. \quad (18)$$

С учетом соотношения (18) следует, что поправка к волновой функции может быть представлена как

$$\delta\psi_i(\mathbf{r}_i) = -u_r \left( \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \frac{dR_{20}(r_i)}{dr_i} Y_{10}(\mathbf{n}_i) + \beta \frac{dR_{21}(r_i)}{dr_i} \left( \frac{2\sqrt{2}\pi}{3} Y_{20}(\mathbf{n}_i) - \frac{1}{3} \right) \right). \quad (19)$$

Как видим, поправка к  $s$ -функции приобретает орбитальный момент  $l = 1$ , а поправка к  $p$ -функции представляется суперпозицией состояний с орбитальным моментом  $l = 2$  и  $l = 0$ .

С учетом вида поправки (17) к гибриризованному состоянию получаем поправки к правильным однокластерным состояниям (5) и (7) в виде

$$|v\rangle = |v^{(0)}\rangle + \delta|v\rangle, \quad |e_{x,y}\rangle = |e_{x,y}^{(0)}\rangle + \delta|e_{x,y}\rangle. \quad (20)$$

Поправки  $\delta|v\rangle$  и  $\delta|e_{x,y}\rangle$  определяют взаимодействие вакансионного центра с колебаниями ядер кластера относительно центра вакансии.

### 5. СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Для построения оператора, описывающего взаимодействие в  $NV^-$ -центре с колебаниями ядер, которые вызывают безызлучательные переходы в энергетическом спектре, необходимо учесть зависимость от них спин-орбитального взаимодействия. Запишем общее выражение для одночастичного оператора спин-орбитального взаимодействия (см., например, [32]):

$$\hat{V}_{so} = \frac{\hbar}{2(mc)^2} \sum_i [\nabla V(\mathbf{r}_i) \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (21)$$

где  $V(\mathbf{r}_i)$  — энергия взаимодействия электрона с ближайшими соседями.

Состояния электронов  $NV^-$ -центра (1) и, соответственно, состояния (8)–(10) и (12)–(14) определяются взаимодействием с положительно заряженными ионами, обладающими эффективными зарядами  $\tilde{Z}_i$ , и соответствуют состояниям электрона в центральном поле. Поэтому в операторе (21) мы также должны понимать, что

$$V(\mathbf{r}_i) = -\frac{\tilde{Z}_i e^2}{r_i} = -\frac{\tilde{Z}_i e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}. \quad (22)$$

Таким образом,

$$\nabla V(\mathbf{r}_i) = \frac{\tilde{Z}_i e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^3} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (23)$$

После простой выкладки получаем

$$[\nabla V(\mathbf{r}_i) \times \hat{\mathbf{p}}] = \frac{\tilde{Z}_i e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^3} \hbar \hat{\mathbf{l}}_i, \quad (24)$$

где оператор орбитального момента электрона  $NV^-$ -центра определен именно относительно узла решетки, для которого определены и состояния суперпозиций.

Теперь мы можем записать оператор спин-орбитального взаимодействия в нужной нам форме:

$$\hat{V}_{so} = \frac{\hbar^2}{2(mc)^2} \sum_i \frac{\tilde{Z}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^3} \hat{\mathbf{l}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}} = 2\mu_0^2 \hat{\mathbf{\Lambda}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (25)$$

где  $\mu_0$  — магнетон Бора, а также введено очевидное обозначение

$$\hat{\mathbf{\Lambda}} = \sum_i \frac{\tilde{Z}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^3} \hat{\mathbf{l}}_i.$$

Оператор взаимодействия (25) записан для одного спина. Поскольку координатные части для каждого электрона определяются суперпозициями (6) и (7), они имеют одинаковый вид для всех электронов, образующих вакансионный центр. Заметим, что переход триплет–синглет связан с изменением суммарного спина вакансии, который определяется суммой

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{\alpha} \hat{\mathbf{s}}_{\alpha},$$

где  $\hat{\mathbf{s}}_{\alpha}$  — операторы спинов электронов  $NV^-$ -центра. Всего мы должны учесть четыре электрона, участвующих в одноэлектронных возбуждениях и, соответственно, в излучательных и безызлучательных переходах.

Во всех расчетах энергетического спектра  $NV^-$ -центров в алмазе считалось, что все спектральные переходы определяются состояниями

(5) и (7), в которых ион азота эффективно «не принимает участия», поэтому в операторе (25) суммирование ведется только по узлам решетки, в которых расположены ионы углерода. Таким образом, это взаимодействие имеет аксиальную симметрию. Подчеркнем, что оператор взаимодействия (25) записан в системе координат, центр которой расположен в центре вакансии, а ось  $z$  направлена по оси третьего порядка, проходящей через узел, в котором расположен ион азота.

Поскольку оператор (25) определен в системе, связанной с решеткой, а в каждом состоянии (1), входящем в суперпозиции, определена проекция орбитального момента на «свою» ось, направленную от узла решетки к центру вакансии, необходимо определить действие оператора  $\hat{\Lambda}$  на одночастичные состояния. Оператор спин-орбитального взаимодействия  $NV^-$ -центра определяется скалярными произведениями вида

$$\hat{\mathbf{l}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_\alpha = \hat{l}_{i,z} \hat{s}_{\alpha,z} + \frac{1}{2} (\hat{l}_{i,+} \hat{s}_{\alpha,-} + \hat{l}_{i,-} \hat{s}_{\alpha,+}). \quad (26)$$

Первое слагаемое оператора не представляет для нас интереса, поскольку не изменяет спинового состояния системы, поэтому будем рассматривать только оставшиеся члены. Обратим внимание, что оператор  $\hat{\mathbf{l}}_i$  действует только на состояние суперпозиции, которое определено относительно  $i$ -го узла. Таким образом, для решения задачи следует записать операторы  $\hat{l}'_{i,\pm}$  в системах координат, связанных с соответствующими узлами решетки:

$$\hat{l}'_{i,\pm} = \hat{R}_{\mathbf{n}_i} \hat{l}_{i,\pm} \hat{R}_{\mathbf{n}_i}^{-1} \propto \exp(i\varphi_i), \quad (27)$$

где  $\hat{R}_{\mathbf{n}_i}$  — оператор поворота, совмещающий ось  $z$   $NV^-$ -центра с локальной осью квантования  $i$ -го иона и зависящий от соответствующих углов  $\theta_i$ ,  $\varphi_i$ , задающих ее ориентацию. Согласно обозначениям, показанным на рис. 2, для всех  $\theta_i = \pi - \theta$  имеем  $\varphi_c = 0$  и, соответственно,  $\varphi_a = 2\pi/3$ ,  $\varphi_b = 4\pi/3$ .

Для определения вероятностей переходов нам понадобится вычислять матричные элементы операторов взаимодействия (25) между возбужденными триплетными состояниями (12), (13) и синглетом (10), в которых координатные части одночастичных волновых функций должны быть взяты в соответствии с выражением (19), учитывающем возбуждение колебаний решетки. Поэтому необходимо определить действие оператора  $\hat{l}'_{i,\pm}$  на соответствующее («свое») одночастичное состояние. Поскольку в одночастичных состояниях (19) угловые и радиальные переменные разделены, оператор момента действует только на угловую часть, представляющую со-

бой собственное состояние оператора  $\mathbf{n}_i \cdot \hat{\mathbf{l}}$  с проекцией на ось  $\mathbf{n}_i$ , равной нулю, которое удобно обозначить как  $|1, 0\rangle_i$ . В результате действия оператора (27) на состояние  $|1, 0\rangle_i$  мы получим суперпозицию всех трех состояний с различными, но определенными проекциями момента на ось  $\mathbf{n}_i$ . Следовательно, матричные элементы между одночастичными состояниями, относящимися к одному и тому же узлу (иону), будут равными нулю. Таким образом, приходим к выводу, что оператор спин-орбитального взаимодействия (25) имеет отличные от нуля матричные элементы между одночастичными состояниями, относящимися к разным узлам кластера, а потому матричные элементы пропорциональны интегралам перекрытия.

## 6. СПИН-ВИБРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Спин-вибронное взаимодействие, во-первых, обеспечивает возможность перехода триплет-синглет с изменением полного спина  $NV^-$ -центра, а, во-вторых, обеспечивает безызлучательный переход между уровнями энергии возбужденных состояний.

Рассмотрим сперва переход с изменением суммарного спина системы между возбужденным термом  ${}^3E$  и ближайшим к нему синглетом  ${}^1A_1$ , которому соответствуют состояния (12), (13) и верхняя строка состояний (10). Одночастичные операторы  $\hat{\mathbf{l}}_i$  и  $\hat{\mathbf{s}}_\alpha$ , входящие в определение оператора спин-орбитального взаимодействия (25), действуют на соответствующие одночастичные состояния, входящие в определение состояний различных уровней энергии. Из выражений для рассматриваемых состояний видно, что интересующий нас переход возможен, если изменяется спиновое состояние одного из электронов, находящихся в одном из двух состояний первой пары состояний прямого произведения, поскольку вторая пара состояний может обладать только суммарным спином  $S_{34} = 0$  как для терма  ${}^3E$ , так и для терма  ${}^1A_1$ . Таким образом, отличные от нуля матричные элементы для переходов с изменением полного спина системы возможны только в результате действия операторов  $\hat{\mathbf{l}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_1$  и  $\hat{\mathbf{l}}_2 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$ , входящих в определение полного оператора спин-орбитального взаимодействия (25).

Итак, исходя из приведенных аргументов, а также выражений для состояний (12), (13) и (10), приходим к выводу, что спин-вибронное взаимодействие будет определяться эффективным оператором, который получается в результате вычисления матричных элементов вида  $\langle v | \hat{V}_{so} | e_{x,y} \rangle$ , где состояния  $|v\rangle$

и  $|e_{x,y}\rangle$  определяются выражениями (20). При этом из полного оператора спин-орбитального взаимодействия следует выделить часть, которая даст отличный от нуля результат. Иными словами, в дальнейших выкладках оператор (25) заменяется только его двумя слагаемыми<sup>2)</sup>:

$$\begin{aligned} \widehat{V}_{so} &\rightarrow \widehat{V}_{so}^{eff} = \\ &= 2\mu_0^2 \left( \widehat{\Lambda}_z \widehat{S}_z + \frac{\widetilde{Z}}{2r_1^3} (\hat{l}_{1,+}\hat{s}_{1,-} + \hat{l}_{1,-}\hat{s}_{1,+}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\widetilde{Z}}{2r_2^3} (\hat{l}_{2,+}\hat{s}_{2,-} + \hat{l}_{2,-}\hat{s}_{2,+}) \right). \end{aligned} \quad (28)$$

Спиновая часть оператора (28) изменяет соответствующие спиновые состояния следующим образом:

$$\hat{s}_{1,-}|+ \rangle|+ \rangle = |- \rangle|+ \rangle, \quad \hat{s}_{2,-}|+ \rangle|+ \rangle = |+ \rangle|- \rangle,$$

и совершенно аналогично для повышающего оператора, действующего на состояние с отрицательной проекцией  $|- \rangle|- \rangle$ . Таким образом, можем записать

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | \hat{s}_{1,\pm} | 1, \mp 1 \rangle &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \langle 0, 0 | \hat{s}_{2,\pm} | 1, \mp 1 \rangle &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (29)$$

Рассмотрим теперь действие одночастичного оператора момента на одночастичные состояния  $|e_{x,y}\rangle$ . Как видно из выражений для состояний (20) и (2), оператор момента действует как на невозмущенное состояние, так и на поправку, вызванную взаимодействием с радиальными смещениями ядер кластера. Таким образом, можно записать

$$\begin{aligned} \hat{l}_+ |e_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1-\mathcal{S})}} \hat{l}_+ (|\psi_a\rangle - |\psi_b\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(1-\mathcal{S})}} \left( \beta(\hat{l}_+ |2, 1, 0\rangle_a - \hat{l}_+ |2, 1, 0\rangle_b) + \right. \\ &\quad \left. + \hat{l}_+ \delta|\psi_a\rangle - \hat{l}_+ \delta|\psi_b\rangle \right), \end{aligned} \quad (30)$$

где учтено, что после действия оператора момента на гибризованное состояние (2) останется только второе слагаемое.

Исходя из выражения для поправок (19), получаем, что матричные элементы могут быть отличными от нуля в первом порядке, только если учитывается поправка к  $s$ -состоянию (первое слагаемое в формуле (19)). При этом отличный от нуля результат

<sup>2)</sup> Здесь первое слагаемое  $\widehat{\Lambda}_z \widehat{S}_z$  не изменяет состояние, но оставлено, чтобы показать, что во взаимодействии участвуют все электроны.

получится вследствие действия как на  $p$ -состояние невозмущенной суперпозиции, так и на поправку к  $s$ -состоянию. Во втором порядке отличный от нуля результат получается для диагональных по поправкам матричных элементов.

Получим выражение для матричного элемента первого порядка по смещению ядер кластера. Для определенности рассмотрим действие повышающего оператора момента на состояние  $|e_y\rangle$ , при этом будем полагать  $\beta_a = \beta_b = \beta_c = \beta$  и  $\alpha_a = \alpha_b = \alpha_c = \alpha$ . Легко видеть также, что учет двух слагаемых в операторе (28), действующих на два электрона, дает сумму двух одинаковых слагаемых в матричном элементе. Таким образом, отличный от нуля матричный элемент можно представить в виде<sup>3)</sup>

$$\begin{aligned} \langle {}^1A_1 | \widehat{V}_{so} | E_y, M_S = -1 \rangle &= \frac{\mu_0^2 \widetilde{Z}}{3\sqrt{2(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})}} \times \\ &\times \left[ \sum_i (\alpha \langle \psi_{200,i} | + \beta \langle \psi_{210,i} | \right] \frac{\hat{l}_+}{r^3} (\delta|\psi_a\rangle - \delta|\psi_b\rangle) + \\ &+ \beta \left[ \sum_i \delta \langle \psi_i | \right] \frac{\hat{l}_+}{r^3} [|\psi_{210,a}\rangle - |\psi_{210,b}\rangle]. \end{aligned} \quad (31)$$

В формуле (31) стоят одночастичные состояния, на которые действует одночастичный оператор. Здесь в поправках к состояниям  $\delta \langle \psi_i |$  учитываются линейные по смещениям ядер члены. Суммирование ведется по всем орбиталиям:  $i = a, b, c$ . Матричный элемент  $\langle {}^1A_1 | \widehat{V}_{so} | E_y, M_S = +1 \rangle$  оказывается равным матричному элементу (31).

В Приложении показано, что матричный элемент (31) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle {}^1A_1 | \widehat{V}_{so} | E_y, M_S = -1 \rangle &= \\ &= i \frac{\sqrt{2}\mu_0^2 \widetilde{Z}^5 \mathcal{S}}{(2a_0)^4 \sqrt{3(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})}} u_r, \end{aligned} \quad (32)$$

где  $a_0$  — борковский радиус.

Для получения эффективного оператора спин-вибронного взаимодействия следует поставить в соответствие радиальным смещениям  $u_r$  ядер кластера оператор  $\hat{u}_r$ . Согласно принятым выше приближениям, радиальные колебания должны соответствовать симметричному одномерному представлению группы симметрии  $C_{3v}$ . В этом случае колебательная часть гамильтониана кластера может быть представлена как гамильтониан одномерного гармонического осциллятора с частотой радиальных колебаний  $\omega_r$ :

<sup>3)</sup> Здесь учтен матричный элемент от спинового оператора (29).



$$\hat{H}_{vibr} = \hbar\omega_r \left( a_r^\dagger a_r + \frac{1}{2} \right), \quad (33)$$

где  $a_r^\dagger$  и  $a_r$  — соответственно повышающий и понижающий операторы гармонического осциллятора. Частоту радиальных колебаний  $\omega_r$  аналитически точно не представляется возможным вычислить, однако вполне можно оценить пределы ее возможных значений. Частота колебаний системы определяется энергией связи и приведенной массой кластера относительно радиальных смещений. Для радиальных смещений упругая радиальная сила может быть определена как

$$F_r = -\frac{\partial U}{\partial r} = -\left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_0 u_r,$$

где  $u_r$  — обобщенная радиальная координата. Поскольку радиальные колебания должны соответствовать симметричному одномерному представлению группы симметрии, все смещения направлены вдоль химических связей кластера. Обратная приведенная масса равна сумме обратных масс ядер. Пренебрежем изотопическим сдвигом и будем для оценки считать все ядра одинаковыми,  ${}^{12}\text{C}$ , тогда приведенная масса радиальных смещений будет равна  $M = M_C/4 \approx 3M_p$ , где  $M_p$  — масса протона.

Энергию  $U$  однозначно невозможно определить, однако можно предположить, что  $|E_{FB} + E_{CB}| = U_0 \sim |E_{2sp}|$ , где  $E_{FB}$  и  $E_{CB}$  — соответственно ширины запрещенной зоны и зоны проводимости алмаза,  $E_{2sp}$  — энергия электрона для  $2sp$ -состояний в атоме углерода. Таким образом, можем записать

$$\omega_r = \sqrt{\frac{1}{M} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_0} \sim \sqrt{\frac{U_0}{3M_p R_0^2}},$$

где  $R_0$  — равновесное расстояние ядер кластера относительно центра вакансии. Если рассматривать энергию  $2sp$ -состояний как энергию водородоподобного атома с эффективным зарядом  $\tilde{Z} = 2.6$  [33], мы получаем  $U_0 \approx 23$  эВ. С другой стороны, квантовохимические расчеты зонной структуры алмаза показывают  $U_0 \approx 30$  эВ [34–36]. Таким образом, для оценки частоты радиальных колебаний можно выбрать предел изменений  $23 \text{ эВ} \lesssim U_0 \lesssim 30 \text{ эВ}$ . Принимая длину химической связи в кластере равной длине связи в решетке алмаза, получаем  $1.8 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1} \lesssim \omega_r \lesssim 2.1 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ , что меньше необходимой энергии перехода между рассматриваемыми уровнями энергии кластера, однако это различие составляет примерно 0.05 эВ, что уже может быть компенсировано возбуждением колебаний решетки,

которые будут рассмотрены в следующем разделе. Следует также учитывать значительную грубость модели для проведения более точных оценок.

Итак, эффективный оператор спин-вибронного взаимодействия, который определяет переход  ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$ , можно записать в виде

$$\hat{V}_{s-v} = i \frac{\sqrt{2}\mu_0^2 \tilde{Z}^5 \mathcal{S}}{(2a_0)^4 \sqrt{3(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})}} \hat{S}_{1 \rightarrow 0} \hat{u}_r, \quad (34)$$

где

$$\hat{u}_r = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_r}} (\hat{a}_r + \hat{a}_r^\dagger),$$

а оператор  $\hat{S}_{1 \rightarrow 0}$  переводит состояние со спином 1 в состояние со спином 0:

$$\hat{S}_{1 \rightarrow 0} |S = 1, M_S = \pm 1\rangle = |0, 0\rangle.$$

Нетрудно убедиться, что матричные элементы оператора спин-вибронного взаимодействия, которые определяют переход  ${}^1E_{x,y} \rightarrow {}^3A_2$ , отличаются от матричных элементов (31) только знаком. Действительно, для дополнительных, по сравнению с рассмотренными выше переходами, интегралов перекрытия, которые возникают при вычислении отличных от нуля матричных элементов  $\langle e_y | \hat{V}_{so} | e_x \rangle$ , имеем

$$\langle \psi_a | \hat{V}_{so} | \psi_c \rangle = \langle \psi_b | \hat{V}_{so} | \psi_c \rangle.$$

Таким образом, эффективный оператор спин-вибронного взаимодействия, определяющий переход  ${}^1E_{x,y} \rightarrow {}^3A_2$ , имеет вид

$$\hat{V}_{s-v} = -i \frac{\sqrt{2}\mu_0^2 \tilde{Z}^5 \mathcal{S}}{(2a_0)^4 \sqrt{3(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})}} \hat{S}_{0 \rightarrow 1} \hat{u}_r, \quad (35)$$

где оператор  $\hat{S}_{0 \rightarrow 1}$  переводит состояние со спином 0 в состояние со спином 1:

$$\hat{S}_{0 \rightarrow 1} |0, 0\rangle = \pm |S = 1, M_S = \pm 1\rangle.$$

## 7. СКОРОСТЬ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОГО ПЕРЕХОДА, ОБУСЛОВЛЕННОГО СПИН-ФОНОННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

При вычислении скорости безызлучательного перехода следует иметь в виду, что рассмотренные в разд. 5 и 6 взаимодействия могут быть учтены как малые поправки к гамильтониану, описывающему электронные состояния  $\text{NV}^-$ -центра. Таким образом, гамильтониан системы, учитывающий взаимодействия с колебаниями кластера и радиальными колебаниями решетки, можно записать в виде суммы:

$$\hat{H} = \hat{H}_{NV} + \hat{H}_{vibr} + \hat{H}_{ph} + \hat{V}_{s-v} + \hat{V}_{q-ph}, \quad (36)$$

где  $\hat{H}_{NV}$  — гамильтониан изолированного кластера ( $NV^-$ -центра),  $\hat{H}_{vibr}$  — гамильтониан (33),  $\hat{H}_{ph}$  — гамильтониан радиальных колебаний решетки относительно заряженного центра,  $\hat{V}_{s-v}$  — оператор спин-вибронного взаимодействия, который определяется выражением (34) или (35) в зависимости от рассматриваемого перехода.

Определим теперь гамильтониан радиальных колебаний решетки и оператор взаимодействия с ними заряженного  $NV^-$ -центра,  $\hat{V}_{q-ph}$ .

Колебания решетки определяются оператором радиальных смещений решетки  $\hat{\xi}_r$ , который в кристаллах диэлектриков со структурой алмаза построен в работах [29, 30] в приближении упругой среды. Такая задача рассматривалась при описании процесса формирования акцепторного центра, образованного отрицательным мюоном. Наиболее подробно вывод представлен в работе [37], где получено следующее выражение:

$$\hat{\xi}_r = \frac{1}{r} \sum_n \sqrt{\frac{2\hbar}{\rho\omega(k_n)R_D}} \sin(k_n r) (b_n^\dagger + b_n). \quad (37)$$

Здесь  $\rho$  — плотность кристалла,  $b_n^\dagger$  и  $b_n$  — операторы рождения и уничтожения радиальных фононов,  $k_n = 2\pi n/R_D$ , а радиус  $R_D \rightarrow \infty$  и соответствует расстоянию, на котором деформации отсутствуют. Очевидно, в окончательные выражения этот параметр входить не будет.

Зависимость частоты от волнового вектора радиальных фононов определяется нелинейным соотношением

$$\omega^2 = k^2 c_{||}^2 + \Omega^2, \quad (38)$$

где  $c_{||}$  — продольная скорость звука в кристалле, а частота  $\Omega$  определяется формулой

$$\Omega^2 = \left( \frac{\varkappa}{\varepsilon} + \frac{3}{2\pi} \right) \frac{Q^2}{9\varepsilon\rho R_1^6}, \quad (39)$$

$\varepsilon$  и  $\varkappa$  — соответственно диэлектрическая проницаемость и восприимчивость кристалла,  $Q$  — заряд центра, который в нашем случае равен  $-e$ . Параметр  $R_1 > R_0$  строго не определен, но его можно считать равным радиусу первой координационной сферы.

Как получено в работе [37], оператор взаимодействия заряженного центра с радиальными колебаниями решетки имеет вид

$$\hat{V}_{q-ph} = \frac{5Q^2}{2\pi\varepsilon r^5} \hat{\xi}_r. \quad (40)$$

Для определенности сперва рассмотрим скорость безызлучательного перехода  ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$ , которая может быть вычислена в соответствии с «золотым правилом» Ферми во втором порядке теории возмущений:

$$dw_{E \rightarrow A} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_n \frac{\langle i | \hat{V}_{s-v} | n \rangle \langle n | \hat{V}_{q-ph} | f \rangle}{E_i - E_n} \right|^2 \times \delta(E_i - E_n - \hbar\omega(k_f)) \frac{R_D dk_f}{2\pi}, \quad (41)$$

где начальное, промежуточное и конечное состояния определяются как

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |{}^3E\rangle |n_v = 0\rangle |n_{ph}\rangle, \\ |n\rangle &= |{}^1A_1\rangle |n_v = 1\rangle |n_{ph}\rangle, \\ |f\rangle &= |{}^1A_1\rangle |n_v = 1\rangle |n_{ph} + 1\rangle. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь первый вектор в прямом произведении определяет электронное состояние  $NV^-$ -центра, второй — колебательные состояния кластера, третий — состояние радиальных колебаний решетки с числом фононов  $n_{ph}$ .

Определим матричные элементы:

$$\langle i | \hat{V}_{s-v} | n \rangle = i \frac{\sqrt{2}\mu_0^2 \tilde{Z}^5 \mathcal{S}}{(2a_0)^4 \sqrt{3(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})}} \times \sqrt{\frac{\hbar}{6M_p\omega_r}}. \quad (43)$$

Второй матричный элемент имеет вид

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{V}_{q-ph} | f \rangle &= \frac{5Q^2}{2\pi\varepsilon} \sqrt{\frac{2\hbar(n(k_f) + 1)}{\rho\omega(k_f)R_D}} \times \\ &\times 4\pi \int_{R_1}^{\infty} \exp(ik_f r) \sin k_f r \frac{dr}{r^4}. \end{aligned} \quad (44)$$

Интеграл в формуле (44) равен

$$\frac{1}{2i} \int_{R_1}^{\infty} (1 - \exp(-2ik_f r)) \frac{dr}{r^4} \approx \frac{1}{6iR_1^3}.$$

Здесь мы пренебрегли вкладом от быстроосциллирующего слагаемого под интегралом. Таким образом, получаем

$$\langle n | \hat{V}_{q-ph} | f \rangle = \frac{5Q^2}{3i\varepsilon R_1^3} \sqrt{\frac{2\hbar(n(k_f) + 1)}{\rho\omega(k_f)R_D}}. \quad (45)$$

Учитывая дисперсионное соотношение для радиальных фононов (38), получаем следующее выражение для скорости перехода:

$$w_{E \rightarrow A} = \left(\frac{5}{9}\right)^2 \frac{\tilde{Z}^{10} \mathcal{S}^2}{27(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})} \left(\frac{\mu_0^2}{a_0^3}\right)^2 \times \\ \times \left(\frac{Q^2}{R_1}\right)^2 \frac{1}{a_0^2 R_1^4} \frac{\hbar}{M_p \omega_r \varepsilon^2 \rho c_{\parallel}} \frac{f(T)}{(\Delta - \hbar \omega_r)^3}, \quad (46)$$

где  $\Delta = E^3_E - E^1_{A_1}$ , а функция  $f(T)$  равна<sup>4)</sup>

$$f(T) = \frac{\Delta - \hbar \omega_r}{\sqrt{(\Delta - \hbar \omega_r)^2 - \hbar^2 \Omega^2}} \times \\ \times \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta - \hbar \omega_r}{T}\right) \right]^{-1}. \quad (47)$$

Согласно полученным выше соотношениям скорость перехода синглет–триплет  ${}^1E_{x,y} \rightarrow {}^3A_2$  также будет определяться формулой (46).

## 8. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученная формула (46) позволяет провести качественные оценки скорости безызлучательного перехода. Заметим, что выражение содержит фактически два параметра, величина которых определяется по порядку величины, но которые в рамках аналитических расчетов не поддаются более точному количественному определению: это интеграл перекрытия  $\mathcal{S}$  и частота радиальных колебаний кластера  $\omega_r$ . Однако эти параметры успешно рассчитываются численно, в частности, с помощью функционала плотности. Оценка частоты радиальных колебаний кластера проведена в разд. 6, где получен диапазон ее возможных значений  $1.8 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1} \lesssim \omega_r \lesssim 2.1 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ .

Для интеграла перекрытия волновых функций, имеющих асимптотику  $\exp(-r\tilde{Z}/2a_0)$ , оценку можно определить как

$$\mathcal{S} \sim \left(\frac{2a_0}{\tilde{Z}R_0}\right)^3 \exp\left(-\frac{\tilde{Z}R_0}{2a_0}\right) \approx 4 \cdot 10^{-4}.$$

Очевидно, для качественных оценок в знаменателе формулы (46) можно пренебречь  $\mathcal{S} \ll 1$ .

При проведении численных оценок примем известные данные о свойствах кристаллов алмаза (см., например, [38, 39]): плотность кристалла  $\rho = 3.51 \text{ г/см}^3$ , диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon = 5.75$ , длина связи (расстояние между соседними

ядрами)  $R_0 = 1.54 \text{ \AA}$ , продольная скорость звука  $c_{\parallel} = 1.75 \cdot 10^6 \text{ см/с}$ . Радиус первой координационной сферы примем  $R_1 = 2.53 \text{ \AA}$ . В соответствии с приведенными параметрами получаем оценку для частоты  $\Omega \sim 10^{12} \text{ с}^{-1}$ . Таким образом, численная оценка скорости безызлучательного перехода равна

$$w_{E \rightarrow A} [\text{с}^{-1}] \approx 5 \cdot 10^5 f(T), \quad (48)$$

что почти на порядок больше экспериментально наблюдаемых значений времени жизни синглетного состояния  ${}^1\tilde{E}$ :  $\tau \approx 370 \text{ нс}$  при температуре  $T \approx 10 \text{ К}$  и  $\tau \approx 170 \text{ нс}$  при комнатной температуре [40].

Как видно, величина оценки (48) существенно зависит от частоты радиальных колебаний  $\omega_r$ , которую можно уточнить в соответствии с температурной зависимостью времени жизни. Действительно, температурная зависимость скорости перехода (47) определяется разностью  $\Delta - \hbar \omega_r$ , в которой величина  $\Delta$  хорошо определена. При любых оценках можно утверждать, что заведомо  $\Delta - \hbar \omega_r > 10^{-2} \text{ эВ}$ , поэтому при криогенных температурах можно считать, что функция  $f(T) \approx 1$ . Поскольку температурная зависимость скорости перехода полностью определяется функцией  $f(T)$ , получаем

$$\frac{w(T = 10 \text{ К})}{w(T = 300 \text{ К})} = \frac{f(T = 10 \text{ К})}{f(T = 300 \text{ К})} \approx 0.46,$$

т. е. различается примерно в два раза. Следовательно, можно заключить, что в качестве оценки для частоты радиальных колебаний мы должны принять  $\Delta - \hbar \omega_r \approx 2.5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$ , что примерно в два раза меньше оценки, полученной в разд. 6, но не противоречит ей. Поскольку данный энергетический множитель входит в третьей степени в знаменатель формулы (46), это приводит к увеличению численного коэффициента в оценке (48) примерно в восемь раз. Получаемый результат уже хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемыми значениями. Таким образом, хорошее количественное согласие полученного теоретического результата (46) с экспериментальными данными [40] достигается при выборе частоты радиальных колебаний, равной  $\omega_r \approx 2.25 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ .

## 9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построенная модель безызлучательных переходов  ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$  и  ${}^1\tilde{E} \rightarrow {}^3A_2$  в  $NV^-$ -центре объясняет не только механизм перехода, но и дает хорошее количественное совпадение с экспериментальными результатами. При этом исключается многофо-

<sup>4)</sup> Мы здесь сразу учли усреднение по равновесному состоянию фононов и заменили квантовые числа средними равновесными значениями  $n(k_f) = \exp[\hbar\omega(k_f)/T] - 1$ , определяемыми равновесной функцией распределения радиальных фононов, чтобы избежать формальных выкладок, поскольку в данном случае это не может привести к недоразумениям.

нонный механизм перехода, который в данном случае не может обеспечить достаточно короткое время жизни в синглетных состояниях  $NV^-$ -центра в кристаллах алмаза. Более точное количественное значение уже может быть получено в результате численных расчетов, в частности, с применением метода функционала плотности. Заметим также, что частоты радиальных колебаний кластера могут быть успешно вычислены и более простыми, кластерными методами расчетов.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Согласно выражению (31), матричный элемент  $\langle {}^1A_1 | \hat{V}_{so} | E_y, M_S = -1 \rangle$  можно представить в виде суммы четырех слагаемых, определяемых вкладами  $2s$ - и  $2p$ -состояний в интегралы перекрытий. Рассмотрим сперва вклад  $2s$ -состояния, соответствующего иону с индексом «с», который определяется матричным элементом

$$\begin{aligned} I_{00}^1 &= \alpha \langle \psi_{200,c} | \frac{\hat{l}_+}{r^3} (\delta |\psi_a\rangle_{2s} - \delta |\psi_b\rangle_{2s}) = \\ &= \alpha^2 u_r \int \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r) \left[ \frac{R_0(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_a) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{R_0(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_b) \right] dr. \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

Здесь для краткости введено обозначение

$$R_0(r_i) = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{dR_{20}(r_i)}{dr_i}.$$

Согласно определению (27), можем записать действие оператора момента следующим образом:

$$\hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_i) = \exp(i\varphi_i) \sum_m C_m(\theta_i) Y_{1,m}(\mathbf{n}_i). \quad (\text{A.2})$$

Учитывая, что  $\varphi_a = 2\pi/3$ , а  $\varphi_b = 4\pi/3$ , получаем, что матричный элемент (A.1) равен

$$I_{00}^1 = i\sqrt{3}\alpha^2 s_0. \quad (\text{A.3})$$

Параметр  $s_0$  можно для оценок выразить через интеграл перекрытия  $\mathcal{S}$ . Действительно, представим его в виде суммы:

$$\mathcal{S} = \alpha^2 \mathcal{S}_{00} + 2\alpha\beta \mathcal{S}_{01} + \beta^2 \mathcal{S}_{11}, \quad (\text{A.4})$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{00} &= \int R_{20}(r) R_{20}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) r^2 d\mathbf{r}, \\ \mathcal{S}_{01} &= \int R_{20}(r) R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) Y_{10}(\mathbf{n}_i) \frac{d\mathbf{r}}{\sqrt{4\pi}}, \\ \mathcal{S}_{11} &= \int R_{21}(r) R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) Y_{10}^*(\mathbf{n}) Y_{10}(\mathbf{n}_i) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Здесь индекс «i» указывает направление на ионы, отличные от иона, относительно которого рассматривается интегрирование. Очевидно, если  $\mathbf{n} = \mathbf{n}_c$ , то в интегралах  $i = a$  либо  $i = b$ . В обоих случаях интегралы равны. В соответствии с этим будем также полагать, что  $\mathcal{S}_{01} = \mathcal{S}_{10}$ .

Радиальные функции  $R_{20}$  и  $R_{21}$  эффективно зависят от переменной  $\tilde{Z}r/2a_0$ , где  $a_0 = \hbar^2/2me^2$  — атомная единица длины. Поэтому стоящие в подынтегральных выражениях производные от радиальных функций имеют порядок  $R_0 \sim R_{20}\tilde{Z}/2a_0$ . Очевидно также, что наибольший вклад в интеграл вносит область интегрирования  $r \sim R_0$ , однако при этом с учетом свойств радиальных функций должно быть выполнено также условие  $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i| \sim 2a_0/\tilde{Z}$ . Таким образом, для параметра  $s_0$  получаем приближенное выражение

$$s_0 \approx \left( \frac{\tilde{Z}}{2a_0} \right)^4 \mathcal{S}_{00}. \quad (\text{A.5})$$

В исходном выражении для матричного элемента перехода для состояния  $|v\rangle$  нужно вычислить еще два интеграла. При этом получаем, что вклад дают интегралы перекрытия только состояний  $|\psi_a\rangle$  с  $|\psi_b\rangle$  и наоборот. Таким образом, в полный матричный элемент (A.3) вклад (A.5) удваивается.

Совершенно аналогично можем записать

$$\begin{aligned} I_{10}^1 &= \beta \langle \psi_{210,c} | \frac{\hat{l}_+}{r^3} (\delta |\psi_a\rangle_{2s} - \delta |\psi_b\rangle_{2s}) = \\ &= \alpha\beta u_r \int R_{21}(r) Y_{10}^*(\mathbf{n}) \left[ \frac{R_0(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_a) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{R_0(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_b) \right] dr. \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

Проводя оценку интеграла перекрытия аналогично (A.5), можем записать

$$I_{10}^1 = i\sqrt{3}\alpha\beta s_1, \quad (\text{A.7})$$

где

$$s_1 \approx \left( \frac{\tilde{Z}}{2a_0} \right)^4 \mathcal{S}_{10}. \quad (\text{A.8})$$

В окончательном выражении также следует учесть удвоение вклада (A.7) из-за добавления еще двух интегралов перекрытия.

Для матричного элемента

$$I_{01}^1 = \alpha\beta \langle (\delta \psi_{200,c}) | \frac{\hat{l}_+}{r^3} (|\psi_a\rangle_{210} - |\psi_b\rangle_{210})$$

получаем

$$I_{01}^1 = \int R_0(r) Y_{10}^*(\mathbf{n}) \left( \frac{R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_a) - \frac{R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_b) \right) dr.$$

С учетом равенства  $\mathcal{S}_{01} = \mathcal{S}_{10}$  можем записать

$$I_{01}^1 = i\sqrt{3}\alpha\beta \left( \frac{\tilde{Z}}{2a_0} \right)^4 \mathcal{S}_{10}. \quad (\text{A.9})$$

Четвертый матричный элемент определяется как

$$I_{11}^1 = \beta^2 \langle (\delta\psi_{210,c}) | \frac{\hat{l}_+}{r^3} (|\psi_a\rangle_{210} - |\psi_b\rangle_{210}).$$

Подставим явное выражение для  $\delta\langle\psi_{210,c}|$  и получим

$$I_{11}^1 = \beta^2 \int R_1(r) (2\sqrt{2\pi} Y_{20}^*(\mathbf{n}) - 1) \times \left( \frac{R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_a|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_a) - \frac{R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|^3} \hat{l}_+ Y_{10}(\mathbf{n}_b) \right) dr, \quad (\text{A.10})$$

где

$$R_1(r) = \frac{1}{3} \frac{dR_{21}(r)}{dr}.$$

Выражение (A.10) содержит два интеграла перекрытия, поэтому, в отличие от (A.3), нужно записать

$$I_{11}^1 = i\sqrt{3}\beta^2 (s_2 - s_3).$$

Оба параметра, как  $s_2$ , так и  $s_3$ , для проведения оценок можно аппроксимировать, учитывая оценку  $R_1 \sim R_{21} \tilde{Z}/2a_0$ , через интеграл перекрытия  $\mathcal{S}_{11}$ . Получаем

$$I_{11}^1 = i\sqrt{3}\beta^2 \left( \frac{\tilde{Z}}{2a_0} \right)^4 \mathcal{S}_{11}. \quad (\text{A.11})$$

Складывая матричные элементы (A.3), (A.7), (A.9) и (A.11), с учетом удвоения получаем

$$I = 2i\sqrt{3}(\alpha^2 \mathcal{S}_{00} + 2\alpha\beta \mathcal{S}_{01} + \beta^2 \mathcal{S}_{11}) \left( \frac{\tilde{Z}}{2a_0} \right)^4 = 2i\sqrt{3} \left( \frac{\tilde{Z}}{2a_0} \right)^4 \mathcal{S}. \quad (\text{A.12})$$

Подставляя матричный элемент (A.12) в формулу (31), получаем искомый результат

$$\langle {}^1A_1 | \hat{V}_{so} | E_y, M_S = -1 \rangle = i \frac{\sqrt{2}\mu_0^2 \tilde{Z}^5 \mathcal{S}}{(2a_0)^4 \sqrt{3(1+2\mathcal{S})(1-\mathcal{S})}} u_r.$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. H. N. Loubser and J. A. van Wyk, Rep. Progr. Phys. **41**, 1201 (1978).
2. G. Davis and M. F. Hamer, Proc. Roy. Soc. London A **348**, 285 (1976).
3. A. T. Collins, J. Phys. C **16**, 2177 (1983).
4. A. Beveratos, R. Brouri, T. Gacoin, A. Villing, J. P. Poizat, and P. Grangier, Phys. Rev. Lett. **89**, 187901 (2002).
5. F. Jelezko, T. Gaebel, I. Popa, M. Domhan, A. Gruber, and J. Wrachtrup, Phys. Rev. Lett. **93**, 130501 (2004).
6. M. V. G. Dutt, L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A. S. Zibrov, P. R. Hemmer, and M. D. Lukin, Science **316**, 1312 (2007).
7. T. D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflame, Y. Nakamura, C. Monroe, and J. L. O'Brien, Nature **464**, 45 (2010).
8. A. Gali, Nanooptics **8**, 1907 (2019).
9. A. Lenef and S. C. Rand, Phys. Rev. B **53**, 13441 (1996).
10. J. A. Larsson and P. Delaney, Phys. Rev. B **77**, 165201 (2002).
11. N. B. Manson, J. P. Harrison, and M. J. Sellars, Phys. Rev. B **74**, 104303 (2006).
12. J. Maze, A. Gali, E. Togan, Y. Chu, A. Trifonov, E. Kaxiras, and M. Lukin, New J. Phys. **13**, 025025 (2011).
13. M. W. Doherty, N. B. Manson, P. Delaney, and L. C. L. Hollenberg, New J. Phys. **13**, 025019 (2011).
14. M. W. Doherty, N. B. Manson, P. Delaney, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and L. C. Hollenberg, Phys. Rep. **528**, 1 (2013).
15. J. A. Larsson and P. Delaney, Phys. Rev. B **77**, 165201 (2008).
16. J. P. Goss, R. Jones, P. R. Briddon, G. Davies, A. T. Collins, A. Mainwood, J. A. van Wyk, J. M. Baker, M. E. Newton, A. M. Stoneham, and S. C. Lawson, Phys. Rev. B **56**, 16031 (1997).
17. A. Lenef and S. C. Rand, Phys. Rev. B **56**, 16033 (1997).
18. Yu. Ma, M. Rohlfing, and A. Gali, Phys. Rev. B **81**, 041204(R) (2010).

19. F. M. Hossan, M. W. Doherty, H. F. Wilson, and L. C. D. Hollenberg, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 226403 (2008).
20. A. Alkauskas, Q. Yan, and Ch. G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **90**, 075202 (2014).
21. A. Alkauskas, B. B. Buckley, D. D. Awschalom, and Ch. G. Van de Walle, *New J. Phys.* **16**, 073026 (2014).
22. M. L. Goldman, A. Sipahigil, M. W. Doherty, N. Y. Yao, S. D. Bennett, M. Markham, D. J. Twitchen, N. B. Manson, A. Kubanek, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 145502 (2015).
23. T. Plakhotnik, M. W. Doherty, and N. B. Manson, *Phys. Rev. B* **92**, 081203(R) (2015).
24. G. Thiering and A. Gali, *Phys. Rev. B* **96**, 081115 (2017).
25. L. J. Polling, *Amer. Chem. Soc.* **53**, 1367 (1931).
26. Ч. Коулсон, *Валентность*, Мир, Москва (1965), с. 1.
27. Yu. M. Belousov, *J. Phys. Conf. Ser.* **343**, 012013 (2012).
28. Yu. M. Belousov and L. P. Sukhanov, *Diam. Rel. Mater.* **58**, 10 (2015).
29. Ю. М. Белоусов, *ЖЭТФ* **123**, 1160 (2016).
30. Y. Belousov, *Crystals* **7**, 174 (2017).
31. Yu. M. Belousov, in *Newest Updates in Physical Science Research* (2021), Vol. 6, DOI: 10.9734/bpi/nupsr/v6/2117F.
32. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1987).
33. J. C. Slater, *Phys. Rev.* **36**, 57 (1930).
34. F. Hermann, R. Kortun, C. Kuglin, and R. A. Short, *Quantum Theory of Atoms Molecules, Solid State*, Acad. Press, New York (1966), p. 381.
35. M. Saslow, T. Bergstresser, and M. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 354 (1966).
36. T. Bergstresser and M. Cohen, *Phys. Rev.* **141**, 789 (1966).
37. Yu. M. Belousov and I. V. Chernousov, *AIP Conf. Proc.* **2362**, 040003 (2021).
38. O. Madelung, *Semiconductors. Basic Data*, Springer, Berlin–Heidelberg (2004).
39. S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors. Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications*, John Wiley & Sons, Chichester (2005).
40. L. Robledo, L. Childress, H. Bernien, B. Hensen, P. F. A. Alkemade, and R. Hanson, *Nature* **477**, 574 (2011).

# ГЕНЕРАЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ ЧАСТОТНЫХ ГРЕБЕНОК В ОПТИЧЕСКОМ МИКРОРЕЗОНАТОРЕ НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 780 нм В РЕЖИМЕ ЗАТЯГИВАНИЯ ПРИ НАКАЧКЕ ЛАЗЕРНЫМ ДИОДОМ

А. Е. Шитиков <sup>a\*</sup>, А. С. Волошин <sup>b</sup>, И. К. Горелов <sup>a,c</sup>, Е. А. Лоншаков <sup>a</sup>, К. Н. Миньков <sup>a</sup>,  
Н. Ю. Дмитриев <sup>a,d</sup>, Н. М. Кондратьев <sup>a</sup>, В. Е. Лобанов <sup>a</sup>, И. А. Биленко <sup>a,c,e</sup>

<sup>a</sup> Российский квантовый центр  
121205, Москва, Россия

<sup>b</sup> Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL)  
1015, Лозанна, Швейцария

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

<sup>d</sup> Московский физико-технический институт  
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

<sup>e</sup> Национальный исследовательский университет «МИСиС»  
119049, Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 ноября 2021 г.,  
после переработки 1 ноября 2021 г.  
Принята к публикации 2 ноября 2021 г.

Представлены результаты экспериментального исследования особенностей генерации оптических частотных гребенок в микрорезонаторах с модами шепчущей галереи из фторида магния на длине волны 780 нм, соответствующей области нормальной дисперсии групповых скоростей, при накачке лазерным диодом, работающим в режиме затягивания. Показано, что возбуждение частотных гребенок обуславливается процессами как в нелинейном микрорезонаторе, так и в лазерном диоде. Обнаружено, что в режиме затягивания могут усиливаться соседние, изначально подавленные, продольные моды лазерного диода, что приводит к генерации гибридных, лазерно-усиленных боковых компонент. В результате возбуждаются гребенки с высокой эффективностью преобразования энергии накачки и низким уровнем фазовых шумов.

DOI: 10.31857/S0044451022050066

EDN: DSQKWN

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Микрорезонаторы с модами шепчущей галереи (МШГ) являются уникальными объектами с чрезвычайно высокой добротностью в широком диапазоне длин волн и малым объемом моды [1], что делает их незаменимыми элементами для фотоники и лазерной физики [2]. Замечательной особенностью высокодобротных микрорезонаторов стала обнаруженная в 2007 году возможность генерации в них за счет нелинейного четырехволнового взаимодей-

ствия [3, 4] такого важного типа оптических сигналов, как оптические частотные гребенки (ОЧГ) [5], в том числе и когерентные или солитонные [6, 7]. Использование высокодобротных микрорезонаторов позволило существенно уменьшить размер генераторов частотных гребенок по сравнению с традиционно используемыми для этого лазерами с синхронизацией мод и значительно расширить область применения частотных гребенок в различных областях науки и техники, включая спектроскопию [8, 9], астрофизические измерения [10], лидары [11], малощумящие микроволновые генераторы [12] и телекоммуникационные системы [13].

\* E-mail: shartev@gmail.com

Однако область применения таких керровских частотных гребенок часто ограничена спектральными диапазонами, в которых дисперсия групповых скоростей является аномальной, поскольку модуляционная неустойчивость, необходимая для иницирования процесса генерации гребенки, в основном отсутствует при нормальной дисперсии групповой скорости [14, 15]. Этот факт препятствует активному применению микрорезонаторных частотных гребенок в таком интересном и важном спектральном диапазоне, как диапазон видимого света, где дисперсия групповой скорости микрорезонаторов обычно нормальная для подавляющего большинства материалов, используемых для создания микрорезонаторов. В некоторых случаях удается создавать микрорезонаторы с аномальной дисперсией групповой скорости даже в таких спектральных диапазонах, управляя дисперсией резонатора путем контроля его геометрии [16, 17]. Тем не менее этот подход не всегда позволяет компенсировать большую нормальную дисперсию групповой скорости и достаточно сложен технологически.

Однако, несмотря на все эти сложности, наличие когерентных керровских ОЧГ в режиме нормальной дисперсии было экспериментально продемонстрировано в различных условиях [18, 19]. Численно показано, что в некоторых случаях такие экспериментальные результаты могут быть объяснены с помощью нового типа солитонных импульсов, называемых «платиконами», — диссипативных солитонов с плоской вершиной, которые могут мягко возбуждаться и стабильно существовать в микрорезонаторах с нормальной дисперсией с локальным возмущением дисперсионного закона, например, сдвига моды накачки [20]. В реальных микрорезонаторах это условие может быть выполнено в результате либо спонтанного, либо контролируемого взаимодействия между различными семействами мод.

Платиконы можно интерпретировать как связанные состояния встречных волн переключения в микрорезонаторе, которые соединяют верхнюю и нижнюю ветви бистабильного нелинейного резонанса для удовлетворения периодических граничных условий [21, 22]. Эффективность преобразования энергии накачки в энергию генерируемых линий гребенки для платиконов оказалась значительно выше, чем для светлых солитонов [23]: эффективность преобразования, превышающая 40 %, была продемонстрирована экспериментально в телекоммуникационном диапазоне в области нормальной дисперсии, тогда как эффективность преобразования светлых солитонов обычно ограничена несколь-

кими процентами [24]. В работе [25] численно показано, что динамика платиконов при наличии дисперсии третьего порядка весьма своеобразна и кардинально отличается от динамики светлых солитонов [26]. Позднее было показано, что генерация платикона также возможна в отсутствие локального дисперсионного возмущения, когда используется двухчастотная или амплитудно-модулированная накачка [27, 28]. Этот метод эффективен, если частота модуляции накачки или разность частот между двумя волнами накачки равна области свободной дисперсии (ОСД) микрорезонатора. Возможность применения этого метода была подтверждена экспериментально [29].

Следует отметить, что использование сдвига моды накачки, вызванного локальным изменением закона дисперсии из-за взаимодействия мод, выглядит перспективно с точки зрения реализации, так как не требует дополнительной модуляции или второго лазера. Однако этот эффект требует либо наличия в резонаторе мод различных семейств, близких по частоте, что крайне трудно контролировать, либо использования второго резонатора, связанного с первым, для сдвига моды накачки [24].

С точки зрения теории, использование модуляции на частоте ОСД или на ее субгармониках является эффективным способом генерации платиконов [28], однако на практике такой подход обладает рядом существенных недостатков. Во-первых, применение амплитудной модуляции приводит к существенному снижению мощности накачки. Во-вторых, на практике крайне трудно добиться модуляции на частотах выше 10 ГГц. Применение же метода двухчастотной накачки помимо необходимости использования двух лазеров с малым уровнем фазовых шумов требует еще строго поддерживать частотный интервал между источниками накачки, равный ОСД микрорезонатора, что является непросто задачей.

В последнее время активно развивается новый подход к генерации ОЧГ в микрорезонаторах, основанный на применении эффекта затягивания. Явление затягивания много лет используется в радиофизике и микроволновой электронике для стабилизации устройств и повышения их спектральной чистоты [30–33]. В течение последних десятилетий затягивание также активно изучалось и применялось в оптике и лазерной физике [34–44]. Наиболее интересные результаты были получены для микрорезонаторов с МШГ [45–47]. В настоящее время эффект затягивания лазерных диодов на микрорезонаторах с МШГ является ключевым компонен-



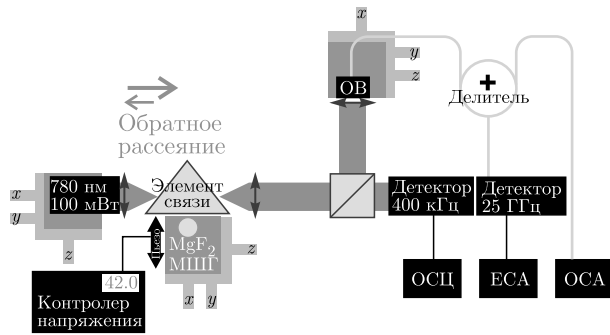


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для генерации ОЧГ в области нормальной дисперсии групповой скорости в режиме затягивания

том различных современных фотонных приложений. Обратное рассеяние Рэлея в оптических микрорезонаторах [48] обеспечивает пассивную частотно-селективную оптическую обратную связь с лазерным диодом, что приводит к значительному подавлению фазового шума лазерного излучения и к существенному сужению спектральной линии излучения. Недавние исследования продемонстрировали пассивную стабилизацию одночастотного [49–53] или даже многочастотного [54–57] полупроводникового лазера до субкилогерцевого уровня ширины линии в режиме затягивания на высокочастотный МШГ-микрорезонатор в различных спектральных диапазонах, от УФ до среднего ИК.

Кроме того, было показано, что такие стабилизированные лазерные диоды могут быть использованы в качестве источника накачки для генерации ОЧГ в том же самом микрорезонаторе, который используется для стабилизации лазерного диода [56, 58]. Этот подход позволяет кардинально ослабить требования к источнику накачки и существенно уменьшить размеры генератора гребенки, открывая путь к полностью интегральным устройствам [58–62].

Как показали дальнейшие исследования, этот метод применим и для генерации когерентных частотных гребенок при нормальной дисперсии групповых скоростей [53, 63]. Эта методика позволяет получить ОЧГ непосредственно при использовании одного лазерного диода; при этом не предъявляются требований к ширине линии генерации (и, соответственно, к уровню его фазовых шумов), так как сужение линии происходит при возбуждении МШГ за счет эффекта затягивания. Однако этот процесс изучен сравнительно слабо и требует дополнительных исследований.

Целью данной работы является экспериментальное изучение особенностей генерации ОЧГ в режи-

ме затягивания в диапазоне нормальной дисперсии групповых скоростей в высокочастотном микрорезонаторе из  $\text{MgF}_2$  при накачке лазерным диодом на длине волны 780 нм. Экспериментально продемонстрирована генерация платиконоподобных частотных гребенок и изучены их спектральные характеристики. Кроме того, показано непосредственное влияние лазерного диода на генерацию ОЧГ. Экспериментально определено, что в спектре результирующих ОЧГ линии, кратные ОСД лазерного диода, заметно усиливаются.

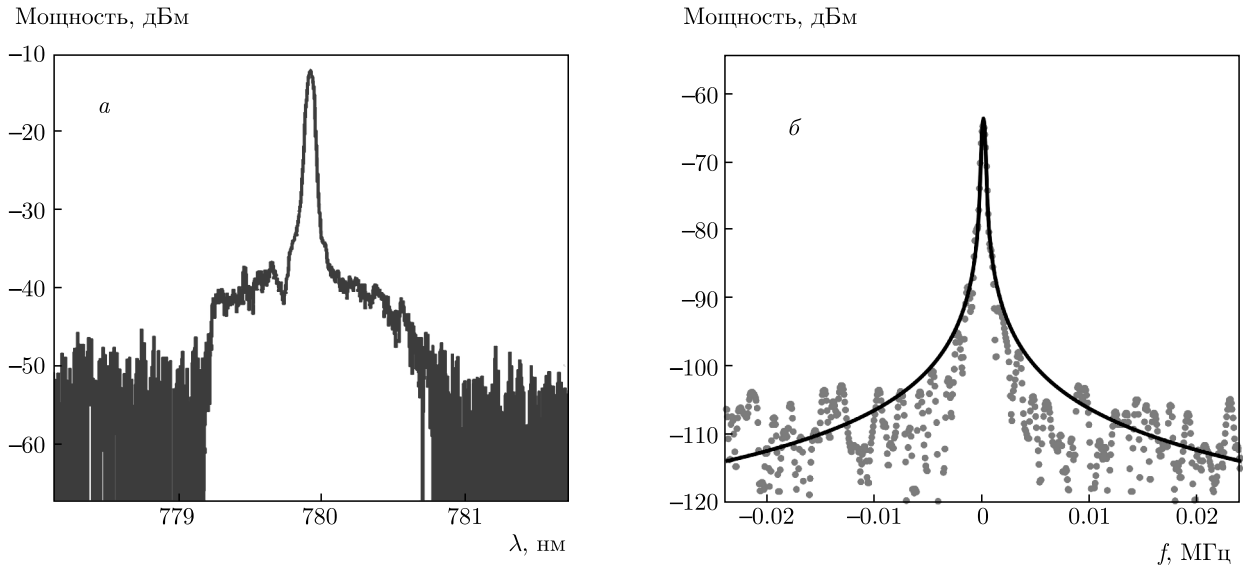
## 2. ЧАСТОТНЫЕ ГРЕБЕНКИ В РЕЖИМЕ ЗАТЯГИВАНИЯ

### 2.1. Экспериментальная установка

Высокочастотные микрорезонаторы МШГ были изготовлены из фторида магния с последующей асимптотической полировкой алмазными суспензиями [64]. Диаметр одного микрорезонатора составлял 3 мм, что соответствовало ОСД 22.0 ГГц, а второго — 4 мм с ОСД 17.5 ГГц. Добротность изготовленных микрорезонаторов измерялась методом звона и для критической связи превышала  $10^9$  для обоих микрорезонаторов.

Для реализации эксперимента генерации ОЧГ в режиме затягивания был выбран одночастотный лазерный диод без изолятора с измеренной мощностью до 70 мВт на длине волны 780 нм. Для возбуждения МШГ использовалась классическая схема с равнобедренной прямоугольной призмой из стекла БК7 в качестве элемента связи (рис. 1). Расстояние от микрорезонатора до лазерного диода равно двойному фокусному расстоянию фокусирующей линзы, установленной между лазером и резонатором, и составляет 16 мм. Зазор между резонатором и элементом связи контролировался с помощью пьезоподачи. Вышедшее из микрорезонатора излучение делилось на две части: первая подавалась на пространственный фотодетектор и контролировалась на осциллографе (ОСЦ), вторая заводилась в одномодовое оптическое волокно (ОВ), с помощью которого подавалась на измерительные приборы — на оптический анализатор спектра (ОСА) и анализатор спектра радиодиапазона (ЕСА) через детектор с полосой пропускания 25 ГГц.

На этапе юстировки оптической схемы для контроля сигнала пропускания использовался пространственный детектор с большой чувствительной областью и полосой 400 кГц. Контрастность связи с МШГ для большинства мод не превышала 25%.



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) *а*) Огибающая спектра когерентной ОЧГ в режиме затягивания с частотным расстоянием между линиями, равным 1 ОСД микрорезонатора. *б*) Спектр сигнала биений между линиями; из значений частоты вычтена величина ОСД резонатора 21.98 ГГц. При аппроксимации распределением Фойгта (черная кривая) лоренцева компонента ширины линии сигнала биений составила 44 Гц, а гауссова — 137 Гц

### 2.2. Генерация когерентной гребенки с межмодовым интервалом 1 ОСД резонатора

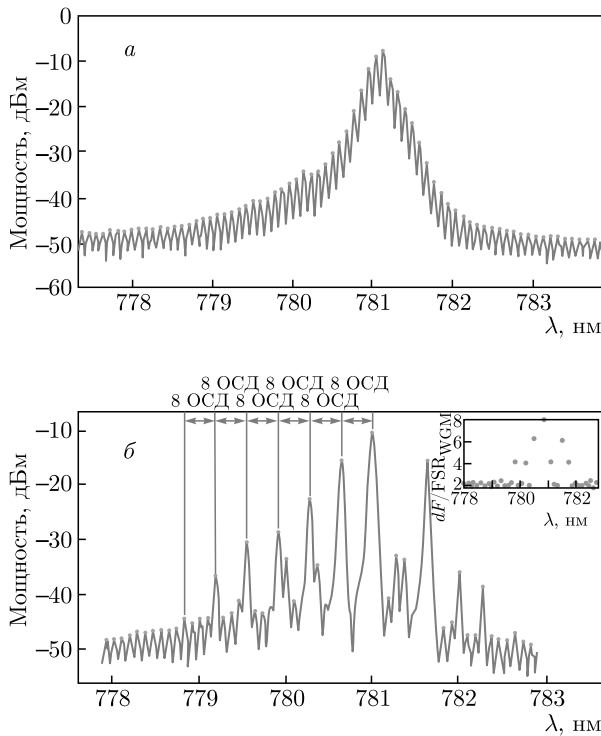
Для генерации ОЧГ в режиме затягивания проводился ряд последовательных операций. Вначале снимался спектр мод микрорезонатора при перестройке частоты лазера током и выбиралась мода, на которую будет проведена настройка. Затем внешняя постоянная перестройка частоты выключалась. Теперь, плавно изменяя ток питания лазерного диода, можно войти в режим затягивания, а затем перестраивать частоту лазера внутри диапазона затягивания. При этом отстройка частоты генерации меняется мало, такая перестройка необходима для поиска режима генерации гребенки. Важно отметить, что генерация гребенок наблюдалась только при увеличении тока питания лазерного диода, т. е. при уменьшении частоты генерации.

На рис. 2*а* представлен спектр (оглаивающая) ОЧГ, сгенерированной в режиме затягивания. Отдельные линии спектра не различимы, что связано с недостаточным разрешением оптического анализатора спектра в этом диапазоне. Сигнал биения линий такой гребенки представлен на рис. 2*б*. Из значений частоты вычтена частота ОСД резонатора, равная 21.98 ГГц. Сигнал биений представляет собой узкий изолированный пик, который при аппроксимации распределением Фойгта имеет ширину 44 Гц для лоренцевой компоненты и 137 Гц для

гауссовой. Этот факт указывает на то, что линии в гребенке являются фазово-связанными, что позволяет говорить о возможной генерации когерентной частотной гребенки в виде платикона во временном представлении. Этот результат аналогичен полученному в работе [18], где он был объяснен влиянием взаимодействия мод с различными свойствами. Однако существуют основания полагать, что существенный вклад в процесс генерации внесли процессы, протекающие в лазерном диоде, что обсуждается в следующем разделе.

### 2.3. Генерация гребенок на частотах, кратных ОСД лазера

В рамках эксперимента исследованы оптические спектры во всем диапазоне сканирования тока питания лазерного диода и выявлено множество различных типов спектров. Было отмечено, что за исключением редких случаев, когда интервал между линиями гребенки, определенный по сигналу биений и равный 1 ОСД микрорезонатора ( $FSR_{WGM}$ ), этот интервал оказывался кратен исключительно четному числу ОСД микрорезонатора (2, 4, 6 и 8) при отсутствии линий, отстоящих от накачки на нечетное число ОСД. Пример таких частотных гребенок приведен на рис. 3. Хорошо видны моды лазерного диода, отмеченные красными кружками. При этом

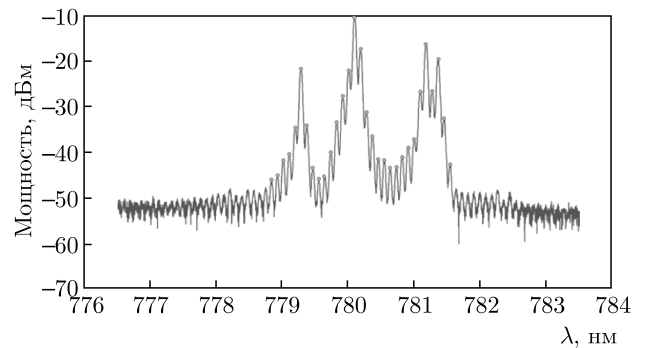


**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Спектры ОЧГ в режиме затыгивания частоты лазерного диода на частоту микрорезонатора диаметром 3 мм (ОСД 22.0 ГГц) для частотных интервалов между линиями, равных 2 (*a*) и 8 (*б*) ОСД резонатора (на вставке указан частотный интервал  $dF$  между соседними линиями, отнесенный к ОСД микрорезонатора  $FSR_{WGM}$ )

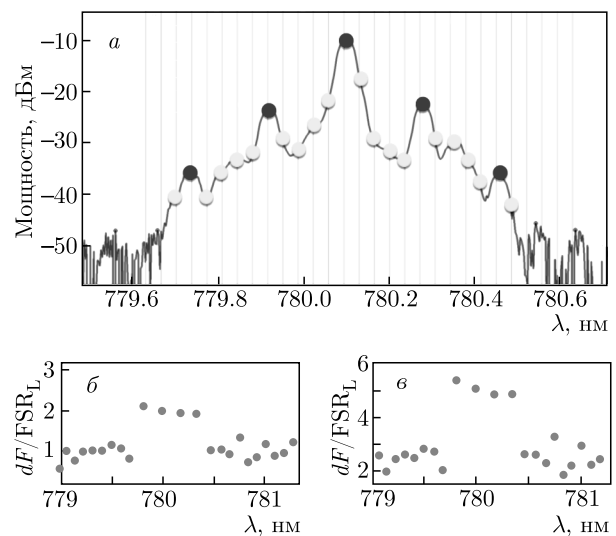
линии гребенки разрешаются и совпадают с собственными частотами лазера, подавленными в свободном состоянии. Расстояние между модами диода составляет около 45 ГГц ( $FSR_L$ ), что примерно равно 2 ОСД микрорезонатора диаметром 3 мм.

На рис. 3 представлены спектры генерации в режиме затыгивания в микрорезонаторе диаметром 3 мм. На рис. 3*a* частотный интервал между линиями кратен 2 ОСД резонатора и, соответственно, 1 ОСД лазера. На рис. 3*б* частотный интервал между выделенными линиями генерации также кратен четному числу ОСД микрорезонатора (8 ОСД). На вставке к рис. 3*б* указано частотное расстояние между соседними линиями в спектре генерируемого сигнала от длины волны, которое составляло 2, 4, 6, 8 ОСД микрорезонатора.

Стоит отметить, что подавленные продольные моды лазерного диода становятся более выраженными при наличии нелинейных процессов в микрорезонаторе. Их интенсивность в спектре может подняться на 10 дБ и более. Можно предположить, что



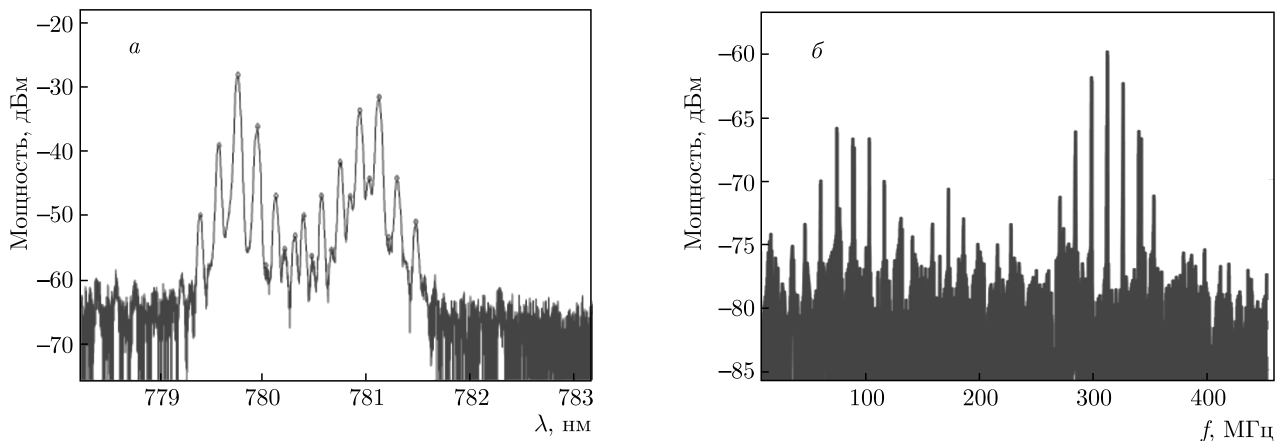
**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Спектр ОЧГ в режиме затыгивания частоты лазерного диода на частоту резонатора с МШГ диаметром 4 мм (ОСД 17.5 ГГц)



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) *a*) Спектр ОЧГ при затыгивании частоты лазерного диода на частоту резонатора диаметром 4 мм с частотным интервалом между линиями в 1 ОСД резонатора. Желтыми кружками отмечены положения линий через ОСД резонатора, синими — линии, выделяющиеся в спектре. *б, в*) Частотные интервалы между контрастными линиями, к которым относятся подавленные моды лазерного диода и линии, выделенные синими кружками в случаях, когда частотное расстояние нормировано на ОСД лазерного диода (*б*) и на ОСД резонатора (*в*)

при возбуждении частотной гребенки сигналы на ее частотах попадают в лазер за счет обратного рассеяния и меняют режим его работы.

Наблюдаемые режимы не реализуются без микрорезонатора. Также эффект наблюдается лишь при высокой добротности — он пропадает при значительном увеличении связи (в случае, когда потери на связь становятся много больше собственных потерь в микрорезонаторе), а также в случае дегра-



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) *а*) Спектр ОЧГ в режиме затягивания частоты лазерного диода на частоту микрорезонатора МШГ диаметром 3 мм. Выделяются два независимых кластера ОЧГ. *б*) Сигнал биений в радиодиапазоне для аналогичного спектра. Частота указана за вычетом частоты ОСД 21.49 ГГц

дации добротности из-за загрязнения, т. е. эффект связан с нелинейными процессами в микрорезонаторе.

Наблюдаемый характер влияния связи двух нелинейных колебательных систем — микрорезонатора и резонатора лазерного диода — на спектры возбуждаемых ОЧГ может быть связан с периодическим совпадением резонансных частот лазера и резонатора (эффект Вернье). Чтобы проверить это предположение, резонатор диаметром 3 мм был заменен на другой высокодобротный резонатор из фторида магния диаметром 4 мм, что соответствует ОСД, равной 17.5 ГГц. Для такого резонатора также была характерна генерация ОЧГ, причем интервал между линиями, кратный ОСД лазера, также наблюдался гораздо чаще, несмотря на то, что 45 ГГц не кратно ОСД резонатора, равной 17.5 ГГц (рис. 4). Это указывает на непосредственное влияние подавленных мод лазерного диода на спектр ОЧГ.

Наименьшее общее кратное 17.5 и 45 будет примерно соответствовать 90, что равно 2 ОСД лазера и 5 ОСД микрорезонатора, т. е. стоит ожидать появления линий с частотным интервалом именно в 5 ОСД микрорезонатора.

На рис. 5а представлен спектр гребенки с частотным расстоянием 1 ОСД резонатора. Низкое разрешение анализатора спектра не позволяет различить отдельные линии. Желтыми кружками отмечены положения линий через 17.5 ГГц, синими — линии, выделяющиеся в спектре. На рис. 5б,в представлены частотные расстояния между контрастными линиями, к которым относятся подавленные мо-

ды лазерного диода и линии, выделенные синими кружками. Видно, что в пределах спектра гребенки частотное расстояние соответствует 2 ОСД лазера и 5 ОСД резонатора. Этот факт показывает влияние подавленных мод лазерного диода на генерацию ОЧГ при затягивании. При различных резонаторах выделены разные частотные интервалы между линиями генерации, одинаково кратные ОСД лазера. Это подтверждает участие в генерации именно подавленных мод лазерного диода.

#### 2.4. Многочастотное затягивание

Отметим, что затягивание на микрорезонатор МШГ в нелинейном режиме может приводить к многочастотному режиму работы лазера, когда возбуждаются подавленные продольные моды диода. При этом эффект возбуждения нескольких мод лазера может быть устойчивым, как в случае рис. 6а, где видны две затянутые линии около 780 нм и 781 нм практически одинаковой мощности. Более того, обе затянутые линии привели к генерации отдельных ОЧГ. Спектр биений линий этих гребенок в радиодиапазоне представлен на рис. 6б. Таким образом, предложенный метод может быть использован для получения двойной частотной гребенки в одном резонаторе, что может стать основой для создания компактных приборов для прецизионной спектроскопии [8, 9].

### 3. ВЫВОДЫ

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования особенности генерации

ОЧГ в высокочастотных МШГ-микрорезонаторах на длине волны 780 нм в области нормальной дисперсии групповых скоростей при накачке лазерным диодом, работающим в режиме затягивания. Показана возможность генерации когерентных платиконных частотных гребенок. Также были выявлены новые режимы генерации ОЧГ, связанные с возбуждением подавленных продольных мод лазерного диода. Было показано, что затягивание приводит к генерации ОЧГ с узкой линией сигнала межмодовых биений, а также к усилению изначально подавленных продольных мод лазерного диода и генерации гибридных лазерно-микрорезонаторных ОЧГ с высокой эффективностью преобразования энергии накачки в энергию генерируемых линий. Этот эффект был продемонстрирован для микрорезонаторов с различным межмодовым расстоянием. Полученные результаты проливают свет на новые аспекты процесса генерации гребенок в режиме затягивания и могут стать важным шагом на пути создания компактных энергоэффективных источников когерентных ОЧГ в области нормальной дисперсии групповых скоростей материалов резонаторов, в том числе в видимом диапазоне.

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-12-01413-П). А. Е. Ш. и В. Е. Л. благодарят за персональную поддержку Фонд развития теоретической физики и математики «Базис».

## ЛИТЕРАТУРА

1. V. B. Braginsky, M. L. Gorodetsky, and V. S. Ilchenko, *Phys. Lett. A* **137**, 393 (1989).
2. D. Strelakov, C. Marquardt, A. Matsko et al., *J. Opt.* **18**, 123002 (2016).
3. P. Del'Haye, A. Schliesser, O. Arcizet et al., *Nature* **450**, 1214 (2007).
4. T. J. Kippenberg, R. Holzwarth, and S. A. Diddams, *Science* **332**, 555 (2011).
5. T. Fortier and E. Baumann, *Comm. Phys.* **2**, 153 (2019).
6. T. J. Kippenberg, A. L. Gaeta, M. Lipson et al., *Science* **361**, 6402 (2018).
7. T. Herr, V. Brasch, J. D. Jost et al., *Science* **2**, 145 (2014).
8. M.-G. Suh, Q.-F. Yang, K. Y. Yang et al., *Science* **354**, 600 (2016).
9. N. G. Pavlov, G. Lihachev, S. Koptyaev et al., *Opt. Lett.* **42**, 514 (2017).
10. E. Obrzud, M. Rainer, A. Harutyunyan et al., *Nature Photon.* **13**, 31 (2019).
11. P. Trocha, M. Karpov, D. Ganin et al., *Science* **359**, 887 (2018).
12. S. Papp, K. Beha, P. Del'Haye et al., *Optica* **1**, 10 (2014).
13. P. Liao, C. Bao, A. Kordts et al., *Opt. Lett.* **43**, 2495 (2018).
14. C. Godey, I. V. Balakireva, A. Coillet et al., *Phys. Rev. A* **89**, 063814 (2014).
15. X. Xue, M. Qi, A. M. Weiner et al., *Nanophotonics* **5**, 244 (2016).
16. S.-W. Huang, H. Liu, J. Yang et al., *Sci. Rep.* **6**, 26255 (2016).
17. S. Fujii and T. Tanabe, *Nanophotonics* **9**, 1087 (2020).
18. W. Liang, A. A. Savchenkov, V. S. Ilchenko et al., *Opt. Lett.* **39**, 2920 (2014).
19. X. Xue, Y. Xuan, Y. Liu et al., *Nature Photon.* **9**, 594 (2015).
20. V. Lobanov, G. Lihachev, T. Kippenberg et al., *Opt. Express* **23**, 7713 (2015).
21. P. Parra-Rivas, E. Knobloch, D. Gomila et al., *Phys. Rev. A* **93**, 063839 (2016).
22. P. Parra-Rivas, D. Gomila, E. Knobloch et al., *Opt. Lett.* **41**, 2402 (2016).
23. X. Xue, P.-H. Wang, Y. Xuan et al., *Laser Photon. Rev.* **11**, 1600276 (2017).
24. B. Y. Kim, Y. Okawachi, J. K. Jang et al., *Opt. Lett.* **44**, 4475 (2019).
25. V. E. Lobanov, A. V. Cherenkov, A. E. Shitikov et al., *Eur. Phys. J. D* **71**, 185 (2017).
26. A. Cherenkov, V. Lobanov, M. Gorodetsky et al., *Phys. Rev. A* **95**, 033810 (2017).
27. V. E. Lobanov, G. Lihachev, M. L. Gorodetsky et al., *Europhys. Lett.* **112**, 54008 (2015).
28. V. E. Lobanov, N. M. Kondratiev, A. E. Shitikov et al., *Phys. Rev. A* **100**, 013807 (2019).
29. H. Liu, S.-W. Huang, J. Yang et al., in *Conference on Lasers and Electro-Optics, OSA Technical Digest (online)*, Opt. Soc. Amer. (2017), paper FTu3D.3.

30. T. Ohta and K. Murakami, *Electron. Comm. Jpn.* **51**, 80 (1968).
31. H.-C. Chang, *IEEE Trans. Microwave Theory Techn.* **51**, 1994 (2003).
32. J. Choi and G. Choi, *IEEE Trans. Electron Devices* **54**, 3430 (2007).
33. М. Ю. Глявин, Г. Г. Денисов, М. Л. Кулыгин, Ю. В. Новожилова, *Письма в ЖТФ* **41**(13), 25 (2015) [*Tech. Phys. Lett.* **41**, 628 (2015)].
34. В. Л. Величанский, А. С. Зибров, В. С. Каргапольцев, *Письма в ЖТФ* **4**, 1087 (1978) [*Sov. Tech. Phys. Lett.* **4**(9), 147 (1978)].
35. R. Lang and K. Kobayashi, *IEEE J. Quant. Electron.* **16**, 147 (1980).
36. Э. М. Беленов, В. Л. Величанский, А. С. Зибров и др., *КЭ* **10**, 1232 (1983) [*Sov. J. Quant. Electr.* **13**, 792 (1983)].
37. E. Patzak, H. Olesen, A. Sugimura et al., *Electron. Lett.* **19**, 938 (1983).
38. B. Dahmani, L. Hollberg, R. Drullinger et al., *Opt. Lett.* **12**, 876 (1987).
39. H. Li and N. Abraham, *IEEE J. Quant. Electr.* **25**, 1782 (1989).
40. A. Hemmerich, D. McIntyre, D. Schropp et al., *Opt. Comm.* **75**, 118 (1990).
41. A. Hemmerich, C. Zimmermann, and T. W. Hänsch, *Appl. Opt.* **33**, 988 (1994).
42. D. Hjelme, A. Mickelson, and R. Beausoleil, *IEEE J. Quant. Electr.* **27**, 352 (1991).
43. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, A. V. Cherenkov et al., *Opt. Express* **25**, 28167 (2017).
44. R. Galiev, N. Kondratiev, V. Lobanov et al., *Phys. Rev. Appl.* **14**, 014036 (2020).
45. V. Braginsky, M. Gorodetsky, and V. Ilchenko, *Phys. Lett. A* **137**, 393 (1989).
46. A. Savchenkov, V. Ilchenko, A. Matsko et al., *Phys. Rev. A* **70**, 051804 (2004).
47. A. E. Shitikov, I. A. Bilenko, N. M. Kondratiev et al., *Optica* **5**, 1525 (2018).
48. M. Gorodetsky, A. Pryamikov, and V. Ilchenko, *J. Opt. Soc. Amer. B* **17**, 1051 (2000).
49. V. Vassiliev, V. Velichansky, V. Ilchenko et al., *Opt. Comm.* **158**, 305 (1998).
50. W. Liang, V. Ilchenko, A. Eliyahu et al., *Nature Comm.* **6**, 7371 (2015).
51. E. Dale, M. Bagheri, A. Matsko et al., *Opt. Lett.* **41**, 5559 (2016).
52. A. Savchenkov, D. Eliyahu, B. Heist et al., *Appl. Opt.* **58**, 2138 (2019).
53. W. Jin, Q.-F. Yang, L. Chang et al., *Nature Photon.* **15**, 346 (2021).
54. P. Donvankar, A. Savchenkov, and A. Matsko, *J. Opt.* **20**, 045801 (2018).
55. R. Galiev, N. Pavlov, N. Kondratiev et al., *Opt. Express* **26**, 30509 (2018).
56. N. G. Pavlov, S. Koptyaev, G. V. Lihachev et al., *Nature Photon.* **12**, 694 (2018).
57. A. A. Savchenkov, S.-W. Chiow, M. Ghasemkhani et al., *Opt. Lett.* **44**, 4175 (2019).
58. A. Raja, A. Voloshin, H. Guo et al., *Nature Comm.* **10**, 680 (2019).
59. S. Boust, H. El Dirani, F. Duport et al., in *2019 International Topical Meeting on Microwave Photonics (MWP)*, ff10.1109/MWP.2019.8892102ff.fhhal-02324813f.
60. T. Briles, J. Stone, S. Papp et al., in *2019 IEEE Avionics and Vehicle Fiber-Optics and Photonics Conference (AVFOP)*, ff10.1109/MWP.2019.8892102ff.fhhal-02324813f.
61. B. Shen, L. Chang, J. Liu et al., *Nature* **582**, 365 (2020).
62. A. S. Voloshin, N. M. Kondratiev, G. V. Lihachev et al., *Nature Comm.* **12**, 235 (2021).
63. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, E. A. Lonshakov et al., *Opt. Express* **28**, 38892 (2020).
64. K. N. Min'kov, G. V. Likhachev, N. G. Pavlov et al., *J. Opt. Technol.* **88**, 348 (2021).

# ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАРЯЖЕННОГО ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ШАРА С ПЛОСКОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ГРАНИЦЕЙ ОДНОРОДНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

*А. В. Филиппов\**

*ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований  
108840, Троицк, Москва, Россия*

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

Поступила в редакцию 18 ноября 2021 г.,  
после переработки 30 ноября 2021 г.  
Принята к публикации 30 ноября 2021 г.

Рассматривается взаимодействие двух заряженных диэлектрических шаров, радиус одного из которых много больше радиуса второго, на малых расстояниях между их поверхностями. Найдены аналитические решения для коэффициентов разложения потенциала для больших мультипольных моментов. Получены точные аналитические выражения для силы взаимодействия в методе разложения потенциала в бисферической системе координат в случае совпадения диэлектрической проницаемости одного из шаров с диэлектрической проницаемостью среды, в которой они находятся. Выполнен переход к случаю бесконечного радиуса шара с диэлектрической проницаемостью, отличной от диэлектрической проницаемости среды. Показано, что эти решения совпадают с известными решениями задач о взаимодействии точечного заряда с диэлектрическим шаром и с плоской заряженной границей диэлектриков. Выполнен переход к бесконечному радиусу одного из шаров в случае, когда диэлектрические проницаемости обоих шаров отличны от диэлектрической проницаемости среды, и найдено аналитическое решение задачи о взаимодействии заряженного диэлектрического шара с плоской заряженной границей однородных диэлектриков.

**DOI:** 10.31857/S0044451022050078  
**EDN:** DSUFFC

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задача об электростатическом взаимодействии заряженных диэлектрических частиц сферической формы, несмотря на давнюю историю, которая начинается с Пуассона (см. работы [1, 2]), Кельвина [3] и Максвелла [4], продолжает привлекать внимание исследователей и появляются все новые работы, посвященные решению различных аспектов и развитию методов решения данной задачи (см. работы [5–11] и цитированную в них литературу). В последние годы появился ряд работ [7, 11–13], в которых изучается взаимодействие заряженных диэлектрических шаров на малых расстояниях между их поверхностями в случае, когда радиус одного из них много больше радиуса второго, включая предель-

ный случай плоской границы между однородными диэлектриками.

Точное описание взаимодействия двух заряженных диэлектрических шаров с сильно различающимися радиусами является актуальной задачей в связи с тем, что такая задача возникает при описании процесса взаимодействия наночастиц со стенкой в технологиях производства наночастиц с уникальными свойствами [14, 15] и в технологии нанесения нанослоев [16], при калибровке атомных силовых микроскопов и при точном выделении ван-дер-ваальсова взаимодействия на малых расстояниях [17–21], при изучении адгезии заряженных частиц тонера к пластине [22], при моделировании процесса удаления мелких пылевых частиц из воздуха [23] и т. д. Эта задача может быть решена с использованием бисферической системы координат, в которой система уравнений для коэффициентов разложения потенциала по мультипольным моментам имеет блочно-диагональный вид и ее численное решение

\* E-mail: fav@triniti.ru

может быть найдено методом матричной прогонки. При этом в случае сильно различающихся радиусов частиц возникает проблема задания значений коэффициентов разложения при больших номерах мультипольного момента, которая вызвана медленным убыванием выражений вида  $\exp\{-(2\ell + 1)\xi_1\}$  (более подробно см. в работе [5]). Здесь  $\ell$  — номер мультипольного момента,  $\xi_1$  — координата поверхности шара большого радиуса в бисферической системе координат, которая является малой величиной при малых расстояниях между поверхностями макрочастиц  $L$ . Например, при радиусе малого шара  $a_2 = 100$  нм, радиусе большого шара  $a_1 = 10^4 a_2$  и  $L = 0.1$  нм имеем  $\xi_1 = 4.473 \cdot 10^{-6}$ , а координата поверхности малого шара равна  $\xi_2 = 4.473 \cdot 10^{-2}$ . Именно на расстояниях  $L = 0.1-1$  нм силы электростатического и ван-дер-ваальсова взаимодействия оказываются сравнимыми друг с другом [18], поэтому эти расстояния и вызывают повышенный интерес.

Настоящая работа посвящена решению задачи о взаимодействии двух заряженных диэлектрических шаров на малых расстояниях между их поверхностями в случае, когда радиус одного из них много больше радиуса второго, включая предельный случай плоской границы между однородными диэлектриками. Для решения задачи используется метод разложения потенциала по полиномам Лежандра (по мультипольным моментам) в бисферической системе координат. Этим же методом данная задача решалась в работах [7, 11], а в работах [12, 13] решалась с использованием разложения в сферической системе координат. В последних работах отмечается трудность решения данной задачи методом разложения в сферической системе координат. Нужно отметить, что во всех этих работах взаимодействие заряженного шара с плоской границей между однородными диэлектриками рассматривалось как взаимодействие заряженного шара с другим шаром заметно большего радиуса (например, в работе [12] радиус большого шара был в 64 раза больше радиуса малого). Трудность решения рассматриваемой задачи связана с тем, что при использовании метода разложения в сферической системе координат для коэффициентов разложения потенциала получается система уравнений с квадратной матрицей, порядок которой для достижения требуемой точности при уменьшении межчастичного расстояния быстро растет, а коэффициенты разложения все медленнее убывают с увеличением номера. При использовании метода разложения в бисферической системе координат система уравнений для коэффициентов разложения потенциала, как уже отмечалось выше,

становится блочно-диагональной, которая при сравнимых размерах шаров успешно решается, например, методом матричной прогонки [5]. Но при сильно различающихся размерах и здесь, как будет показано ниже, возникают проблемы, которые остались незамеченными в работах [7, 11].

## 2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ДВУХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ШАРОВ С СИЛЬНО РАЗЛИЧАЮЩИМИСЯ РАДИУСАМИ

### 2.1. Взаимодействие точечного заряда с диэлектрическим заряженным шаром и плоской границей диэлектриков

Сначала приведем хорошо известные решения задачи о взаимодействии точечного заряда с диэлектрическим заряженным шаром и плоской границей диэлектриков (см. [24, 25]), которые в настоящей работе будут использованы для проверки получаемых результатов. Сила взаимодействия точечного заряда с диэлектрическим заряженным шаром, которая может быть найдена методом разложения по мультипольным моментам с использованием сферических координат или методом изображений (см. [24, 25]), описывается выражением (в настоящей работе приводится сила, действующая на первую частицу, которая положительна в случае отталкивания и отрицательна в случае притяжения; в случае отсутствия внешнего электрического поля эта сила равна по абсолютной величине силе, действующей на вторую частицу)

$$F_{ps} = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon R^2} - \frac{q_2^2}{\varepsilon R^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{\varepsilon_1 n + \varepsilon(n+1)} \left(\frac{a_1}{R}\right)^{2n+1}, \quad (1)$$

где  $a_1, a_2, q_1, q_2, \varepsilon_1, \varepsilon_2$  — соответственно радиусы, заряды и диэлектрические проницаемости частиц,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды,  $R$  — расстояние между центрами частиц. При больших  $a_1$  и, соответственно,  $R$  их отношение стремится к единице:  $a_1/R \rightarrow 1$ , и ряд (1) медленно сходится. Поэтому преобразуем сумму в выражении (1), выделив в коэффициенте перед  $(a_1/R)^{2n+1}$  постоянную и линейную по  $n$  составляющие. Выделенные члены (члены со знаком минус в определении  $f_n$  ниже) просто суммируются (как геометрическая прогрессия и ее производная) и в итоге получим



$$F_{ps} = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon R^2} - \frac{q_2^2}{\varepsilon} \left(\frac{a_1}{R}\right)^3 \frac{1}{R^2 - a_1^2} \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \times \left[ \frac{R^2}{R^2 - a_1^2} (\varepsilon_1 - \varepsilon) + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \right] - \delta f_{ps}, \quad (2)$$

где поправка  $\delta f_{ps}$  определена выражением

$$\delta f_{ps} = \frac{q_2^2}{\varepsilon R^2} \sum_{n=1}^{\infty} f_n \left(\frac{a_1}{R}\right)^{2n+1}, \quad (3)$$

$$f_n = \frac{n(n+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{\varepsilon_1 n + \varepsilon(n+1)} - \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \left[ (\varepsilon_1 - \varepsilon)n + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \right].$$

Когда  $a_1 \rightarrow \infty$ ,  $R \rightarrow \infty$ ,  $a_1/R \rightarrow 1$ , но при этом остается конечной величина  $R - a_1 = L + a_2$  (в наших обозначениях), поправка  $\delta f_{ps}$  обращается в нуль. Также исчезающе малым по сравнению с первым становится второй член в квадратных скобках в выражении (2) (как  $2L/a_1$ ) и для силы взаимодействия точечного заряда с заряженной плоской границей диэлектриков получается выражение (см. [24], задача 144)

$$F_{pp} = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\varepsilon} - \frac{q_2^2}{4\varepsilon(L + a_2)^2} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + \varepsilon}, \quad (4)$$

где  $\sigma_1$  — плотность поверхностного свободного заряда. Прделанный переход к случаю  $a_1 \rightarrow \infty$  показывает сложность этого перехода в общем случае, когда аналитическое выражение для вычисления силы отсутствует, а члены ряда (1) с ростом номера растут пропорционально номеру и при строгом равенстве  $a_1/R = 1$  этот ряд вообще расходится.

### 2.2. Решение методом разложения в бисферической системе координат

Переход к пределу  $a_1 \rightarrow \infty$  при конечных  $L = R - a_1 - a_2$  и  $\sigma_1 = q_1/(4\pi a_1^2)$  в сферической системе координат затруднен (см., например, [12, 13]), поэтому рассмотрим задачу с использованием бисферической системы координат [5]. Здесь не будем приводить общее решение задачи, которое представлено, например, в работе [5], а запишем окончательные уравнения для определения коэффициентов мультипольного разложения потенциала по полиномам Лежандра.

Геометрия рассматриваемой задачи приведена на рис. 1. Две сферические частицы с радиусами  $a_1$ ,  $a_2$ , зарядами  $q_1$ ,  $q_2$  и диэлектрическими постоянными  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  помещены в однородный диэлектрик проницаемостью  $\varepsilon$  и в однородное до введения частиц внешнее электрическое поле  $E_0$ . Введем декартову

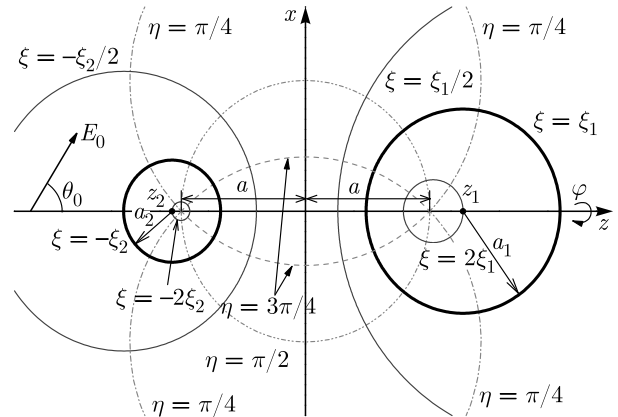


Рис. 1. Геометрия взаимодействия двух макрочастиц радиусами  $a_1$  и  $a_2$  в бисферической системе координат  $(\xi, \eta, \varphi)$

систему координат так, чтобы вектор напряженности внешнего поля лежал в плоскости  $xz$ , а ось  $z$  была направлена вдоль линии, соединяющей центры частиц (см. рис. 1).

Далее введем бисферические координаты (см. [24, 26] и рис. 1):

$$x = \frac{a \sin \eta \cos \varphi}{\operatorname{ch} \xi - \cos \eta}, \quad y = \frac{a \sin \eta \sin \varphi}{\operatorname{ch} \xi - \cos \eta}, \quad (5)$$

$$z = \frac{a \operatorname{sh} \xi}{\operatorname{ch} \xi - \cos \eta}.$$

В бисферических координатах поверхности макрочастиц определяются соотношениями  $\xi = \xi_1$ ,  $\xi = -\xi_2$ , где

$$\operatorname{ch} \xi_1 = \frac{R^2 + a_1^2 - a_2^2}{2Ra_1}, \quad \operatorname{ch} \xi_2 = \frac{R^2 + a_2^2 - a_1^2}{2Ra_2}, \quad (6)$$

$R$  — расстояние между центрами макрочастиц,  $a$  — параметр, определенный выражением  $a = a_1 \operatorname{sh} \xi_1 = a_2 \operatorname{sh} \xi_2$ .

Электростатическое взаимодействие частиц в однородном диэлектрике определяется уравнением Лапласа  $\Delta\phi = 0$ , которое в бисферических координатах может быть решено методом разделения переменных введением новой величины

$$\phi(\xi, \eta, \varphi) = \psi(\xi, \eta, \varphi) \sqrt{\operatorname{ch} \xi - \cos \eta}. \quad (7)$$

Здесь  $\phi$  — потенциал электростатического поля.

Рассматриваем аксиально-симметричную задачу. В этом случае решение для потенциала в однородной диэлектрической среде (вакууме) в области вне частиц определяется выражением [24]

$$\phi(\xi, \eta) = \sqrt{\operatorname{ch} \xi - \cos \eta} \times \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[ C_\ell e^{-(\ell+1/2)\xi} + D_\ell e^{(\ell+1/2)\xi} \right] P_\ell(\cos \eta), \quad (8)$$

$C_\ell, D_\ell$  — искомые коэффициенты разложения,  $P_\ell$  — полиномы Лежандра.

Из граничных условий непрерывности потенциала и разрыва нормальных составляющих вектора электрической индукции для нахождения коэффициентов разложения (8) при однородном распределении свободных зарядов по поверхностям частиц для аксиально-симметричной задачи получим уравнения [5]

$$A_\ell \mathbf{y}_{\ell-1} + C_\ell \mathbf{y}_\ell + B_\ell \mathbf{y}_{\ell+1} = \mathbf{F}_\ell, \quad \ell = 0, 1, \dots, \infty, \quad (9)$$

где вектор неизвестных  $\mathbf{y}_\ell = (C_\ell, D_\ell)^T$ , а матрицы  $A_\ell, B_\ell, C_\ell$  и столбец  $\mathbf{F}_\ell$  определены соотношениями

$$A_\ell = -\ell \times \begin{pmatrix} \tau_1 e^{-(\ell-1/2)\xi_1} & e^{(\ell-1/2)\xi_1} \\ e^{(\ell-1/2)\xi_2} & \tau_2 e^{-(\ell-1/2)\xi_2} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} (C_\ell)_{11} &= \tau_1 [-\text{sh } \xi_1 + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_1] e^{-(\ell+1/2)\xi_1}, \\ (C_\ell)_{12} &= [-\tau_1 \text{sh } \xi_1 + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_1] e^{(\ell+1/2)\xi_1}, \\ (C_\ell)_{21} &= [-\tau_2 \text{sh } \xi_2 + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_2] e^{(\ell+1/2)\xi_2}, \\ (C_\ell)_{22} &= \tau_2 [-\text{sh } \xi_2 + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_2] e^{-(\ell+1/2)\xi_2}; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} B_\ell &= \\ &= -(\ell+1) \times \begin{pmatrix} \tau_1 e^{-(\ell+3/2)\xi_1} & e^{(\ell+3/2)\xi_1} \\ e^{(\ell+3/2)\xi_2} & \tau_2 e^{-(\ell+3/2)\xi_2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_\ell)_1 &= 2\sqrt{2}a \left\{ \frac{4\pi\sigma_1}{\varepsilon + \varepsilon_1} - \right. \\ &\quad \left. - \tau_1 E_0 [\text{ch } \xi_1 - (2\ell + 1) \text{sh } \xi_1] \right\} e^{-(\ell+1/2)\xi_1}, \\ (\mathbf{F}_\ell)_2 &= 2\sqrt{2}a \left\{ \frac{4\pi\sigma_2}{\varepsilon + \varepsilon_2} + \right. \\ &\quad \left. + \tau_2 E_0 [\text{ch } \xi_2 - (2\ell + 1) \text{sh } \xi_2] \right\} e^{-(\ell+1/2)\xi_2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь  $\sigma_1, \sigma_2$  — плотности свободных зарядов на поверхностях частиц;  $\sigma_i = q_i/4\pi a_i^2$ ,  $i = 1, 2$ ; величины  $\tau_1$  и  $\tau_2$  определены соотношениями

$$\tau_1 = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + \varepsilon}, \quad \tau_2 = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{\varepsilon_2 + \varepsilon}. \quad (14)$$

Далее для упрощения выкладок рассмотрим случай без внешнего электрического поля, учет которого не сильно изменит следующие ниже выкладки. В этом случае система уравнений (9) принимает вид ( $\ell = 0, 1, \dots, \infty$ )

$$\begin{aligned} &- \ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + [-\tau_1 \text{sh } \xi_1 + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_1] D_\ell - \\ &- (\ell + 1) e^{\xi_1} D_{\ell+1} = \frac{2\sqrt{2} \text{sh } \xi_1}{\varepsilon + \varepsilon_1} \frac{q_1}{a_1} e^{-(2\ell+1)\xi_1} + \\ &+ \tau_1 \{ \ell e^{\xi_1} C_{\ell-1} + [\text{sh } \xi_1 - (2\ell + 1) \text{ch } \xi_1] C_\ell + \\ &+ (\ell + 1) e^{-\xi_1} C_{\ell+1} \} e^{-(2\ell+1)\xi_1}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} &- \ell e^{-\xi_2} C_{\ell-1} + [-\tau_2 \text{sh } \xi_2 + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_2] C_\ell - \\ &- (\ell + 1) e^{\xi_2} C_{\ell+1} = \frac{2\sqrt{2} \text{sh } \xi_2}{\varepsilon + \varepsilon_2} \frac{q_2}{a_2} e^{-(2\ell+1)\xi_2} + \\ &+ \tau_2 \{ \ell e^{\xi_2} D_{\ell-1} + [\text{sh } \xi_2 - (2\ell + 1) \text{ch } \xi_2] D_\ell + \\ &+ (\ell + 1) e^{-\xi_2} D_{\ell+1} \} e^{-(2\ell+1)\xi_2}. \end{aligned} \quad (16)$$

Выражение для силы в случае аксиально-симметричной задачи имеет вид [5]

$$F_{1z} = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{\ell=0}^{\infty} D_\ell [(2\ell + 1) C_\ell - \ell C_{\ell-1} - (\ell + 1) C_{\ell+1}]. \quad (17)$$

Обратим внимание, что внешнее поле явно не входит в выражение для определения силы, входит только через коэффициенты разложения потенциала.

Далее рассмотрим сначала простые случаи.

### 2.2.1. Случай $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$

В этом случае  $\tau_1 = \tau_2 = 0$  и из (15), (16) вытекают уравнения

$$\begin{aligned} &- \ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_1 D_\ell - (\ell + 1) e^{\xi_1} D_{\ell+1} = \\ &= \frac{4\pi\sqrt{2}a_1\sigma_1}{\varepsilon} \text{sh } \xi_1 e^{-(2\ell+1)\xi_1}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} &- \ell e^{-\xi_2} C_{\ell-1} + (2\ell + 1) \text{ch } \xi_2 C_\ell - (\ell + 1) e^{\xi_2} C_{\ell+1} = \\ &= \frac{4\pi\sqrt{2}a_2\sigma_2}{\varepsilon} \text{sh } \xi_2 e^{-(2\ell+1)\xi_2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Решение уравнений (18) и (19) имеет вид

$$\begin{aligned} C_\ell &= \frac{4\pi\sqrt{2}a_2\sigma_2}{\varepsilon} e^{-(2\ell+1)\xi_2}, \\ D_\ell &= \frac{4\pi\sqrt{2}a_1\sigma_1}{\varepsilon} e^{-(2\ell+1)\xi_1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Суммы, входящие в выражение для силы (17) с коэффициентами (20), легко находятся и для силы взаимодействия имеем

$$F_{1z} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{q_1 q_2}{a_1 a_2} \frac{\text{sh } \xi_1 \text{sh } \xi_2}{\text{sh}^2(\xi_1 + \xi_2)}. \quad (21)$$

Используя следующие соотношения, связывающие бисферические координаты с радиусами частиц и расстояниями между их центрами (см. [27, 28]):

$$\begin{aligned} \operatorname{ch} \xi_1 &= \frac{z_1}{a_1}, & \operatorname{ch} \xi_2 &= \frac{z_2}{a_2}, & \operatorname{sh} \xi_1 &= \frac{a}{a_1}, \\ \operatorname{sh} \xi_2 &= \frac{a}{a_2}, \\ \operatorname{sh}(\xi_1 + \xi_2) &= \frac{R}{a_2} \operatorname{sh} \xi_1 = \frac{R}{a_1} \operatorname{sh} \xi_2, \\ z_1 + z_2 &= R, \end{aligned} \quad (22)$$

из (21) легко получается закон Кулона:

$$F_C = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon R}. \quad (23)$$

### 2.2.2. Случай $\varepsilon_2 = \varepsilon$

В этом случае только  $\tau_2 = 0$  и из уравнения (16) для  $C_\ell$  получаем уравнение (19), решением которого является первое выражение (20). Подставим это решение в уравнение (15) и для  $D_\ell$  получим уравнение

$$\begin{aligned} -\ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + [-\tau_1 \operatorname{sh} \xi_1 + (2\ell + 1) \operatorname{ch} \xi_1] D_\ell - \\ - (\ell + 1) e^{\xi_1} D_{\ell+1} &= \frac{2\sqrt{2}q_1}{a_1(\varepsilon + \varepsilon_1)} \operatorname{sh} \xi_1 e^{-(2\ell+1)\xi_1} - \\ - \frac{2\sqrt{2}q_2}{a_2(\varepsilon + \varepsilon_2)} \tau_1 e^{-(2\ell+1)(\xi_1 + \xi_2)} [\ell e^{\xi_1 + 2\xi_2} + \\ + \operatorname{sh} \xi_1 - (2\ell + 1) \operatorname{ch} \xi_1 - (\ell + 1) e^{-(\xi_1 + 2\xi_2)}]. \end{aligned} \quad (24)$$

Это уравнение при достаточно больших  $\ell > \ell_{min}$  приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} \ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + [-\tau_1 \operatorname{sh} \xi_1 + (2\ell + 1) \operatorname{ch} \xi_1] D_\ell - \\ - (\ell + 1) e^{\xi_1} D_{\ell+1} &= \frac{2\sqrt{2}q_1}{a_1(\varepsilon + \varepsilon_1)} \operatorname{sh} \xi_1 e^{-(2\ell+1)\xi_1}. \end{aligned} \quad (25)$$

Значение  $\ell_{min}$  определяет точность вычисления силы взаимодействия. В настоящей работе значение  $\ell_{min}$  определялось из выражения

$$\ell_{min} \approx -\frac{1}{2} \frac{\ln \delta}{\xi_1 + \xi_2}. \quad (26)$$

В расчетах задавалось  $\delta = 10^{-31}$ , следовательно, отбрасываемые члены в выражении (24) будут величинами именно такого порядка или меньше. При этом точность вычисления силы будет не такой высокой, но число учитываемых членов разложения потенциала в расчетах будет достаточной, чтобы при суммировании ряда для определения силы получить хорошую точность до 11–13 знаков. Конечно, такая высокая точность обычно не требуется, но для сравнения точности вычисления силы разными методами и в различных приближениях она бывает необходима.

Решение уравнения (25) будем искать в виде  $D_\ell = \alpha \exp\{-(2\ell + 1)\xi_1\}$ , где  $\alpha$  — независимая от  $\ell$  величина. В итоге получаем решение, совпадающее со вторым выражением (20). Соответственно, в случае  $\varepsilon_2 = \varepsilon$  на больших расстояниях сила определяется выражением (21), что говорит о выходе силы на больших расстояниях на кулоновскую асимптотику.

### 2.2.3. Общий случай $\varepsilon_2 \neq \varepsilon$ , $\varepsilon_1 \neq \varepsilon$

Из решения (20) видно, что множителями при  $\tau_1$  и  $\tau_2$  в конце уравнений (15) и (16) при сравнимых радиусах частиц и, соответственно, сравнимых  $\xi_1$  и  $\xi_2$  при достаточно больших  $\ell > \ell_{min}$  можно пренебречь, поскольку они убывают как  $\exp\{-(2\ell + 1)(\xi_1 + \xi_2)\}$  и решение при больших  $\ell > \ell_{min}$  будет тем же самым. В работе [5] система уравнений (15), (16) решалась методом матричной прогонки с использованием нулевых значений коэффициентов  $C_\ell$  и  $D_\ell$  в качестве граничных значений при  $\ell = \ell_{min}$ , что, как видно из (20), оправдано при сравнимых радиусах частиц. Отметим, что нулевые граничные значения можно использовать при достаточно больших  $\ell \gtrsim \ell_{max}$ , где число  $\ell_{max}$  определено соотношением

$$\ell_{max} \approx -\frac{1}{2} \ln \left( \frac{\delta}{\xi_{min}} \right), \quad \xi_{min} = \min\{\xi_1, \xi_2\}. \quad (27)$$

Для упомянутых выше радиусов малого шара  $a_2 = 100$  нм и большого  $a_1 = 10^4 a_2$  при  $L = 0.1$  нм и  $\delta = 10^{-31}$  из (27) находим, что  $\ell_{max} \approx 7.98 \cdot 10^6$ , в то время как (26) дает на четыре порядка меньшее число:  $\ell_{min} \approx 798$ .

В настоящей работе решение системы уравнений для коэффициентов разложения методом матричной прогонки проводилось со значениями коэффициентов  $C_\ell$  и  $D_\ell$  при  $\ell = \ell_{min}$ , задаваемых выражениями (20). В случае сильно различающихся радиусов частиц при малых расстояниях между поверхностями частиц, как уже отмечалось во Введении, координата поверхности большей частицы оказывается малой величиной и коэффициенты разложения, «связанные» с ней, медленно убывают. Поэтому задание нулевого граничного значения при  $\ell = \ell_{min}$  для него приводит к значительной ошибке в определении силы, а при задании граничного значения  $D_\ell$  при  $\ell = \ell_{max}$  блочно-диагональная система становится чрезвычайно большой и появляются сложности при ее точном решении.

**2.3. Переход к пределу  $a_1 \rightarrow \infty$**

Из определения координат поверхностей частиц в бисферической системе координат (6) следует, что

$$\lim_{a_1 \rightarrow \infty} \xi_1 = 0, \quad \lim_{a_1 \rightarrow \infty} \operatorname{ch} \xi_2 = 1 + \frac{L}{a_2}. \quad (28)$$

При этом произведение  $a_1 \operatorname{sh} \xi_1 = a_2 \operatorname{sh} \xi_2 \equiv a$  остается конечной величиной, что учитывается в выкладках ниже.

При выполнении условия  $\ell > \ell_{min}$  решением уравнений (15) и (16) будет (20). Из первого выражения (20) в пределе  $a_1 \rightarrow \infty$  для  $D_\ell$  можно получить

$$D_\ell^0 = \lim_{a_1 \rightarrow \infty} D_\ell = \frac{4\pi\sqrt{2}}{\varepsilon} \sigma_1 [a_1 - (2\ell + 1)a]. \quad (29)$$

Поэтому введем новые коэффициенты

$$d_\ell = D_\ell - D_\ell^0, \quad (30)$$

подставим в уравнение (15) и после несложных преобразований в пределе  $a_1 \rightarrow \infty$  найдем, что

$$\begin{aligned} -\ell d_{\ell-1} + (2\ell + 1)d_\ell - (\ell + 1)d_{\ell+1} = \\ = \tau_1 [\ell C_{\ell-1} - (2\ell + 1)C_\ell + (\ell + 1)C_{\ell+1}]. \end{aligned} \quad (31)$$

Из (31) следует, что коэффициенты  $\tau_1 C_\ell$  и  $d_\ell$  различаются только на постоянную (не зависящую от  $\ell$ ) величину, которая из вида решений (20) при  $\ell > \ell_{min}$  должна быть положена равной нулю, поэтому имеем равенство

$$d_\ell = -\tau_1 C_\ell. \quad (32)$$

Подставим  $D_\ell$  из (30) с решением (32) в уравнение (16):

$$\begin{aligned} -\ell e^{-\xi_2} (1 - \beta_{\ell-1}) C_{\ell-1} + \{(1 - \tau_2) \operatorname{sh} \xi_2 + \\ + (1 - \beta_\ell) [(2\ell + 1) \operatorname{ch} \xi_2 - \operatorname{sh} \xi_2]\} C_\ell - \\ - (\ell + 1) e^{\xi_2} (1 - \beta_{\ell+1}) C_{\ell+1} = \\ = e^{-(2\ell+1)\xi_2} \{ \alpha_1 \operatorname{sh} \xi_2 + 2\alpha_2 \tau_2 \operatorname{sh} \xi_2 \times \\ \times [(2\ell + 1) \operatorname{sh} \xi_2 - \operatorname{ch} \xi_2] \}, \end{aligned} \quad (33)$$

здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} \beta_\ell = \tau_1 \tau_2 e^{-(2\ell+1)\xi_2}, \quad \alpha_1 = \frac{2\sqrt{2}}{\varepsilon + \varepsilon_2} \frac{q_2}{a_2}, \\ \alpha_2 = \frac{4\pi\sqrt{2}}{\varepsilon} a_2 \sigma_1. \end{aligned}$$

Мы получили для нахождения коэффициентов систему с трехдиагональной матрицей, которая может быть успешно решена методом простой прогонки.

Найдем решение уравнения (32) для больших  $\ell$ , когда становятся пренебрежимо малыми  $\beta_\ell$  и ими можно пренебречь. Решение будем искать в виде

$$C_\ell = (\alpha + \beta \ell) e^{-(2\ell+1)\xi_2},$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — независимые от  $\ell$  величины. В итоге находим следующее решение уравнения (32):

$$C_\ell = \left\{ \frac{\sqrt{2}q_2}{\varepsilon a_2} + \alpha_2 \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{2\varepsilon + \varepsilon_2} [(2\ell + 1) \operatorname{sh} \xi_2 - \operatorname{ch} \xi_2] \right\} \times e^{-(2\ell+1)\xi_2}. \quad (34)$$

Появление дополнительного члена в выражении (34) по сравнению с (20) связано с тем, что при  $a_1 \gg \gg a_2$  величина  $\exp\{-2(\ell+1)\xi_1\}$  практически не убывает (в пределе  $a_1 \rightarrow \infty$ , который мы здесь рассматриваем, она равна единице).

Отметим, что в рассматриваемом случае сила через коэффициенты  $d_\ell$  определяется выражением

$$F_{z\infty} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell [-\ell d_{\ell-1} + (2\ell + 1)d_\ell - (\ell + 1)d_{\ell+1} + \alpha_2 \operatorname{sh} \xi_2]. \quad (35)$$

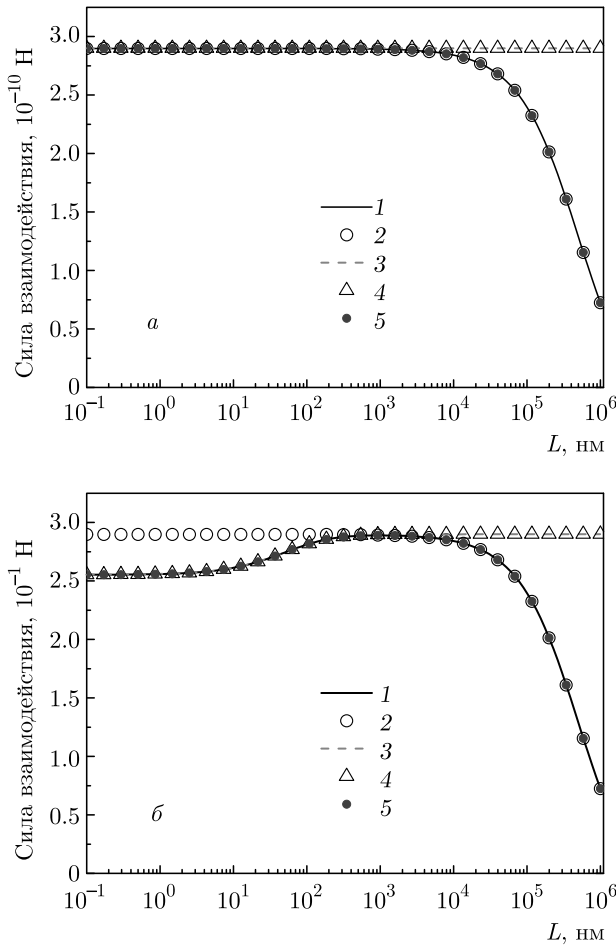
Используя приближенное решение (34), из (35) находим

$$F_{z\infty}^a = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon a_2^2 \operatorname{ch}^2 \xi_2} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon + \varepsilon_1} \left[ \frac{q_2^2}{4} - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{2\varepsilon + \varepsilon_2} \frac{2\pi q_2 \sigma_1 a_2^2}{\operatorname{ch} \xi_2} + \left( \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{2\varepsilon + \varepsilon_2} \right)^2 \frac{6\pi^2 \sigma_1^2 a_2^4}{\operatorname{ch}^2 \xi_2} \right]. \quad (36)$$

Подставив вместо  $\operatorname{ch} \xi_2$  его значение (28), из (36) легко получим выражение

$$F_{z\infty}^a = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon + \varepsilon_1} \frac{1}{(L + a_2)^2} \frac{q_2^2}{4\varepsilon} + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon + \varepsilon_1} \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{2\varepsilon + \varepsilon_2} \frac{2\pi\sigma_1 a_2^3}{\varepsilon(L + a_2)^3} \times \left[ q_2 - \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{2\varepsilon + \varepsilon_2} \frac{3\pi a_2^3 \sigma_1}{L + a_2} \right]. \quad (37)$$

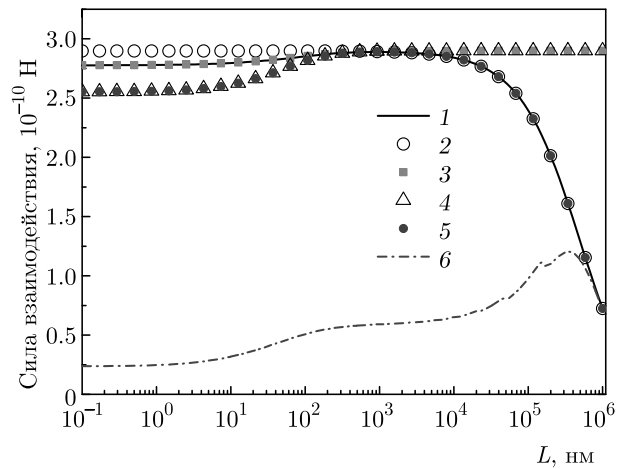
Верхняя строка в этом выражении совпадает с выражением для силы взаимодействия точечного заряда с заряженной плоской границей (см. выражение (4)), которое автоматически получается при  $\varepsilon_2 = \varepsilon$ . А при  $\varepsilon_1 = \varepsilon$  остается только первый член вне зависимости от значения  $\varepsilon_2$ , поскольку в этом случае заряд на поверхности диэлектрика не поляризуется и однородное распределение свободного заряда создает однородное же электрическое поле. Под действием этого поля на второй частице наводится дипольный момент, сила взаимодействия которого с однородным полем равна нулю.



**Рис. 2.** Зависимости силы взаимодействия частиц от расстояния между их поверхностями: а)  $\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 4$ , б)  $\epsilon_1 = 4, \epsilon_2 = 1$ . Кривая 1 — из (17) при  $a_1 = 10^4 a_2$ , 2 — сила взаимодействия точечных зарядов (23), 3 — из (35) при  $a_1 = \infty$ , 4 — сила взаимодействия точечного заряда с плоской заряженной границей диэлектриков (4), 5 — сила взаимодействия точечного заряда с шаром (1)

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Основные расчеты в настоящей работе проведены для следующих параметров: радиус малой частицы  $a_2 = 100$  нм, радиус крупной —  $a_1 = 10^4 a_2$ , для крупной частицы задается однородная плотность поверхностного свободного заряда  $\sigma_1 = 10^{-3} e/\text{нм}^2$  (при такой плотности свободного заряда при  $a_1 = a_2$  заряд первой частицы будет  $q_1 \approx 125.6e$ ), заряд малой частицы  $q_2 = 100e$ , их диэлектрические проницаемости, если не оговорено иное,  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 4$ , диэлектрическая проницаемость среды (вакуума)  $\epsilon = 1$ , расстояние между поверхностями частиц менялась от 0.1 нм до 1 см.



**Рис. 3.** Зависимости силы взаимодействия частиц от расстояния между их поверхностями при  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 4$ . Кривая 1 — из (17) при  $a_1 = 10^4 a_2$ , 2 — сила взаимодействия точечных зарядов (23), 3 — из (35) при  $a_1 = \infty$ , 4 — сила взаимодействия точечного заряда с плоской заряженной границей диэлектриков из (4), 5 — сила взаимодействия точечного заряда с шаром (1), 6 — из (17) при  $a_1 = 10^4 a_2$  и  $C_{\ell_{min}} = D_{\ell_{min}} = 0$ , 7 — из (17) при  $a_1 = 10^4 a_2$  и  $C_{\ell_{min}} = 0, D_{\ell_{min}}$  из (20)

В таблице приведены значения силы взаимодействия частиц при  $L = 0.1$  нм, а на рис. 2 и 3 — зависимости силы взаимодействия от расстояния между поверхностями частиц, рассчитанные для различных параметров и в различных приближениях. Из первого ряда таблицы видно, что конечный размер второй частицы (или учет ее поляризуемости) оказывает заметное влияние на силу взаимодействия (отличие значений как  $F_{1z}$  и  $F_{ps}$ , друг от друга, так и  $F_{z\infty}$  и  $F_{pp}$  составляет почти 8%). В то же время различие между  $F_{1z}$  при  $a_1 = 10^4 a_2$  и  $F_{z\infty}$  при  $a_1 = \infty$  проявляется только в третьем знаке после десятичной точки и относительное их отличие составляет величину порядка 0.03%. Такого же порядка относительное отличие имеет место для сил взаимодействия точечного заряда со сферой радиусом  $a_1 = 1$  мм и точечного заряда с плоской границей диэлектриков. Это отличие связано с тем, что для двух шаров основной составляющей силы является кулоновская зависимость (23), а при  $a_1 = \infty$  величина

$$F_{C\infty} = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\epsilon}. \tag{38}$$

Сила Кулона при  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 4$  для двух шаров при  $a_1 = 10a_2$  составляет  $F_C = 2.89857829708 \cdot 10^{-10}$  Н, а для сферы и плоской границы —  $F_{C\infty} = 2.89915862150 \cdot 10^{-10}$  Н. Отличие между ними при  $L \ll a_2$  составляет величину порядка

**Таблица.** Сила взаимодействия частиц (в  $10^{-10}$  Н) при  $L = 0.1$  нм,  $a_2 = 100$  нм, вычисленная с  $\ell_{min} = 1081$

	$a_1 = 1$ мм		$a_1 = \infty$	
	$F_{1z}$ из (17)	$F_{ps}$ из (1)	$F_{z\infty}$ из (35)	$F_{pp}$ из (4)
$\varepsilon_1 = 4, \varepsilon_2 = 4$	2.77719582129	2.55322165285	2.77812264405	2.55378813877
$C_\ell = D_\ell = 0$ при $\ell = \ell_{min}$	0.23691354841	–	–	–
$C_\ell = 0$ при $\ell = \ell_{min}$	2.77719582129	–	–	–
$\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 4$	2.89821402039	2.89818502941	2.89915862150	2.89915862150
$\varepsilon_1 = 4, \varepsilon_2 = 1$	2.55322151314	2.55322165285	2.55378813877	2.55378813877
$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$	2.89857815821	2.89857829708	2.89915862150	2.89915862150

$$\frac{F_{C\infty}}{F_C} = \left( \frac{L + a_1 + a_2}{a_1} \right)^2 \approx 1 + \frac{2a_2}{a_1},$$

т. е. отличие составляет 0.02 %.

При задании нулевых значений для коэффициентов разложения потенциала  $C_\ell = D_\ell = 0$  при  $\ell = \ell_{min}$ , как видно из таблицы, сила взаимодействия оказывается на порядок меньше, чем при задании асимптотических значений этих коэффициентов из (20). В то же время, если задавать нулевое значение только для  $C_\ell$ , то для силы взаимодействия получается не отличающаяся в 11 десятичных знаках величина.

При задании  $\varepsilon_1 = 1$  первая частица (или плоская граница) не поляризуется, поэтому она выступает как точечная частица (или только создает однородное электрическое поле). В этом случае учет размера второй частицы при  $a_1 = 10^4 a_2$  приводит к незначительному изменению силы взаимодействия (в четвертом знаке после десятичной точки), причем сила оказывается больше при  $a_2 = 0$ . В то же время при  $a_1 = \infty$  значения силы совпадают в обоих случаях: как при конечном  $a_2$ , так и при точечном заряде  $a_2 = 0$ , причина чего отмечалась в конце разд. 2.3.

В случае  $\varepsilon_2 = 1$  вторая частица выступает как точечная частица в том смысле, что распределение поля вне второй частицы точно совпадает с полем точечного заряда  $q_2$ , помещенного в ее центр. В этом случае должны совпадать значения силы как при  $a_1 = 10^4 a_2$ , рассчитанные из (1) и (17), так и при  $a_1 = \infty$ , рассчитанные из (4) и (35). Из таблицы видно, что значения силы совпадают с высокой точностью при  $a_1 = \infty$ , а при  $a_1 = 10^4 a_2$  отличие появляется в седьмом знаке после десятичной точки, что позволяет судить о точности решения блочно-диагональной системы (15), (16) методом матричной прогонки и точности вычисления силы взаимодей-

ствия. Отметим, что при сравнимых радиусах частиц, как было показано в работе [5], этот метод оказывается значительно точнее.

При увеличении расстояния между поверхностями частиц  $L$  отмеченные в таблице особенности сохраняются, что хорошо видно из рис. 2 и 3. Из рис. 2а видно, что при  $\varepsilon_1 = \varepsilon$  в случае  $a_1 = \infty$  сила взаимодействия остается постоянной при всех  $L$ , а при  $a_1 = 10^4 a_2$  на всех расстояниях совпадает с кулоновской зависимостью. При  $\varepsilon_2 = \varepsilon$  на малых расстояниях значения силы как при  $a_1 = \infty$ , так и при  $a_1 = 10^4 a_2$  оказываются близкими и заметно отличными от кулоновской силы. При больших  $L, L \gg a_2$ , сила  $F_{z\infty}$  принимает постоянное значение, так как эффект от поляризации поверхностного заряда на плоской границе точечным зарядом становится пренебрежимо малым, а сила  $F_{1z}$  при  $L \gg a_2$  выходит на кулоновскую асимптотику по той же причине.

Из рис. 3 видно, что учет поляризации обеих частиц приводит к отличию значений силы от силы взаимодействия в случае, когда одна из частиц является точечным зарядом. Это отличие по мере увеличения  $L$  постепенно уменьшается и становится пренебрежимо малым при  $L \gg a_2$ . На больших расстояниях сила взаимодействия хорошо описывается выражением (1) в случае конечного радиуса  $a_1$  и выражением (4) в случае плоской границы. Из рис. 3 видно также, к какой ошибке приводит решение системы (15), (16) с нулевыми значениями коэффициентов разложения потенциала при  $\ell = \ell_{min}$ .

На рис. 4 проводится сравнение решений системы (15), (16) методом матричной прогонки при различных радиусах большей частицы и уравнения (33) методом простой прогонки при  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 4$  и  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 80$ . Видно, что различие этих решений на малых расстояниях становится заметным при  $a_1 = 100 a_2$  и отклонения растут по мере уменьшения

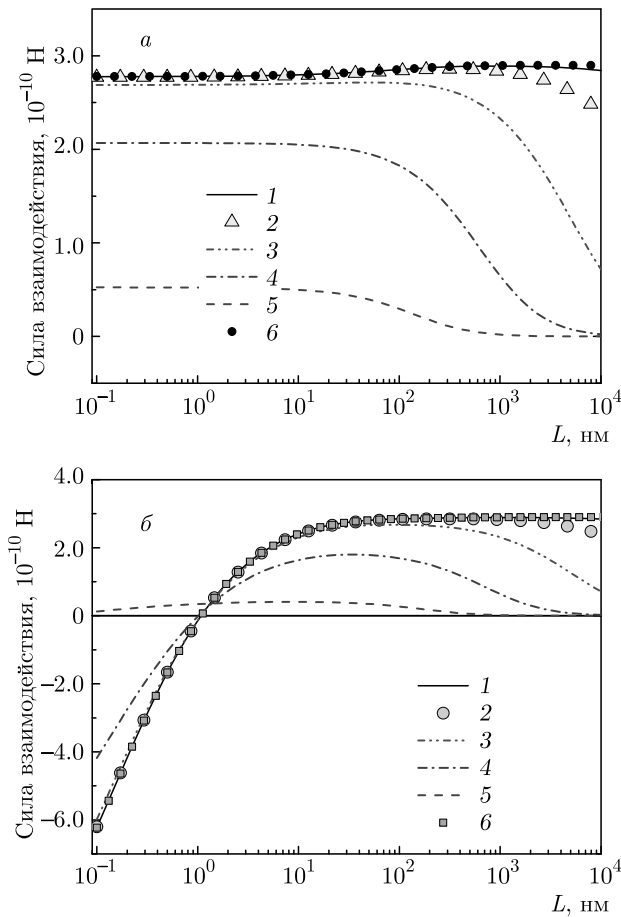


Рис. 4. Сила взаимодействия как функция расстояния между поверхностями частиц  $L$  при следующих параметрах: а)  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 4$ , б)  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 80$ ; кривая 1 —  $a_1 = 10^4 a_2$ , 2 —  $a_1 = 10^3 a_2$ , 3 —  $a_1 = 10^2 a_2$ , 4 —  $a_1 = 10 a_2$ , 5 —  $a_1 = a_2$ , 6 —  $a_1 = \infty$  из (35)

радиуса большей частицы. На больших расстояниях сила взаимодействия частицы с плоской границей медленнее убывает и, как видно из рис. 4, переходит в решение (4) на расстояниях  $L \sim a_2$ . Следовательно, можно сделать вывод, что для получения хорошей точности для силы взаимодействия заряженного шара с плоской заряженной границей задачу о взаимодействии двух шаров необходимо решать при  $a_1 \gtrsim 10^3 a_2$  и расстояниях  $L \lesssim a_2$ . Отметим, что при  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 80$  переход от отталкивания на больших расстояниях к притяжению на малых для рассмотренных здесь зарядов не наблюдается только при  $a_1 = a_2$ , а при  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 4$  этот переход вообще не имеет места.

На рис. 5 проводится сравнение численных решений друг с другом и с аналитическими формулами (1) и (4) при трех значениях диэлектрической про-

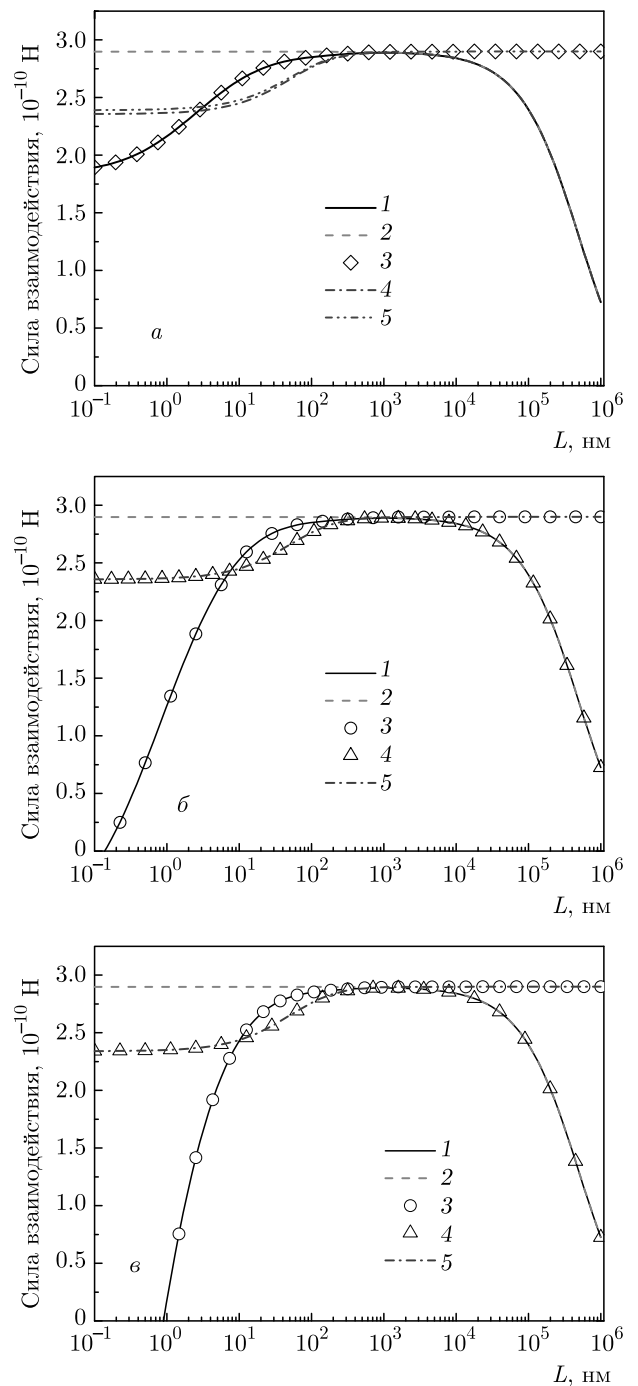
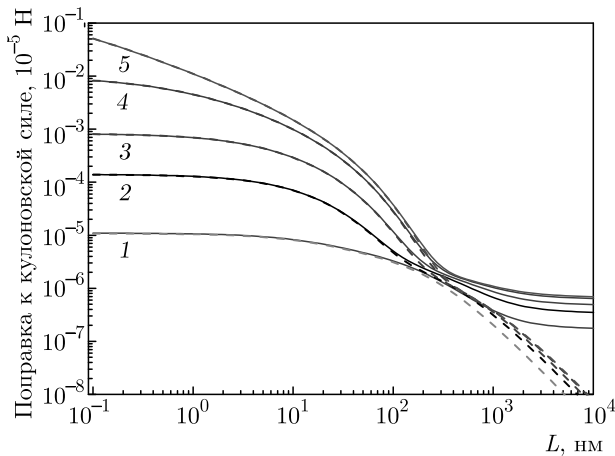


Рис. 5. Сила взаимодействия как функция расстояния между поверхностями частиц  $L$  при следующих параметрах: а)  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 16$ , б)  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 32$ , в)  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 64$ ; кривая 1 — из (17) при  $a_1 = 10^4 a_2$ , 2 — сила взаимодействия точечных зарядов (23), 3 — из (35) при  $a_1 = \infty$ , 4 — сила взаимодействия точечного заряда с плоской заряженной границей диэлектриков из (4), 5 — сила взаимодействия точечного заряда с шаром (1)



**Рис. 6.** Поправка к кулоновской силе как функция расстояния между поверхностями частиц  $L$ : сплошные кривые —  $a_1 = \infty$ , штриховые —  $a_1 = 10^4 a_2$ , 1 —  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 2$ , 2 —  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 4$ , 3 —  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 8$ , 4 —  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 32$ , 5 —  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 256$

нищаемости материала частиц. Видно хорошее согласие сил  $F_{1z}$  и  $F_{z\infty}$  и все возрастающее с ростом диэлектрической проницаемости отличие их от  $F_{ps}$  и  $F_{pp}$ . При этом интересно отметить хорошее совпадение  $F_{ps}$  и  $F_{pp}$  при  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 > 16$ . Это связано с тем, что при больших  $\varepsilon_1$  величина  $f_n$  в выражении (3), которая определяет поправку  $\delta f_{ps}$ , стремится к нулю. Из рис. 5 видно, что при  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 32$  происходит переход от отталкивания к притяжению на малых расстояниях, при  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 64$  этот переход происходит на больших расстояниях, а при  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 16$  он не имеет места.

На рис. 6 проводится сравнение поправки к кулоновской силе, в качестве которой при  $a_1 = \infty$  выступает величина  $F_{C\infty} - F_{z\infty}$ , а при  $a_1 = 10^4 a_2$  — величина  $F_C - F_{1z}$ . Видно, что эти величины при всех рассмотренных значениях диэлектрической проницаемости материала частиц на малых расстояниях до  $L \sim a_2$  практически сливаются. На больших расстояниях эти поправки зависят от отношения  $(\varepsilon_1 - \varepsilon) / (\varepsilon_1 + \varepsilon)$  и отличие кривых по мере роста  $\varepsilon_1$  становится все меньше и меньше. Также отметим, что поправка на всех расстояниях положительна, следовательно, сила взаимодействия всегда меньше, чем  $F_{C\infty}$  или  $F_C$  в случае конечного радиуса большой частицы.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе найдены ряд аналитических решений для коэффициентов разложения потен-

циала в бисферической системе координат для больших номеров мультипольного момента. Выполнен переход к бесконечному радиусу одного из шаров и впервые найдено аналитическое решение данной задачи. Найденное решение позволяет с высокой точностью рассчитать силу взаимодействия заряженной диэлектрической частицы сферической формы с частицей значительно большего радиуса или с плоской границей диэлектриков при расстояниях между их поверхностями в области 0.1–1 нм, в которой силы электростатического и ван-дер-ваальсова взаимодействия сравнимы друг с другом.

**Финансирование.** Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2020-785).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. R. W. Home, *British J. Hist. Sci.* **16**(3), 239 (1983).
2. J. R. Hoffman and A.-M. Ampère, *Poisson's 1812 Electricity Memoir*, Cambridge Univ. Press (1995), pp. 113–118.
3. W. Thomson, *Reprint of Papers on Electrostatics and Magnetism*, Macmillan, London, UK (1884), pp. 86–97.
4. J. C. Maxwell, *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, Oxford, UK (1891).
5. В. Р. Муниров, А. В. Филиппов, *ЖЭТФ* **144**, 931 (2013).
6. E. B. Lindgren, H. K. Chan, A. J. Stace, and E. Besley, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 5883 (2016).
7. A. Khachatourian, H.-K. Chan, A. J. Stace, and E. Bichoutskaia, *J. Chem. Phys.* **140**, 074107 (2014).
8. A. V. Filippov, X. Chen, C. Harris, A. J. Stace, and E. Besley, *J. Chem. Phys.* **151**, 154113 (2019).
9. M. Majic, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **276**, 107945 (2021).
10. J. Baptiste, C. Williamson, J. Fox, A. J. Stace, M. Hassan, S. Braun, and E. Besley, *Atmosph. Chem. Phys.* **21**, 8735 (2021).
11. A. T. Pérez and R. Fernández-Mateo, *J. Electrostatics* **112**, 103601 (2021).
12. Y. Nakajima and T. Sato, *J. Electrostatics* **45**, 213 (1999).



13. E. Bichoutskaia, A. L. Boatwright, A. Khachatourian, and A. J. Stace, *J. Chem. Phys.* **133**, 024105 (2010).
14. T. B. Jones and T. B. Jones, *Electromechanics of Particles*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2005).
15. A. Castellanos, *Adv. Phys.* **54**(4), 263 (2005).
16. X. Meng, J. Zhu, and J. Zhang, *J. Phys. D* **42**, 065201 (2009).
17. B. Gady, D. Schleef, R. Reifenberger, D. Rimai, and L. P. DeMejo, *Phys. Rev. B* **53**, 8065 (1996).
18. B. Gady, R. Reifenberger, D. S. Rimai, and L. P. DeMejo, *Langmuir* **13**, 2533 (1997).
19. Y. Liu, C. Song, G. Lv, N. Chen, H. Zhou, and X. Jing, *Appl. Surf. Sci.* **433**, 450 (2018).
20. M. C. Stevenson, S. P. Beaudoin, and D. S. Corti, *J. Phys. Chem. C* **124**, 3014 (2020).
21. M. C. Stevenson, S. P. Beaudoin, and D. S. Corti, *J. Phys. Chem. C* **125**, 20003 (2021).
22. H. Zhou, M. Götzinger, and W. Peukert, *Powder Technology* **135–136**, 82 (2003).
23. Y. Gao, E. Tian, and J. Mo, *ACS EST Engg.* **1**, 1449 (2021).
24. В. В. Батыгин, И. Н. Топтыгин, *Сборник задач по электродинамике*, Наука, Москва (1970).
25. В. Смайт, *Электростатика и электродинамика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1954) [W. R. Smythe, *Static and Dynamic Electricity*, Taylor and Francis, New York–Toronto–London (1950)].
26. P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw Hill, New York (1953).
27. А. В. Филиппов, *ЖЭТФ* **136**, 601 (2009).
28. А. V. Filippov, *Contrib. Plasma Phys.* **49**, 433 (2009).

# ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ ПОРИСТЫХ КОМПОЗИТОВ

С. А. Родионов<sup>a,\*</sup>, А. М. Мерзликин<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова  
127030, Москва, Россия*

<sup>b</sup> *Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 июля 2021 г.,  
после переработки 17 декабря 2021 г.  
Принята к публикации 20 декабря 2021 г.

Исследуется распространение света в двумерных пористых композитных материалах на основе кремния (Si) и диоксида кремния (SiO<sub>2</sub>) в терминах эффективных параметров. Эффективный показатель преломления  $n_{eff}$  и квазистатическая эффективная диэлектрическая проницаемость  $\sqrt{\varepsilon_{eff}}$  были вычислены независимо. Эффективный показатель преломления был вычислен с использованием теоремы Блоха, в то время как квазистатическая эффективная диэлектрическая проницаемость была рассчитана разными методами: при помощи метода асимптотического осреднения, приближения Максвелла Гарнетта и модели Бруггемана. Показано, что в длинноволновом приближении  $n_{eff}$  не сходится к квадратному корню из квазистатической диэлектрической проницаемости, вычисленной при помощи моделей Максвелла Гарнетта и Бруггемана. Показано, что, напротив, сходимость между  $n_{eff}$  и  $\sqrt{\varepsilon_{eff}}$ , вычисленной методом асимптотического осреднения, осуществляется в длинноволновом пределе для любых значений пористости композитного материала.

DOI: 10.31857/S004445102205008X  
EDN: DSUGDW

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время исследование оптических композитных материалов [1], свойства которых обусловлены не только их составом, но и внутренней геометрией, представляет высокий интерес [2]. Особенности взаимодействия света с микроструктурой композитных материалов проявляется в различных макроскопических оптических свойствах данных структур, включая такие необычные свойства, как формирование фотонной запрещенной зоны [3, 4], аномальное преломление света [5, 6] и т. д. Понимание физики взаимодействия света с данными структурами и определение их макроскопических свойств — важные проблемы современной оптики [7–9].

Для изучения макроскопических оптических свойств композитных материалов достаточно широко используется метод гомогенизации уравнений

Максвелла [1, 6, 10–17]. Смысл данного метода заключается в замене точных электромагнитных полей в неоднородной среде «средними»<sup>1)</sup> полями, взаимодействующими с некоторой гомогенной средой. Данный подход позволяет избежать затратных по времени вычислений микрополей в структуре композитного материала и описывать его свойства в терминах эффективных параметров [10–15]. Полная характеристика оптических свойств материала требует определения двух параметров<sup>2)</sup>:  $\varepsilon_{eff}$ ,  $\mu_{eff}$  — эффективных диэлектрической и магнитной проницаемостей соответственно [18], что следует из уравнений Максвелла для однородной среды.

В наиболее простом случае статических полей амплитуды электрического и магнитного полей независимы, что позволяет преобразовать систему уравнений Максвелла к уравнению Лапласа. Гомо-

<sup>1)</sup> Различные авторы рассматривают поля, усредненные по физически бесконечно малому элементу объема [18], ансамблю [19], и более сложные методы усреднения [1, 12, 13].

<sup>2)</sup> В случае анизотропных сред данные параметры являются тензорными величинами. Биизотропные и бианизотропные среды не рассматриваются в данной работе.

\* E-mail: sergeyrodionov93@yandex.ru

гомогенизация уравнения Лапласа является достаточно хорошо изученной проблемой [1, 8–11, 14, 15]. Существует много феноменологических методов гомогенизации, среди которых приближение Максвелла Гарнетта [10, 11] и модель эффективной среды Бругемана [14] наиболее популярны. Также существуют математически строгие методы гомогенизации, среди которых метод асимптотического осреднения уравнения Лапласа для периодических сред широко используется в задачах механики, электростатики и магнитостатики [20, 21]. Данный метод основан на методе многих масштабов [9, 20] и разложении поля в ряд по малому параметру  $a/L$ , где  $a$  — характерный масштаб неоднородности внутренней структуры образца,  $L$  — характерный масштаб размеров образца.

При изучении взаимодействия переменных электромагнитных полей с композитным материалом электрическое и магнитное поля связаны посредством уравнений Максвелла, а также данные уравнения содержат дополнительный параметр масштаба — длину волны  $\lambda$ . Связь между электрическим и магнитным полями приводит к уравнениям, отличным от уравнения Лапласа, а наличие третьего параметра масштаба (длины волны) требует принятия во внимание отношений  $a/\lambda$  и  $\lambda/L$ , помимо  $a/L$ . Важно отметить, что в случае  $a/\lambda > 1/2n$ , где  $n$  — показатель преломления матрицы композитного материала, метод гомогенизации не может быть применен, так как при приближении к первому брэгговскому резонансу среда начинает сильно рассеивать излучение и не может рассматриваться как однородная [15]. Таким образом, метод гомогенизации может применяться, когда  $a/\lambda \ll 1/2n$ .

В случае, когда длина волны существенно превышает все остальные характерные масштабы:  $\lambda \gg \gg a, L$ , уравнения Максвелла могут быть сведены к уравнению Лапласа. Однако, в отличие от статического случая, связь между электрическим и магнитным полями должна быть сохранена. Также должна быть учтена дисперсия параметров среды. Данное приближение называется квазистатическим [8, 18]. Гомогенизация неоднородной среды с использованием квазистатического приближения достаточно популярный метод и, как и в статическом случае, достаточно хорошо изученная проблема [14, 22].

Волновые свойства излучения учитываются в более точном, длинноволновом приближении. В данном приближении при решении уравнений Максвелла поля раскладываются в ряд по степеням  $a/\lambda$  и  $\lambda/L$ , что позволяет учитывать набег фазы волны в среде и другие явления, связанные с волновой при-

родой электромагнитного излучения. Однако при использовании данного приближения уравнения, которые описывают электромагнитные поля, отличны от уравнения Лапласа. Таким образом, стандартные методы гомогенизации оказываются неприменимы.

Достаточно известным методом гомогенизации в длинноволновом приближении является метод, впервые предложенный Рытовым и Левиным в работах [23, 24] и основанный на теореме Блоха [15]. Суть метода заключается в разложении электромагнитного поля в периодической структуре в ряд по блоховским волнам. При помощи данного метода можно вычислить эффективный показатель преломления  $n_{eff}$  и эффективный импеданс  $Y_{eff}$ , при помощи которых могут быть вычислены эффективная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_{eff}$  и эффективная магнитная проницаемость  $\mu_{eff}$ . Однако в работах [25–28] было показано, что для периодических слоистых композитов введение эффективного импеданса в длинноволновом приближении некорректно. Оказывается, что эффективный импеданс сильно зависит от граничных условий на поверхности образца и процедура сходимости для данного параметра, при увеличении размеров образца, не выполняется [25, 26]. Также в ряде работ [10–15, 29, 30] обсуждаются основные современные методы гомогенизации и способы корректного введения полного набора эффективных материальных параметров в длинноволновом приближении, которые в основном сводятся к введению эффективных переходных слоев на поверхности образца. Тем не менее такие слои все еще довольно сильно зависят от типа границы, что не позволяет описывать композитный материал в терминах эффективных параметров корректно [31].

Таким образом, применимость метода гомогенизации к уравнениям Максвелла для композитных материалов в длинноволновом приближении все еще остается до конца не решенной проблемой и требует дальнейшего исследования. Однако, так как введение  $n_{eff}$  остается в силе [29, 32, 33] в динамической задаче, данный параметр можно использовать для описания макроскопических свойств композитного материала. Также в связи с тем, что квазистатическое приближение [10, 11] применимо к композитным материалам в случае  $\lambda \gg a$ , достаточно важной задачей является определение разницы между  $n_{eff}$ , рассчитанным при помощи теоремы Блоха в длинноволновом приближении, и  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$ , рассчитанным с использованием метода асимптотического осреднения в квазистатическом приближении:

$$\Delta n_{eff} = n_{eff} - \sqrt{\varepsilon_{eff}}. \quad (1)$$

В последнее время нанопористый кремний и диоксид кремния представляют большой интерес в оптике [34, 35]. За счет технологической возможности управления пористостью материала  $p^3$ ) оказывается возможным изменять оптические свойства данного материала в достаточно широких пределах, что находит применение во многих оптических устройствах [35–38]. Так как данные структуры принадлежат к классу двумерных композитных материалов [39–42] за счет сонаправленного роста пор, есть определенный теоретический интерес к изучению связи между эффективными параметрами и микроструктурой данного композитного материала. Следовательно, изучение таких структур является важной задачей как для прикладной оптики, так и для теоретической. В данной работе исследуются эффективные оптические параметры двумерных пористых композитных материалов и связь между методом асимптотического осреднения и теоремой Блоха в длинноволновом пределе в задаче гомогенизации. Также в данной работе мы показали, что такие популярные методы гомогенизации, как приближение Максвелла Гарнетта и модель Бруггемана, дают результаты, отличные от математически строгого метода асимптотического осреднения при больших пористостях, и оказываются непригодными.

Работа имеет следующую структуру. В разд. 2 описана постановка задачи, т. е. представлена модель пористого материала и методы для расчета его эффективных параметров. Метод асимптотического осреднения используется для расчета квазистатической эффективной диэлектрической проницаемости, а эффективный показатель преломления в длинноволновом приближении вычисляется при помощи теоремы Блоха. В разд. 3 представлены результаты вычислений. Обсуждение полученных результатов проводится в разд. 4.

## 2. МЕТОДЫ

### 2.1. Модель пористого композита

Модель двумерного пористого композитного материала представляет собой однородную сплошную среду из кремния или диоксида кремния (матрица) и включений в виде сонаправленных бесконечных цилиндров, заполненных воздухом (рис. 1а). Характерный размер неоднородности композитного мате-

<sup>3)</sup> Отношение объема, занимаемого порами, к объему всего композита.

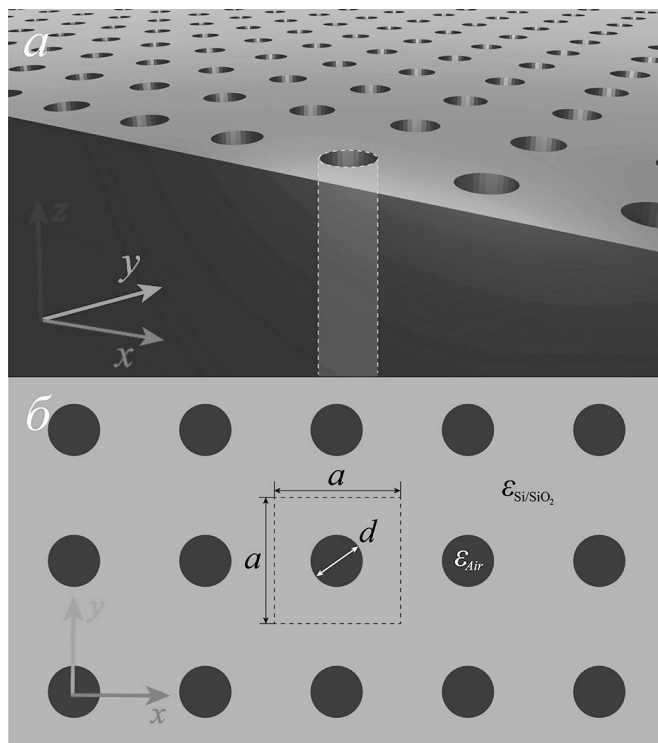


Рис. 1. Модель пористого композита

риала, т. е. среднее расстояние между осями соседних цилиндров  $a$ , предполагается много меньшим, чем характерный размер всей структуры  $L$  ( $a \ll L$ ). Также предполагается, что длина волны  $\lambda$  много меньше  $L$  ( $\lambda \ll L$ ), что позволяет рассматривать структуру как двумерную и бесконечную. Для применения метода асимптотического осреднения и теоремы Блоха, которые описаны ниже, за счет равномерного распределения пор в композитном материале структура предполагается периодической, с квадратной ячейкой периода  $a$ , и все цилиндры предполагаются идентичными, с диаметром  $d$  (рис. 1б).

Как видно из рис. 1а, структура неоднородна в плоскости  $xy$  и однородна вдоль оси  $z$ . Тогда эффективная диэлектрическая проницаемость не является скаляром и зависит от направления. За счет трансляционной симметрии вдоль оси  $z$  и квадратной элементарной ячейки в выбранной системе координат, представленной на рис. 1, тензор эффективной диэлектрической проницаемости может быть представлен в диагональной форме:

$$\varepsilon_{ij}^{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{eff}^{(\perp)} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{eff}^{(\perp)} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{eff}^{(\parallel)} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Таким образом, проблема исследования оптических свойств пористого кремния или пористого диоксида кремния в квазистатическом приближении сводится к вычислению величин  $\varepsilon_{eff}^{(\perp)}$  и  $\varepsilon_{eff}^{(\parallel)}$ . Отметим, что так как  $z$ -компонента вектора напряженности электрического поля непрерывна на границе между материалами, то в направлении, параллельном осям пор, электрическое поле одинаково во всем пространстве. Следовательно,  $\varepsilon_{eff}^{(\parallel)} = \langle \varepsilon \rangle$ , где  $\langle \varepsilon \rangle$  — диэлектрическая проницаемость, усредненная по элементарной ячейке композитного материала.

Рассматривается структура со следующими параметрами:  $a = 50$  нм — период элементарной ячейки,  $d = 15$  нм — диаметр пор,  $\lambda = 850$  нм — длина волны излучения в вакууме,  $\varepsilon_{SiO_2} = 2.13$  — диэлектрическая проницаемость диоксида кремния при заданной длине волны [43],  $\varepsilon_{Si} = 13.22$  — диэлектрическая проницаемость кремния при заданной длине волны [44],  $\varepsilon_{Air} = 1$  — диэлектрическая проницаемость воздуха.

## 2.2. Метод асимптотического осреднения

В данной работе метод асимптотического осреднения используется для вычисления компонент тензора эффективной диэлектрической проницаемости в квазистатическом приближении. Детальное описание данного метода можно найти в [20, 21]. В данном разделе представлена суть этого метода. При использовании квазистатического приближения система уравнений Максвелла преобразуется к уравнению Лапласа<sup>4)</sup> с сохранением дисперсии параметров среды:

$$\sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial x_j} = 0, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$  — тензор диэлектрической проницаемости, компоненты которого являются функциями координат,  $\phi(\mathbf{r})$  — скалярный потенциал,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор,  $x_i$  —  $i$ -я компонента радиус-вектора. Поиск асимптотического решения уравнения (3) в виде разложения в ряд по параметру  $k = a/L$  составляет суть метода асимптотического осреднения:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n k^n \phi_n(\mathbf{r}), \quad (4)$$

<sup>4)</sup> Для упрощения нашего рассмотрения временная зависимость  $\exp(i\omega t)$  опущена, так как уравнения Максвелла рассматриваются в частотной области. Далее в работе временная зависимость также будет опущена.

где  $\phi_n(\mathbf{r})$  — средний потенциал в случае нулевого индекса и его поправки во всех остальных случаях. Также в данном методе используется разделение на «быстрые» и «медленные» переменные, соответственно:

$$\xi_i = x_i/a, \quad \eta_i = x_i/L, \quad (5)$$

что позволяет существенно упростить решение задачи. Сходимость уравнения Лапласа с неоднородными коэффициентами (3) к осредненному уравнению:

$$\sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^{eff} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (6)$$

при  $k \rightarrow 0$  выполняется в рамках теории G-сходимости [45].

Для вычисления  $\varepsilon_{ij}^{eff}$  решается дополнительная краевая задача на ячейке периодичности:

$$\sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \varepsilon_{ij}(\xi) \frac{\partial M_l(\xi)}{\partial \xi_j} = 0, \quad (7)$$

$$[M_l(\xi) - \xi_l]_{\Gamma} = 0, \quad \left[ \frac{\partial M_l(\xi)}{\partial \mathbf{n}_\xi} \right]_{\Gamma} = 0, \quad (8)$$

где  $\xi$  — набор «быстрых» переменных,  $M_l(\xi)$  —  $l$ -я дополнительная функция «быстрых» переменных,  $\Gamma$  — граница элементарной ячейки,  $\mathbf{n}_\xi$  — нормаль к  $\Gamma$ . Отсюда следует, что тензор эффективной диэлектрической проницаемости может быть вычислен с помощью выражения

$$\varepsilon_{ij}^{eff} = \int_{V_\xi} \sum_n \varepsilon_{in}(\xi) \frac{\partial M_j(\xi)}{\partial \xi_n} d\xi, \quad (9)$$

где  $V_\xi$  — объем элементарной ячейки в быстрых переменных и  $d\xi$  — элемент объема элементарной ячейки в быстрых переменных.

## 2.3. Теорема Блоха

Поскольку среда периодическая, для описания распространения в ней электромагнитных волн, за счет схожести уравнений квантовой механики и электродинамики, может быть использована теорема Блоха [3, 4, 15]. При данном подходе компоненты электромагнитного поля могут быть разложены по блоховским волнам:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}_b} \mathbf{E}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}), \quad (10)$$

где  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  — вектор напряженности электрического поля,  $\mathbf{E}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r})$  — периодические функции распределения поля в среде,  $\mathbf{k}_b$  — блоховский волновой вектор. При использовании данного метода задача сводится к определению закона дисперсии:  $\mathbf{k}_b = \mathbf{k}_b(\omega)$ , где  $\omega$  — частота излучения, и к последующему вычислению  $\mathbf{E}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r})$ . Тогда вдали от первого брэгговского резонанса ( $a/\lambda \ll 1/2n$ ) можно ввести эффективный показатель преломления:

$$n_{eff} = k_b/k_0, \tag{11}$$

где  $k_0$  — волновое число излучения в вакууме. В данной работе мы рассматриваем только режим распространения волн с высокой симметрией ( $k_{bz} = 0$ ), где блоховский волновой вектор лежит в плоскости  $xy$ .

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

С помощью метода асимптотического осреднения компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости были вычислены при разных величинах пористости  $p$  для моделей пористого диоксида кремния (рис. 2) и пористого кремния (рис. 3), при фиксированных  $\lambda$  и  $a$ .

Также мы вычислили зависимости эффективной диэлектрической проницаемости от пористости для пористого кремния при помощи приближения Максвелла Гарнетта и модели Бруггемана. Отличие результатов метода асимптотического осреднения от данных приближений представлено на рис. 4.

В динамическом случае мы рассмотрели электромагнитные волны, распространяющиеся в плоско-

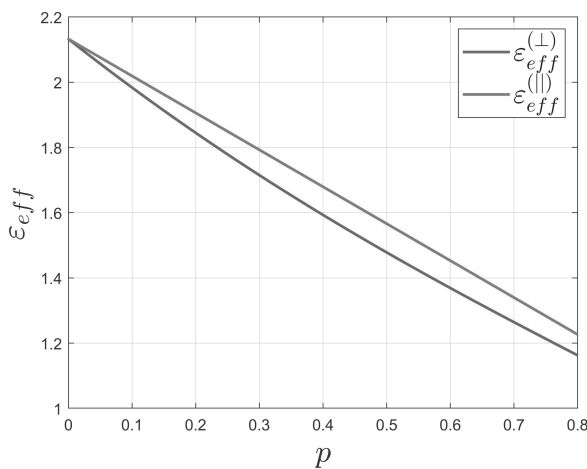


Рис. 2. (В цвете онлайн) Компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости в зависимости от пористости для пористого диоксида кремния

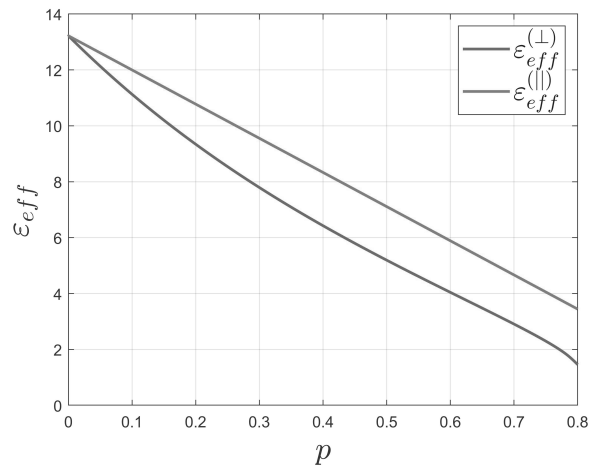


Рис. 3. (В цвете онлайн) Компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости в зависимости от пористости для пористого кремния

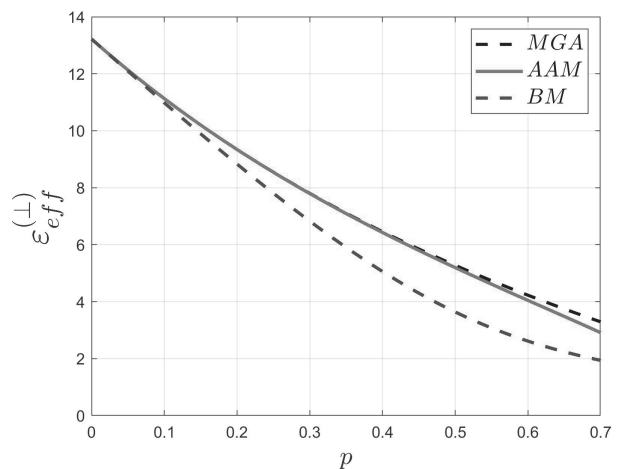


Рис. 4. (В цвете онлайн) Сравнение зависимостей эффективной диэлектрической проницаемости от пористости композитного материала, вычисленных с использованием приближения Максвелла Гарнетта (MGA), метода асимптотического осреднения (AAM) и модели Бруггемана (BM) для пористого кремния

сти  $xy$ , т. е. когда  $k_z = 0$ . Эффективные показатели преломления данной структуры для обоих направлений вектора напряженности электрического поля (в плоскости или перпендикулярно ей) были вычислены в зависимости от  $a/\lambda$  для моделей пористого диоксида кремния (рис. 5a) и пористого кремния (рис. 6a). Вычисления были выполнены с использованием теоремы Блоха при фиксированных  $\lambda$  и  $p$ . Также, используя (1), было проведено сравнение величины эффективного показателя преломления с

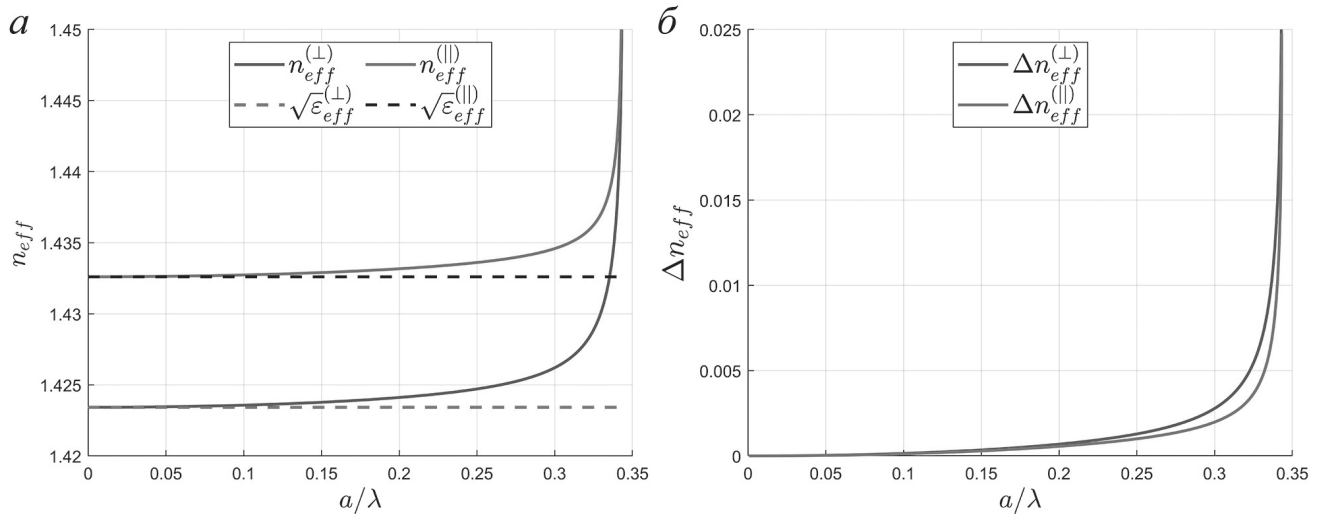


Рис. 5. (В цвете онлайн) а) Эффективные показатели преломления при разных  $a/\lambda$  для пористого диоксида кремния. Штриховые линии отмечают  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$ . б) Разности между динамическими и квазистатическими показателями преломления как функции  $a/\lambda$  для пористого диоксида кремния

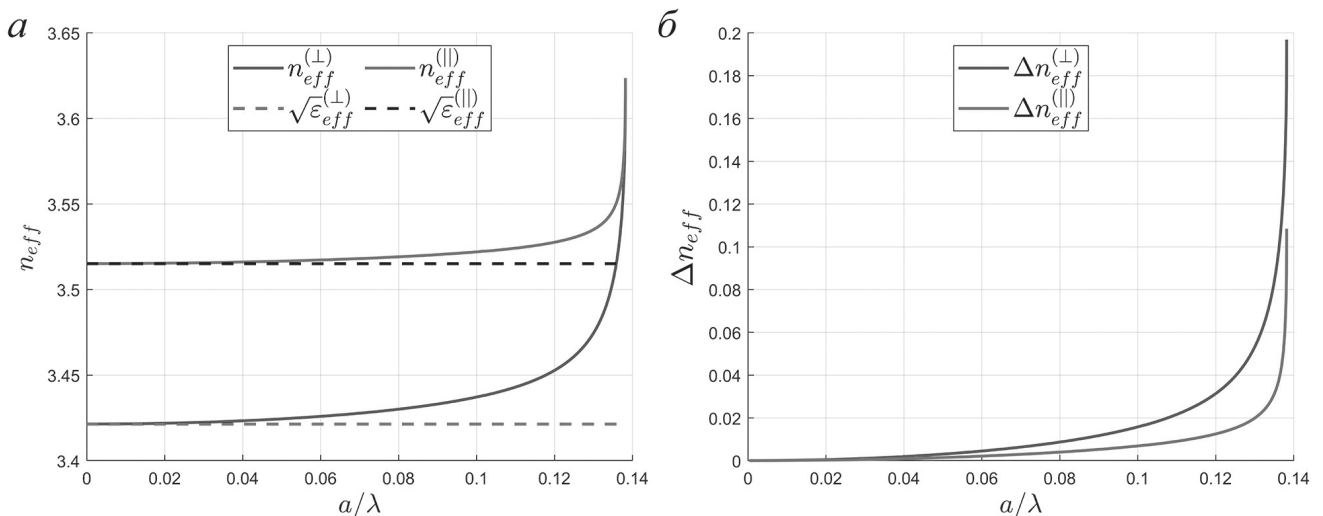


Рис. 6. (В цвете онлайн) а) Эффективные показатели преломления при разных  $a/\lambda$  для пористого кремния. Штриховые линии отмечают  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$ . б) Разности между динамическими и квазистатическими показателями преломления как функции  $a/\lambda$  для пористого кремния

$\sqrt{\epsilon_{eff}}$ , вычисленной при помощи метода асимптотического осреднения в квазистатическом приближении (рис. 5б и рис. 6б).

Динамические вычисления были выполнены при фиксированной пористости, которая была выбрана достаточно маленькой ( $p \approx 0.07$ ). Чтобы показать, что данный результат справедлив при всех пористостях, мы вычислили зависимости  $\Delta n_{eff}^{(\perp)}$  от  $a/\lambda$  для разных пористостей. Вычисления были выполнены для модели пористого кремния, результаты представлены на рис. 7.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из рис. 2 и 3 ясно, что компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости могут меняться в очень широких пределах при изменении пористости образца. Также данная структура обладает большой анизотропией даже в случае малой разности между диэлектрическими проницаемостями компонентов композитного материала<sup>5)</sup>.

<sup>5)</sup> В случае кремния разность между компонентами тензора диэлектрической проницаемости порядка 1.

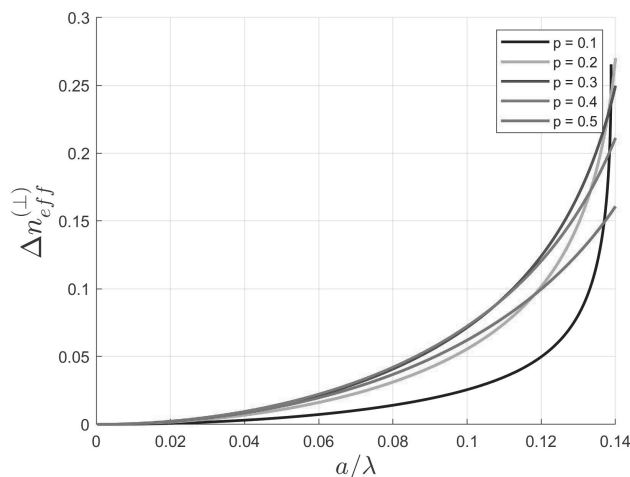


Рис. 7. (В цвете онлайн) Разности между динамическими и квазистатическими эффективными показателями преломления  $\Delta n_{eff}^{(\perp)}$  в зависимости от  $a/\lambda$  для разных пористостей для пористого кремния

На рис. 4 показано, что при малой пористости ( $p \leq 0.05$ ) эффективная диэлектрическая проницаемость, вычисленная с использованием приближения Максвелла Гарнетта и с использованием модели Бруггемана, совпадает с эффективной диэлектрической проницаемостью, вычисленной методом асимптотического осреднения. Но выше величины пористости  $p \approx 0.05$  эффективная диэлектрическая проницаемость из модели Бруггемана значительно отличается от эффективной диэлектрической проницаемости, вычисленной методом асимптотического осреднения, и становится неприменимой. Эффективная диэлектрическая проницаемость, вычисленная с использованием приближения Максвелла Гарнетта, согласуется с эффективной диэлектрической проницаемостью, вычисленной с использованием метода асимптотического осреднения, вплоть до значений пористости  $p \approx 0.4$ . Выше данного значения разница между эффективными диэлектрическими проницаемостями из приближения Максвелла Гарнетта и метода асимптотического осреднения становится значительной и быстро растет. Следовательно, при пористостях выше  $p \approx 0.4$  приближение Максвелла Гарнетта становится неприменимым.

На рис. 5 и 6 построены зависимости  $n_{eff}$  от  $a/\lambda$  вплоть до первого брэгговского резонанса. Как было сказано выше, эффективный показатель преломления композитного материала имеет смысл только вдали от первого брэгговского резонанса. Поэтому в расчетах используется только первая зона Бриллюэна для  $a/\lambda$ . Как видно из рис. 5а и 6а,  $n_{eff}$  стремится

к  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$  в пределе больших длин волн ( $a/\lambda \rightarrow 0$ ). Данный результат очень важен, так как показывает связь между квазистатическим показателем преломления  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$  и асимптотическим значением динамического показателя преломления  $n_{eff}$ , вычисленных разными методами.

На рис. 5б и 6б видно, что  $n_{eff}$  сильно отличается от  $a/\lambda$  только вблизи первого брэгговского резонанса и их разница быстро уменьшается при удалении от него. Следовательно, оказывается возможным использовать эффективный показатель преломления уже при  $a/\lambda \leq 1/4n$ . Более того, начиная с данного значения  $a/\lambda$ , становится возможным использование квазистатического приближения для вычисления эффективных параметров с достаточно хорошей точностью. В самом деле, для пористого диоксида кремния ошибка оказывается порядка  $10^{-4}$  или меньше, а для кремния — порядка  $10^{-3}$  или меньше.

Из рис. 7 ясно, что сходимость  $n_{eff}$  к  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$  в пределе больших длин волн не зависит от пористости. Следовательно, для двумерных пористых структур имеется непрерывный переход от эффективного показателя преломления из теоремы Блоха к квадратному корню из эффективной диэлектрической проницаемости из метода асимптотического осреднения в пределе больших длин волн.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были исследованы эффективные оптические параметры двумерного пористого кремния и диоксида кремния в разных приближениях. В квазистатическом приближении компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости были вычислены для разных значений пористости  $p$  при фиксированных  $\lambda$  и  $a$  методом асимптотического осреднения. Было показано, что такие структуры обладают анизотропией ввиду различий свойств среды в направлениях, параллельном и перпендикулярном порам. За счет возможности изменять пористость образца, компоненты тензора диэлектрической проницаемости могут меняться в широких пределах.

Сравнение эффективных диэлектрических проницаемостей, вычисленных при помощи метода асимптотического осреднения, приближения Максвелла Гарнетта и модели Бруггемана, показало, что модель Бруггемана применима только при малых пористостях. Приближение Максвелла Гарнетта может быть использовано для вычисления эффективной диэлектрической проницаемости вплоть



до значения пористости  $p \approx 0.4$ , но после этого значения также становится неприменимым. Из выполненных вычислений было установлено, что приближение Максвелла Гарнетта следует использовать с осторожностью при высоких пористостях, а модель Бруггемана не рекомендуется использовать при любых пористостях для таких структур при количественных вычислениях.

В длинноволновом приближении эффективный показатель преломления был вычислен для разных значений  $a/\lambda$  при фиксированных  $\lambda$  и  $p$  с использованием теоремы Блоха. Впервые было показано, что эффективный показатель преломления  $n_{eff}$  стремится к квазистатической диэлектрической проницаемости  $\sqrt{\epsilon_{eff}}$ , вычисленной с использованием метода асимптотического осреднения при любой пористости в пределе  $a/\lambda \rightarrow 0$ . Данный результат показывает связь между двумя разными вычислительными методами.

## ЛИТЕРАТУРА

1. G. W. Milton, *The Theory of Composites*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2002).
2. M. Kadic, G. W. Milton, M. van Hecke, and M. Wegener, *Nature Rev. Phys.* **1**, 198 (2019).
3. A. Yariv and P. Yeh, *Optical Waves in Crystals*, Wiley, New York (1984).
4. K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer (2004).
5. В. Г. Веселого, УФН **92**, 517 (1967).
6. D. R. Smith and N. Kroll, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2933 (2000).
7. L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2012).
8. A. K. Sarychev and V. M. Shalaev, *Electrodynamics of Metamaterials*, World Sci. (2007).
9. A. P. Vinogradov, *Electrodynamics of Composite Materials*, URSS (2001).
10. V. A. Markel, *J. Opt. Soc. Amer. A* **33**, 1244 (2016).
11. V. A. Markel, *J. Opt. Soc. Amer. A* **33**, 2237 (2016).
12. A. Chipouline, C. Simovski, and S. Tretyakov, *Metamaterials* **6**, 77 (2012).
13. A. P. Vinogradov and A. M. Merzlikin, *Metamaterials* **6**, 121 (2012).
14. R. Landauer, *AIP Conf. Proc.* **40**, 2 (1978).
15. C. R. Simovski, *Opt. Spectrosc.* **107**, 726 (2009).
16. S. G. Moiseev, *Physica B: Condens. Matter* **405**, 3042 (2010).
17. K. Cherednichenko and S. Cooper, *Mathematika* **61**, 475 (2015).
18. L. D. Landau, J. S. Bell, M. J. Kearsley, L. P. Pitaevskii, E. M. Lifshitz, and J. B. Sykes, *Electrodynamics of Continuous Media*, Elsevier (2013).
19. Y. A. Ryzhov, V. V. Tamoikin, and V. I. Tatarskii, *Sov. Phys. JETP* **21**, 433 (1965).
20. N. S. Bakhvalov and G. Panasenko, *Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media: Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials*, Springer (2012).
21. E. Sánchez-Palencia, *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, Springer (1980).
22. D. J. Bergman, *Phys. Rep.* **43**, 377 (1978).
23. S. Rytov, *Sov. Phys. JETP* **2**, 466 (1956).
24. M. L. Levin, *Zh. Tekh. Fiz.* **18**, 1399 (1948).
25. А. П. Виноградов, А. В. Мерзликин, ЖЭТФ **121**, 565 (2002) [A. P. Vinogradov and A. V. Merzlikin, *JETP* **94**, 482 (2002)].
26. A. P. Vinogradov and A. M. Merzlikin, *Advances in Electromagnetics of Complex Media and Metamaterials*, Springer (2002), pp. 341–361.
27. A. P. Vinogradov and A. M. Merzlikin, *SPIE Proc.* **4806**, 307 (2002).
28. N. A. Enkin, A. M. Merzlikin, and A. P. Vinogradov, *J. Commun. Technol. Electron.* **55**, 565 (2010).
29. A. M. Merzlikin and R. S. Puzko, *Sci. Rep.* **10**, 1 (2020).
30. C. R. Simovski, *J. Commun. Technol. Electron.* **52**, 953 (2007).
31. A. P. Vinogradov, A. I. Ignatov, A. M. Merzlikin, S. A. Tretyakov, and C. R. Simovski, *Opt. Express* **19**, 6699 (2011).
32. R. S. Puzko and A. M. Merzlikin, *Opt. Commun.* **383**, 323 (2017).
33. R. S. Puz'ko and A. M. Merzlikin, *J. Commun. Technol. Electron.* **61**, 1368 (2016).
34. H. Sohn, *Refractive Index of Porous Silicon*, ed. by L. Canham, *Handbook of Porous Silicon*, Springer (2014).

35. V. B. Novikov, A. I. Maydykovskiy, B. I. Mantsyzov, and T. V. Murzina, *Phys. Rev. B* **93**, 235420 (2016).
36. S. E. Svyakhovskiy et al., *J. Russ. Laser Res.* **36**, 588 (2015).
37. V. B. Novikov and T. V. Murzina, *Opt. Lett.* **42**, 1389 (2017).
38. J. J. Saarinen et al., *Opt. Express* **13**, 3754 (2005).
39. G. Bouchitté, S. Guenneau, and F. Zolla, *Multiscale Modeling and Simulation* **8**, 1862 (2010).
40. D. Felbacq and G. Bouchitté, *Waves in Random Media* **7**, 245 (1997).
41. G. Bouchitté and D. Felbacq, *SIAM J. Appl. Math.* **66**, 2061 (2006).
42. R. C. McPhedran et al., *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A: Math. Phys. Eng. Sci.* **452**, 2231 (1996).
43. L. V. Rodríguez-de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, and J. A. Aznárez, *Opt. Mater. Express* **6**, 3622 (2016).
44. C. Schinke et al., *AIP Advances* **5**, 67168 (2015).
45. V. V. Zhikov, S. M. Kozlov, O. A. Oleinik, and K. T. Ngoan, *Russ. Math. Surveys* **34** (1979).

# ВЛИЯНИЕ АТОМОВ Co НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ И $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$

*Т. П. Макарова*<sup>a\*</sup>, *Д. А. Естюнин*<sup>a</sup>, *С. О. Фильнов*<sup>a</sup>, *Д. А. Глазкова*<sup>a</sup>,  
*Д. А. Пудиков*<sup>a</sup>, *А. Г. Рыбкин*<sup>a</sup>, *А. А. Гогина*<sup>a</sup>, *З. С. Алиев*<sup>b</sup>,  
*И. Р. Аммирасланов*<sup>c</sup>, *Н. Т. Мамедов*<sup>c</sup>, *К. А. Кох*<sup>d,e,f</sup>, *О. Е. Терещенко*<sup>d,g</sup>,  
*А. М. Шижин*<sup>a</sup>, *М. М. Отроков*<sup>h,i</sup>, *Е. В. Чулков*<sup>a,j</sup>, *И. И. Климовский*<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский государственный университет  
198504, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности  
AZ1010, Баку, Азербайджан

<sup>c</sup> Институт физики Национальной академии наук Азербайджана  
AZ1141, Баку, Азербайджан

<sup>d</sup> Новосибирский государственный университет  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>e</sup> Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>f</sup> Кемеровский государственный университет  
650000, Кемерово, Россия

<sup>g</sup> Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>h</sup> Centro de Fisica de Materiales (CFM-MPC), Centro Mixto CSIC-UPV/EHU  
20018, Donostia-San Sebastián, Basque Country, Spain

<sup>i</sup> IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48011, Bilbao, Spain

<sup>j</sup> Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología,  
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU  
20080, San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 10 ноября 2021 г.,  
после переработки 10 ноября 2021 г.  
Принята к публикации 11 ноября 2021 г.

Работа посвящена экспериментальному исследованию электронной структуры поверхности топологических изоляторов различной стехиометрии при адсорбции атомов Co. При помощи методов фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии изучены изменения в электронной структуре систем  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при напылении атомов Co при различных температурах. Предположительно, атомы Co связываются с поверхностными атомами подложки, при этом меняется положение точки Дирака. Наблюдаемые изменения связываются с возможным формированием магнитных Co-содержащих упорядоченных поверхностных сплавов.

DOI: 10.31857/S0044451022050091  
EDN: DSXJCP

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время значительное внимание привлекается к исследованию новых квантовых мате-

\* E-mail: makarova.tanja535@yandex.ru

риалов с уникальной электронной структурой, таких как топологические изоляторы (ТИ) [1]. Эти материалы являются перспективными элементами для электроники с низким энергопотреблением [2], спинтроники и реализации фундаментальных эффектов, таких как топологический магнитоэлектрический эффект [3] и квантовый аномальный эффект Холла [4]. Топологические изоляторы — это материалы с объемной запрещенной зоной и топологически защищенными проводящими состояниями на поверхности, существование которых обусловлено сильным спин-орбитальным взаимодействием, приводящим к инверсии объемной запрещенной зоны и изменению топологии материала. Поверхностные состояния характеризуются линейной дисперсией  $E(k)$ , имеющей вид так называемого конуса Дирака с геликоидальной спиновой структурой и фиксированным направлением спина по отношению к волновому вектору для всей поверхности Ферми. Данная особенность состояний исключает возможность обратного рассеяния электронов без изменения их спина (т. е. рассеяние на немагнитных примесях). Металлический характер поверхностных состояний оказывается защищенным благодаря наличию симметрии обращения времени [5]. Кроме того, данная симметрия приводит к вырождению состояний конуса Дирака в его вершине. Однако, если нарушить симметрию обращения времени, в поверхностных состояниях образуется энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в точке Дирака, вследствие чего возможен переход материала в состояние квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ) [6, 7]. Другим условием для реализации КАЭХ является расположение магнитно-индуцированной ЭЗЗ на уровне Ферми [8].

Существует несколько способов реализации магнитных ТИ. Наиболее технически доступный и используемый метод — магнитное легирование ТИ [9]. Для материалов, полученных данной методикой, экспериментально наблюдался КАЭХ в тонких пленках  $(\text{Bi}, \text{Sb})_2\text{Te}_3$ , легированных  $\text{Cr}$  [10] и в ТИ  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ , легированном  $\text{V}$  [11]. Однако замещающие магнитные атомы в легированных ТИ распределены достаточно хаотично. Это приводит к латеральной неоднородности магнитных и электронных свойств. Так, например, в случае пленки  $\text{Cr}$ -легированного ТИ [12] методом сканирующей туннельной спектроскопии была показана значительная неоднородность распределения размеров ЭЗЗ по поверхности. Наличие подобных неоднородностей приводит к тому, что КАЭХ в данных материалах наблюдается при достаточно низкой температуре в сравнении с тем-

пературой магнитного упорядочения.

Другим активно изучаемым способом нарушения симметрии обращения времени является напыление магнитного металла на поверхность ТИ. При этом для открытия ЭЗЗ необходимо, чтобы намагничивание осуществлялось в направлении, перпендикулярном поверхности [13]. Результаты работ, посвященных экспериментам с адсорбцией магнитных металлов ( $\text{Ni}$ ,  $\text{Co}$ ,  $\text{Fe}$ ) на поверхность ТИ различной стехиометрии [14–18], показывают, что напыление приводит к изменениям в электронной структуре исследуемых материалов, в частности, к сдвигу точки Дирака [19, 20] и изменению положения пиков остовных уровней. Также было показано [21, 22], что напыление ряда магнитных металлов и сплавов ( $\text{CoFe}$ ,  $\text{NiFe}$ ,  $\text{Ni}$ ,  $\text{Cr}$ ) на поверхность ТИ приводит к образованию поверхностных сплавов с атомами ТИ, вследствие чего могут формироваться гетероструктуры типа магнитный изолятор/ТИ.

При этом теоретически было показано, что по сравнению с легированием ТИ и напылением на поверхность ТИ, более перспективный способ открытия ЭЗЗ в точке Дирака — так называемый эффект «магнитного продолжения», а именно, создание пленки стехиометрического магнитного ТИ на поверхности немагнитного ТИ [23, 24]. В таком случае топологическое состояние значительно проникает в область магнитной пленки и сильно расщепляется из-за прямого взаимодействия с магнитными моментами атомов. Например, в системе  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  теоретически рассчитанное значение ЭЗЗ — 77 мэВ [25]. В работах [26, 27] для гетероструктур вида  $\text{MnBi}_2\text{Se}_4/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Mn}_4\text{Bi}_2\text{Te}_7/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  наблюдалась магнитная ЭЗЗ величиной 40–80 мэВ. Еще одним многообещающим способом создания магнитных гетероструктур на основе ТИ является внедрение магнитной примеси в приповерхностный слой [28].

Последним и наиболее перспективным на данный момент решением является создание собственных магнитных ТИ, в которых магнитный металл стехиометрически встроен в кристаллическую решетку образца. Примером такого магнитного ТИ является  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [29], и для него экспериментально возможно наблюдать ЭЗЗ порядка 60–70 мэВ [30, 31]. Однако поверхностная магнитная и электронная структура  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  в эксперименте оказывается отличной от теоретической, рассчитанной для идеальной кристаллической структуры, поэтому важным направлением исследований является модификация магнитной текстуры на поверхности собственных магнитных ТИ.

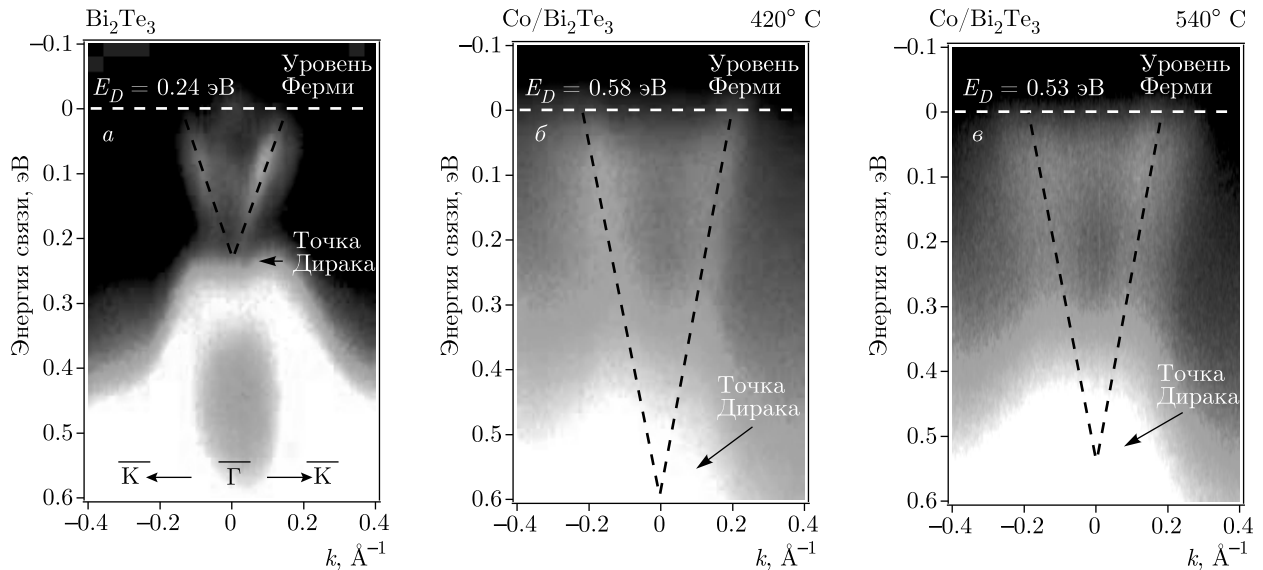


Рис. 1. Спектры ФЭСУР для ТИ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ : *a* — чистого, *б* — после напыления на поверхность слоя Со толщиной  $2 \text{ \AA}$  с одновременным прогревом до  $T = 420^\circ\text{C}$ , *в* — после напыления на поверхность еще одного слоя Со толщиной  $1 \text{ \AA}$  с одновременным прогревом до  $T = 540^\circ\text{C}$ ,  $h\nu = 21.2 \text{ эВ}$

В данной работе исследовались два способа модификации электронной структуры топологических изоляторов различной стехиометрии при взаимодействии с атомами Со: возможность создания гетероструктур на основе  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и Со с формированием упорядоченного слоя на поверхности при прогреве и изучение антиферромагнитного  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  с адсорбцией атомов Со на поверхности с целью модификации поверхностной, атомной, электронной и магнитной структур.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТ И МЕТОДЫ

Образцы  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , исследуемые в данной работе, были выращены методом Бриджмена в Новосибирском Государственном университете [32]. Высококачественные монокристаллы  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [33] были выращены вертикальным методом Бриджмена в Азербайджанском государственном университете нефти и промышленности.

Эксперимент проводился с использованием фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР), спектры остовных уровней были получены методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Измерения проводились в ресурсном центре Санкт-Петербургского Государственного Университета «Физические методы исследования поверхности» при давлении не выше, чем

$1\text{--}2 \cdot 10^{-10}$  мбар с использованием полусферического энергоанализатора VG Scienta R4000 с микроканальным детектором. Фотоэлектронные спектры на различных стадиях эксперимента измерялись при энергии фотонов  $h\nu = 21.2 \text{ эВ}$ . При исследовании остовных уровней использовалась рентгеновская трубка с Al-катодом и энергией  $1486.6 \text{ эВ}$  (линия Al  $K_\alpha$ ). Для напыления атомов кобальта использовались испарители металлов, откалиброванные по кварцевым микровесам. В данной работе каждое напыление длилось в течение  $2.5n$  минут, что соответствует напыленной толщине Со в  $n \text{ \AA}$ .

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

**Система Со/ $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .** Эксперимент по изучению влияния атомов Со на электронную структуру поверхности ТИ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  состоял из нескольких этапов. На первом этапе был измерен чистый образец при комнатной температуре (рис. 1*a*), на втором этапе измерялся образец, на поверхность которого нанесли Со толщиной  $2 \text{ \AA}$  с одновременным прогревом до температуры  $420^\circ\text{C}$  (рис. 1*б*), на третьем этапе был измерен образец после напыления еще одного слоя Со толщиной  $1 \text{ \AA}$  с одновременным прогревом до температуры  $540^\circ\text{C}$  (рис. 1*в*). Образцы прогревались до температур, при которых начинает трансформироваться поверхность ТИ, но не достигалась

температура плавления теллурида висмута, равная  $585^\circ\text{C}$  [34, 35]. Для анализа электронной структуры были измерены ФЭСУР спектры ТИ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  на каждом из этапов, дисперсионные зависимости которых представлены на рис. 1.

На спектре, представленном на рис. 1а, видны поверхностные состояния, образующие конус Дирака (отмечены черными штриховыми линиями). Дисперсионная зависимость имеет характерный вид для теллурида висмута: нижняя часть конуса находится практически в валентной зоне вместе с точкой Дирака, верхняя часть отчетливо видна и располагается в объемной запрещенной зоне [17]. Из линейной аппроксимации верхней части конуса следует, что энергетическое положение точки Дирака составляет  $E_D = 0.24$  эВ. Валентная зона располагается в диапазоне энергий связи выше  $0.25$  эВ и имеет характерную  $M$ -образную форму с локальным минимумом вблизи точки  $\bar{\Gamma}$  поверхностной зоны Бриллюэна.

На втором этапе образец был нагрет до температуры  $420^\circ\text{C}$  с одновременным напылением  $\text{Co}$  толщиной  $2 \text{ \AA}$  на поверхность. В измеренном спектре ФЭСУР наблюдаются явные изменения в электронной структуре (рис. 1б). Поверхностные состояния становятся менее интенсивными и уширяются, при этом конус Дирака сдвигается относительно уровня Ферми в сторону больших энергий связи, что также наблюдалось в работе [14], нижняя часть конуса практически полностью сливается с состояниями валентной зоны и совсем не различима,  $E_D = 0.58$  эВ. Наблюдаемые изменения могут объясняться эффектом переноса электронов от адатомов к подложке. Действительно, атомы  $\text{Co}$  оказываются донорами электронов, создавая положительный заряд на поверхности, в результате изгиба зон вниз состояния смещаются в сторону больших энергий связи. При этом состояния зоны проводимости вблизи уровня Ферми на спектре не видны, в отличие от рис. 1а, что говорит об увеличении объемной запрещенной зоны в приповерхностных слоях. Подобные изменения наблюдались в работе [13] для системы  $\text{Fe}/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Данные изменения электронной структуры могут объясняться возможной трансформацией поверхности и образованием в приповерхностной области сплава, состоящего из атомов  $\text{Bi}$ ,  $\text{Te}$  и  $\text{Co}$ .

На третьем этапе система прогревалась до температуры  $540^\circ\text{C}$  с одновременным дополнительным напылением  $\text{Co}$  толщиной  $1 \text{ \AA}$  на поверхность. Спектры ФЭСУР системы представлены на рис. 1в. Положение точки Дирака сдвигается в сторону меньших энергий связи,  $E_D = 0.53$  эВ. Наблюдаемые из-

менения могут быть связаны с тем, что при температуре  $540^\circ\text{C}$  часть  $\text{Co}$ , находящегося на поверхности в виде островков, начинает десорбироваться. Возможно, часть  $\text{Co}$  встраивается в поверхностный слой, приводя к дальнейшему упорядочению сплавов  $\text{Bi}$ ,  $\text{Te}$  и  $\text{Co}$ . Изменения электронной структуры топологических изоляторов при прогреве были отмечены в работах [36–38], при этом прогрев с одновременным напылением атомов  $\text{Co}$  может приводить к трансформации поверхностных слоев с формированием поверхностных сплавов  $\text{Co}$ ,  $\text{Bi}$  и  $\text{Te}$ .

Для анализа возможности формирования химической связи между  $\text{Co}$  и атомами подложки ( $\text{Bi}$ ,  $\text{Te}$ ) были исследованы спектры РФЭС основных уровней данных элементов ( $\text{Bi } 4f$ ,  $\text{Te } 3d$ ,  $\text{Co } 2p$ ), полученные результаты представлены на рис. 2. С целью определения химического сдвига уровней спектры были разложены на соответствующие спектральные компоненты. На рис. 2а представлены спектры линии  $\text{Bi } 4f$ , положения пиков  $\text{Bi } 4f_{7/2}$  и  $\text{Bi } 4f_{5/2}$  имеют значения соответственно  $157.0$  эВ и  $162.3$  эВ, что согласуется с ранее опубликованными результатами для чистого ТИ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [39]. Спектры, измеренные на втором этапе, представлены на рис. 2б. Положение пиков  $\text{Bi } 4f$  показывают смещение в сторону большей энергии связи на  $0.2$  эВ. Результаты, полученные после проведения третьего этапа, представлены на рис. 2в. Пики смещаются еще на  $0.1$  эВ в ту же сторону. Спектры  $\text{Te } 3d$  для чистого ТИ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  представлены на рис. 2г. Для состояний  $\text{Te } 3d_{5/2}$  —  $571.3$  эВ и  $\text{Te } 3d_{3/2}$  —  $581.7$  эВ помимо основных линий наблюдаются их оксидные компоненты при значениях энергии  $575.0$  эВ и  $585.7$  эВ, что было описано ранее в работе [40]. На втором этапе (рис. 2д) оксидные пики исчезают, а значения энергии связи основных пиков сдвигаются в сторону уменьшения энергии связи на  $0.2$  эВ. Спектры РФЭС, полученные в результате третьего этапа, представлены на рис. 2е. Также был проведен анализ спектров  $\text{Co } 2p$  (рис. 2ж). Черный и красный спектры относятся соответственно ко второму и третьему этапу. Положение пика  $\text{Co } 2p_{3/2}$  соответствует  $778$  эВ, а  $\text{Co } 2p_{1/2}$  —  $793$  эВ. Также со стороны большей энергии связи наблюдаются сателлиты, соответствующие эффектам встряски (shake-up). Таким образом, поскольку пики  $\text{Bi } 4f$  и  $\text{Te } 3d$  смещаются в противоположные стороны, возможно образование химической связи  $\text{Co}$  с  $\text{Bi}$  и  $\text{Te}$ , что может свидетельствовать о встраивании напыленного  $\text{Co}$  в структуру  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  или формировании упорядоченных соединений на поверхности.

**Система  $\text{Co}/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .** Помимо немагнитного  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  с целью изучения возможности модифи-

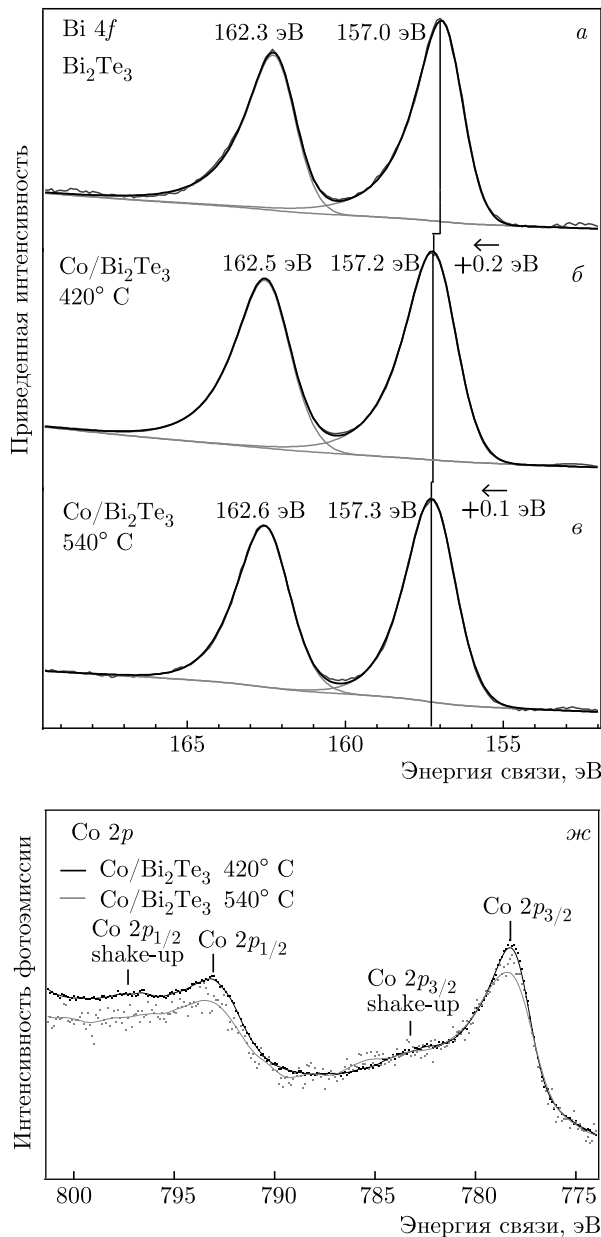
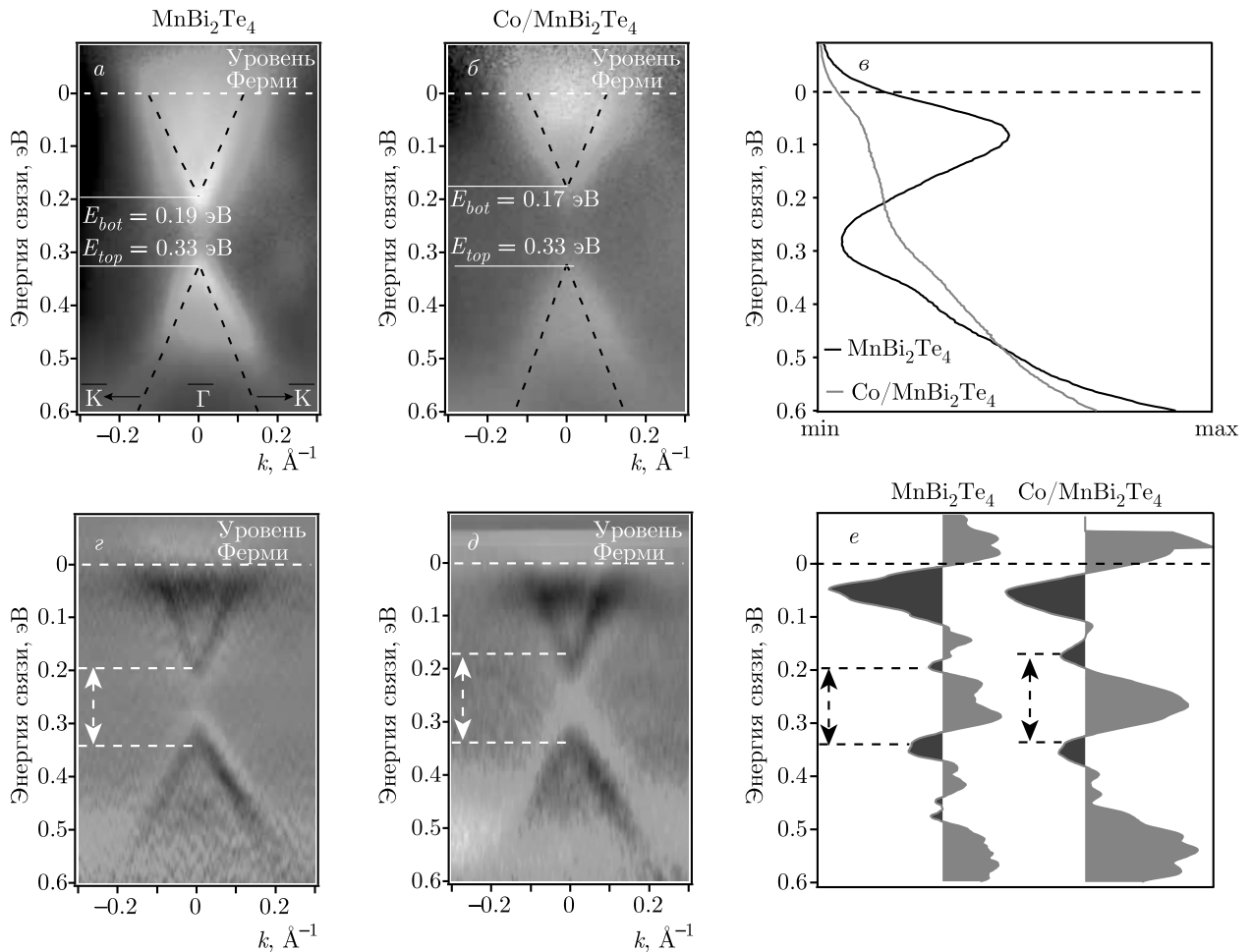


Рис. 2. Спектры РФЭС для ГИ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3+\text{Co}$ . Уровни Bi 4f и Te 3d, измеренные для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (a, z); для  $\text{Co}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  при прогреве до  $T = 420^\circ\text{C}$  (б, д); для  $\text{Co}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  при прогреве до  $T = 540^\circ\text{C}$  (в, е); уровень Co 2p для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , прогретого до  $T = 420^\circ\text{C}$  (черный спектр),  $540^\circ\text{C}$  (красный спектр) (жс)

кации электронной структуры собственных магнитных ГИ был исследован антиферромагнитный ГИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  с напылением атомов Co на поверхность. Поскольку Co — магнитный металл, он может влиять на магнитные моменты атомов в приповерхностном слое. Как следствие, может наблюдаться изменение электронной структуры топологических состояний и ЭЗЗ за счет изменения магнитного момента приповерхностных атомов.

Данная часть эксперимента состояла из двух этапов: на первом этапе был измерен чистый образец  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при комнатной температуре (рис. 3a), на втором этапе на поверхность нанесли слой Co толщиной  $1 \text{ \AA}$  также при комнатной температуре

(рис. 3б). Исследованные дисперсии электронных состояний представлены на рис. 3, для данных спектров была применена процедура нормализации. Рисунок 3a представляет спектр ФЭСУР для чистого образца  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , верхняя и нижняя части конуса Дирака отчетливо просматриваются, минимум верхней части конуса находится при энергии связи  $E_{bot} = 0.19$  эВ, значение энергии максимума нижней части конуса составляет  $E_{top} = 0.33$  эВ (значения энергий были получены из линейной аппроксимации), соответственно, величина запрещенной зоны составляет 140 мэВ. Необходимо отметить, что наблюдаемая запрещенная зона, вероятно, связана с объемной запрещенной зоной [41]. Ранее в работе



**Рис. 3.** Спектры ФЭСУР для ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , представленные после обработки с применением процедуры нормализации: *a* — чистого, *б* — после напыления на поверхность слоя  $\text{Co}$  толщиной  $1 \text{ \AA}$ , *в* — исходные профили в точке  $\Gamma$ , черный спектр соответствует  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , красный —  $\text{Co}/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , *г, д* — графики кривизны спектров соответственно для рис. *а, б*, *е* — профили в точке  $\Gamma$  для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и  $\text{Co}/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Все спектры были измерены при комнатной температуре,  $h\nu = 21.2 \text{ эВ}$

[29] экспериментально наблюдалась объемная ЭЗЗ порядка 200 мэВ и в дальнейших исследованиях значения величины наблюдаемой объемной ЭЗЗ варьируются от 180 до 220 мэВ, это объясняется тем, что в спектрах доминируют состояния объема, и величина ЭЗЗ зависит от энергии фотонов, при которой измеряются образцы [42, 43].

На втором этапе (рис. 3б) конус сдвигается в сторону уменьшения энергии связи, значение энергии  $E_{bot} = 0.17 \text{ эВ}$ , поверхностные состояния становятся менее интенсивными. Также после напыления  $\text{Co}$  величина ЭЗЗ увеличивается и становится равной 160 мэВ. На рис. 3в представлены профили в точке  $\Gamma$  без применения процедур нормализации. Видно, что напыление атомов  $\text{Co}$  приводит к появлению металлического фона и ослаблению интенсивности

состояний ТИ. Для более подробного изучения полученных спектров был проведен анализ кривизны спектров с использованием зависимости

$$C(E) = \frac{N''(E)}{(1 + N'(E)^2)^{3/2}},$$

поскольку данный метод позволяет улучшить визуализацию полученных данных и выявить спектральные особенности [44]. Рисунок 3г, д представляет результаты, полученные после применения метода анализа кривизны для системы соответственно на первом и втором этапах. Также осуществлена оценка величины ЭЗЗ, результаты представлены на рис. 3е. При этом стоит отметить, что наблюдаемая ЭЗЗ образована краями как поверхностных, так и объемных состояний. Поскольку после напы-



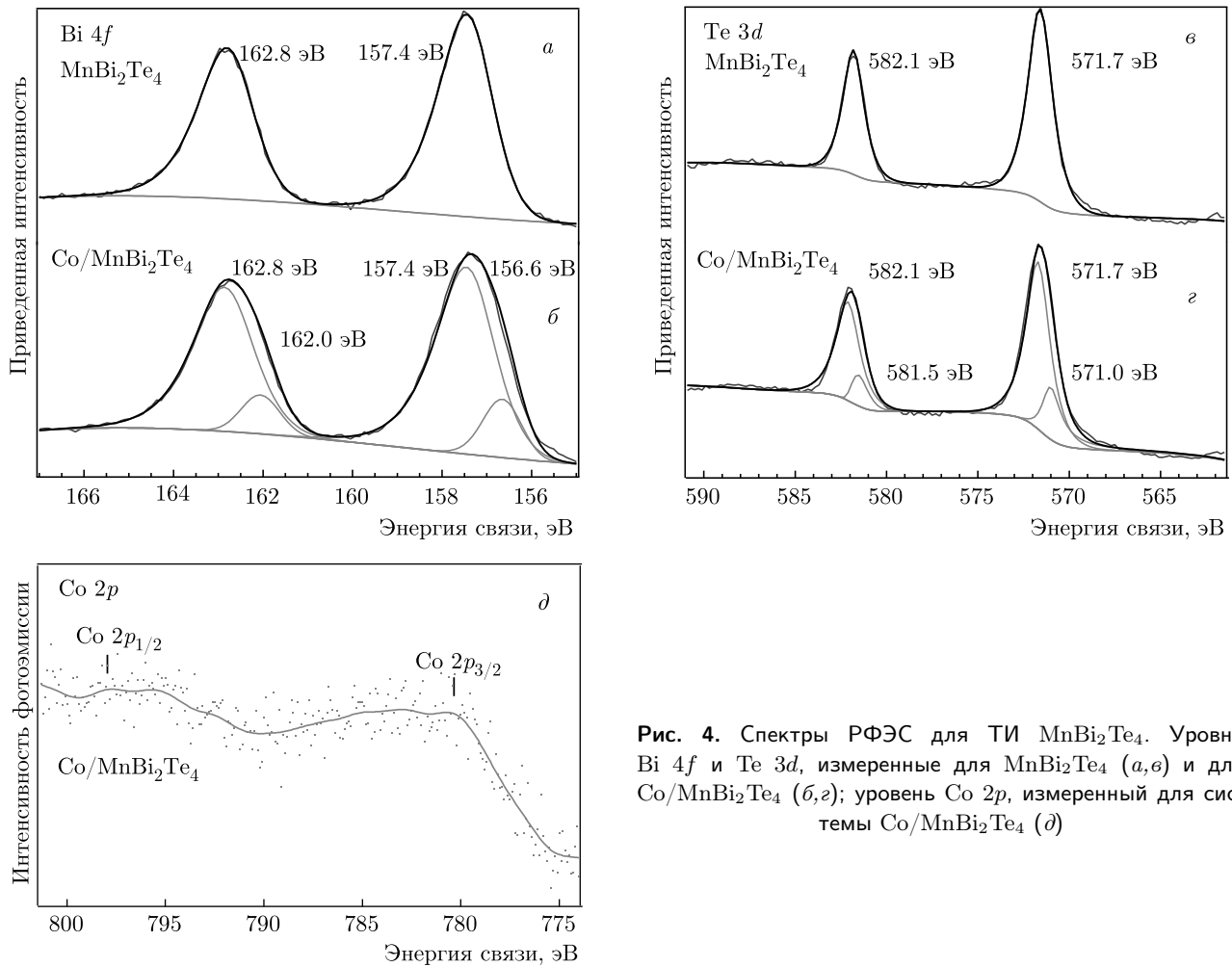


Рис. 4. Спектры РФЭС для ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Уровни  $\text{Bi } 4f$  и  $\text{Te } 3d$ , измеренные для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  (а, б) и для  $\text{Co}/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  (б, г); уровень  $\text{Co } 2p$ , измеренный для системы  $\text{Co}/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  (д)

ления Со изменяется величина ЭЗЗ, можно предположить, что в приповерхностной области  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  происходит замещение атомов Вi атомами Со или встраивание Со в вакансии Те, присутствующие в верхнем слое [45], что сказывается на электронной структуре поверхностных слоев. Для анализа формирования химической связи Со и атомов подложки были проведены измерения РФЭС.

Анализ спектров РФЭС был проведен для уровней  $\text{Bi } 4f$ ,  $\text{Te } 3d$  и  $\text{Co } 2p$  (рис. 4). Стоит отметить, что после напыления Со полуширина имеющихся пиков увеличивается. В связи с этим дальнейший анализ положения пиков проводился в рамках предположения, согласно которому уширенный пик состоит из двух компонент. При этом первая компонента соответствует пику, присутствующему на спектрах до напыления, а вторая компонента появляется в спектре в связи с напылением Со. На рис. 4а представлен пик  $\text{Bi } 4f_{7/2}$ , имеющий энергию 157.4 эВ и  $\text{Bi } 4f_{5/2}$  — 162.8 эВ. Рисунок 4б соответствует второму этапу,

спектры  $\text{Bi } 4f$  состоят из четырех компонент. Пики  $\text{Bi } 4f_{7/2}$ ,  $4f_{5/2}$  имеют те же положения максимумов пиков, при этом со стороны меньших энергий связи появляются дополнительные особенности. Спектры для  $\text{Te } 3d$  изменяются подобным образом. Для чистого  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  (рис. 4б) пики  $\text{Te } 3d_{5/2}$ ,  $3d_{3/2}$  находятся при энергиях 571.7 эВ и 582.1 эВ. Спектр  $\text{Te } 3d$  для ТИ с напыленным Со представлен на рис. 4г. Появление дополнительных пиков говорит о встраивании Со в вакансии Те или о возможном замещении Со/Вi. Наблюдаемые изменения в структуре остовных уровней  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  указывают на возможное формирование химической связи атомов Со с атомами Вi и Те. Для образца после напыления были сняты пики  $\text{Co } 2p$ , положения пиков  $\text{Co } 2p_{3/2}$  и  $\text{Co } 2p_{1/2}$  отмечены на рис. 4д. Значения энергии наблюдаемых пиков отличаются от металлического Со и составляют 782.0 эВ и 797.0 эВ соответственно для  $\text{Co } 2p_{3/2}$  и  $\text{Co } 2p_{1/2}$ , что также указывает на взаимодействие атомов Со с атомами подложки, поскольку

данные энергии близки к значениям энергий связи для соединения CoTe [46].

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была осуществлена адсорбция атомов Co на поверхность двух различных ТИ с целью изучения сплавов на основе магнитных металлов и модификации поверхности собственного магнитного ТИ. Для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  было произведено напыление Co на поверхность с прогревом до высоких температур и с использованием методов ФЭСУР и РФЭС выявлены изменения электронной структуры, заключающиеся в сдвиге точки Дирака и изменении структуры конуса Дирака, состояний валентной зоны и зоны проводимости, которые зависят от температуры и количества напыляемого металла. Анализ остовных уровней показал возможность формирования химической связи Co с Bi или Te. Другой частью эксперимента было исследование собственного антиферромагнитного ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при взаимодействии с атомами Co, результаты которого показали, что напыление Co на  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  приводит к сдвигу точки Дирака, появлению новых компонент остовных уровней, что свидетельствует о возможности формирования упорядоченного соединения с содержанием Co на поверхности  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .

**Финансирование.** Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 73028629), Российского научного фонда (грант № 18-12-00062), Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 20-32-70127, 21-52-12024, 18-29-12094), Фонда развития науки при Президенте Республики Азербайджан (грант № EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1-M-02), а также в рамках госзадания Института геологии и минералогии Сибирского отделения Российской академии наук и Института физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
2. Y. P. Chen, *Micro and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications* **IV**, 8373 (2012).
3. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
4. R. Yu, W. Zhang, H. J. Zhang et al., *Science* **329**, 61 (2010).
5. C. Z. Chang, P. Wei, and J. S. Moodera, *MRS Bulletin* **39**, 867 (2014).
6. C. Z. Chang and M. Li, *J. Phys.: Cond. Matter* **28**, 123002 (2016).
7. С. О. Фильнов, Ю. А. Сурнин, А. В. Королева, И. И. Климовских, Д. А. Естюнин, А. Ю. Варышалов, К. А. Бокай, К. А. Кох, О. Е. Терещенко, В. А. Голяшов, Е. В. Шевченко, А. М. Шикин, *ЖЭТФ* **156**, 483 (2019).
8. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nature Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).
9. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, A. V. Koroleva et al., *Phys. Sol. St.* **62**, 338 (2020).
10. M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki et al., *Appl. Phys. Lett.* **107**, 182401 (2015).
11. M. Li, C. Z. Chang, L. Wu et al., *Phys. Rev. Lett.* **114**, 146802 (2015).
12. I. Lee, C. K. Kim, J. Lee et al., *Proceed. National Acad. Sciences* **112**, 1316 (2015).
13. M. R. Scholz, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 256810 (2012).
14. M. R. Scholz, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko et al., *Phys. Stat. Sol. Rapid Res. Lett.* **7**, 139 (2013).
15. M. Vondráček, L. Cornils, J. Minár et al., *Phys. Rev. B* **94**, 161114 (2016).
16. N. de Jong, E. Frantzeskakis, B. Zwartsenberg et al., *Phys. Rev. B* **92**, 075127 (2015).
17. P. Y. Chuang, S. H. Su, C. W. Chong et al., *RSC Adv.* **8**, 423 (2018).
18. D. A. Pudikov, E. V. Zhizhin, and G. G. Vladimirov, *Phys. Sol. St.* **60**, 1016 (2018).
19. Ю. А. Сурнин, И. И. Климовских, Д. М. Состина, К. А. Кох, О. Е. Терещенко, А. М. Шикин, *ЖЭТФ* **153**, 641 (2018).
20. A. K. Kaveev, A. G. Bانشchikov, and A. N. Terpit-skiy, arXiv:1912.11878 (2019).
21. L. A. Walsh, C. M. Smyth, A. T. Barton et al., *J. Phys. Chem. C* **121**, 23551 (2017).

22. J. Sánchez-Barriga, I. I. Ogorodnikov, M. V. Kuznetsov et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 30520 (2017).
23. Е. К. Петров, И. В. Силкин, Т. В. Меньщикова, Е. В. Чулков, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 118 (2019).
24. М. М. Отроков, Т. В. Меньщикова, И. П. Русинов, М. Г. Вергниори, В. М. Кузнецов, Е. В. Чулков, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 275 (2017).
25. M. M. Otrokov, T. V. Menshchikova, M. G. Vergniory et al., *2D Materials* **4**, 025082 (2017).
26. T. Hirahara, S. V. Eremeev, T. Shirasawa et al., *Nano Lett.* **17**, 3493 (2017).
27. T. Hirahara, M. M. Otrokov, T. T. Sasaki et al., *Nature Commun.* **11**, 4821 (2020).
28. N. Bhattacharjee, K. Mahalingam, A. Fedorko et al., [arXiv:cond-mat/2110.02845](https://arxiv.org/abs/cond-mat/2110.02845).
29. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., *Nature* **576**, 416 (2019).
30. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al., *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
31. A. M. Shikin, *Phys. Sol. St.* **62**, 1460 (2020).
32. K. A. Kokh, B. G. Nenashev, A. E. Kokh et al., *J. Cryst. Growth* **275**, e2129 (2005).
33. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova et al., *J. Alloys Comp.* **789**, 443 (2019).
34. V. Thakur, K. Upadhyay, R. Kaur et al., *Mater. Today Adv.* **8**, 100082 (2020).
35. C. Wood, *Rep. Progress Phys.* **51**, 459 (1988).
36. P. M. Coelho, G. A. S. Ribeiro, A. Malachias et al., *Nano Lett.* **13**, 4517 (2013).
37. K. Schouteden, K. Govaerts, J. Debehets et al., *ACS Nano* **10**, 8778 (2016).
38. I. I. Klimovskikh, D. Sostina, A. Petukhov et al., *Sci. Rep.* **7**, 45797 (2017).
39. V. V. Atuchin, V. A. Golyashov, K. A. Kokh et al., *J. Sol. St. Chem.* **236**, 203 (2016).
40. C. R. Thomas, M. K. Vallon, M. G. Frith et al., *Chem. Mater.* **28**, 35 (2016).
41. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., *APL Mater.* **8**, 021105 (2020).
42. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
43. R. C. Vidal, H. Bentmann, T. R. F. Peixoto et al., *Phys. Rev. B* **100**, 121104 (2019).
44. P. Zhang, P. Richard, T. Qian et al., *Rev. Sci. Instr.* **82**, 043712 (2011).
45. M. Garnica, M. M. Otrokov, and P. C. Aguilar, [arXiv:2109.01615](https://arxiv.org/abs/2109.01615) (2021).
46. S. Demiss, R. Tromer, S. Siddique et al., [arXiv:2109.02783](https://arxiv.org/abs/2109.02783) (2021).

# НЕВЗАИМНОСТЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОБМЕННО-ДИПОЛЬНЫХ СПИНОВЫХ ВОЛН В ДВУСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНКАХ СО СКРЕЩЕННОЙ НАМАГНИЧЕННОСТЬЮ СЛОЕВ

*В. Д. Пойманов<sup>a\*</sup>, В. В. Кругляк<sup>b\*\*</sup>*

<sup>a</sup> *Донецкий национальный университет, 83001, Донецк*

<sup>b</sup> *University of Exeter, Stocker road, Exeter, EX4 4QL, United Kingdom*

Поступила в редакцию 4 июля 2021 г.,  
после переработки 11 ноября 2021 г.  
Принята к публикации 12 ноября 2021 г.

Представлена аналитическая теория распространения обменно-дипольных спиновых волн в двуслойных дипольно связанных магнитных пленках в приближении однородности динамической намагниченности по толщине каждого слоя. Рассмотрены различные случаи неодинакового намагничивания слоев в направлениях, параллельных и перпендикулярных направлению распространения волны. Для рассмотренных конфигураций рассчитаны спектры и эллиптичности спиновых волн, распространяющихся в противоположных направлениях. Показано, что как частота, так и эллиптичность прямой и обратной волн могут различаться, т. е. распространение становится невзаимным, когда хотя бы один из слоев намагничен в плоскости пленки перпендикулярно направлению распространения, включая случай, когда равновесные намагниченности слоев взаимно перпендикулярны. Невзаимность в таких двуслойных волноводах со скрещенной намагниченностью, однако, выражена слабее, чем в геометрии Дэймона–Эшбаха с антипараллельной намагниченностью слоев. Это различие объясняется тем, что в последней геометрии как величина, так и киральность циркулярно поляризованного динамического магнитодипольного поля вносят невзаимные вклады в энергию его взаимодействия с прецессирующей намагниченностью. В то же время в геометриях со скрещенной намагниченностью присутствует лишь один из этих вкладов.

DOI: 10.31857/S0044451022050108  
EDN: DSZZMV

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время проблема создания устройств на основе спиновых волн (СВ) [1] приобретает все большую актуальность, поскольку такие функциональные элементы могут иметь ряд преимуществ перед устройствами классической электроники и фотоники [2, 3]. Такими преимуществами являются высокая энергоэффективность и малые размеры, так как скорость распространения СВ на несколько порядков меньше скорости распространения электромагнитных волн. Другим преимуществом является наличие выделенного направления (киральности) прецессии намагниченности, определяемого ее рав-

новесной ориентацией, что приводит к различию в условиях распространения и рассеяния СВ в прямом и обратном направлениях [4–10]. Это дает возможность улучшения существующих и конструирования новых спин-волновых устройств для обработки сигналов — вентилях, фазовращателях, мультиплексоров и т. п. [10–15].

Диапазон обменных СВ (длиной до 100 нм) для технической реализации устройств пока что не используется. Поэтому основной практический интерес представляет диапазон магнитостатических волн (МСВ), которые имеют длины более 1 мкм и исследуются уже достаточно давно [1, 2]. Традиционно для описания их распространения в изолированном слое из уравнения Ландау–Лифшица можно найти тензор высокочастотной проницаемости, в котором пространственной дисперсией, как правило, пренебрегают. Затем полученный тензор используется в магнитостатических уравнениях Максвелла

\* E-mail: [poymanow76@gmail.com](mailto:poymanow76@gmail.com)

\*\* E-mail: [V.V.Kruglyak@exeter.ac.uk](mailto:V.V.Kruglyak@exeter.ac.uk)

для нахождения магнитостатического потенциала и поля МСВ, в котором пренебрегают уже временной дисперсией. Такое уравнение впервые было получено Уокером [16].

В последнее время все больше исследуется класс обменно-дипольных волн (ОДВ), которые имеют длины до 1 мкм и также подчиняются уравнению Уокера. Однако, в отличие от МСВ, для них уже не следует пренебрегать пространственной дисперсией в уравнении Ландау – Лифшица. Описание таких волн существенно упрощается для тонких пленок, где можно считать намагниченность однородной по толщине [8, 17]. В этом случае можно поступить наоборот — вначале найти размагничивающее поле в пленке и после усреднения по толщине учесть его в уравнении Ландау – Лифшица при получении закона дисперсии.

Задача о распространении МСВ в однослойных пленках хорошо исследована в геометрии с равновесной намагниченностью, перпендикулярной направлению распространения, — геометрии Дэймона–Эшбаха (ГДЭ) [4–8, 18]. Известно, что поле в МСВ локализовано вблизи одной из поверхностей слоя. Выбор этой поверхности обусловлен наличием двух выделенных направлений — распространения волны и равновесной намагниченности, определяющей также направление ее прецессии (киральности). При изменении направления одного из этих векторов поле локализуется на другой поверхности и МСВ распространяется с тем же законом дисперсии в обратном направлении. Таким образом, невзаимность в данном случае отсутствует, несмотря на то, что в исходном уравнении Уокера за счет существования в МСВ объемных магнитных зарядов имеется линейное по волновому вектору слагаемое.

В связи с указанным обстоятельством возникает вопрос о существовании магнитных структур, в которых спектр МСВ был бы невзаимным. Для этого необходимо, чтобы условия распространения прямой и обратной волн были разными. Этого можно достичь в двуслойной магнитной структуре, в которой слои разделены немагнитной прослойкой, так что волны в слоях взаимодействуют посредством магнитодипольной связи [5, 8]. В частности, если равновесные намагниченности  $M_1$  и  $M_2$  в слоях антипараллельны, то поля МСВ в них локализованы либо на обращенных друг к другу поверхностях слоев, либо наоборот, на противоположных. Очевидно, условия распространения МСВ в этих двух случаях различаются принципиально, и взаимность спектра нарушается. Кроме того, к невзаимности распространения в ГДЭ может приводить различие в фи-

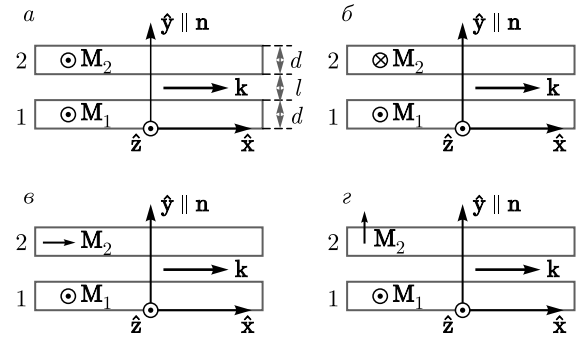


Рис. 1. (В цвете онлайн) Геометрии распространения ОДВ. Во всех случаях  $M_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ : а —  $M_2 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ ,  $M_1 \uparrow \uparrow M_2$  («параллельная» ГДЭ); б —  $M_2 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ ,  $M_1 \uparrow \downarrow M_2$  («антипараллельная» ГДЭ); в —  $M_2 \parallel \mathbf{k}$  (скрещенная геометрия 1); з —  $M_2 \parallel \mathbf{n}$  (скрещенная геометрия 2)

зических и геометрических параметрах слоев волновода, наличие внешнего подмагничивающего поля и т. п.

Целью данной работы является изучение невзаимного распространения ОДВ как в ГДЭ (рис. 1а, б), так и в геометриях, в которых векторы равновесной намагниченности взаимно скрещены под углом  $90^\circ$  и при этом намагниченность хотя бы одного из слоев перпендикулярна направлению распространения ОДВ. Необходимость исследования скрещенных конфигураций обусловлена их использованием в киральных устройствах генерации и контроля СВ [10–12]. Две геометрии, в которых обнаруживается невзаимность распространения, представлены на рис. 1в, з ( $\mathbf{n}$  — нормаль к слоям,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор). Во всех случаях  $M_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ . В других геометриях, когда равновесные намагниченности одновременно направлены либо вдоль  $\mathbf{n}$ , либо вдоль  $\mathbf{k}$ , а также в случаях, когда одна из намагниченностей направлена вдоль  $\mathbf{n}$ , а другая — вдоль  $\mathbf{k}$ , спектр является взаимным. В настоящей работе аналитически исследуется наиболее простой случай тождественных неограниченных в плоскости магнитных слоев двуслойного волновода. Случай распространения СВ в конечных структурах, ограниченных в двух (полосовой волновод) либо трех (резонатор Фабри–Перо [19]) направлениях, требует численного моделирования.

## 2. ГЕОМЕТРИЯ ДЭЙМОНА – ЭШБАХА: $M_2 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$

Рассмотрим двуслойную магнитную структуру, геометрия которой изображена на рис. 1а и 1б, соответствующих ГДЭ с параллельным и антипарал-

лельным намагничиванием слоев. В этом случае при распространении ОДВ возникают как объемные, так и поверхностные магнитные заряды. Запишем уравнение Максвелла для размагничивающего поля такой структуры, вводя магнитостатический потенциал  $\mathbf{h} = \nabla\psi$ :

$$\Delta\psi = -4\pi(\nabla \cdot \mathbf{m}). \quad (1)$$

Распределение намагниченности в слоях зададим в виде плоской ОДВ:

$$\begin{aligned} m_x(x, y) &= (\Pi_1(y)m_{1x} + \Pi_2(y)m_{2x}) \exp(ik_x x), \\ m_y(x, y) &= (\Pi_1(y)m_{1y} + \Pi_2(y)m_{2y}) \exp(ik_x x), \end{aligned} \quad (2)$$

где амплитуды  $m_{1x(y)}$  и  $m_{2x(y)}$  в общем случае комплексны, измеряемые компоненты намагниченности являются вещественными частями соответствующих комплексных функций, а  $\Pi_1(y)$  и  $\Pi_2(y)$  — прямоугольные функции:

$$\Pi_1(y) = \theta(y) - \theta(y - d_1), \quad (3)$$

$$\Pi_2(y) = \theta(y - d_1 - l) - \theta(y - d_1 - l - d_2).$$

Уравнение Уокера в такой геометрии имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -4\pi \left( \frac{\partial m_x}{\partial x} + \frac{\partial m_y}{\partial y} \right). \quad (4)$$

Решение уравнения (4) с учетом (2) и (3) приведено в Приложении А и дает усредненный по толщине пленки тензор размагничивающих факторов  $\hat{N}$ . Для случая одинаковых слоев связь между компонентами размагничивающего поля и компонентами динамической намагниченности можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} h_{d,1x} \\ h_{d,1y} \\ h_{d,2x} \\ h_{d,2y} \end{pmatrix} = e^{ik_x x} \hat{N} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2x} \\ m_{2y} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где

$$\hat{N} = -4\pi \begin{pmatrix} 1 - \xi & 0 & \zeta & -i\sigma\zeta \\ 0 & \xi & -i\sigma\zeta & -\zeta \\ \zeta & i\sigma\zeta & 1 - \xi & 0 \\ i\sigma\zeta & -\zeta & 0 & \xi \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$\sigma \equiv k_x / |k_x| = \pm 1$  — маркер направления распространения ОДВ,

$$\xi = \frac{1 - e^{-kd}}{kd}, \quad \zeta = \frac{(1 - e^{-kd})^2}{2kd} e^{-kl}, \quad (7)$$

$d$  — толщины слоев, а  $l$  — величина зазора между ними (рис. 1а).

Используем найденное размагничивающее поле для исследования динамики намагниченности в слоях. Плотность энергии  $W_n$  и эффективное поле  $\mathbf{H}_{eff,n}$  для каждого из них задаются выражениями

$$\begin{aligned} W_n &= \\ &= \frac{1}{2} [\lambda^2 (\nabla \cdot \mathbf{M}_n)^2 + \beta (\mathbf{M}_{n,x}^2 + \mathbf{M}_{n,y}^2) - \mathbf{M}_n \cdot \mathbf{h}_{d,n}], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\mathbf{H}_{eff,n} = \lambda^2 \Delta \mathbf{m}_n - \beta (\mathbf{m}_{n,x} + \mathbf{m}_{n,y}) + \mathbf{h}_{d,n}, \quad (9)$$

где  $\lambda$  — обменная длина,  $n$  — номер слоя,  $\beta$  — константа одноосной анизотропии,  $\mathbf{h}_{d,n}$  — размагничивающее поле в  $n$ -м слое, определяемое формулами (5)–(7).

Линеаризованное уравнение Ландау–Лифшица для каждого слоя в общем случае при наличии однородного обмена, легкоосной анизотропии (вдоль направления равновесной намагниченности), внешнего и рассмотренного выше размагничивающего поля ОДВ представим как

$$i\omega \mathbf{m}_n + \gamma [\mathbf{M}_{0,n} \times ((\lambda^2 k^2 + \beta) \mathbf{m}_n - \mathbf{h}_{d,n})] = 0. \quad (10)$$

Нахождение спектра ОДВ из выражения (10) в общем случае представлено в Приложении В. В случае слоев с одинаковыми толщинами и намагниченностью насыщения в отсутствие внешнего поля уравнения динамики намагниченностей имеют вид

$$\begin{pmatrix} \Omega_x & i\sigma_1 \Omega & \zeta & -i\sigma\zeta \\ -i\sigma_1 \Omega & \Omega_y & -i\sigma\zeta & -\zeta \\ \zeta & i\sigma\zeta & \Omega_x & i\sigma_2 \Omega \\ i\sigma\zeta & -\zeta & -i\sigma_2 \Omega & \Omega_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2x} \\ m_{2y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где  $\Omega = \omega/\omega_M$  и  $\Omega_{ex} = (\lambda^2 k^2 + \beta)/4\pi$  — частоты в единицах  $\omega_M = 4\pi\gamma M$  и

$$\begin{aligned} \Omega_x(k) &= \Omega_{ex} + 1 - \xi, & \Omega_y(k) &= \Omega_{ex} + \xi, \\ \Omega_z(k) &= \Omega_{ex}. \end{aligned} \quad (12)$$

Маркеры при  $\Omega$  определены как  $\sigma_n \equiv M_{0,n}/|M_{0,n}| = \pm 1$ , где  $M_{0,n}$  обозначает проекцию равновесной намагниченности на координатную ось, перпендикулярную плоскости прецессии. Наличие этих маркеров в (11) говорит о том, что случаи противоположного намагничивания различаются киральностью прецессии намагниченности. Характеристическое уравнение получается из (11) приравниванием к нулю ее определителя:

$$\begin{aligned} \Omega^4 - 2\Omega^2 (\Omega_x \Omega_y - 2\zeta^2 \sigma_1 \sigma_2) + 4\Omega \sigma s \zeta^2 (\Omega_x + \Omega_y) + \\ + \Omega_x^2 \Omega_y^2 - \zeta^2 (\Omega_x + \Omega_y)^2 = 0, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $s = (\sigma_1 - \sigma_2)/2 = \pm 1$  — антисимметричный маркер, отличный от нуля при антипараллельной равновесной поляризации намагниченности слоев. Отметим, что в отсутствие магнитодипольной связи между слоями ( $\zeta \rightarrow 0$ ) в каждом слое частота колебаний равна  $\Omega_{xy} = \sqrt{\Omega_x \Omega_y}$ . Эллиптичности ОДВ, как следует из (11), имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &\equiv \frac{m_{1y}}{im_{1x}} = -\sigma \frac{\Omega_x - \sigma\sigma_1\Omega}{\Omega_y - \sigma\sigma_1\Omega}, \\ \varepsilon_2 &\equiv \frac{m_{2y}}{im_{2x}} = \sigma \frac{\Omega_x + \sigma\sigma_2\Omega}{\Omega_y + \sigma\sigma_2\Omega}. \end{aligned} \quad (14)$$

Введем также параметры отношения амплитуд намагниченности одноименных компонент в разных слоях:

$$\begin{aligned} \delta_x &\equiv \frac{m_{2x}}{m_{1x}} = \frac{(\Omega^2 - \Omega_x \Omega_y)(\Omega_y + \sigma\sigma_2\Omega)}{\zeta(\Omega_x + \Omega_y + 2\sigma\sigma_1\Omega)(\Omega_y - \sigma\sigma_1\Omega)}, \\ \delta_y &\equiv \frac{m_{2y}}{m_{1y}} = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \delta_x = \\ &= -\frac{(\Omega^2 - \Omega_x \Omega_y)(\Omega_x + \sigma\sigma_2\Omega)}{\zeta(\Omega_x + \Omega_y + 2\sigma\sigma_1\Omega)(\Omega_x - \sigma\sigma_1\Omega)}. \end{aligned} \quad (15)$$

### 2.1. $M_1 \uparrow\uparrow M_2$ («параллельная» геометрия Дэймона – Эшбаха)

В случае параллельного намагничивания слоев (рис. 1а), обозначаемом ниже индексом « $\uparrow\uparrow$ »,  $s = 0$ ,  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_0$ , уравнение (13) является биквадратным,

$$\begin{aligned} \Omega^4 - 2\Omega^2 (\Omega_x \Omega_y - 2\zeta^2) + \\ + \left( \Omega_x^2 \Omega_y^2 - \zeta^2 (\Omega_x + \Omega_y)^2 \right) = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

и имеет корни, не зависящие от направления распространения  $\sigma$  (оптическая ветвь соответствует знаку «+», акустическая — «-»):

$$\Omega_{\uparrow\uparrow\pm} = \sqrt{\Omega_x \Omega_y - 2\zeta^2 \pm \zeta \sqrt{(\Omega_x - \Omega_y)^2 + 4\zeta^2}}. \quad (17)$$

Таким образом, спектр в данном случае является взаимным, т. е. одинаковым для  $\sigma = \pm 1$ , и содержит две симметричные ветви. Максимальное значение величины  $\zeta$  равно приблизительно 0,2, т. е. ее можно считать малым параметром в уравнении (16). Переписав его в виде

$$(\Omega^2 - \Omega_x \Omega_y)^2 = \zeta^2 \left( (\Omega_x + \Omega_y)^2 - 4\Omega^2 \right)$$

и подставив в правую часть невозмущенную частоту  $\Omega_{xy}$ , в первом приближении по  $\zeta$  получаем

$$\begin{aligned} \Omega_{\uparrow\uparrow\pm} &= \sqrt{\Omega_x \Omega_y \pm \zeta |\Omega_y - \Omega_x|} = \\ &= \Omega_{xy} \pm \zeta \frac{|\Omega_y - \Omega_x|}{2\Omega_{xy}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Такое представление является более удобным для анализа и может быть получено разложением (17) в ряд. После подстановки (18) в (14), (15) выражения для эллиптичности и параметров  $\delta$  в нулевом приближении по  $\zeta$  принимают вид

$$\varepsilon_{1\uparrow\uparrow\pm} = \varepsilon_{2\uparrow\uparrow\pm} \approx \sigma_0 \sqrt{\frac{\Omega_x}{\Omega_y}},$$

$$\delta_{x\uparrow\uparrow\pm} = \delta_{y\uparrow\uparrow\pm} \approx \pm (\Omega_y - \Omega_x).$$

Отметим, что смена знака  $(\Omega_y - \Omega_x)$  и, следовательно, относительной фазы колебаний в смежных слоях происходит при  $kd \approx 1.6$ , что практически достижимо только для ОДВ, длина которых меньше толщины пленки. Поэтому в рассматриваемом диапазоне длин волн можно считать, что  $\delta_{x\uparrow\uparrow\pm} = \delta_{y\uparrow\uparrow\pm} \approx \pm 1$ .

### 2.2. $M_1 \uparrow\downarrow M_2$ («антипараллельная» геометрия Дэймона – Эшбаха)

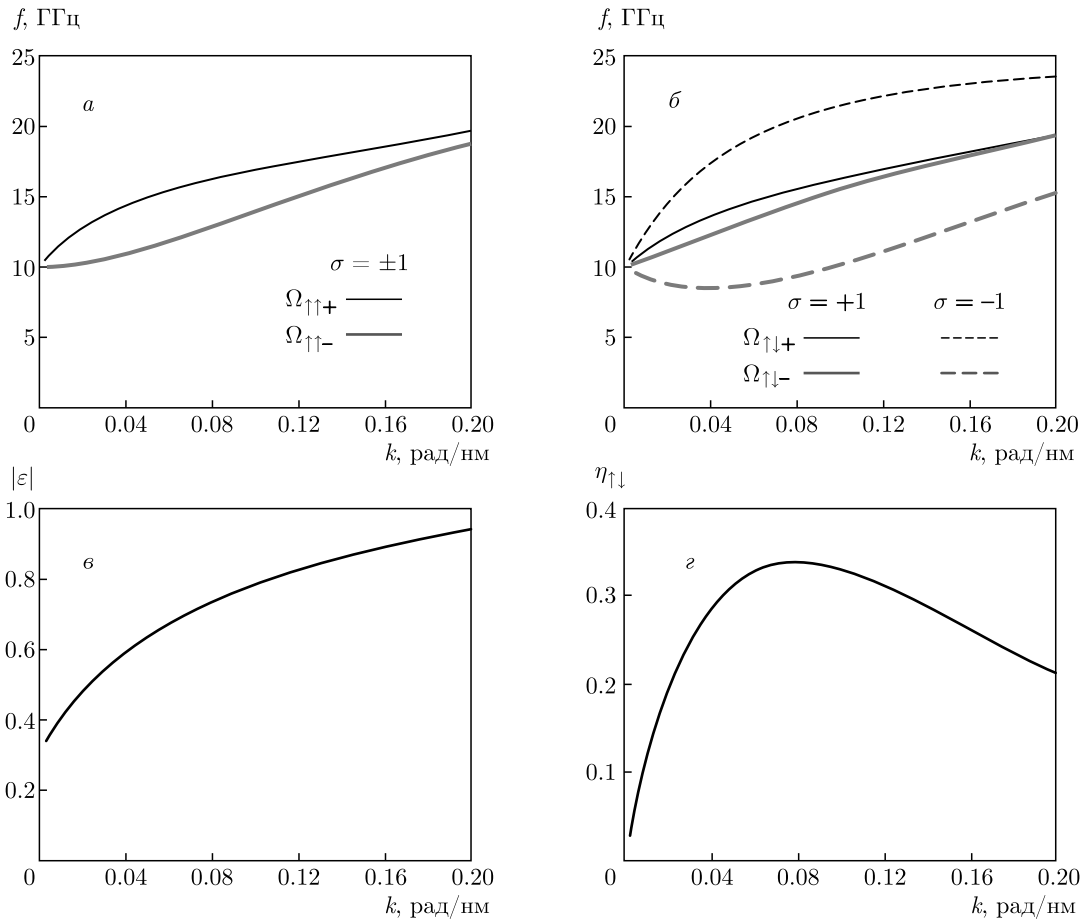
В случае антипараллельного намагничивания слоев (рис. 1б), обозначаемом ниже индексом « $\uparrow\downarrow$ », имеем

$$\begin{aligned} \Omega^4 - 2\Omega^2 (\Omega_x \Omega_y + 2\zeta^2) + 4\Omega\sigma s \zeta^2 (\Omega_x + \Omega_y) + \\ + \Omega_x^2 \Omega_y^2 - \zeta^2 (\Omega_x + \Omega_y)^2 = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

и ветви дисперсионного уравнения (13) (оптическая  $\Omega_{\uparrow\downarrow+}$  и акустическая  $\Omega_{\uparrow\downarrow-}$ ) определяются как

$$\begin{aligned} \Omega_{\uparrow\downarrow+} &= \sqrt{(\Omega_x + \zeta)(\Omega_y + \zeta) - \sigma s \zeta}, \\ \Omega_{\uparrow\downarrow-} &= \sqrt{(\Omega_x - \zeta)(\Omega_y - \zeta) + \sigma s \zeta}, \\ \Omega_{\uparrow\downarrow+} &> \Omega_{\uparrow\downarrow-}. \end{aligned} \quad (20)$$

Очевидно, в этом случае спектр обладает невзаимностью, что выражается в зависимости от направления распространения  $\sigma = \pm 1$ . Объясняется это тем, что при одинаковых направлениях равновесной намагниченности поле ОДВ формируется вблизи поверхности по одну и ту же сторону в обоих слоях, и при изменении направления распространения ОДВ поле «переходит» на другую сторону (вместе с этим изменяется и киральность ОДВ). Если же направления намагничивания различны, то ОДВ формируются на ближайших друг к другу поверхностях



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Геометрия Дэймона–Эшбаха. Ветви дисперсионного уравнения: *а* — параллельное намагничивание (взаимное распространение) и *б* — антипараллельное намагничивание (невзаимное распространение) слоев. Штриховые линии на рис. *б* соответствуют ОДВ, бегущим в обратном направлении. *в*) Модуль эллиптичности  $|\varepsilon_{1\uparrow\pm}| = |\varepsilon_{2\uparrow\pm}| = |\varepsilon_{1\downarrow\pm}| = |\varepsilon_{2\downarrow\pm}|$ . *г*) Параметр невязимности

для одного направления распространения и на отдаленных — для противоположного. Поэтому условия распространения в прямом и обратном направлениях при этом будут различными.

Аналогично случаю параллельных взаимных ориентаций выпишем ветви дисперсионного уравнения в первом приближении по  $\zeta$ , а эллиптичности (14) и отношение амплитуд намагниченности слоев (15) — в нулевом. Уравнение (19), записанное в виде

$$\Omega^2 - \Omega_x \Omega_y = \pm \zeta |\Omega_x + \Omega_y - 2\sigma s \Omega|,$$

дает следующие ветви:

$$\Omega_{\uparrow\downarrow\pm} = \sqrt{\Omega_x \Omega_y \pm \zeta \left( \sqrt{\Omega_x} - \sigma s \sqrt{\Omega_y} \right)^2}, \quad (21)$$

откуда следует

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1\uparrow\pm} &= -\varepsilon_{2\uparrow\pm} \approx s \sqrt{\frac{\Omega_x}{\Omega_y}}, \\ \delta_{x\uparrow\pm} &= \delta_{y\uparrow\pm} \approx \pm 1. \end{aligned} \quad (22)$$

Таким образом, невязимость распространения ОДВ обусловлена наличием в уравнении (13) линейного по частоте слагаемого, содержащего быстро убывающий с величиной зазора между слоями множитель  $\zeta$ . Для характеристики величины невязимности введем параметр  $\eta$ , равный отношению разности частот при прямом и обратном распространении к средней частоте:

$$\eta_{\uparrow\downarrow} \equiv 2 \left| \frac{\Omega_{\uparrow\downarrow,\sigma=+1} - \Omega_{\uparrow\downarrow,\sigma=-1}}{\Omega_{\uparrow\downarrow,\sigma=+1} + \Omega_{\uparrow\downarrow,\sigma=-1}} \right| \approx \frac{2\zeta}{\Omega_{xy}}. \quad (23)$$

Приведем зависимости частоты от волнового числа в ГДЭ. При расчетах будем использовать



значения магнитных параметров, характерных для пермаллоя (заметим, что в последнее время также ведутся активные исследования СВ в сверхтонких пленках железо-иттриевого граната [20]): обменная длина  $\lambda = 5.3$  нм, характерная угловая частота  $\omega_M = 176$  рад/нс ( $4\pi M = 10^4$  Гс), за исключением константы одноосной анизотропии  $B = 1.45$ . Последняя имеет обобщенный смысл и может учитывать вклады различной природы, такие как магнитокристаллическая анизотропия или анизотропия формы, а также наличие внешнего подмагничивающего поля. Верхняя граница волнового числа  $0.2$  рад/нм соответствует минимальной длине волны  $30$  нм. Параметры двуслойной структуры: зазор между слоями  $l = 5$  нм, толщина слоев  $d = 5$  нм. На рис. 2а изображены ветви дисперсионного уравнения, построенные по формуле (17) для случая параллельных равновесных намагниченностей (см. рис. 1а), а на рис. 2б — для антипараллельной ориентации (прямая и обратная волны, формула (21)). На рис. 2в,г представлены зависимости эллиптичности (14) и параметра невзаимности (23), которые оказываются независимыми от направлений распространения ОДВ и намагничивания слоев.

### 2.3. Скрещенная геометрия 1: $\mathbf{M}_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ , $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$

Рассмотрим две другие геометрии, в которых также имеет место невзаимность распространения. Для каждой из них векторы равновесной намагниченности скрещены так, что  $\mathbf{M}_1 \perp \mathbf{M}_2$ . При этом первый слой намагничен параллельно его плоскости и перпендикулярно направлению распространения ОДВ, так что  $\mathbf{M}_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ . Во втором слое намагниченность параллельна направлению распространения ОДВ:  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$ . В этом случае во втором слое отсутствуют объемные магнитные заряды. Эффективное поле в слоях равно

$$\mathbf{H}_{eff,n} = \lambda^2 \Delta \mathbf{m}_n - \beta (\mathbf{m}_{n,x} + \mathbf{m}_{n,y}) + \mathbf{h}_{d,n}. \quad (24)$$

Компоненты размагничивающего поля  $\mathbf{h}_{d,n}$  в этом случае

$$\begin{pmatrix} h_{d,1x} \\ h_{d,1y} \\ h_{d,2y} \end{pmatrix} = -4\pi \begin{pmatrix} 1 - \xi & 0 & -i\sigma\zeta \\ 0 & \xi & -\zeta \\ i\sigma\zeta & -\zeta & \xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2y} \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Уравнение Ландау – Лифшица для каждого слоя и динамические переменные для данной геометрии запишем в матричном виде, используя обозначения (12):

$$\begin{pmatrix} \Omega_x & i\sigma_1\Omega & -i\sigma\zeta & 0 \\ -i\sigma_1\Omega & \Omega_y & -\zeta & 0 \\ i\sigma\zeta & -\zeta & \Omega_y & i\sigma_2\Omega \\ 0 & 0 & -i\sigma_2\Omega & \Omega_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2y} \\ m_{2z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Дисперсионное уравнение принимает вид

$$\Omega^4 - \Omega_y (\Omega_x + \Omega_z) \Omega^2 + 2\sigma\sigma_1\zeta^2\Omega_z\Omega + \Omega_z (\Omega_y^2\Omega_x - \zeta^2 (\Omega_x + \Omega_y)) = 0. \quad (27)$$

Дисперсионное уравнение (27) имеет четыре разных по модулю корней – два положительных и два отрицательных. При смене знака величины  $\sigma\sigma_1$  оно имеет те же корни, но противоположного знака. Следовательно, ветвями для случаев  $\sigma\sigma_1 = \pm 1$  можно считать положительные корни соответствующего дисперсионного уравнения.

Для эллиптичности и отношения амплитуд в разных слоях имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,M_2\parallel\mathbf{k}} &\equiv \frac{m_{1y}}{im_{1x}} = -\sigma \frac{\Omega_x - \sigma\sigma_1\Omega}{\Omega_y - \sigma\sigma_1\Omega}, \\ \varepsilon_{2,M_2\parallel\mathbf{k}} &\equiv \frac{m_{2z}}{im_{2y}} = \sigma_2 \frac{\Omega}{\Omega_z}, \\ \delta_y &\equiv \frac{m_{2y}}{m_{1y}} = \frac{\Omega_x\Omega_y - \Omega^2}{\zeta (\Omega_x - \sigma\sigma_1\Omega)}. \end{aligned} \quad (28)$$

Аналогично ГДЭ, выпишем приближенные выражения, используя малость  $\zeta$ , для чего перепишем дисперсионное уравнение в виде

$$\begin{aligned} (\Omega^2 - \Omega_x\Omega_y) (\Omega^2 - \Omega_z\Omega_y) &= \\ &= \zeta^2\Omega_z (\Omega_x + \Omega_y - 2\sigma\sigma_1\Omega). \end{aligned} \quad (29)$$

Невозмущенная частота колебаний слоя 1 равна  $\Omega_{xy} = \sqrt{\Omega_x\Omega_y}$ . Подставляя ее в правую часть выражения (29), для первой ветви ОДВ получаем

$$\begin{aligned} \Omega_{M_2\parallel\mathbf{k}}^{(1)} &= \\ &= \sqrt{\Omega_x\Omega_y + \zeta^2 \frac{\Omega_z (\Omega_x + \Omega_y - 2\sigma\sigma_1\sqrt{\Omega_x\Omega_y})}{\Omega_y (\Omega_x - \Omega_z)}}. \end{aligned} \quad (30)$$

Аналогично, невозмущенная частота колебаний слоя 2 равна  $\Omega_{zy} = \sqrt{\Omega_z\Omega_y}$ . Подставляя ее в правую часть выражения (29), для второй ветви ОДВ получаем

$$\begin{aligned} \Omega_{M_2\parallel\mathbf{k}}^{(2)} &= \\ &= \sqrt{\Omega_z\Omega_y - \zeta^2 \frac{\Omega_z (\Omega_x + \Omega_y - 2\sigma\sigma_1\sqrt{\Omega_z\Omega_y})}{\Omega_y (\Omega_x - \Omega_z)}}. \end{aligned} \quad (31)$$

Отметим характерную особенность скрещенных геометрий, следующую из выражений (30), (31).

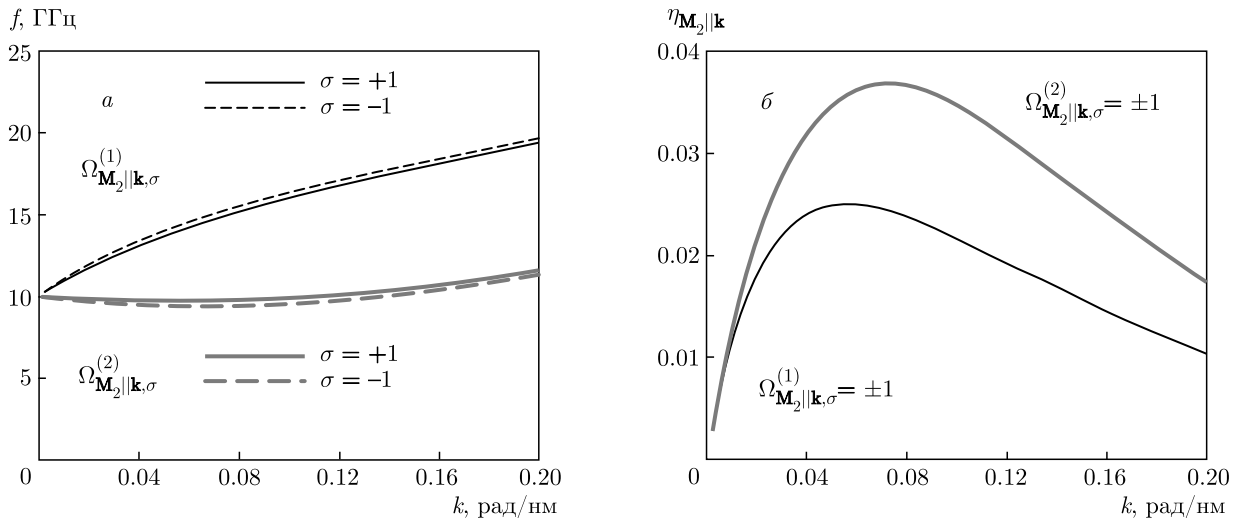


Рис. 3. (В цвете онлайн) Скрещенная геометрия 1:  $M_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ ,  $M_2 \parallel \mathbf{k}$ . а) Ветви дисперсионных уравнений (30) — черные линии, (31) — синие линии; штриховые линии соответствуют ОДВ, бегущим в обратном направлении. б) Соответствующие параметры невязимости. Значения параметров слоев те же, что и на рис. 2 (ГДЭ)

В силу невырожденности корней дисперсионного уравнения, в отличие от ГДЭ, в них величина расщепления ветвей прямого и обратного распространения, а также параметр невязимости (23) имеют более высокий (второй) порядок малости по  $\zeta$ , как это следует из сравнения формул (18), (21) с (30), (31). Поэтому эффект невязимости в этом случае выражен гораздо слабее. Это можно заметить также из графиков, представленных на рис. 3, где параметры невязимости ОДВ, соответствующие каждому слою, рассчитаны по формулам

$$\begin{aligned} \eta_{M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(1)} &\equiv 2 \left| \frac{\Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=+1}^{(1)} - \Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=-1}^{(1)}}{\Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=+1}^{(1)} + \Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=-1}^{(1)}} \right| \approx \\ &\approx \frac{2\zeta^2 \Omega_z}{(\Omega_x - \Omega_z) \Omega_{xy} \Omega_y}, \\ \eta_{M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(2)} &\equiv 2 \left| \frac{\Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=+1}^{(2)} - \Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=-1}^{(2)}}{\Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=+1}^{(2)} + \Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}, \sigma=-1}^{(2)}} \right| \approx \\ &\approx \frac{2\zeta^2 \Omega_z}{(\Omega_x - \Omega_z) \Omega_{zy} \Omega_y}. \end{aligned} \quad (32)$$

Эллиптичности и отношение амплитуд намагниченностей слоев для каждой из ОДВ (30), (31) имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1, M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(1)} &= \sigma_1 \sqrt{\frac{\Omega_x}{\Omega_y}}, \quad \varepsilon_{2, M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(1)} = \sigma_2 \frac{\sqrt{\Omega_x \Omega_y}}{\Omega_z}, \\ \delta_{y, M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(1)} &= -\zeta \frac{\Omega_z (\sqrt{\Omega_x} - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_y})}{\sqrt{\Omega_x \Omega_y} (\Omega_x - \Omega_z)}, \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1, M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(2)} &= -\sigma \frac{\Omega_x - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_y}}{\Omega_y - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_y}}, \\ \varepsilon_{2, M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(2)} &= \sigma_2 \sqrt{\frac{\Omega_y}{\Omega_z}}, \\ \delta_{y, M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(2)} &= \frac{\Omega_y (\Omega_x - \Omega_z)}{\zeta (\Omega_x - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_y})}. \end{aligned} \quad (34)$$

Величины в выражениях (33) и (34) — эллиптичности в слоях и отношения амплитуд намагниченности слоев на частотах, равных соответственно  $\Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(1)}$  и  $\Omega_{M_2 \parallel \mathbf{k}}^{(2)}$ . Графики зависимостей (33) и (34) представлены на рис. 4.

#### 2.4. Скрещенная геометрия 2: $M_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ , $M_2 \parallel \mathbf{n}$

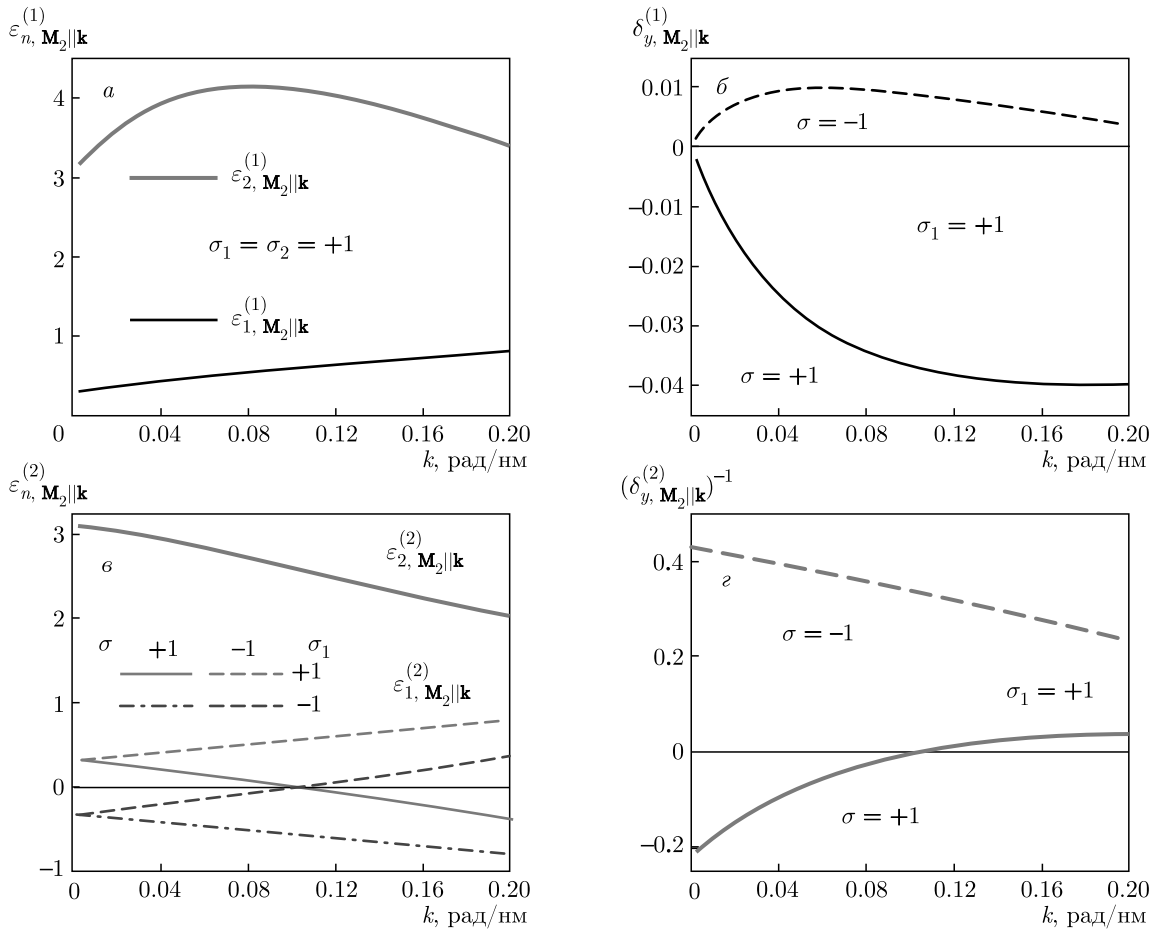
В этом случае во второй пленке отсутствуют поверхностные магнитные заряды. Эффективное поле в слоях

$$\mathbf{H}_{eff, n} = \lambda^2 \Delta \mathbf{m}_n - \beta (\mathbf{m}_{n,x} + \mathbf{m}_{n,y}) + \mathbf{h}_{d,n}. \quad (35)$$

Компоненты размагничивающего поля  $\mathbf{h}_{d,n}$ :

$$\begin{pmatrix} h_{d,1x} \\ h_{d,1y} \\ h_{d,2x} \end{pmatrix} = -4\pi \begin{pmatrix} 1 - \xi & 0 & \zeta \\ 0 & \xi & -i\sigma\zeta \\ \zeta & i\sigma\zeta & 1 - \xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2x} \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Уравнение Ландау–Лифшица для каждого слоя и динамические переменные для данной геометрии:



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Скрещенная геометрия 1:  $\mathbf{M}_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ ,  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$ . Значения параметров слоев те же, что и на рис. 2, 3. *а*) Эллиптичности в первом (черная линия) и втором (синяя линия) слоях для ветви дисперсии  $\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}}^{(1)}$ . *б*) Соответствующие случаю *а* отношения амплитуд в слоях для прямой (сплошная линия) и обратной (штриховая линия) волн. *в*) Эллиптичности для ветви дисперсии  $\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}}^{(2)}$ . Разные линии соответствуют разным слоям, разным направлениям намагничивания слоя 1, а также разным направлениям распространения ОДВ. *г*) Соответствующие рис. *в* отношения амплитуд в слоях для прямой (сплошная линия) и обратной (штриховая линия) волн

$$\begin{pmatrix} \Omega_x & i\sigma_1\Omega & 0 & \zeta \\ -i\sigma_1\Omega & \Omega_y & 0 & -i\sigma\zeta \\ 0 & 0 & \Omega_z & i\sigma_2\Omega \\ \zeta & i\sigma\zeta & -i\sigma_2\Omega & \Omega_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2z} \\ m_{2x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}} &= \frac{m_{1y}}{im_{1x}} = -\sigma \frac{\Omega_x - \sigma\sigma_1\Omega}{\Omega_y - \sigma\sigma_1\Omega}, \\ \varepsilon_{2, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}} &= \frac{m_{2x}}{im_{2z}} = \sigma_2 \frac{\Omega_z}{\Omega}, \\ \delta_{x, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}} &= \frac{m_{2x}}{m_{1x}} = \frac{\Omega^2 - \Omega_x\Omega_y}{\zeta(\Omega_y - \sigma\sigma_1\Omega)}. \end{aligned} \quad (39)$$

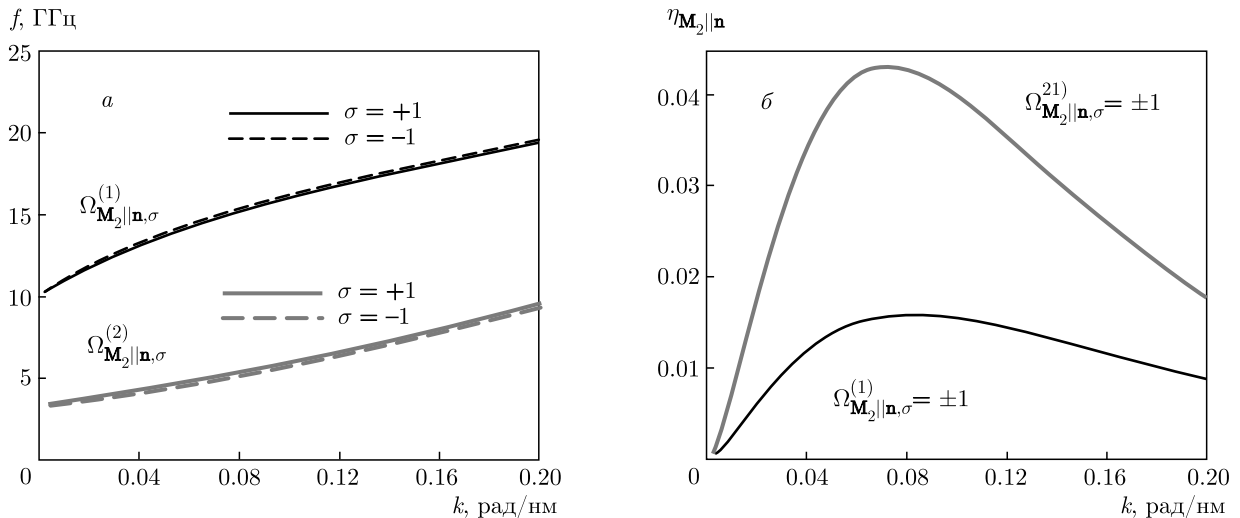
Дисперсионное уравнение

$$\begin{aligned} \Omega^4 - \Omega_x(\Omega_y + \Omega_z)\Omega^2 + 2\sigma\sigma_1\zeta^2\Omega_z\Omega + \\ + \Omega_z(\Omega_x^2\Omega_y - \zeta^2(\Omega_x + \Omega_y)) = 0. \end{aligned} \quad (38)$$

Эллиптичности и отношение амплитуд в слоях:

Аналогично ГДЭ и скрещенной геометрии 1 ( $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$ ), выпишем приближенные выражения, используя малость  $\zeta$ . Для этого перепишем дисперсионное уравнение в виде

$$\begin{aligned} (\Omega^2 - \Omega_x\Omega_y)(\Omega^2 - \Omega_z\Omega_x) = \\ = \zeta^2\Omega_z(\Omega_x + \Omega_y - 2\sigma\sigma_1\Omega). \end{aligned} \quad (40)$$



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Скрещенная геометрия 2:  $\mathbf{M}_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ ,  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}$ . а) Ветви дисперсионных уравнений (41) — черные линии, (42) — синие линии; штриховые линии соответствуют ОДВ, бегущим в обратном направлении. б) Соответствующие параметры невязимости. Значения параметров слоев те же, что и на рис. 2–4 (ГДЭ)

Заметим также, что дисперсионное уравнение (38) получается из (27) переобозначением  $\Omega_x \leftrightarrow \Omega_y$ , поэтому результаты расчета качественно совпадают с результатами, полученными в геометрии с  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$ . Приведем их (рис. 5а). Первая ветвь спектра (соответствующая невозмущенной частоте колебаний, равной частоте  $\Omega_{xy} = \sqrt{\Omega_x \Omega_y}$  слоя 1):

$$\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(1)} = \sqrt{\Omega_x \Omega_y + \zeta^2 \frac{\Omega_z (\sqrt{\Omega_x} - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_y})^2}{\Omega_x (\Omega_y - \Omega_z)}}. \quad (41)$$

Вторая ветвь спектра (соответствующая невозмущенной частоте колебаний, равной частоте  $\Omega_{zx} = \sqrt{\Omega_z \Omega_x}$  слоя 1):

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(2)} &= \\ &= \sqrt{\Omega_z \Omega_x + \zeta^2 \frac{\Omega_z (\Omega_x + \Omega_y - 2\sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_x})}{\Omega_x (\Omega_z - \Omega_y)}}. \end{aligned} \quad (42)$$

Параметры невязимости ОДВ, соответствующие каждой ветви (рис. 5б):

$$\begin{aligned} \eta_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(1)} &\equiv 2 \left| \frac{\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=+1}^{(1)} - \Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=-1}^{(1)}}{\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=+1}^{(1)} + \Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=-1}^{(1)}} \right| \approx \\ &\approx \frac{2\zeta^2 \Omega_z}{(\Omega_y - \Omega_z) \Omega_x \Omega_{xy}}, \\ \eta_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(2)} &\equiv 2 \left| \frac{\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=+1}^{(2)} - \Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=-1}^{(2)}}{\Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=+1}^{(2)} + \Omega_{\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}, \sigma=-1}^{(2)}} \right| \approx \\ &\approx \frac{2\zeta^2 \Omega_z}{(\Omega_y - \Omega_z) \Omega_x \Omega_{zx}}. \end{aligned} \quad (43)$$

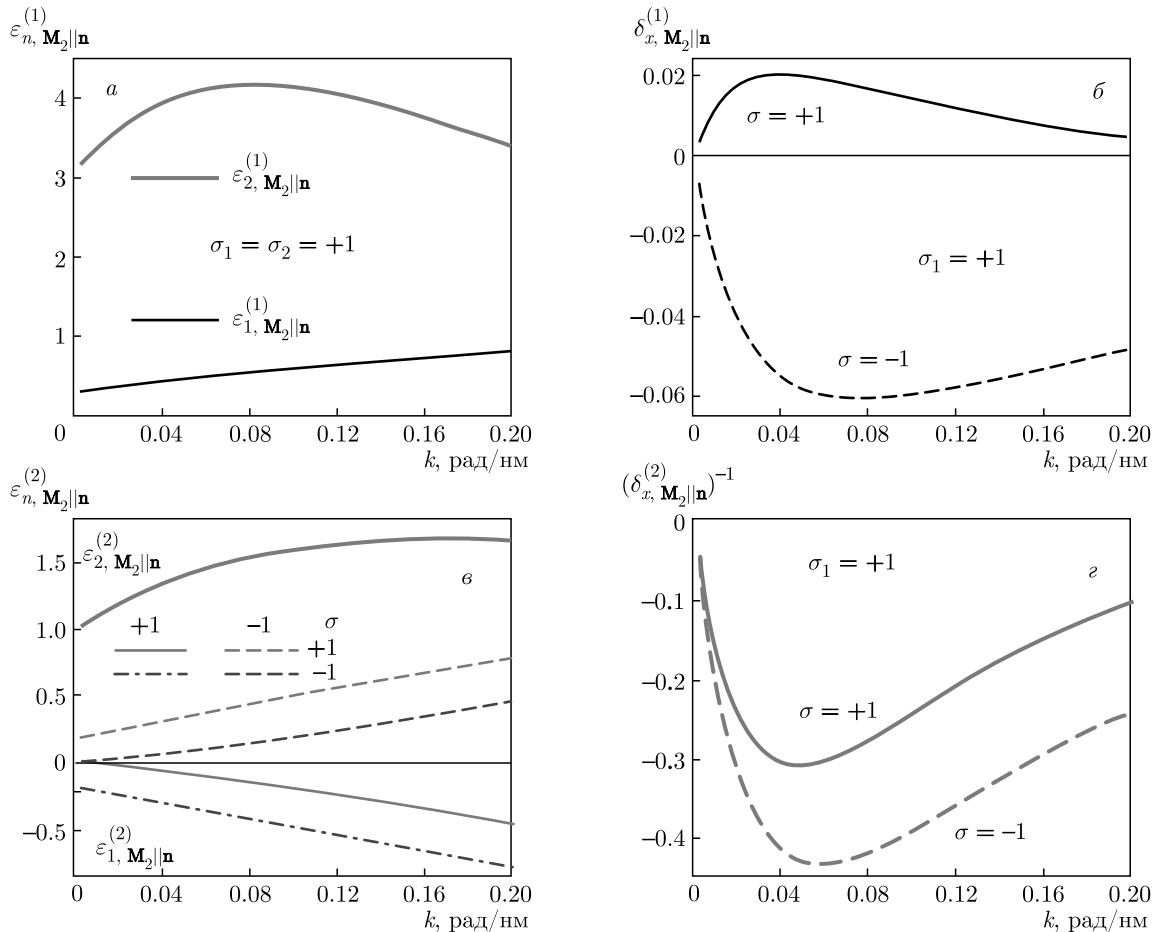
Эллиптичности и отношение амплитуд намагниченности слоев для каждой из ОДВ (41), (42) имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(1)} &= \sigma_1 \sqrt{\frac{\Omega_x}{\Omega_y}}, \quad \varepsilon_{2, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(1)} = \sigma_2 \frac{\sqrt{\Omega_x \Omega_y}}{\Omega_z}, \\ \delta_{x, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(1)} &= -\zeta \frac{\Omega_z (\sqrt{\Omega_x} - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_y})}{\sqrt{\Omega_y} \Omega_x (\Omega_y - \Omega_z)} \end{aligned} \quad (44)$$

для ветви, соответствующей невозмущенной собственной частоте первого слоя, и

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(2)} &= -\sigma \frac{\Omega_x - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_x}}{\Omega_y - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_x}}, \\ \varepsilon_{2, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(2)} &= \sigma_2 \sqrt{\frac{\Omega_x}{\Omega_z}}, \\ \delta_{x, \mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}}^{(2)} &= -\frac{\Omega_x (\Omega_y - \Omega_z)}{\zeta (\Omega_y - \sigma \sigma_1 \sqrt{\Omega_z \Omega_x})} \end{aligned} \quad (45)$$

— второго слоя.



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Скрещенная геометрия 2:  $M_1 \perp (k, n)$ ,  $M_2 \parallel n$ . Значения параметров слоев те же, что и на рис. 2–5. *а*) Эллиптичности в первом (черная линия) и втором (синяя линия) слоях для ветви дисперсии  $\Omega_{M_2||n}^{(1)}$ . *б*) Соответствующие рис. *а* отношения амплитуд в слоях для прямой (сплошная линия) и обратной (штриховая линия) волн. *в*) Эллиптичности для ветви дисперсии  $\Omega_{M_2||k}^{(2)}$ . Разные линии соответствуют разным слоям, разным направлениям намагничивания слоя 1, а также разным направлениям распространения ОДВ. *г*) Соответствующие рис. *в* отношения амплитуд в слоях для прямой (сплошная линия) и обратной (штриховая линия) волн

Графики зависимостей (44) и (45) представлены на рис. 6 для  $\sigma_1 = \sigma_2 = +1$ .

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как следует из приведенных графиков, наибольший эффект невзаимности достигается при распространении ОДВ в ГДЭ. Математически в этом случае корни дисперсионного уравнения оказываются кратными, и поэтому дипольное возмущение от смежного слоя имеет порядок малости, меньший чем в случае скрещенных геометрий. В ГДЭ на межслойном расстоянии, равном толщине пленок, относительная разность частот ОДВ в прямом и обратном направлениях достигает 35%, в то время как в скрещенных геометриях она составляет всего около 3–4%. При равном нулю зазоре между слоями отно-

сительная разность частот ОДВ достигает 100% в ГДЭ и около 10% в скрещенных геометриях.

Физически, чтобы объяснить относительно малую по сравнению со случаем ГДЭ величину параметра невзаимности в скрещенных геометриях, нужно сначала вспомнить о причинах невзаимности в ГДЭ. Последняя имеет две взаимосвязанные причины. Первая и наиболее часто цитируемая из них состоит в том, что магнитодипольное поле СВ в каждом из слоев локализовано преимущественно вблизи одной из его поверхностей, зависящей от направления распространения СВ [4, 5, 18]. Такое асимметричное распределение поля объясняется суперпозицией полей, создаваемых объемными и поверхностными динамическими магнитными зарядами СВ. Данная суперпозиция определяется, в свою

очередь, поляризацией прецессии СВ. В частности, поле циркулярно поляризованной СВ в ГДЭ и вовсе равно нулю по одну из сторон слоя [21].

Вторым, не менее важным фактором является поляризация этого динамического магнитодипольного поля. Так как магнитостатический потенциал является решением уравнения Лапласа, эта поляризация оказывается циркулярной с киральностью, определяемой направлением распространения СВ и рассматриваемой поверхностью пленки. При этом киральность поля может совпадать с киральностью прецессии в другом слое (на который данное поле действует), может быть противоположной, а может «совпадать» лишь частично, если прецессия поляризована эллиптически. Заметим, что в рассматриваемых нами простых случаях ГДЭ с одинаковыми слоями эффекты киральности и пространственной локализации складываются в «антипараллельной» ГДЭ и взаимно компенсируются в «параллельной» ГДЭ. Идеальная компенсация на всех частотах (а значит, независимо от эллиптичности прецессии) в последнем случае наглядно иллюстрирует тонкую взаимосвязь между данными эффектами.

Существенно, что энергия взаимодействия динамического магнитодипольного поля одного слоя с намагниченностью другого слоя определяется не только величиной и киральностью поля, но также и киральностью и вообще поляризацией прецессии этой намагниченности. В частности, в скрещенных геометриях 1 и 2 плоскость поляризации динамического магнитодипольного поля, создаваемого первым слоем с  $\mathbf{M}_1 \perp (\mathbf{k}, \mathbf{n})$ , оказывается ортогональной плоскости прецессии во втором слое соответственно с  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$  и  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}$ . В данном случае важной оказывается только пространственная локализация поля, создаваемого первым слоем, а его киральность не оказывает влияния на энергию взаимодействия. В результате невзаимность оказывается ослабленной по сравнению с ГДЭ.

В силу принципа взаимности для магнитостатики [22] энергия взаимодействия между слоями не должна зависеть от того, поле какого из двух слоев рассматривается. В ГДЭ с одинаковыми слоями соблюдение этого принципа очевидно. Рассмотрим природу возникновения невзаимности в скрещенных геометриях с точки зрения поля, создаваемого вторым слоем. Бегущая в слое с  $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{k}$  ( $\mathbf{M}_2 \parallel \mathbf{n}$ ) линейная СВ не создает объемных (поверхностных) динамических магнитных зарядов. Поэтому динамическое магнитодипольное поле такой волны характеризуется симметричным и взаимным распределением амплитуды. В этом случае невзаимность

является следствием циркулярной поляризации поля, киральность которого зависит от направления распространения СВ и от рассматриваемой поверхности пленки. Плоскость поляризации поля в этом случае совпадает с плоскостью прецессии в первом слое, и, таким образом, соотношение между поляризацией поля и киральностью прецессии оказывается существенным. В частности, невзаимность оказывается максимальной, когда прецессия в первом слое циркулярна. В этом случае энергия взаимодействия максимальна, когда киральность прецессии совпадает с киральностью поля, создаваемого СВ, бегущей во втором слое, и равна нулю, когда киральности противоположны.

Заметим, что случай циркулярной прецессии является идеализацией (см. рис. 2*в*, 4*а,в*, 6*а,в*), реализующейся в нашей модели за рамками ее применимости, т. е. в случае очень коротких волн. Тем не менее киральность в скрещенных геометриях оказывается существенной в системах, в которых трансляционная симметрия нарушена [11, 12]. Детальное рассмотрение механизма усиления киральности в таких системах требует решения задачи рассеяния, что выходит за рамки данной работы. Заметим только, что для решения задачи рассеяния могут оказаться существенными зависимость эллиптичности прецессии от направления распространения СВ (см. рис. 4*в*, 6*в*), а также связанная с этим необходимость учета эванесцентных волн [9, 23]. В самом деле, как следует из выражений (33), (34) и (44), (45), направления распространения ОДВ и равновесных намагниченностей определяют как знак, так и абсолютное значение эллиптичности волны в первом слое для ветви дисперсии, «получаемой» из «собственной» частоты второго слоя. Фактически оказывается, что эллиптичности волн, бегущих в противоположных направлениях, различаются. Это может являться важным обстоятельством в задачах рассеяния, где эллиптичности необходимы для сшивки разных проекций динамической намагниченности в граничных условиях. В работах [9, 23] было показано, что эллиптичности объемных и эванесцентных волн взаимно обратны, что давало возможность факторизации системы граничных условий для каждого типа волн. При учете размагничивающего поля ОДВ указанное обстоятельство делает такую факторизацию невозможной.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основным результатом данного исследования является вывод о принципиальной возможности

невзаимного распространения ОДВ в двуслойных магнитных пленках, когда хотя бы один из слоев намагничен в плоскости пленки перпендикулярно направлению распространения. Проведено сравнение невзаимности в ГДЭ с антипараллельной намагниченностью слоев и в геометриях, когда равновесные намагниченности слоев взаимно перпендикулярны («скрещены»). Невзаимность в первой геометрии выражена значительно сильнее, чем в геометриях со скрещенной намагниченностью. Это различие объяснено тем, что в ГДЭ как величина, так и киральность циркулярно поляризованного динамического магнитодипольного поля вносят невзаимные вклады в энергию его взаимодействия с прецессирующей намагниченностью, в то время как в геометриях со скрещенной намагниченностью присутствует лишь один из этих вкладов.

Для рассмотренных конфигураций рассчитаны спектры, эллиптичности прецессии и параметры невзаимности (относительно направления распространения СВ). Несмотря на то что представленная аналитическая теория построена в приближении однородности динамической намагниченности по толщине каждого слоя, ожидается что невзаимность распространения ОДВ в геометриях со скрещенной намагниченностью сохранится и в более общем случаях неоднородной по толщине динамической намагниченности, а также нетождественных слоев. С другой стороны, можно надеяться, что рассмотренное приближение сделает возможным построение теории кирального рассеяния ОДВ в системах, подобных рассмотренным в работах [10–12, 19, 24].

**Благодарности.** Авторы выражают благодарность В. Д. Запорожцу за помощь в подготовке статьи к публикации.

## 5. ПРИЛОЖЕНИЕ А

Так как зависимость динамических переменных от  $x$  периодическая с волновым числом  $k_x$ , т.е.  $\mathbf{m} \propto \exp(ik_x x)$ , решение уравнения Уокера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -4\pi \left( \frac{\partial m_x}{\partial x} + \frac{\partial m_y}{\partial y} \right) \quad (46)$$

следует искать в виде

$$\psi(x, y) = \varphi(y) \exp(ik_x x). \quad (47)$$

Первое слагаемое в правой части выражения (46) определяет объемный магнитный заряд, второе —

поверхностный. С учетом периодической зависимости от  $x$  и соотношения  $d\theta(y)/dy = \delta(y)$  получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - k_x^2 \varphi = & -4\pi [ik_x(\theta(y) - \theta(y - d_1))m_{1x} + \\ & + (\theta(y - d_1 - l) - \theta(y - d_1 - l - d_2))m_{2x} + \\ & + (\delta(y) - \delta(y - d_1))m_{1y} + (\delta(y - d_1 - l) - \\ & - \delta(y - d_1 - l - d_2))m_{2y}]. \quad (48) \end{aligned}$$

Обозначим последовательно области

$$\begin{aligned} a : & y < 0, \\ 1 : & 0 < y < d_1, \\ b : & d_1 < y < d_1 + l, \\ 2 : & d_1 + l < y < d_1 + l + d_2, \\ c : & y < d_1 + l + d_2, \end{aligned} \quad (49)$$

и запишем уравнения в каждой из них:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_{a,b,c}}{\partial y^2} - k_x^2 \varphi_{a,b,c} = 0, \\ \frac{\partial^2 \varphi_{1,2}}{\partial y^2} - k_x^2 \varphi_{1,2} = -4\pi ik_x m_{1,2x}. \end{aligned} \quad (50)$$

Обозначим  $\kappa_y = k > 0$ , а  $k_x = \sigma k$ , где  $\sigma = \pm 1$  — маркер направления распространения волны ( $\psi \propto \exp(k(\pm y + i\sigma x))$ ). Тогда общее решение уравнения в каждой области имеет вид

$$\begin{aligned} a : & \varphi_a = A_a e^{ky}, \\ 1 : & \varphi_1 = A_1 \operatorname{ch}(ky) + B_1 \operatorname{sh}(ky) + i\sigma \frac{4\pi}{k} m_{1x}, \\ b : & \varphi_b = A_b \operatorname{ch}[k(y - d_1)] + B_b \operatorname{sh}[k(y - d_1)], \\ 2 : & \varphi_2 = A_2 \operatorname{ch}[k(y - d_1 - l)] + \\ & + B_2 \operatorname{sh}[k(y - d_1 - l)] + i\sigma \frac{4\pi}{k} m_{2x}, \\ c : & \varphi_c = B_c e^{-k(y - d_1 - l - d_2)}. \end{aligned} \quad (51)$$

Эти решения помимо непрерывности связаны также условиями, получаемыми интегрированием выражения (48) по малой окрестности каждой границы (штрих означает производную по  $y$ ):

$$\begin{aligned} \varphi'_1(0) - \varphi'_a(0) &= -4\pi m_{1y}, \\ \varphi'_b(d_1) - \varphi'_1(d_1) &= 4\pi m_{1y}, \\ \varphi'_2(d_1 + l) - \varphi'_b(d_1 + l) &= -4\pi m_{2y}, \\ \varphi'_c(d_1 + l + d_2) - \varphi'_2(d_1 + l + d_2) &= 4\pi m_{2y}. \end{aligned} \quad (52)$$

В матричной форме система граничных условий для амплитуд после подстановки принимает вид

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\text{ch}(kd_1) & -\text{sh}(kd_1) & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\text{sh}(kd_1) & -\text{ch}(kd_1) & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{ch}(kl) & \text{sh}(kl) & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{sh}(kl) & \text{ch}(kl) & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\text{ch}(kd_2) & -\text{sh}(kd_2) & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\text{sh}(kd_2) & -\text{ch}(kd_2) & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_a \\ A_1 \\ B_1 \\ A_b \\ B_b \\ A_2 \\ B_2 \\ B_c \end{pmatrix} = \frac{4\pi}{k} \begin{pmatrix} i\sigma m_{1x} \\ m_{1y} \\ i\sigma m_{1x} \\ m_{1y} \\ i\sigma m_{2x} \\ m_{2y} \\ i\sigma m_{2x} \\ m_{2y} \end{pmatrix}. \quad (53)$$

Решая полученную систему, находим потенциал в каждой области:

$$\begin{aligned} \varphi_a &= \frac{2\pi}{k} [(\exp(-kd_1) - 1)(-i\sigma m_{1x} - m_{1y}) + \\ &\quad + \exp(-k(d_1 + l))(\exp(-kd_2) - 1)(-i\sigma m_{2x} - m_{2y})] \exp(ky), \\ \varphi_1 &= \frac{2\pi}{k} [(\exp(k(y - d_1)) - 1)(-i\sigma m_{1x} - m_{1y}) + (\exp(-ky) - 1)(-i\sigma m_{1x} + m_{1y}) + \\ &\quad + \exp(k(y - d_1 - l))(\exp(-kd_2) - 1)(-i\sigma m_{2x} - m_{2y})], \\ \varphi_b &= \frac{2\pi}{k} [\exp(-ky)(1 - \exp(kd_1))(-i\sigma m_{1x} + m_{1y}) + \exp(k(y - d_1 - l))(\exp(-kd_2) - 1)(-i\sigma m_{2x} - m_{2y})], \\ \varphi_2 &= \frac{2\pi}{k} [\exp(-ky)(1 - \exp(kd_1))(-i\sigma m_{1x} + m_{1y}) + (\exp(-k(y - d_1 - l)) - 1)(-i\sigma m_{2x} + m_{2y}) + \\ &\quad + (\exp(k(y - d_1 - l - d_2)) - 1)(-i\sigma m_{2x} - m_{2y})], \\ \varphi_c &= \frac{2\pi}{k} [(1 - \exp(kd_1))(-i\sigma m_{1x} + m_{1y}) + \exp(k(d_1 + l))(1 - \exp(kd_2))(-i\sigma m_{2x} + m_{2y})] \exp(-ky). \end{aligned} \quad (54)$$

Компоненты намагниченности в ОДВ не являются независимыми, а связаны между собой условиями, следующими не из уравнения Уокера (оно лишь позволяет определить размагничивающее поле, создаваемое распределением намагниченности, которое можно выбрать произвольным), а из уравнения динамики намагниченности — уравнения Ландау–Лифшица. Эту связь можно записать в виде

$$\frac{m_{1y}}{im_{1x}} = \varepsilon_1, \quad \frac{m_{2y}}{im_{2x}} = \varepsilon_2, \quad \frac{m_{2x}}{m_{1x}} = \delta_x. \quad (55)$$

Здесь первые два параметра — эллиптичности ОДВ в каждом слое, последний — отношение  $x$ -компонент

динамической намагниченности в слоях. Эти величины являются функциями волнового числа и в дальнейшем подлежат определению. Для волны с правой циркулярной поляризацией  $\varepsilon = +1$ , с левой —  $\varepsilon = -1$ . Киральность этой поляризации (т.е. знак эллиптичности) соответствует знаку равновесной намагниченности.

Таким образом, в задаче присутствует только один независимый параметр, в качестве которого выберем  $m_{1x} = m$ . С учетом обозначений (55) перепишем выражение для размагничивающего поля:



$$\begin{aligned}
 h_{ax} &= 2\pi m[(\exp(-kd_1) - 1)(1 + \sigma\varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp(-k(d_1 + l))(\exp(-kd_2) - 1)(1 + \sigma\varepsilon_2)] \exp(ky) \exp(i\sigma kx), \\
 h_{1x} &= 2\pi m[(\exp(k(y - d_1)) - 1)(1 + \sigma\varepsilon_1) + (\exp(-ky) - 1)(1 - \sigma\varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp(k(y - d_1 - l))(\exp(-kd_2) - 1)(1 + \sigma\varepsilon_2)] \exp(i\sigma kx), \\
 h_{bx} &= 2\pi m[\exp(-ky)(1 - \exp(kd_1))(1 - \sigma\varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp((k(y - d_1 - l))(\exp(-kd_2) - 1)(1 + \sigma\varepsilon_2)] \exp(i\sigma kx), \\
 h_{2x} &= 2\pi m[\exp(-ky)(1 - \exp(kd_1))(1 - \sigma\varepsilon_1) + \delta_x((\exp(-k(y - d_1 - l)) - 1)(1 - \sigma\varepsilon_2) + \\
 &\quad + (\exp(k(y - d_1 - l - d_2)) - 1)(1 + \sigma\varepsilon_2))] \exp(i\sigma kx), \\
 h_{cx} &= 2\pi m[(1 - \exp(kd_1))(1 - \sigma\varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp(k(d_1 + l))(1 - \exp(kd_2))(1 - \sigma\varepsilon_2)] \exp(-ky) \exp(i\sigma kx), \\
 h_{ay} &= -2\pi im[(\exp(-kd_1) - 1)(\sigma + \varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp(-k(d_1 + l))(\exp(-kd_2) - 1)(\sigma + \varepsilon_2)] \exp(ky) \exp(i\sigma kx), \\
 h_{1y} &= -2\pi im[\exp(k(y - d_1))(\sigma + \varepsilon_1) - \exp(-ky)(\sigma - \varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp(k(y - d_1 - l))(\exp(-kd_2) - 1)(\sigma + \varepsilon_2)] \exp(i\sigma kx), \\
 h_{by} &= -2\pi im[\exp(-ky)(\exp(kd_1) - 1)(\sigma - \varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x \exp(k(y - d_1 - l))(\exp(-kd_2) - 1)(\sigma + \varepsilon_2)] \exp(i\sigma kx), \\
 h_{2y} &= -2\pi im[\exp(-ky)(\exp(kd_1) - 1)(\sigma - \varepsilon_1) + \\
 &\quad + \delta_x(\exp(k(y - d_1 - l - d_2))(\sigma + \varepsilon_2) - \exp(-k(y - d_1 - l))(\sigma - \varepsilon_2))] \exp(i\sigma kx), \\
 h_{cy} &= -2\pi im[(\exp(kd_1) - 1)(\sigma - \varepsilon_1) + \delta_x \exp(k(d_1 + l))(\exp(kd_2) - 1)(\sigma - \varepsilon_2)] \exp(-ky) \exp(i\sigma kx).
 \end{aligned} \tag{56}$$

Из полученных выражений (56) можно заметить следующее.

а) При одинаковых круговых поляризациях слоев по одну сторону от структуры поле всегда равно нулю. В частности, при  $\sigma = +1$  для левополяризованных ОДВ ( $m_y = -im_x$ ,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -1$ ) поле отсутствует при  $y < 0$ , для правополяризованных ( $m_y = im_x$ , что соответствует  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = +1$ ) — при  $y > d_1 + d_2 + l$ . Отметим, что данный эффект возможен и для одного слоя [21].

б) При  $\sigma = +1$  и  $\varepsilon_1 = +1$ ,  $\varepsilon_2 = -1$  поле отсутствует и в пространстве между слоями. Если же при  $\sigma = +1$  наоборот  $\varepsilon_1 = -1$ ,  $\varepsilon_2 = +1$ , то поле не равно нулю. Если изменить направление волнового вектора, то поле между слоями появится/исчезнет. Размагничивающее поле внутри каждого слоя,  $\mathbf{h}_{d,1}$  и  $\mathbf{h}_{d,2}$ , состоит из частей, содержащих намагничен-

ности соответственно «своего» и «чужого» слоев. Представим соотношение между намагниченностью и размагничивающим полем (56) в виде

$$\begin{pmatrix} h_{d,1x} \\ h_{d,1y} \\ h_{d,2x} \\ h_{d,2y} \end{pmatrix} = \exp(ikx) \hat{N} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2x} \\ m_{2y} \end{pmatrix}, \tag{57}$$

где

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} N_{xx}^{(11)} & N_{xy}^{(11)} & N_{xx}^{(12)} & N_{xy}^{(12)} \\ N_{yx}^{(11)} & N_{yy}^{(11)} & N_{yx}^{(12)} & N_{yy}^{(12)} \\ N_{xx}^{(21)} & N_{xy}^{(21)} & N_{xx}^{(22)} & N_{xy}^{(22)} \\ N_{yx}^{(21)} & N_{yy}^{(21)} & N_{yx}^{(22)} & N_{yy}^{(22)} \end{pmatrix} \tag{58}$$

и

$$\begin{aligned}
 N_{xx}^{(11)} + 4\pi &= -N_{yy}^{(11)} = N_1, & N_{xy}^{(11)} &= N_{yx}^{(11)} = i\sigma N'_1, & -N_{xx}^{(12)} &= N_{yy}^{(12)} = N_{12}, & N_{xy}^{(12)} &= N_{yx}^{(12)} = i\sigma N_{12}, \\
 N_{xx}^{(22)} + 4\pi &= -N_{yy}^{(22)} = N_2, & N_{xy}^{(22)} &= N_{yx}^{(22)} = i\sigma N'_2, \\
 -N_{xx}^{(21)} &= N_{yy}^{(21)} = N_{21}, & N_{xy}^{(21)} &= N_{yx}^{(21)} = -i\sigma N_{21}, \\
 N_1 &= 2\pi \left( e^{k(y-d_1)} + e^{-ky} \right), & N_2 &= 2\pi \left( e^{-k(y-d_1-l)} + e^{k(y-d_1-l-d_2)} \right), \\
 N'_1 &= 2\pi \left( e^{-ky} - e^{k(y-d_1)} \right), & N'_2 &= 2\pi \left( e^{-k(y-d_1-l)} - e^{k(y-d_1-l-d_2)} \right), \\
 N_{12} &= 2\pi \left( 1 - e^{-kd_2} \right) e^{k(y-d_1-l)}, & N_{21} &= 2\pi \left( e^{kd_1} - 1 \right) e^{-ky},
 \end{aligned} \tag{59}$$

так что

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} N_1 - 4\pi & i\sigma N'_1 & -N_{12} & i\sigma N_{12} \\ i\sigma N'_1 & -N_1 & i\sigma N_{12} & N_{12} \\ -N_{21} & -i\sigma N_{21} & N_2 - 4\pi & i\sigma N'_2 \\ -i\sigma N_{21} & N_{21} & i\sigma N'_2 & -N_2 \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Таким образом, весь тензор определяется шестью независимыми компонентами:  $N_1, N'_1, N_2, N'_2, N_{12}, N_{21}$ . В длинноволновом приближении  $k \rightarrow 0$  все компоненты, кроме  $N_{yy}^{(11)} = N_{yy}^{(22)} = -4\pi$ , обращаются в нуль, что соответствует случаю однородно намагниченного слоя.

Найденное размагничивающее поле неоднородно вдоль толщины, в отличие от намагниченности. Поэтому для расчета спектра ОДВ будем использовать приближение среднего размагничивающего поля, усреднив полученные компоненты по толщине слоя. При этом слой не должен быть слишком толстым, чтобы не нарушалось условие однородности намагниченности вдоль нормали. Усредненные по толщине соответствующего слоя компоненты определим как

$$\bar{N}_k = \frac{1}{d_k} \int N_k(y) dy. \quad (61)$$

Тогда, интегрируя, получим

$$\begin{aligned} \bar{N}_1 &= 4\pi\xi_1, & N_2 &= 4\pi\xi_2, & N_{12} &= 4\pi\xi_1\eta_2, \\ N_{21} &= 4\pi\xi_2\eta_1, & N'_1 &= N'_2 &= 0, \end{aligned} \quad (62)$$

где

$$\begin{aligned} \xi_n &= \xi_n(k, d_n) = \frac{1 - \exp(-kd_n)}{kd_n}, \\ \eta_n &= \eta_n(k, d_n) = \frac{1 - \exp(-kd_n)}{2} \exp(-kl). \end{aligned} \quad (63)$$

Заметим, что  $\xi$  — монотонно убывающая от 1 до 0 функция с ростом толщины слоя (или с уменьшением длины волны), величина  $\eta$  убывает с увеличением расстояния между слоями, однако с уменьшением длины волны ведет себя немонотонно, вначале

возрастая от нуля (для однородно намагниченного вдоль поверхности слоя), а затем снова убывая до нуля.

## 6. ПРИЛОЖЕНИЕ В

Используем найденное размагничивающее поле для исследования динамики намагниченности в слоях. Запишем плотность энергии и линеаризованное эффективное поле при наличии обмена, постоянного внешнего поля, найденного усредненного размагничивающего поля и «закрепляющего» поля легкоосевой анизотропии вдоль основного состояния, в качестве которого в данной геометрии выступает направление  $\hat{\mathbf{z}}$  ( $\lambda_n^2 = 2A_n/M_n^2$  — квадрат обменной длины):

$$W_n = \frac{1}{2} \left( \lambda_n^2 (\nabla \cdot \mathbf{M}_n)^2 + \beta_n (\mathbf{M}_{n,x}^2 + \mathbf{M}_{n,y}^2) - \mathbf{M}_n \cdot \mathbf{H}_{n,d} \right) - \mathbf{M}_n \cdot \mathbf{H}, \quad (64)$$

$$\mathbf{H}_{n,eff} = \lambda_n^2 \Delta \mathbf{m}_n - \beta_n (\mathbf{m}_{n,x} + \mathbf{m}_{n,y}) + \mathbf{h}_{d,n}.$$

где  $\mathbf{H}$  — внешнее поле, а  $\mathbf{m}_{n,x}$  и  $\mathbf{m}_{n,y}$  — векторные компоненты динамической намагниченности вдоль направлений соответственно  $\hat{\mathbf{x}}$  и  $\hat{\mathbf{y}}$ . Уравнения Ландау–Лифшица для каждого слоя:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{m}_n}{\partial t} + \\ + \gamma [\mathbf{M}_{n,0} \times (\lambda_n^2 \Delta \mathbf{m}_n - \beta_n (\mathbf{m}_{n,x} + \mathbf{m}_{n,y}) + \mathbf{h}_{d,n})] + \\ + \gamma [\mathbf{m}_n \times \mathbf{H}] = 0. \end{aligned} \quad (65)$$

С учетом однородности намагниченности вдоль толщины слоев запишем систему в проекциях в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \left( \begin{pmatrix} \omega_1 & -\sigma_1 \hat{\omega}_t & 0 & 0 \\ \sigma_1 \hat{\omega}_t & \omega_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_2 & -\sigma_2 \hat{\omega}_t \\ 0 & 0 & \sigma_2 \hat{\omega}_t & \omega_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \omega_{M1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{M1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{M2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_{M2} \end{pmatrix} \times \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} 1 - \xi_1 & 0 & \xi_1 \eta_2 & -i\sigma \xi_1 \eta_2 \\ 0 & \xi_1 & -i\sigma \xi_1 \eta_2 & -\xi_1 \eta_2 \\ \xi_2 \eta_1 & i\sigma \xi_2 \eta_1 & 1 - \xi_2 & 0 \\ i\sigma \xi_2 \eta_1 - \xi_2 \eta_1 & & 0 & \xi_2 \end{pmatrix} \right), \quad (66)$$

где

$$\omega_{Mn} = 4\pi\gamma |M_{n0}|, \quad \omega_n = \sigma_n\omega_H + \omega_{Mn}(\alpha_n k^2 + \beta_n)/4\pi,$$

$$\omega_H = \gamma H, \quad \hat{\omega}_t = \partial/\partial t.$$

Решение этой системы имеет вид периодической по времени функции  $m \propto \exp(-i\omega t)$ . С учетом найденного размагничивающего тензора запишем систему для определения компонент намагниченности в слоях:

$$\begin{pmatrix} \omega_{1x} & i\sigma_1\omega & \omega_{12} & -i\sigma\omega_{12} \\ -i\sigma_1\omega & \omega_{1y} & -i\sigma\omega_{12} & -\omega_{12} \\ \omega_{21} & i\sigma\omega_{21} & \omega_{2x} & i\sigma_2\omega \\ i\sigma\omega_{21} & -\omega_{21} & -i\sigma_2\omega & \omega_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1x} \\ m_{1y} \\ m_{2x} \\ m_{2y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (67)$$

где

$$\omega_{nx}(k) = \omega_{n0} + (1 - \xi_n)\omega_{Mn} = \left( \frac{\alpha_n k^2 + \beta_n}{4\pi} + 1 - \frac{1 - \exp(-kd_n)}{kd_n} \right) \omega_{Mn} + \sigma_n\omega_H,$$

$$\begin{aligned} \omega_{ny}(k) &= \omega_{n0} + \xi_n\omega_{Mn} = \\ &= \left( \frac{\alpha_n k^2 + \beta_n}{4\pi} + \frac{1 - \exp(-kd_n)}{kd_n} \right) \omega_{Mn} + \sigma_n\omega_H, \end{aligned} \quad (68)$$

$$\omega_{12}(k) = \omega_{M1}\zeta_{12}(k), \quad \omega_{21}(k) = \omega_{M2}\zeta_{21}(k),$$

$$\begin{aligned} \zeta_{12}(k) &= \xi_1\eta_2 = \frac{1 - \exp(-kd_1)}{kd_1} \times \\ &\times \frac{1 - \exp(-kd_2)}{2} \exp(-kl), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \zeta_{21}(k) &= \xi_2\eta_1 = \frac{1 - \exp(-kd_2)}{kd_2} \times \\ &\times \frac{1 - \exp(-kd_1)}{2} \exp(-kl). \end{aligned}$$

Собственные частоты определим, приравнявая к нулю определитель (66):

$$\begin{aligned} \omega^4 - \omega^2(\omega_{1x}\omega_{1y} + \omega_{2x}\omega_{2y} - 4\omega_{12}\omega_{21}\sigma_1\sigma_2) + \\ + 2\omega\sigma\omega_{12}\omega_{21}(\sigma_1(\omega_{2x} + \omega_{2y}) - \sigma_2(\omega_{1x} + \omega_{1y})) + \\ + (\omega_{1x}\omega_{1y}\omega_{2x}\omega_{2y} - \omega_{12}\omega_{21}(\omega_{1x} + \omega_{1y}) \times \\ \times (\omega_{2x} + \omega_{2y})) = 0. \end{aligned} \quad (69)$$

Из системы (66) после подстановки найденных корней (68) находим эллиптичности и отношение амплитуд слоев  $\delta$ :

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= -\sigma \frac{\omega_{1x} - \sigma\sigma_1\omega}{\omega_{1y} - \sigma\sigma_1\omega}, \quad \varepsilon_2 = \sigma \frac{\omega_{2x} + \sigma\sigma_2\omega}{\omega_{2y} + \sigma\sigma_2\omega}, \\ \delta x &= \frac{m_{2x}}{m_{1x}} = \\ &= \frac{(\omega_2 - \omega_{1x}\omega_{1y})(\omega_{2y} + \sigma\sigma_2\omega)}{\omega_{12}(\omega_{1y} - \sigma\sigma_1\omega)(\omega_{2x} + \omega_{2y} + 2\sigma\sigma_2\omega)}. \end{aligned} \quad (70)$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Гуревич, Г. А. Мелков, *Магнитные колебания и волны*, Физматлит, Москва (1994).
2. С. А. Никитов, Д. В. Калябин, И. В. Лисенков и др., *УФН* **185**, 1099 (2015).
3. A. Barman, G. Gubiotti, S. Ladak et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 413001 (2021).
4. R. W. Damon and J. R. Eshbach, *J. Phys. Chem. Sol.* **19**, 308 (1961).
5. R. E. Camley, *Surf. Sci. Rep.* **7**, 103 (1987).
6. M. Mruczkiewicz, E. S. Pavlov, S. L. Vysotsky et al., *Phys. Rev. B* **90**, 174416 (2014).
7. V. K. Sakharov, Y. V. Khivintsev, S. L. Vysotsky et al., *IEEE Magn. Lett.* **8**, 3704105 (2017).
8. R. A. Gallardo, T. Schneider, A. K. Chaurasiya et al., *Phys. Rev. Appl.* **12**, 034012 (2019).
9. V. D. Poimanov and V. V. Kruglyak, *J. Appl. Phys.* **130**, 133902 (2021).
10. V. V. Kruglyak, *Appl. Phys. Lett.* **119**, 200502 (2021).
11. Y. Au, M. Dvornik, O. Dmytriiev et al, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 172408 (2012).
12. Y. Au, E. Ahmad, O. Dmytriiev et al., *Appl. Phys. Lett.* **100**, 182404 (2012).
13. M. Balynsky, A. Kozhevnikov, Y. Khivintsev et al., *Sci. Rep.* **121**, 024504 (2017).
14. T. Goto, T. Yoshimoto, B. Iwamoto et al., *Sci. Rep.* **9**, 16472 (2019).
15. V. A. Gubanov, S. E. Sheshukova, S. A. Nikitov et al., *J. Phys. D* **54**, 245001 (2021).

16. L. R. Walker, Phys. Rev. **105**, 390 (1957).
17. J. F. Cochran, J. Rudd, W. B. Muir et al., Phys. Rev. B **42**, 508 (1990).
18. T. Wolfram, J. Appl. Phys. **41**, 4748 (1970).
19. H. Qin, R. B. Holländer, L. Flajšman et al., Nature Comm. **12**, 2293 (2021).
20. A. V. Sadovnikov, E. N. Beginin, S. E. Sheshukova et al., Phys. Rev. B **99**, 054424 (2019).
21. J. C. Mallinson, IEEE Trans. Magn. **9**, 678 (1973).
22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
23. V. D. Poimanov, A. N. Kuchko, and V. V. Kruglyak, Phys. Rev. B **102**, 104414 (2020).
24. K. Sobucki, W. Śmigaj, J. Rychły et al., Sci. Rep. **11**, 4428 (2021).

# ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА НА СПИНОВУЮ ПОЛЯРИЗАЦИЮ ЭЛЕКТРОНОВ В МАТЕРИАЛАХ С НЕОДНОРОДНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТЬЮ

*Н. Г. Бебенин\**

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

Поступила в редакцию 13 декабря 2021 г.,

после переработки 10 января 2022 г.

Принята к публикации 10 января 2022 г.

Теоретически изучается неравновесная намагниченность (спиновая поляризация) электронов проводимости, движущихся в материалах с неоднородным распределением намагниченности. Рассматриваются как стационарные состояния, так и переходные процессы при включении или выключении тока. Из-за наличия координатной зависимости намагниченности протекание электрического тока приводит к отклонению намагниченности носителей заряда от ее равновесного значения. В рамках простой модели для неравновесной намагниченности получено выражение, описывающее координатную зависимость неравновесной намагниченности в терминах дрейфовой длины, длины спиновой диффузии. Показано, что эффект является наибольшим там, где производная намагниченности по координате максимальна. Рассмотрены различные примеры сред с неоднородной намагниченностью, включая периодические структуры — волны спиновой плотности и искусственные сверхрешетки.

DOI: 10.31857/S004445102205011X

EDN: DTASQS

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Спиновая электроника (спинтроника) является частью твердотельной электроники, посвященной изучению эффектов, в которых существенную роль играют спиновые степени свободы. Интенсивное развитие спинтроники началось после открытия эффекта гигантского магнитосопротивления в магнитных сверхрешетках Fe/Cr, и к настоящему времени опубликовано не только огромное число оригинальных статей, но и множество обзоров и монографий [1–5]. Одним из направлений спинтроники является изучение спиновых потоков, генерируемых в металлах и полупроводниках, с целью их использования в различного рода микроустройствах. Например, теоретически и экспериментально было показано, что при протекании электрического тока в среде, составленной из ферромагнетика и неферромагнитного металла или полупроводника [6–11], спиновая поляризация электронов проводи-

мости (намагниченность электронного газа) вблизи контакта отличается от своего равновесного значения (спиновая инжекция и спиновая аккумуляция). Обнаружение этих эффектов показывает, что если намагниченность материала, а значит, и величина равновесной намагниченности носителей заряда по каким-либо причинам меняется в пространстве, то электрический ток заметно влияет на (неравновесную) намагниченность электронов. Такой эффект должен иметь место, например, в различных наноструктурах с ферромагнитными слоями, в материалах с длиннопериодическими модулированными структурами, в неоднородных ферромагнетиках. Во всех случаях на спиновый транспорт влияют не только магнитная неоднородность, но и множество других факторов, например, различие проводимостей кристаллов, образующих структуру, эффекты на интерфейсах и т. д., что затрудняет вычленение роли именно магнитной неоднородности.

Любой электронный прибор включают и выключают, однако переходные процессы в спин-транспортных структурах изучены сравнительно слабо, причем численными методами и в сравнительно сложных системах [12–15].

\* E-mail: bebenin@imp.uran.ru

Цель предлагаемой работы состоит в исследовании неравновесной намагниченности электронов и электронного спинового транспорта в материалах с неоднородной намагниченностью в рамках простой модели, допускающей аналитическое решение как для стационарного случая, когда электрический ток, протекающий в материале, не зависит от времени, так и для переходных процессов, имеющих место при включения или выключения тока.

## 2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим материал, в котором намагниченность  $\mathbf{M} = (M_x, 0, 0)$  носителей заряда зависит только от одной координаты  $z$ :  $M_x = M_x(z)$ . Магнитное поле считаем равным нулю. Электроны движутся вдоль оси  $z$  с дрейфовой скоростью  $V_z > 0$ , которую мы будем считать не зависящей от  $z$ ; иначе говоря, мы предполагаем, что магнитная структура «погружена» в проводящий материал. В отсутствие электрического тока электронная намагниченность  $M_x^{equ}$ , очевидно, определяется эффективным полем, действующим на носители заряда, а при  $V_z \neq 0$ , очевидно,  $M_x \neq M_x^{equ}$ . Возможность использования столь простой модели для описания материалов с волной спиновой плотности (например, типа TSW, см. обзор [16]) сомнений не вызывает. В случае бесконечно тонкого ферромагнитного слоя (ферромагнитного  $\delta$ -слоя), помещенного в однородную немагнитную матрицу, в расчете фигурируют электрические характеристики только немагнитного материала, поэтому использование модели в этом случае также вряд ли может вызвать возражения. Сложнее обстоит дело со наноструктурами, образованными различными металлами. Многие авторы исследовали, например, сверхрешетки Fe/Cr. Согласно [4], длина спиновой диффузии в железе равна примерно 9 нм, а в хrome около 5 нм, удельные сопротивления тонких слоев железа и хрома также различаются не слишком сильно, поэтому можно думать, что для такого рода структур модель может дать если не количественные, то качественные результаты. Это должно быть верно и для систем, состоящих из ферромагнитных и немагнитных полупроводников.

Зависимость  $M_x$  от координаты  $z$  определяется потоком  $J_{zx}$  намагниченности в направлении этой оси и релаксацией. Уравнение непрерывности для  $M_x$  можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial M_x}{\partial t} + \frac{\partial J_{zx}}{\partial t} = -\frac{M_x - M_x^{equ}}{\tau_s}, \quad (1)$$

где  $\tau_s$  — время спиновой релаксации. В немагнитных материалах  $J_{zx} = V_z M_x - D \partial M_x / \partial z$ , где  $D$  — коэффициент диффузии [1]. В равновесном состоянии, т. е. при отсутствии электрического тока, все потоки должны быть равны нулю. Если равновесное значение электронной намагниченности зависит от координаты  $z$ , эта формула дает отличное от нуля значение  $J_{zx}$  при  $V_z = 0$ , т. е. в отсутствие электрического тока. Правильное выражение для  $J_{zx}$  таково (см., например, [6]):

$$J_{zx} = V_z M_x - D \frac{\partial(M_x - M_x^{equ})}{\partial z}. \quad (2)$$

Рассмотрим сначала стационарный случай, когда все величины не зависят от времени. Подставляя (2) в (1) и полагая  $\partial M_x / \partial t = 0$ , получаем

$$V_z \frac{\partial M_x}{\partial z} - D \frac{\partial^2(M_x - M_x^{equ})}{\partial z^2} = -\frac{M_x - M_x^{equ}}{\tau_s}. \quad (3)$$

Это уравнение удобно записать в виде

$$L_D^2 \frac{\partial^2 \delta M_x}{\partial z^2} - l_d \frac{\partial \delta M_x}{\partial z} - \delta M_x = l_d \frac{\partial M_x^{equ}}{\partial z}, \quad (4)$$

где  $\delta M_x = M_x - M_x^{equ}$ ,  $l_d = V_z \tau_s$  — дрейфовая длина и  $L_D = \sqrt{D \tau_s}$  — длина спиновой диффузии. Ограниченное при всех  $z$  решение этого уравнения таково:

$$\delta M_x = -\frac{e^{k_1 z} l_d}{\sqrt{l_d^2 + 4L_D^2}} \int_z^\infty e^{-k_1 z'} \frac{\partial M_x^{equ}(z')}{\partial z'} dz' - \frac{e^{k_2 z} l_d}{\sqrt{l_d^2 + 4L_D^2}} \int_{-\infty}^z e^{-k_2 z'} \frac{\partial M_x^{equ}(z')}{\partial z'} dz', \quad (5)$$

где

$$k_1 = \frac{l_d + \sqrt{l_d^2 + 4L_D^2}}{2L_D^2}, \quad k_2 = \frac{l_d - \sqrt{l_d^2 + 4L_D^2}}{2L_D^2}. \quad (6)$$

Из (5) следует, что максимальное отклонение намагниченности электронного газа от равновесного значения следует ожидать там, где величина производной  $\partial M_x^{equ}(z) / \partial z$  максимальна.

Используя экспериментальные данные о диффузионной длине и времени спиновой диффузии [4, 7–11], легко показать, что практически всегда  $l_d \ll L_D$ , поэтому ниже мы будем полагать  $k_1 = 1/L_D$  и  $k_2 = -1/L_D$ , т. е. ограничиваться линейным приближением по  $l_d$ . Многими авторами влияние электрического тока на спиновую поляризацию изучается в рамках исследования спиновой инжекции из ферромагнетика в немагнитный металл или полупроводник. Решение соответствующих

уравнений ищется отдельно для ферромагнетика и неферромагнитного материалов, после чего проводится «сшивка» решений при условии непрерывности потока частиц и спинового тока на границе раздела. Такой подход неприменим, если резкая граница между материалами с разной намагниченностью отсутствует. В формуле (5) какие-либо ограничения на вид зависимости  $M_x^{equ}$  от  $z$  отсутствуют, что позволяет анализировать различные случаи с единой точки зрения.

### 3. ФЕРРОМАГНИТНЫЕ СЛОИ В НЕМАГНИТНОМ МАТЕРИАЛЕ

В настоящее время активно исследуются полупроводниковые структуры с  $\delta$ -легированными слоями, в которых примесь расположена в слое толщиной порядка 1 нм. Возможны и металлические структуры такого типа. Предположим, что  $\delta$ -слой является ферромагнитным. В рамках используемого макроскопического подхода такой слой следует считать плоскостью, вставленной в немагнитную матрицу. Будем считать, что это  $x$ - $y$ -плоскость, а ток течет вдоль ее нормали. Равновесную намагниченность, которую считаем направленной вдоль оси  $x$ , в этом случае можно записать в виде  $M_x^{equ} = m_0\delta(z)$ , где  $m_0$  — магнитный момент единицы площади слоя. Используя формулу (5) и учитывая, что  $M_x^{equ} = 0$  при  $z \neq 0$ , получаем

$$M_x(z) = \frac{m_0 l_d}{L_D^2} F(z),$$

где в рассматриваемом случае

$$F(z) = \begin{cases} -\frac{1}{2}e^{k_1 z} \approx e^{z/L_D}, & z < 0, \\ \frac{1}{2}e^{k_2 z} \approx e^{-z/L_D}, & z > 0. \end{cases} \quad (7)$$

Ферромагнитный  $\delta$ -слой действует как спиновый поляризатор, точнее, как спиновый фильтр, см. вставку на рис. 1. Поскольку  $\delta$ -слой пропускает носители заряда преимущественно с магнитным моментом, направленным параллельно магнитному моменту слоя, справа от  $\delta$ -слоя электронная намагниченность  $M_x(z)$  оказывается положительной, а слева отрицательной.

Рассмотрим теперь намагниченность электронного газа в материале с двумя ферромагнитными  $\delta$ -слоями, магнитные моменты которых параллельны. Будем считать, что  $\delta$ -слои расположены на расстоянии  $t_g$  друг от друга при  $z = \pm t_g/2$ . Используя формулу (5), для случая параллельных моментов  $\delta$ -слоев получаем

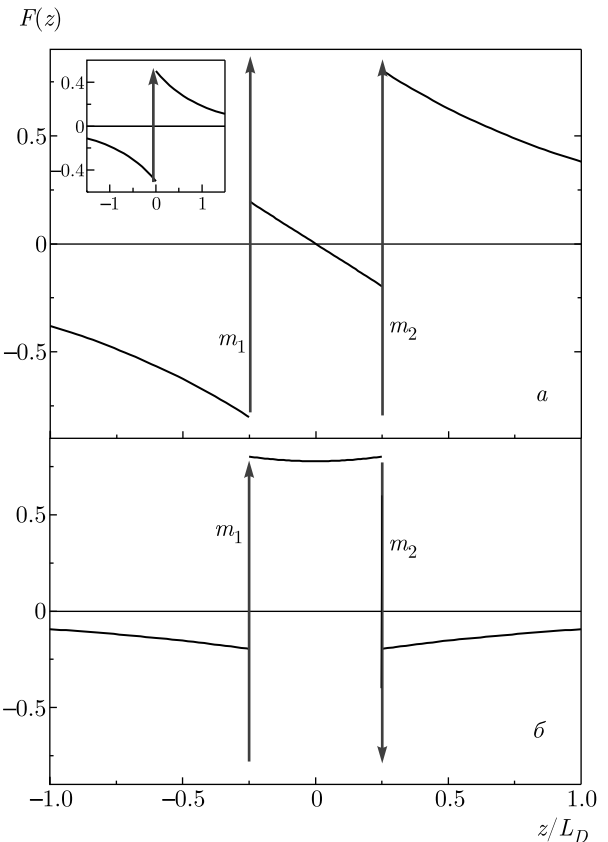
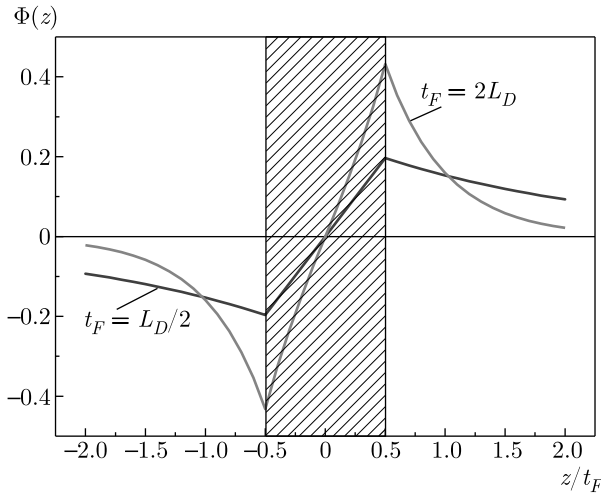


Рис. 1. Намагниченность электронов при их прохождении через ферромагнитные  $\delta$ -слои. Носители заряда движутся слева направо вдоль оси  $z$ , направление магнитного момента слоев показано вертикальными стрелками. На вставке: поляризация электронов одиночным  $\delta$ -слоем. Панель *a*: координатная зависимость намагниченности при параллельных магнитных моментах слоев; панель *б* — то же при антипараллельных магнитных моментах

зую формулу (5), для случая параллельных моментов  $\delta$ -слоев получаем

$$F(z) = \begin{cases} -\text{ch}(t_g/2L_D) e^{z/L_D}, & z < -t_g/2, \\ -e^{-t_g/2L_D} \text{sh}(z/L_D), & -t_g/2 < z < t_g/2, \\ \text{ch}(t_g/2L_D) e^{-z/L_D}, & z > t_g/2. \end{cases} \quad (8)$$

На рис. 1а показан график этой функции для  $t_g = L_D/2$ . В промежутке между двумя слоями величина намагниченности электронного газа меньше, чем вблизи слоев вне этой области, причем вблизи первого слоя  $F(z) > 0$ , а вблизи второго эта функция отрицательна,  $F(z) < 0$ .



**Рис. 2.** Изменение намагниченности электронов при их прохождении через слой ферромагнетика при различных соотношениях между толщиной ферромагнитного слоя  $t_F$  и длиной спиновой диффузии  $L_D$ . Носители заряда движутся слева направо

Если магнитные моменты слоев направлены противоположно друг другу т. е.

$$M_x^{equ} = m_0 \delta \left( z + \frac{t_g}{2} \right) - m_0 \delta \left( z - \frac{t_g}{2} \right),$$

то ситуация обратная (рис. 1б):

$$F(z) = \begin{cases} -\text{sh}(t_g/2L_D) e^{z/L_D}, & z < -t_g/2, \\ e^{-t_g/2L_D} \text{ch}(z/L_D), & -t_g/2 < z < t_g/2, \\ -\text{sh}(t_g/2L_D) e^{-z/L_D}, & z > t_g/2. \end{cases} \quad (9)$$

Функция  $F(z)$  положительна в промежутке между слоями и отрицательна вне его; при  $t_g < L_D$  эта функция близка к единице в интервале  $-t_g/2 < z < t_g/2$  и мала по величине как при  $z < -t_g/2$ , так и при  $z > t_g/2$ , т. е. пара  $\delta$ -слоев с противоположно направленными магнитными моментами приводит к концентрации неравновесной электронной намагниченности в узкой области пространства между слоями.

Перейдем к рассмотрению намагниченности носителей тока, движущихся через ферромагнитную пластину толщиной  $t_F$ , помещенную в немагнитную среду, см. рис. 2. Полагая, что равновесная намагниченность электронов равна  $M_F$  внутри ферромагнетика, т. е. при  $-t_F/2 < z < t_F/2$ , и нулю вне этого интервала, с помощью (5) легко вычислить  $\delta M_x(z)$ .

Записывая  $\delta M_x(z)$  в виде  $\delta M_x = l_d M_F / L_D \Phi(z)$ , для функции  $\Phi(z)$  получаем

$$\Phi(z) = \begin{cases} -\text{sh}(t_g/2L_D) e^{z/L_D}, & z < -t_g/2, \\ e^{-t_g/2L_D} \text{sh}(z/L_D), & -t_g/2 < z < t_g/2, \\ \text{sh}(t_g/2L_D) e^{-z/L_D}, & z > t_g/2. \end{cases} \quad (10)$$

Очевидно, функция  $\Phi(z)$  является непрерывной при всех  $z$ , соответствующие кривые для различных соотношений между длиной спиновой диффузии и толщиной пластины показаны на рис. 2. Если  $t_F \ll L_D$ , то пластина ведет себя, очевидно, как  $\delta$ -слой с  $m_0 = M_F t_F$ . На границах ферромагнетика и немагнитного материала функция  $\Phi(z)$  достигает минимального (при  $z = -t_F/2$ ) и максимального (при  $z = +t_F/2$ ) значений:

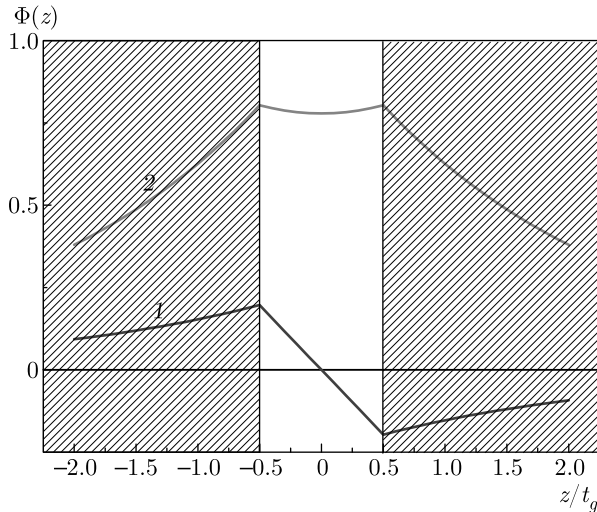
$$\Phi \left( z = \pm \frac{t_F}{2} \right) = \pm \frac{1}{2} \left( 1 - e^{-t_F/L_D} \right).$$

Это есть не что иное, как известный эффект спиновой аккумуляция, т. е. возникновение неравновесной спиновой плотности вблизи поверхности раздела сред с различной намагниченностью при протекании электрического тока через эту поверхность. Поскольку функция  $\Phi$  на левом и правом концах интервала  $(-t_F/2, +t_F/2)$  имеет разные знаки, можно сказать, что при  $t_F > 0$  имеет место положительная, а при  $t_F < 0$  отрицательная аккумуляция.

Заметим, что, в отличие от  $M_x(z)$ , функция  $\delta M_x(z)$  является непрерывной при всех  $z$ , в том числе и при  $z = \pm t_F/2$ , а из непрерывности  $\delta M_x(z)$  следует и непрерывность потока намагниченности в этих точках, см. (1). Иначе говоря, если функция  $M_x^{equ}(z)$  испытывает конечный скачок в какой-либо точке  $z_0$ , то  $\delta M_x(z)$  и  $J_{zx}(z)$  в этой точке непрерывны. Если же при  $z = z_0$  имеет место более сильная особенность функции  $M_x^{equ}(z)$ , то  $\delta M_x(z)$  и  $J_{zx}(z)$  непрерывными, вообще говоря, не являются. Так, в случае  $\delta$ -слоя  $\delta M_x(z)$  испытывает скачок, см. (7), а потоки намагниченности справа и слева от  $\delta$ -слоя различаются.

Величина  $|\Phi|$  на границах интервала  $(-t_F/2, +t_F/2)$  зависит от отношения толщины ферромагнитного слоя к длине спиновой диффузии, возрастая при увеличении  $t_F$ . Следовательно, для того чтобы спиновая инжекция была эффективной, толщина ферромагнитного слоя (спинового инжектора) должна превышать длину спиновой диффузии. В реальных экспериментах это условие не всегда выполняется; так, в [7] толщина слоя





**Рис. 3.** Отклонение намагниченности электронов при прохождении немагнитного слоя толщиной  $t_g$ . Области, занятые ферромагнетиком, заштрихованы. Электроны движутся слева направо из ферромагнетика, намагниченность которого считается положительной, проходят немагнитный слой и попадают во второй слой ферромагнетика, намагниченность которого либо положительна, как у первого ферромагнетика (кривая 1), либо отрицательна (кривая 2).

Длина спиновой диффузии  $L_D = 2t_g$

железа была 5 нм, тогда как в железе  $L_D$  около 9 нм [4].

Очевидно, если неравенство  $t_F \gg L_D$  выполняется, то эффекты вблизи краев пластины можно рассматривать независимо, что существенно упрощает расчет. Рассмотрим, например, электронную намагниченность в промежутке между двумя ферромагнитными слоями толщиной  $t_F \gg L_D$ . Будем считать, что области  $z < -t_g/2$  и  $z > t_g/2$  заняты ферромагнетиками, а щель между ними ( $-t_g/2 < z < t_g/2$ ) заполнена немагнитным материалом. На рис. 3 показана функция  $\Phi(z)$  для случаев, когда равновесные намагниченности в ферромагнетиках параллельны (кривая 1), либо направлены противоположно друг другу. Легко видеть, что в промежутке между двумя толстыми пластинами ферромагнетиков характер зависимости  $\delta M_x$  от  $z$  такой же, как и в промежутке между двумя ферромагнитными  $\delta$ -слоями. В частности, как и в случае двух  $\delta$ -слоев, при протекании электрического тока пара ферромагнитных платин с противоположно направленными намагниченностями работает как концентратор неравновесной спиновой плотности.

#### 4. ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

Интенсивное развитие спинтроники было стимулировано обнаружением гигантского магнитосопротивления в магнитных сверхрешетках [17], которые являются примером проводящих структур с периодически меняющейся в пространстве намагниченностью. Другим примером являются материалы с магнитным упорядочением типа статических спиновых волн (продольных или поперечных), см., например, обзор [6]. Во многих материалах (например, в редкоземельных металлах) наблюдаются спиральные (геликоидальные) магнитные структуры. Хотя такие структуры в настоящее время привлекают большое внимание, эффекты, связанные с протеканием в них электрического тока, оказываются существенно более сложными, см. недавно опубликованную статью [18] и ссылки в ней. В данной работе они рассматриваться не будут.

Предположим, что функция  $M_x^{equ}(z)$  является периодической с периодом  $d$ . Рассмотрим сначала статическую поперечную спиновую волну (TSW-структуру). Равновесная намагниченность в этом случае меняется следующим образом:

$$M_x^{equ}(z) = \mu \sin Qz,$$

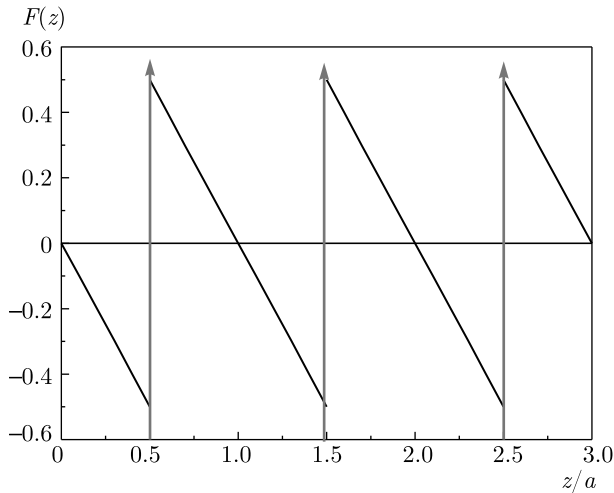
где  $Q = 2\pi/d$  — волновой вектор структуры. Подставляя это выражение в (5) и считая, что  $l_d \ll L_D$ , получаем

$$\delta M_x = -\mu \frac{l_d}{L_D} \frac{QL_D}{1 + (QL_D)^2} \cos Qz. \quad (11)$$

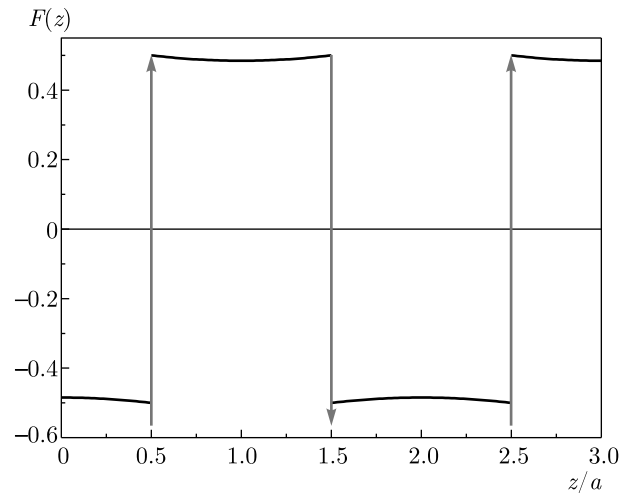
Амплитуда осцилляций  $\delta M_x$  определяется не только отношением  $l_d/L_D$ , но и отношением длины спиновой диффузии к периоду структуры. Если  $QL_D \ll 1$ , то  $\delta M_x \ll \mu$ , поскольку равновесная намагниченность почти постоянна на расстояниях порядка  $L_D$  и ситуация близка к той, что реализуется в однородном ферромагнетике. Если же  $QL_D \gg 1$ , на расстоянии порядка  $L_D$  происходит усреднение осцилляций, в результате чего отклонение намагниченности электронов от ее равновесного значения опять оказывается малым. Амплитуда колебаний  $\delta M_x$  максимальна, когда  $QL_D = 1$ .

Полученные формулы остаются, очевидно, справедливыми и в случае продольной волны спиновой плотности, когда в пространстве изменяется не  $x$ , а  $z$ -компонента намагниченности и  $M_z^{equ}(z) = \mu \sin Qz$ , в приведенных формулах нужно лишь заменить индекс поляризации  $x$  на  $z$ .

Теперь рассмотрим влияние электрического тока на намагниченность электронов в сверхрешетках, образованных чередованием ферромагнитных и



**Рис. 4.** Зависимость неравновесной намагниченности электронов в сверхрешетке, образованной чередованием ферромагнитных  $\delta$ -слоев, магнитные моменты которых параллельны. Длина спиновой диффузии  $L_D = 2a$ ; дрейфовая длина  $l_d \ll L_D$



**Рис. 5.** Зависимость неравновесной намагниченности электронов в сверхрешетке, в которой магнитные моменты соседних  $\delta$ -слоев направлены противоположно друг другу. Длина спиновой диффузии  $L_D = 2a$ ; дрейфовая длина  $l_d \ll L_D$

немагнитных слоев. Выше было показано, что координатная зависимость намагниченности электронов между двумя ферромагнитными слоями аналогична зависимости между ферромагнитными  $\delta$ -слоями, помещенными в немагнитную матрицу. В связи с этим ниже мы ограничимся рассмотрением сверхрешеток, образованных чередованием  $\delta$ -слоев.

Предположим, что магнитные моменты ферромагнитных  $\delta$ -слоев, находящихся на расстоянии  $a$  друг от друга, параллельны друг другу. Для определенности будем считать, что  $\delta$ -слои расположены при  $z = a/2 \pm na, n = 0, 1, 2, \dots$  Как и в случае двух  $\delta$ -слоев, результат вычисления  $\delta M_x(z)$  с помощью (5) можно записать в виде

$$M_x(z) = \frac{l_d m_0}{L_D^2} F(z).$$

Даже в этом случае формулы для  $F(z)$  получаются довольно громоздкие, поэтому мы их не выписываем. Вместо этого на рис. 4 приведены кривые, рассчитанные при  $L_D = 2a$ . Как и в случае двух слоев, в промежутке между ферромагнитными слоями  $M_x(z)$  существенным образом зависит от  $z$ , а в середине этого промежутка обращается в нуль.

Обратимся к рассмотрению сверхрешетки, в которой магнитные моменты соседних слоев направлены противоположно друг другу. Период такой магнитной структуры  $d = 2a$ . График функции  $F(z)$  для этого случая показан на рис. 5.

Легко видеть, что в обоих рассмотренных случаях имеет место периодическая зависимость электронной намагниченности от координаты  $z$ , имеющая антиферромагнитный характер, т. е. магнитный момент электронного газа в расчете на период структуры равен нулю. Этот результат есть следствия предположения о том, что время спиновой релаксации не зависит от  $z$ . Действительно, если магнитная структура является периодической с периодом  $d$ , то интегрируя уравнение (1) от 0 до  $d$  и учитывая, что  $J_{zx}(z) = J_{zx}(z + d)$ , для стационарного случая получаем

$$\int_0^d \frac{M_x - M_x^{equ}}{\tau_s} dz = 0. \tag{12}$$

Очевидно, это соотношение справедливо при любой периодической зависимости  $M_x^{equ}(z)$ . Если  $\tau_s$  не зависит от  $z$ , то интеграл от  $\delta M_x$  оказывается равным нулю.

Влияние тока на намагниченность электронного газа должно иметь место не только в регулярных структурах, но и в том случае, когда распределение намагниченности имеет случайный характер. Прежде всего это относится к сильнонеоднородным магнетикам. Очевидно, что в этом случае эффект зависит от функции распределения производной  $\partial M_x^{equ} / \partial z$ . Детальное рассмотрение этой ситуации выходит за рамки настоящей работы, но анализ на качественном уровне провести несложно. Если

намагниченность плавно меняется на длине, меньшей чем длина спиновой диффузии, то, очевидно, ситуация близка к той, что имеет место в случае статической волны спиновой плотности при  $QL_D \gg 1$  и, следовательно, влияние тока на намагниченность будет слабым, см (11). Слабым будет эффект и в том случае, когда намагниченность меняется на длине, большей чем  $L_D$ . Наиболее заметным он будет, очевидно, когда характерная длина изменения намагниченности порядка  $L_D$ .

### 5. ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ВКЛЮЧЕНИИ И ВЫКЛЮЧЕНИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

До сих пор мы рассматривали только стационарные состояния и полагали, что  $\delta M_x$  зависит только от  $z$ . Любой электронный прибор, однако, включают и выключают, поэтому необходимо исследовать не только стационарный случай, но и переходные процессы.

Предположим, что при  $t < 0$  скорость электронов не зависит от времени, а в момент  $t = 0$  электрический ток выключается. При  $t > 0$  зависимость  $\delta M_x$  от  $z$  и  $t$  описывается соотношениями (1) и (2), в которых следует положить  $V_z = 0$ . Для удобства введем переменные  $\zeta = z/L_D$  и  $\tau = t/\tau_s$  и функцию  $U(\zeta, \tau) = \delta M_x(\zeta L_D, \tau \tau_s)$ . Поскольку  $l_d = 0$ , функция  $U(\zeta, \tau)$  является решением уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} - \frac{\partial^2 U}{\partial \zeta^2} + U = 0. \tag{13}$$

В момент  $\tau = 0$  функция  $U(\zeta, 0)$  равна  $\delta M_x$  в стационарном состоянии и  $U \rightarrow 0$  при  $\tau \rightarrow \infty$ . Решение (13) нетрудно найти методом разделения переменных. Результат можно записать в виде

$$U(\zeta, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(1+\kappa^2)\tau} \times [A(\kappa) \cos \kappa \zeta + B(\kappa) \sin \kappa \zeta] d\kappa, \tag{14}$$

где

$$A(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\zeta, 0) \cos \kappa \zeta d\zeta, \tag{15}$$

$$B(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\zeta, 0) \sin \kappa \zeta d\zeta.$$

Легко видеть, что если электрический ток включается при  $t = 0$ , то

$$\delta M_x(\zeta L_D, \tau \tau_s) = \delta M_x^{steady}(\zeta L_D) - U(\zeta, \tau).$$

В качестве примера рассмотрим эволюцию неравновесной намагниченности электронного газа при выключении электрического тока, который при  $t < 0$  тек через ферромагнитный  $\delta$ -слой вдоль его нормали. Стационарное решение дается формулой (7). Поскольку

$$F(z) = \frac{1}{2} [-e^\zeta \theta(-\zeta) + e^{-\zeta} \theta(\zeta)]$$

(здесь  $\theta(\zeta)$  — ступенчатая функция) является нечетной функцией, то  $A(\kappa) = 0$ . Определим  $\varphi(\zeta, \tau)$  равенством

$$U = \frac{m_0 l_d}{L_D^2} \varphi.$$

Для  $\varphi(\zeta, \tau)$  получаем

$$\varphi(\zeta, \tau) = \frac{e^{-\tau}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\kappa}{1 + \kappa^2} e^{-\kappa^2} \sin \kappa \zeta d\kappa. \tag{16}$$

С учетом [19]  $\varphi(\zeta, \tau)$  можно записать в виде

$$\varphi(\zeta, \tau) = \frac{1}{4} \left[ e^{-\zeta} \operatorname{Erfc} \left( \sqrt{\tau} - \frac{\zeta}{2\sqrt{\tau}} \right) - e^\zeta \operatorname{Erfc} \left( \sqrt{\tau} + \frac{\zeta}{2\sqrt{\tau}} \right) \right], \tag{17}$$

где функция ошибок определяется следующим образом:

$$\operatorname{Erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-\xi^2} d\xi. \tag{18}$$

Из (17) следует, что зависимость  $M_x$  от времени не является экспоненциальной. На рис. 6 показаны кривые  $\varphi(\zeta, \tau)/\varphi(\zeta, 0)$  для точек вблизи ферромагнитного  $\delta$ -слоя и при удалении от него. Вблизи  $\delta$ -слоя намагниченность электронов быстро убывает при росте  $\tau$ , тогда как вдали от слоя в течение некоторого времени намагниченность практически не изменяется. На первый взгляд, отсутствие уменьшения  $\varphi(\zeta, \tau)$  со временем противоречит наличию спиновой релаксации. Дело в том, что  $M_x$  изменяется не только из-за релаксации, но и благодаря спиновой диффузии. Для точек правее  $\delta$ -слоя поток намагниченности направлен от слоя, что и приводит к быстрому уменьшению  $M_x$  при  $z < L_D$  и к замедлению убывания  $M_x$  при  $z > L_D$ .

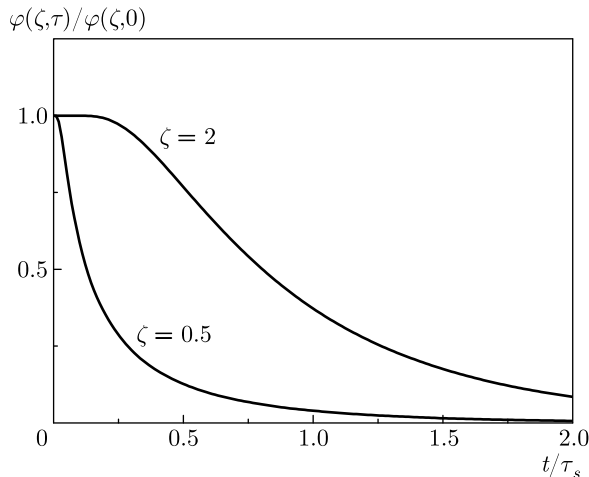


Рис. 6. Зависимость намагниченности электронного газа от времени при выключении электрического тока вблизи ферромагнитного  $\delta$ -слоя и при удалении от него

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные результаты работы.

В рамках использованной простой модели удалось с единой точки зрения описать влияние электрического тока на неравновесную электронную намагниченность в структурах, в которых равновесная намагниченность меняется в пространстве. Из полученных формул следует, что влияние электрического тока на электронную намагниченность является наиболее сильным там, где производная  $\partial M_x^{equ}/\partial z$  имеет особенность.

Величина намагниченности электронов, инжектированных из ферромагнетика в немагнитный материал, является наибольшей, т. е. инжекция наиболее эффективна, когда толщина ферромагнитного слоя заметно больше длины спиновой диффузии.

В промежутке между двумя ферромагнитными слоями неравновесная намагниченность электронов существенным образом зависит от координаты. Если промежуток между слоями меньше длины спиновой диффузии, а моменты слоев параллельны друг другу, то  $M_x$  меняет знак в середине указанного промежутка. Если же магнитные моменты ферромагнитных слоев направлены противоположно друг другу, то внутри немагнитного слоя величина неравновесной намагниченности значительно больше, чем в случае параллельных магнитных моментов, а зависимость  $M_x$  от  $z$  значительно слабее. Иными словами, пара ферромагнитных слоев с противоположно направленными магнитными моментами работают как концентратор неравновесной электронной намагниченности.

В магнитных материалах с длиннопериодическими магнитными структурами типа статической спиновой волны (TSW- и LSW-структуры) амплитуда колебаний  $\delta M_x$  максимальна, когда  $QL_D = 1$ .

В магнитных сверхрешетках, образованных чередованием ферромагнитных и немагнитных слоев, электрический ток индуцирует формирование периодической структуры неравновесной электронной намагниченности в немагнитных слоях. Эта структура является антиферромагнитной как при параллельной, так и антипараллельной ориентации магнитных моментов соседних ферромагнитных слоев.

Исследование переходных процессов как при включении, так и при выключении электрического тока показало, что зависимость электронной намагниченности от времени в магнитно-неоднородной среде не описывается экспоненциальной зависимостью и определяется не только временем спиновой релаксации, но и спиновой диффузией.

**Благодарности.** Автор признателен В. В. Устинову и И. А. Ясюлевичу за обсуждение работы.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования России (тема «Спин» № АААА-А18-118020290104-2) при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-02-00038).

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Spin Physics in Semiconductor*, ed. by M. I. Dyakonov, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2008).
2. *Spin Current*, ed. by S. Maekawa, S. O. Valenzuelo, S. Saitoh, and T. Kimura, Oxford University, Oxford, United Kingdom Press (2017).
3. *Spintronics for Next Generation Innovative Devices*, ed. by K. Sato and E. Saitoh, John Wiley and Sons (2015).
4. J. Bass and W. P. Pratt Jr. *J. Phys.: Condens. Matter.* **19**, 183201 (2007).
5. A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Dieny, P. Pirro, and B. Hillebrands, *J. Magn. Magn. Mat.* **509**, 166711 (2020).
6. M. Johnson and R. H. Silsbee, *Phys. Rev. B* **37**, 5312 (1988).
7. X. H. Lou, C. Adelman, S. A. Cooker, E. S. Garlid, J. Zhang, K. S. M. Reddy, S. D. Flexner, C. J. Palmstrom, and P. A. Crowell, *Nature Phys.* **3**, 197 (2007).

8. O. M. J. van 't Erve, A. L. Friedman, E. Cobas, C. H. Li, J. T. Robinson, and B. T. Jonker, *Nature Nanotechnol.* **7**, 737 (2012).
9. Y. Fujita, M. Yamada, S. Yamada, T. Kanashima, K. Sawano, and K. Hamaya, *Phys. Rev. B* **94**, 245302 (2016).
10. N. A. Viglin, V. V. Ustinov, S. O. Demokritov, A. O. Shorikov, N. G. Bebenin, V. M. Tselikhovskaya, T. N. Pavlov, and E. I. Patrakov, *Phys. Rev. B* **96**, 235303 (2017).
11. N. A. Viglin and N. G. Bebenin, *Phys. Met. Metallogr.* **119**, 1289 (2018).
12. I. Appelbaum, *Phil. Trans. R. Soc. A* **369**, 3554 (2011).
13. A. I. Nikitchenko and N. A. Pertsev, *Phys. Rev. Appl.* **14**, 034022 (2020).
14. Е. А. Вилков, Г. М. Михайлов, С. А. Никитов, А. Р. Сафин, М. В. Логунов, V. N. Korenivskii, С. Г. Чигарев, Л. А. Фомин, *ЖЭТФ* **154**, 1108 (2018).
15. M. Baumgartner, K. Garello, J. Mendil, C. O. Avci, E. Grimaldi, C. Murer, J. Feng, M. Gabureac, C. Stamm, Y. Acremann, S. Finizio, S. Wintz, J. Raabe, and P. Gambardella, *Nature Nanotechnol.* **12**, 980 (2017).
16. Ю. А. Изюмов, *УФН* **144**, 439 (1984).
17. M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. E. Eitenne, G. Creuzet, A. Friedrich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
18. V. V. Ustinov and I. A. Yasyulevich, *Phys. Rev. B* **102**, 134431 (2020).
19. *Tables of Integral Transforms*, Vol. I, McGraw-Hill Book Company, Inc. (1954).

# ЧАСТОТА СПИН-ТРАНСФЕРНОГО НАНООСЦИЛЛЯТОРА НА ОСНОВЕ ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОЙ ТУННЕЛЬНОЙ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРЫ С НЕНУЛЕВОЙ ЭЛЛИПТИЧНОСТЬЮ

Ю. Н. Шубин <sup>a\*</sup>, М. Х. Машаев <sup>b</sup>, А. В. Ведяев <sup>a</sup>, Н. В. Стрелков <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет  
119991, Москва, Россия*

<sup>b</sup> *Туркменский государственный университет им. Махтумгули  
744000, Ашхабад, Туркменистан*

Поступила в редакцию 12 января 2022 г.,  
после переработки 25 января 2022 г.  
Принята к публикации 26 января 2022 г.

Свободный слой в наногетероструктуре с магнитным туннельным переходом (МТП) обычно имеет форму тонкого диска диаметром в несколько десятков нанометров и толщиной в несколько нанометров. При определенных значениях тока, протекающего через такую МТП-структуру, намагниченность свободного слоя испытывает стационарную прецессию, вызванную компенсацией диссипации энергии прецессии спин-трансферным эффектом. Важным свойством такого осциллятора является линейная зависимость частоты колебаний от приложенного напряжения. Если форма МТП-структуры приобретает эллиптичность при изготовлении, то колебания намагниченности становятся отличными от синусоидальных, и зависимость частоты от напряжения становится более сложной. В данной статье приводится приближенная формула для расчета частоты однодоменного наноосциллятора в МТП-структуре с ненулевой эллиптичностью, которая была получена с помощью асимптотического метода решения уравнения Ландау–Лифшица с дополнительными феноменологическими транспортными слагаемыми. Также проводится сравнение полученной формулы с результатами численных расчетов, которое показывает хорошее согласование при малых отклонениях формы МТП-структуры от симметричного диска.

DOI: 10.31857/S0044451022050121  
EDN: DTDDR

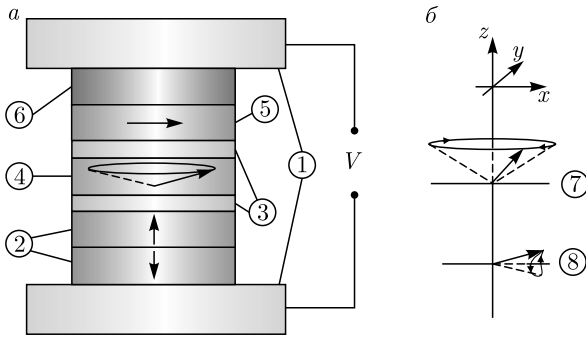
## 1. ВВЕДЕНИЕ

Использование перпендикулярно намагниченного опорного слоя в структуре с магнитным туннельным переходом (МТП) было предложено в 2003 г. [1]. Спин-трансферный эффект [2, 3] в МТП-структуре с перпендикулярно намагниченным опорным слоем (перпендикулярная МТП-структура), изображенной на рис. 1а, приводит к возникновению прецессии намагниченности в свободном слое в режиме «выхода из плоскости» (ИП) [4, 5]. В отличие от прецессии в режиме «в плоскости» (ВП) [6], режим ИП сопровождается большей амплитудой колебаний намагниченности и, следовательно, большей

амплитудой генерируемого высокочастотного (ВЧ) сигнала (рис. 1б). МТП-структуры с таким эффектом получили название спин-трансферных наноосцилляторов (СТНО). Частота прецессии СТНО лежит в микроволновом диапазоне и может достигать десятков гигагерц [7]. Такие стационарные колебания осциллятора возможны благодаря компенсации диссипации энергии прецессии намагниченности спин-трансферным эффектом [8–10]. Массив из сотен подобных наноосцилляторов [11–13] можно не только использовать как генератор ВЧ-сигнала, но и применять в нейроморфных вычислениях [14, 15].

Магнитная запись с резонансной микроволновой накачкой позволяет значительно уменьшить магнитное поле записи в магнитном носителе информации, а следовательно, и увеличить плотность записи [16]. Это становится возможным, если генерировать локальное электромагнитное ВЧ-поле с помощью

\* E-mail: ynshubin@gmail.com

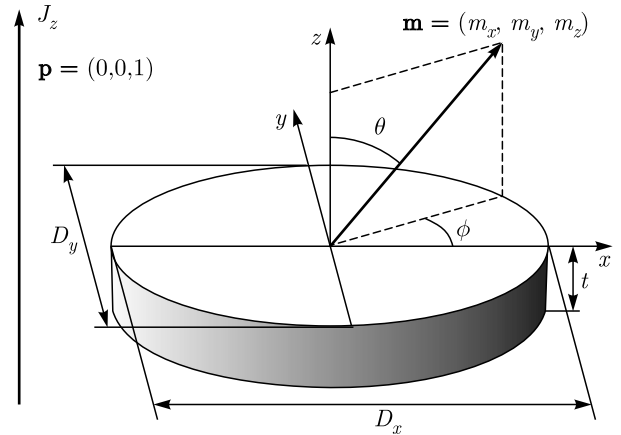


**Рис. 1.** а) Пример гетероструктуры с перпендикулярно намагниченным опорным слоем 2. 1 — проводящие электроды, 2 — синтетический антиферромагнетик, состоящий из закрепленного (↓) и опорного (↑) слоев, 3 — изолятор, 4 — свободный слой, 5 — анализатор, 6 — антиферромагнетик,  $V$  — приложенное напряжение. б) Режимы прецессии намагниченности свободного слоя. 7 — режим прецессии с «выходом из плоскости» (ИП), 8 — режим прецессии «в плоскости» (ВП)

СТНО, совпадающее с частотой ферромагнитного резонанса магнитных гранул, составляющих поверхность магнитного носителя. Еще одно важное свойство СТНО с перпендикулярной МТП-структурой, которое было показано ранее, состоит в том, что частота СТНО является линейной функцией от приложенного напряжения и не зависит от внешнего перпендикулярного магнитного поля [17]. Это свойство определяет устойчивость ВЧ-сигнала и возможность его модуляции по частоте с помощью простого изменения приложенного напряжения.

Единственный недостаток такой конфигурации — это невозможность детектировать магниторезистивный сигнал, так как относительный угол между намагниченностями опорного и свободного слоев не изменяется при прецессии в режиме ИП. Но эту проблему можно решить, добавив в состав гетероструктуры рядом со свободным слоем, со стороны, обратной изолятору, еще один ферромагнитный слой с фиксированной намагниченностью — анализатор [4]. Намагниченность анализатора фиксируется с помощью эффекта обменного смещения на интерфейсе ферромагнетик/антиферромагнетик (рис. 1а) [18].

Симметричная перпендикулярная МТП-структура уже рассматривалась ранее как численно, так и аналитически [19, 20]. В данной работе мы рассматриваем перпендикулярную МТП-структуру, которая имеет форму эллипса в плоскости слоев с осями  $D_x$  и  $D_y$ . Эллиптичность, вводимая нами как  $|1 - D_x/D_y|$ , может возникнуть как дефект из-за



**Рис. 2.** Упрощенная однодоменная модель ферромагнитного свободного слоя в перпендикулярной МТП-структуре под действием спин-поляризованного тока.  $J_z$  — ток, протекающий перпендикулярно плоскости свободного слоя,  $\mathbf{p}$  — единичный вектор поляризации, направленный вдоль намагниченности опорного слоя,  $\mathbf{m}$  — единичный вектор, направленный вдоль намагниченности свободного слоя,  $t$  — толщина,  $D_{x,y}$  — длины свободного слоя в форме эллипса в направлении соответственно  $x$  и  $y$

особенностей изготовления подобных наноструктур и изменяться от одной МТП-структуры к другой внутри одного массива. Представленные результаты показывают, как изменяется частота СТНО с изменением эллиптичности и как изменяется зависимость частоты от напряжения в случае ненулевой эллиптичности МТП-структуры.

## 2. МОДЕЛЬ

Мы рассматриваем систему, показанную на рис. 2, которая представляет собой одиночный свободный слой МТП-структуры, через который протекает ток  $J_z$  с поляризацией  $\mathbf{p}$ , направленной перпендикулярно плоскости слоя, вдоль оси  $z$ . В однодоменном приближении свободная энергия свободного слоя в единицах СИ записывается как

$$E = -\mu_0 M_s \mathbf{H}_{ext} \cdot \mathbf{m} + \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \sum_{i=x,y,z} N_i m_i^2, \quad (1)$$

где  $\mathbf{m}$  — единичный вектор вдоль намагниченности свободного слоя,  $M_s$  — намагниченность насыщения,  $\mathbf{H}_{ext}$  — внешнее однородное магнитное поле,  $N_i$  — диагональные компоненты тензора размагничивания,  $\mu_0$  — магнитная постоянная. Динамика намагниченности свободного слоя описывается уравнением Ландау – Лифшица – Гильберта с дополнительными слагаемыми:

$$\frac{d\mathbf{m}}{d\tau} = -\gamma [\mathbf{m} \times \mu_0 \mathbf{H}_{eff}] + \alpha \left[ \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{d\tau} \right] - \gamma a_{\parallel} V [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{p}]], \quad (2)$$

где  $\gamma$  — гиромагнитное отношение свободных электронов,  $\alpha$  — константа затухания Гильберта,  $\mathbf{p}$  — единичный вектор вдоль намагниченности опорного слоя (вектор поляризации),  $a_{\parallel}$  — феноменологическая спин-транспортная константа,  $V$  — приложенное напряжение. Эффективное поле  $\mathbf{H}_{eff}$  рассчитывается из свободной энергии (1):

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta E}{\delta \mathbf{m}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ H_z \end{pmatrix} - M_s \begin{pmatrix} N_x m_x \\ N_y m_y \\ N_z m_z \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Принимая во внимание постоянство модуля вектора  $\mathbf{m}$  ( $|\mathbf{m}| = 1$ ) и переходя в сферические координаты, уравнение (2) с эффективным полем (3) можно преобразовать в систему двух уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= -\gamma'_0 M_s \left[ -\alpha \cos \theta (N_{\perp} + N_{\parallel} \cos 2\varphi) + \alpha \frac{H_z}{M_s} + N_{\parallel} \sin 2\varphi + \frac{a_{\parallel} V}{\mu_0 M_s} \right] \sin \theta, \\ \dot{\varphi} &= \gamma'_0 M_s \left[ -\cos \theta (N_{\perp} + N_{\parallel} \cos 2\varphi) + \frac{H_z}{M_s} - \alpha N_{\parallel} \sin 2\varphi - \alpha \frac{a_{\parallel} V}{\mu_0 M_s} \right], \end{aligned} \quad (4)$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \gamma'_0 &= \frac{\gamma \mu_0}{1 + \alpha^2}, \\ N_{\perp} &= N_z - \frac{N_x + N_y}{2}, \\ N_{\parallel} &= \frac{N_y - N_x}{2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Система уравнений (4) имеет аналитическое решение в стационарном случае, когда  $\dot{\theta} = \dot{\varphi} = 0$ :

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \frac{H_z}{M_s} \left[ N_{\perp} \pm N_{\parallel} \sqrt{1 - \left( \frac{a_{\parallel} V}{\mu_0 M_s N_{\parallel}} \right)^2} \right]^{-1}, \\ \cos \varphi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \left( \frac{a_{\parallel} V}{\mu_0 M_s N_{\parallel}} \right)^2} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Из (6) очевидно, что стационарное решение существует тогда, когда выполняется условие

$$|V| \leq V_{th} = \frac{\mu_0 M_s |N_{\parallel}|}{a_{\parallel}} = \mu_0 M_s \frac{|N_y - N_x|}{2a_{\parallel}}. \quad (7)$$

Физический смысл (7) заключается в том, что у свободного слоя с ненулевой эллиптичностью в основном состоянии намагниченность направлена вдоль большей оси в результате возникающей анизотропии формы. Чтобы преодолеть этот энергетический барьер и вызвать стационарную прецессию, необходимо приложить достаточное для этого напряжение  $V_{th}$ . При этом прецессия может сохраняться и при напряжениях, меньших  $V_{th}$ . В симметричном случае ( $N_x = N_y$ ) статического решения (6) не существует и система прецессирует при любом  $V > 0$ .

В симметричном случае существует решение системы (4) для стационарной ИП-прецессии в случае  $\dot{\theta} = 0$ , полученное ранее в работе [17]. Если положить  $N_{\parallel} = 0$  и  $\dot{\theta} = 0$ , то частота прецессии выразится как

$$\omega_0 = \dot{\varphi} = \gamma \frac{a_{\parallel} V}{\alpha}. \quad (8)$$

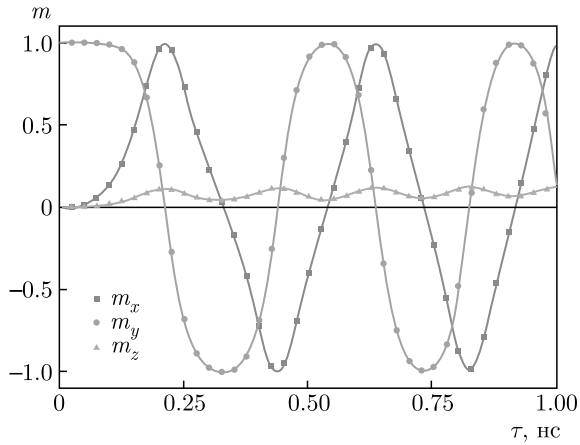
Из (8) следует, что частота ИП-прецессии линейно зависит от приложенного напряжения и не зависит от внешнего перпендикулярного магнитного поля. Это важное свойство СТНО позволяет легко модулировать ВЧ-сигнал, изменяя приложенное напряжение, и гарантирует хорошую помехоустойчивость по отношению к внешним магнитным полям.

В несимметричном свободном слое с ненулевой эллиптичностью эти свойства не сохраняются. Мы покажем это аналитически, выполнив приближенное решение системы (4) и подтвердим этот результат, используя численное моделирование.

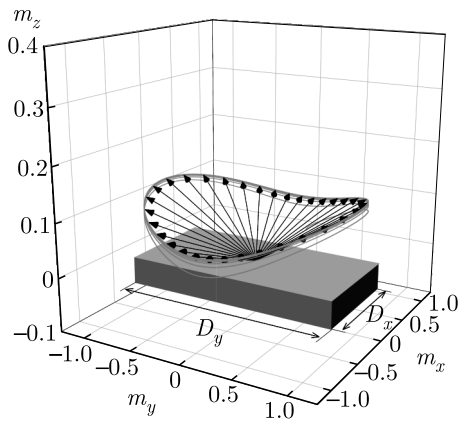
### 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТНО

Для численного моделирования системы уравнений (4) были выбраны параметры, соответствующие материалу свободного слоя CoFeV толщиной  $t = 3$  нм и с осями  $D_x = 100$  нм,  $D_y = 130$  нм. Параметр затухания Гильберта  $\alpha$  выбран равным 0.01 [21], спонтанная намагниченность  $M_s = 10^6$  А/м [22], средние размагничивающие факторы  $N_{x,y,z}$  рассчитывались приближенно по формуле для параллелепипеда [23], феноменологический транспортный параметр  $a_{\parallel} = 16$  мТл/В [24]. Приложенное напряжение  $V$  выбрано равным 0.07 В, меньше критического  $V_{th}$  (7), чтобы получить как можно большую амплитуду колебаний с минимальным выходом намагниченности из плоскости ( $m_z \rightarrow 0$ ). Незатухающие осцилляции намагниченности возможны, если начальное условие для направления намагниченности выбрано вдоль наименьшей оси





**Рис. 3.** Зависимости компонент вектора намагниченности  $\mathbf{m}$  от времени при стационарной ИП-прецессии намагниченности свободного слоя СТНО. Параметры системы:  $M_s = 10^6$  А/м,  $\alpha = 0.01$ ,  $V = 0.07$  В,  $H_z = 0$  А/м,  $D_x = 100$  нм,  $D_y = 130$  нм,  $t = 3$  нм,  $a_{\parallel} = 16$  мТл/В



**Рис. 4.** Трехмерная траектория вектора намагниченности  $\mathbf{m}$  при стационарной ИП-прецессии намагниченности свободного слоя СТНО. Параметры системы такие же, как и на рис. 3

эллипса  $x$ . В реальном устройстве для этого можно приложить начальный импульс напряжения, превышающий  $V_{th}$  и постепенно затухающий до значения  $V$ .

На рис. 3 изображена зависимость компонент намагниченности  $\mathbf{m}$  от времени. Периодические кривые отклоняются от синусоидальной формы из-за присутствия анизотропии формы. Среднее значение  $z$ -компоненты намагниченности  $\mathbf{m}$  отлично от нуля. Численный расчет ее частоты колебаний дает величину, примерно равную 6 ГГц, что в два раза выше частоты прецессии остальных компонент ( $\approx 3$  ГГц). На рис. 4 изображена траектория намагниченности,

построенная по точкам  $(m_x, m_y, m_z)$ , взятым через регулярные временные интервалы. Форма этой траектории была предсказана ранее [20].

#### 4. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СТНО

Наличие ненулевой эллиптичности приводит к ненулевому значению  $N_{\parallel}$ . Это затрудняет поиск аналитического решения для системы уравнений (4). Если допустить, что  $N_{\parallel}$  мало по сравнению с  $N_{\perp}$ , то колебания  $z$ -компоненты намагниченности  $m_z = \cos \theta$  (рис. 3) при ИП-прецессии будут также малы. Для приближенного решения системы уравнений (4) воспользуемся асимптотическим методом прямого разложения и представим решение при  $\tau \rightarrow \infty$  в виде ряда по степеням  $N_{\parallel}$ :

$$\begin{aligned} \theta(\tau) &= \theta_0(\tau) + N_{\parallel} \theta_1(\tau) + N_{\parallel}^2 \theta_2(\tau) + \dots, \\ \varphi(\tau) &= \varphi_0(\tau) + N_{\parallel} \varphi_1(\tau) + N_{\parallel}^2 \varphi_2(\tau) + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

Перепишем систему уравнений (4) в более удобном виде:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= (\alpha \omega_M \cos \theta (N_{\perp} + N_{\parallel} \cos 2\varphi) - \alpha \omega_H - \\ &\quad - N_{\parallel} \omega_M \sin 2\varphi - \omega_J) \sin \theta, \\ \dot{\varphi} &= -\omega_M \cos \theta (N_{\perp} + N_{\parallel} \cos 2\varphi) + \omega_H - \\ &\quad - \alpha N_{\parallel} \omega_M \sin 2\varphi - \alpha \omega_J, \end{aligned} \quad (10)$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \omega_M &= \gamma'_0 M_s, \\ \omega_J &= \gamma'_0 \frac{a_{\parallel} V}{\mu_0}, \\ \omega_H &= \gamma'_0 H_z. \end{aligned} \quad (11)$$

Подставим ряды (9) до второго порядка включительно в систему уравнений (10) и результат разложим в ряд Тейлора по степеням  $N_{\parallel}$ . Затем выделим члены при одинаковых степенях  $N_{\parallel}$  и получим связанные системы уравнений, которые можно решать последовательно. Для нулевого порядка получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_0 &= (\alpha N_{\perp} \omega_M \cos \theta_0 - \alpha \omega_H - \omega_J) \sin \theta_0, \\ \dot{\varphi}_0 &= \omega_H - \alpha \omega_J - N_{\perp} \omega_M \cos \theta_0. \end{aligned} \quad (12)$$

Поскольку решение должно быть незатухающим, из (12) следует, что средний угол стационарной ИП-прецессии  $\theta_0$  — это константа, значение которой определяется выражением

$$\cos \theta_0 = \frac{\alpha \omega_H + \omega_J}{\alpha N_{\perp} \omega_M} = \xi_0. \quad (13)$$

Выражение (13) определяет также среднюю проекцию намагниченности на ось  $z$ :  $\langle m_z \rangle = \cos \theta_0$ , которое в дальнейшем мы обозначим как  $\xi_0$ . Подстановка (13) во второе уравнение системы (12) дает выражение для основной частоты ИП-прецессии  $\omega_0$ , совпадающее с (8), и определяет решение в нулевом приближении:  $\varphi_0 = \omega_0 \tau$ .

В первом порядке разложения система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_1 &= \omega_M (\alpha \xi_0 \cos 2\varphi_0 - \sin 2\varphi_0) \sqrt{1 - \xi_0^2} - \\ &\quad - \omega_M \alpha N_{\perp} (1 - \xi_0^2) \theta_1, \\ \dot{\varphi}_1 &= \omega_M (-\xi_0 \cos 2\varphi_0 - \alpha \sin 2\varphi_0) + \\ &\quad + \omega_M N_{\perp} \theta_1 \sqrt{1 - \xi_0^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Из решения первого уравнения (14) можно выделить незатухающую часть, которая осциллирует с частотой  $2\omega_0$ :

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \left[ (2\omega_0 + \alpha^2 \omega_M N_{\perp} \xi_0 (1 - \xi_0^2)) \cos 2\omega_0 \tau + \right. \\ &\quad \left. + \alpha (2\xi_0 \omega_0 - \omega_M N_{\perp} \xi_0 (1 - \xi_0^2)) \sin 2\omega_0 \tau \right] \times \\ &\quad \times \frac{\omega_M \sqrt{1 - \xi_0^2}}{(2\omega_0)^2 + (\omega_M \alpha N_{\perp})^2 (1 - \xi_0^2)^2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Выражение (15) позволяет найти амплитуду осцилляций  $z$ -компоненты вектора намагниченности. Для этого выполним разложение  $\cos \theta$  в ряд Тейлора с точностью до первого порядка по  $N_{\parallel}$ , учитывая определение (13):

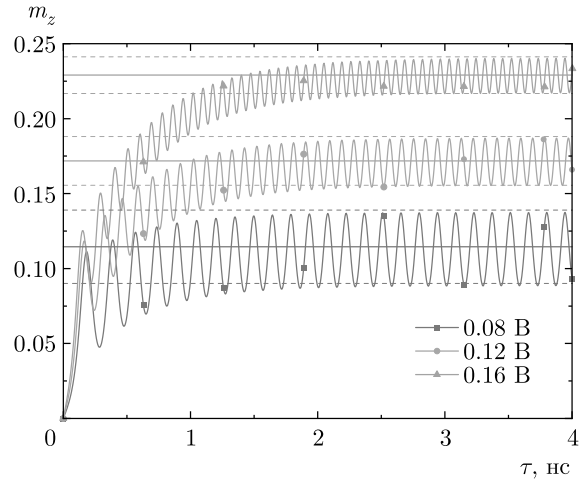
$$m_z \approx \cos(\theta_0 + N_{\parallel} \theta_1) \approx \xi_0 - N_{\parallel} \theta_1 \sqrt{1 - \xi_0^2}. \quad (16)$$

Выполнив подстановку  $\theta_1$  из (15) в (16), найдем производную  $m_z$  по времени и приравняем ее нулю, чтобы найти время с максимальным и минимальным значением:

$$\tau_n = \frac{1}{2\omega_0} \left[ \arctg \alpha \frac{\omega_M N_{\perp} - \xi_0 (2\omega_0 + \omega_M N_{\perp} \xi_0)}{2\omega_0 + \alpha^2 \omega_M N_{\perp} \xi_0 (1 - \xi_0^2)} + 2\pi n \right], \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (17)$$

Затем, подставив (17) в (15) и умножив результат на  $N_{\parallel} \sqrt{1 - \xi_0^2}$ , получим амплитуду колебаний  $m_z$ . При малом параметре затухания,  $\alpha \sim 10^{-2} - 10^{-3}$ , можно оставить только слагаемые, линейные по  $\alpha$ , тогда выражение для амплитуды  $m_z$  сильно упрощается:

$$\begin{aligned} N_{\parallel} \theta_1 \sqrt{1 - \xi_0^2} &\approx \frac{N_{\parallel} \omega_M}{2\omega_0} (1 - \xi_0^2)^{3/2} \approx \\ &\approx \frac{N_{\parallel} \omega_M}{2\omega_0} = \alpha N_{\parallel} \frac{\mu_0 M_s}{2a_{\parallel} V}. \end{aligned} \quad (18)$$



**Рис. 5.** Колебания  $z$ -компоненты намагниченности  $m_z$  при разных значениях приложенного напряжения  $V = 0.08, 0.12$  и  $0.16$  В. Прямыми сплошными линиями обозначены средние значения, рассчитанные из формулы (13), штриховыми линиями — амплитуды, рассчитанные из формулы (18). Параметры системы такие же, как на рис. 3

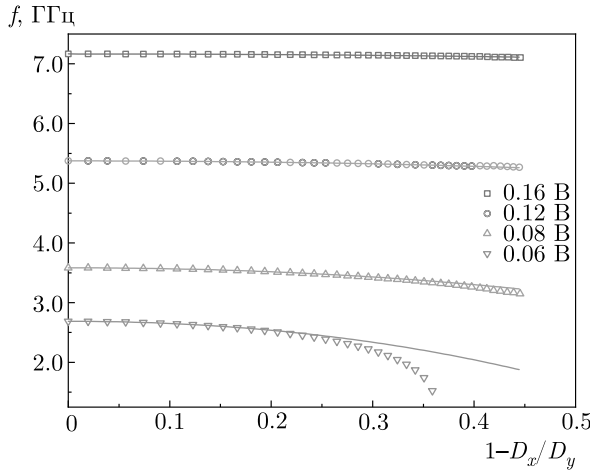
В (18) мы дополнительно учли, что угол ИП-прецессии слабо отклоняется от  $\pi/2$ , т.е.  $\xi_0^2 \ll 1$ . Таким образом,  $z$ -компонента намагниченности совершает колебания с частотой  $2\omega_0$  относительно среднего значения (13) с амплитудой (18). Как видно из рис. 5, справедливость полученных выражений подтверждается результатами численных расчетов.

Решение второго уравнения из (14) для  $\varphi_1$  дает только затухающие и периодические слагаемые, которые при усреднении обращаются в нуль. Следовательно, в первом приближении по  $N_{\parallel}$  изменения частоты колебаний СТНО с ростом эллиптичности нет.

Во втором порядке разложения система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_2 &= \omega_M \xi_0 \theta_1 (\alpha \xi_0 \cos 2\varphi_0 - \sin 2\varphi_0) - \\ &\quad - \omega_M \sqrt{1 - \xi_0^2} \left[ \alpha \theta_1 \sqrt{1 - \xi_0^2} \cos 2\varphi_0 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \alpha N_{\perp} \xi_0 \theta_1^2 + \alpha N_{\perp} \theta_2 \sqrt{1 - \xi_0^2} + \right. \\ &\quad \left. + 2\varphi_1 (\cos 2\varphi_0 + \alpha \xi_0 \sin 2\varphi_0) \right], \\ \dot{\varphi}_2 &= \omega_M \left( \theta_1 \cos 2\varphi_0 \sqrt{1 - \xi_0^2} + \frac{1}{2} N_{\perp} \xi_0 \theta_1^2 + \right. \\ &\quad \left. + N_{\perp} \theta_2 \sqrt{1 - \xi_0^2} - 2\varphi_1 (\alpha \cos 2\varphi_0 - \xi_0 \sin 2\varphi_0) \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Из-за громоздкости выражений мы не представляем результат решения системы уравнений (19), а лишь



**Рис. 6.** Зависимости частоты колебаний СТНО от эллиптичности свободного слоя для нескольких приложенных напряжений  $V = 0.06, 0.08, 0.12$  и  $0.16$  В. Символами обозначены точки, рассчитанные численным методом, сплошными линиями — зависимости, рассчитанные из формулы (21). Длина оси  $D_y$  изменялась от 100 нм до 180 нм. Остальные параметры системы такие же, как на рис. 3

приводим выражение для поправки второго порядка по  $N_{\parallel}$  к частоте  $\omega_0$ :

$$\dot{\varphi}_2 = -\frac{\omega_M^2}{\omega_0} \left[ 1 - \frac{\xi_0}{2} \frac{N_{\perp} \omega_M}{2\omega_0} + \frac{1}{2} \left( \frac{N_{\perp} \omega_M}{2\omega_0} \right)^2 \right] + \mathcal{G}(\cos 4\omega_0 \tau, \sin 4\omega_0 \tau). \quad (20)$$

Поскольку нам необходимо найти такую поправку, которая не обращается в нуль при усреднении по времени, в (20) мы можем отбросить периодическую часть  $\mathcal{G}$ , среднее значение которой равно нулю. Также мы сохраняем только линейные по  $\alpha$  и  $\xi_0$  слагаемые. Тогда частота ИП-прецессии свободного слоя СТНО с точностью до второго порядка разложения по  $N_{\parallel}$  имеет вид

$$2\pi f \approx \omega_0 - N_{\parallel}^2 \frac{\omega_M^2}{\omega_0} \times \left[ 1 - \frac{\xi_0}{2} \frac{N_{\perp} \omega_M}{2\omega_0} + \frac{1}{2} \left( \frac{N_{\perp} \omega_M}{2\omega_0} \right)^2 \right]. \quad (21)$$

На рис. 6 представлено сравнение результатов численных расчетов с результатами, полученными по формуле (21). При небольшой эллиптичности  $|1 - D_x/D_y| \ll 1$  аналитическое выражение дает результат, совпадающий с численным расчетом. С ростом эллиптичности аналитическое выражение начинает завывать значение частоты, так как в этом

случае необходим учет членов более высокого порядка разложения по  $N_{\parallel}$  в (9).

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Асимптотический метод решения уравнения Ландау–Лифшица для СТНО в однодоменном приближении показывает хорошее качественное и количественное согласие с результатами численных расчетов. Основные выводы, которые следуют из этого решения, следующие. С появлением эллиптичности намагниченность свободного слоя СТНО в режиме ИП-прецессии начинает совершать колебания вдоль оси  $z$  с частотой  $2\omega_0$  (8), амплитудой (18), около среднего значения (13). Чем ниже приложенное напряжение  $V$ , тем больше амплитуда этих колебаний для данной эллиптичности (рис. 5) и сильнее отклонение основной частоты СТНО от значения  $\omega_0$  (рис. 6). Максимум  $z$ -компоненты  $\mathbf{m}$  достигается в момент, когда проекция намагниченности на плоскость свободного слоя ориентирована вдоль большей оси эллипса, и минимум, — когда вдоль меньшей (рис. 4). Частота ИП-прецессии свободного слоя уменьшается с ростом эллиптичности (21), но это изменение имеет второй порядок малости по разности размагничивающих факторов  $N_{\parallel} \sim |N_y - N_x|$ . Также эта частота начинает слабо зависеть от внешнего магнитного поля  $H_z$  с малым коэффициентом  $\alpha N_{\parallel}^2$ . Из анализа результатов можно сделать оценку, что наличие ненулевой эллиптичности МТП-структуры до 20% не изменит частоту ИП-прецессии СТНО более чем на 0.1%.

## ЛИТЕРАТУРА

1. O. Redon, B. Dieny, and B. Rodmacq, US Patent 6.532.164 (2003).
2. J. C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
3. L. Berger, Phys. Rev. B **54**, 9353 (1996).
4. D. Houssameddine, U. Ebels, B. Delaët, B. Rodmacq, I. Firastrau, F. Ponthenier, M. Brunet, C. Thirion, J. P. Michel, L. Prejbeanu-Buda, M. C. Cyrille, O. Redon, and B. Dieny, Nat. Mater. **6**, 447 (2007).
5. A. Vayssset, C. Papyrusoi, L. D. Buda-Prejbeanu, S. Bandiera, M. Marins de Castro, Y. Dahmane, J.-C. Toussaint, U. Ebels, S. Auffret, R. Sousa, L. Vila, and B. Dieny, Appl. Phys. Lett. **98**, 242511 (2011).

6. S. I. Kiselev, J. C. Sankey, I. N. Krivorotov, N. C. Emley, R. J. Schoelkopf, R. A. Buhrman, and D. C. Ralph, *Nature* **425**, 380 (2003).
7. W. H. Rippard, M. R. Pufall, S. Kaka, S. E. Russek, and T. J. Silva, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 027201 (2004).
8. M. Tsoi, A. G. M. Jansen, J. Bass, W.-C. Chiang, M. Seck, V. Tsoi, and P. Wyder, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4281 (1998).
9. A. V. Nazarov, H. M. Olson, H. Cho, K. Nikolaev, Z. Gao, S. Stokes, and B. B. Pant, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 162504 (2006).
10. D. Houssameddine, S. H. Florez, J. A. Katine, J.-P. Michel, U. Ebels, D. Mauri, O. Ozatay, B. Delaet, B. Viala, L. Folks, B. D. Terris, and M.-C. Cyrille, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 22505 (2008).
11. A. N. Slavin and V. S. Tiberkevich, *Phys. Rev. B* **74**, 104401 (2006).
12. S. Kaka, M. R. Pufall, W. H. Rippard, T. J. Silva, S. E. Russek, and J. A. Katine, *Nature* **437**, 389 (2005).
13. H.-H. Chen, C.-M. Lee, Z. Zhang, Y. Liu, J.-C. Wu, L. Horng, and C.-R. Chang, *Phys. Rev. B* **93**, 224410 (2016).
14. J. Torrejon, M. Riou, F. A. Araujo, S. Tsunegi, G. Khalsa, D. Querlioz, P. Bortolotti, V. Cros, K. Yakushiji, A. Fukushima, H. Kubota, S. Yuasa, M. D. Stiles, and J. Grollier, *Nature* **547**, 428 (2017).
15. T. Kanao, H. Suto, K. Mizushima, H. Goto, T. Tanamoto, and T. Nagasawa, *Phys. Rev. Appl.* **12**, 024052 (2019).
16. J. Zhu, X. Zhu, and Y. Tang, *IEEE Trans. Magn.* **44**, 125 (2008).
17. K. J. Lee, O. Redon, and B. Dieny, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 022505 (2005).
18. W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, *Phys. Rev.* **102**, 1413 (1956).
19. A. D. Kent, B. Özyilmaz, and E. Del Barco, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3897 (2004).
20. B. Lacoste, L. D. Buda-Prejbeanu, U. Ebels, and B. Dieny, *Phys. Rev. B* **88**, 054425 (2013).
21. T. Devolder, J. Kim, J. Swerts, S. Couet, S. Rao, W. Kim, S. Mertens, G. Kar, and V. Nikitin, *IEEE Trans. Magn.* **54**, 1 (2018).
22. H. Sato, P. Chureemart, F. Matsukura, R. W. Chantrell, H. Ohno, and R. F. L. Evans, *Phys. Rev. B* **98**, 214428 (2018).
23. A. Aharoni, *J. Appl. Phys.* **83**, 3432 (1998).
24. N. Strelkov, A. Timopheev, R. C. Sousa, M. Chshiev, L. D. Buda-Prejbeanu, and B. Dieny, *Phys. Rev. B* **95**, 184409 (2017).

# СТРУКТУРЫ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СЛОИСТОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*М. К. Бадиев\**, *А. К. Муртазаев*, *М. К. Рамазанов*, *М. А. Магомедов*

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
367003, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 17 января 2022 г.,  
после переработки 17 января 2022 г.  
Принята к публикации 19 января 2022 г.

На основе репличного алгоритма метода Монте-Карло выполнены исследования магнитных структур основного состояния, магнитных и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом обменных взаимодействий следующих за ближайшими соседями. Получены магнитные структуры основного состояния во внешнем магнитном поле в интервале  $0 \leq h \leq 16$ . Обнаружено, что в рассмотренном интервале значений поля наблюдаются неупорядоченная, частично упорядоченная и полностью упорядоченная фазы. Показано, что магнитные структуры основного состояния зависят от знака (ферромагнитного ( $J_2 > 0$ ) и антиферромагнитного ( $J_2 < 0$ )) обменного взаимодействия вторых соседей. На зависимости намагниченности от магнитного поля обнаружено плато, равное  $1/3$  намагниченности насыщения для  $J_2 > 0$ , а для  $J_2 < 0$  плато равно  $1/2$  намагниченности насыщения.

DOI: 10.31857/S0044451022050133  
EDN: DTDJPC

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы исследование моделей магнитных материалов с различной кристаллической решеткой вызвали значительный интерес. Это связано с уникальностью их магнитных и критических свойств, а также с возможностью широкого применения подобных материалов в области микроэлектроники и спинтроники [1–4]. По причине малого энергопотребления и компактности создание устройств с использованием таких материалов является крайне востребованной задачей. Кроме того, в области технологий они позволяют создавать сверхсильные постоянные магниты, такие как молекулярные датчики, устройства магнитной записи сверхвысокой плотности, устройства визуализации [5] и другие. В данной работе нами проводятся исследования антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых соседей во внешнем магнитном поле. Данная модель представляет собой геометрически фрустрированную спиновую модель, которая иссле-

дуется уже давно [6–13]. Эта модель представляет, как теоретический, так и экспериментальный интерес. Модель Изинга на слоистой треугольной решетке можно применить к описанию реальных материалов, таких как  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ ,  $\text{CsCoCl}_3$ ,  $\text{CsCoBr}_3$  и  $\text{FeI}_2$ . Эти материалы демонстрируют многоступенчатое поведение намагничивания [14, 16]. В подобных материалах отклонение физических величин встречаются в двух температурных точках. Исследования, проведенные разными методами, показывают, что в промежуточном состоянии одна из трех магнитных подрешеток не упорядочена и такое неупорядоченное состояние описывается изменяющейся в пространстве и во времени фазой [17–19]. В работе [20] исследованы ориентированные фазы и фазовые переходы (ФП) в модели Изинга на слоистой треугольной решетке с сильным межплоскостным взаимодействием. Авторы обнаружили, что в промежуточном состоянии одна из трех магнитных подрешеток частично не упорядочена. Было показано, что низкотемпературная фаза исследуемых соединений представляет собой так называемую двухподрешеточную ферримагнитную фазу. Результаты по исследованию изинговских антиферромагнетиков на многослойных треугольных решетках с фрустрированными (abc и abab) спинами, а также сравнение

\* E-mail: m\_zagir@mail.ru

с нефрустрированной (aaa) конфигурацией спинов представлены в работе [21]. Авторами показано, что если межслоевые взаимодействия намного слабее, чем взаимодействия внутри плоскости, то парамагнитная фаза моделей с фрустрированными спинами имеет классический режим спиновой жидкости при низкой температуре, в котором корреляции сильны как внутри, так и между плоскостями, но отсутствует дальний порядок. Несмотря на множество работ и полученные результаты, при исследовании ФП и критического поведения антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке до сих пор остается множество спорных вопросов. Одним из них является вопрос о влиянии возмущений различной природы, таких как внешнее магнитное поле, взаимодействие вторых соседей, немагнитные примеси, тепловые и квантовые флуктуации на природу ФП, магнитные и термодинамические свойства этой модели. Включение этих возмущающих факторов может привести к совершенно новому физическому поведению в магнитных спиновых системах с фрустрациями. Причина такого поведения заключается в высокой чувствительности фрустрированных систем к внешним возмущающим факторам. В связи с этим, в данном исследовании мы изучаем влияние магнитных полей типа обменного взаимодействия вторых соседей на магнитные и термодинамические свойства фрустрированной модели Изинга. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с физикой фрустрированных спиновых систем.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

где  $S_{i,j,l} = \pm 1$  — изинговский спин,  $J_1$  и  $J_2$  — константы обменного взаимодействия соответственно первых и вторых соседей. Первый член в этой формуле характеризует антиферромагнитное ( $J_1 < 0$ ) взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым внутри слоя и между слоями. Второй член характеризует взаимодействие вторых соседей внутри слоев, которое может быть как ферромагнитным ( $J_2 > 0$ ), так и антиферромагнитным

( $J_2 < 0$ ). Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Все параметры приводятся в безразмерных величинах. Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12-90$ , где  $L$  приводится в размерах элементарной ячейки. Магнитная структура основного состояния рассматриваемой модели сильно вырождена. Из-за геометрии решетки обменные связи препятствуют формированию обычного двухподрешеточного антиферромагнитного порядка. Это наглядно проявляется в классическом пределе: если мы направим спины в двух вершинах треугольника антипараллельно, то третий спин не может одновременно быть антипараллелен обоим — но при этом его взаимодействие с обоими спинами одинаково. Это вырождение может быть нарушено введением в систему обменной анизотропии, учета взаимодействий вторых соседей или же внешним магнитным полем, что приводит к стабилизации коллинеарного антиферромагнитного состояния. В настоящее время спиновые системы с фрустрациями на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода Монте-Карло (МК) [22–28]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [29]. Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются  $N$  реплик  $X_1, X_2, \dots, X_N$  с температурами  $T_1, T_2, \dots, T_N$ .

2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик проводится обмен данными между парой соседних реплик  $X_i$  и  $X_{i+1}$  в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{если } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{если } \Delta > 0, \end{cases}$$

где

$$\Delta = -(U_i - U_{i+1})(1/T_i - 1/T_{i+1}),$$

$U_i$  и  $U_{i+1}$  — внутренние энергии реплик. Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности очень утомительно и отнимает много времени.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 1 и 2 приведены магнитные структуры основного состояния, полученные нами для фер-

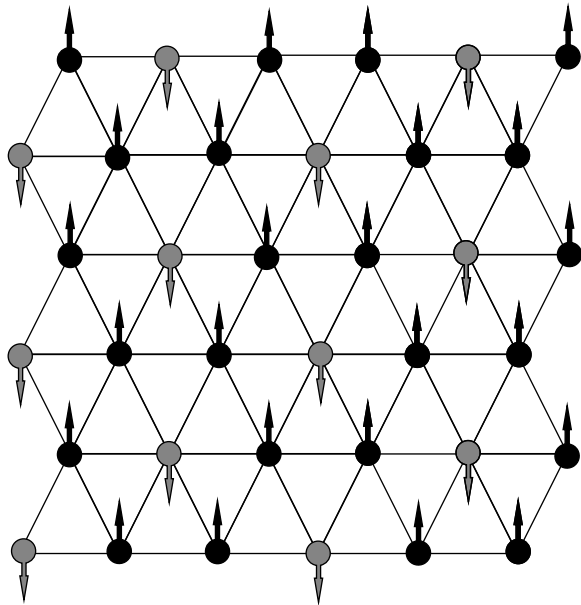


Рис. 1. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 > 0$

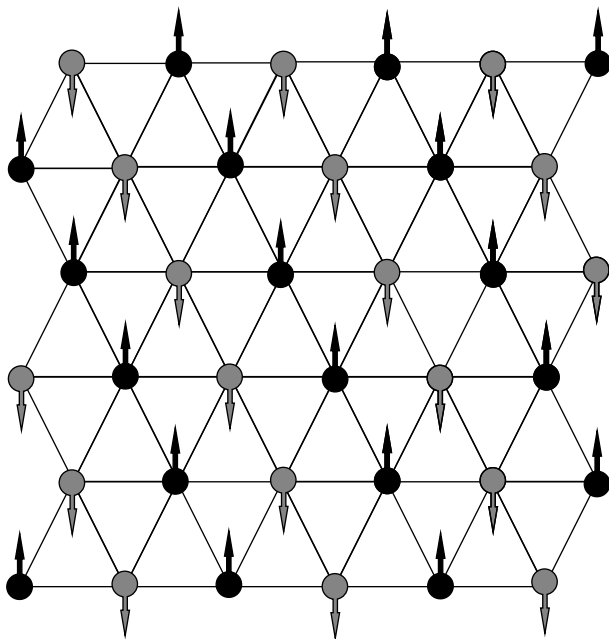


Рис. 2. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 < 0$

ромагнитного и антиферромагнитного взаимодействий вторых соседей при слабых магнитных полях. На рисунках мы видим, что для  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$  система принимает разные спиновые конфигурации. В случае, когда  $J_2 > 0$ , появляются структуры  $\uparrow\uparrow\downarrow$  (спин вверх, спин вверх и спин вниз) в треуголь-

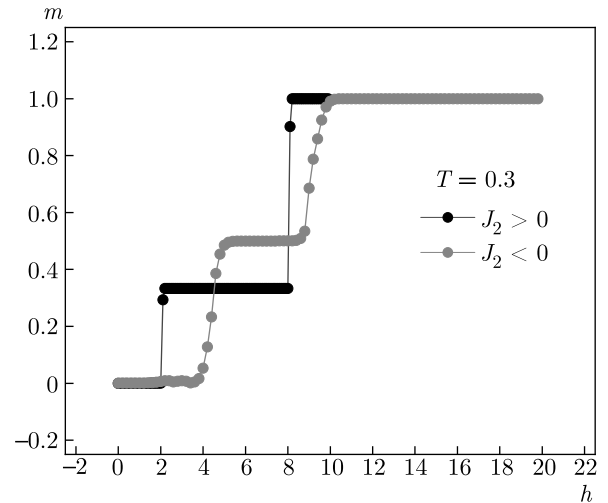


Рис. 3. Зависимости намагниченности от магнитного поля  $h$

ной подрешетке и  $\downarrow\downarrow\uparrow$  (спин вниз, спин вниз и спин вверх) с одинаковой вероятностью. В этом состоянии система может быть шестикратно вырождена. Магнитная структура модели образована чередованием слоев, приведенных на рис. 1 и 2. Когда взаимодействие вторых соседей антиферромагнитное ( $J_2 < 0$ ), в системе наблюдается полосовая структура. Это видно на рис. 2. Анализ рис. 1 и 2 показывает, что изменение типа обменного взаимодействия вторых соседей приводит к изменению динамики конкуренции. Энергия, необходимая для переворота спинов в разных слоях, зависит от знака взаимодействия. Этим обусловлено изменением магнитной структуры основного состояния.

Намагниченность системы вычислялась по формуле

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i. \tag{2}$$

На рис. 3 приведены графики зависимости намагниченности от магнитного поля  $h$  для исследуемой модели при  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$ . На рисунке видно, что с увеличением магнитного поля на графиках намагниченности наблюдается плато. Плато сохраняется вплоть до поля насыщения, что приводит к двухступенчатому поведению намагниченности, экспериментально обнаруженному в нескольких классических и квантовых треугольных спиновых системах [30–32]. На графиках можно заметить, что плато намагниченности для случая, когда  $J_2 > 0$ , наблюдается в интервале полей  $2 \leq h \leq 8$ . Для случая  $J_2 < 0$  плато намагниченности наблю-

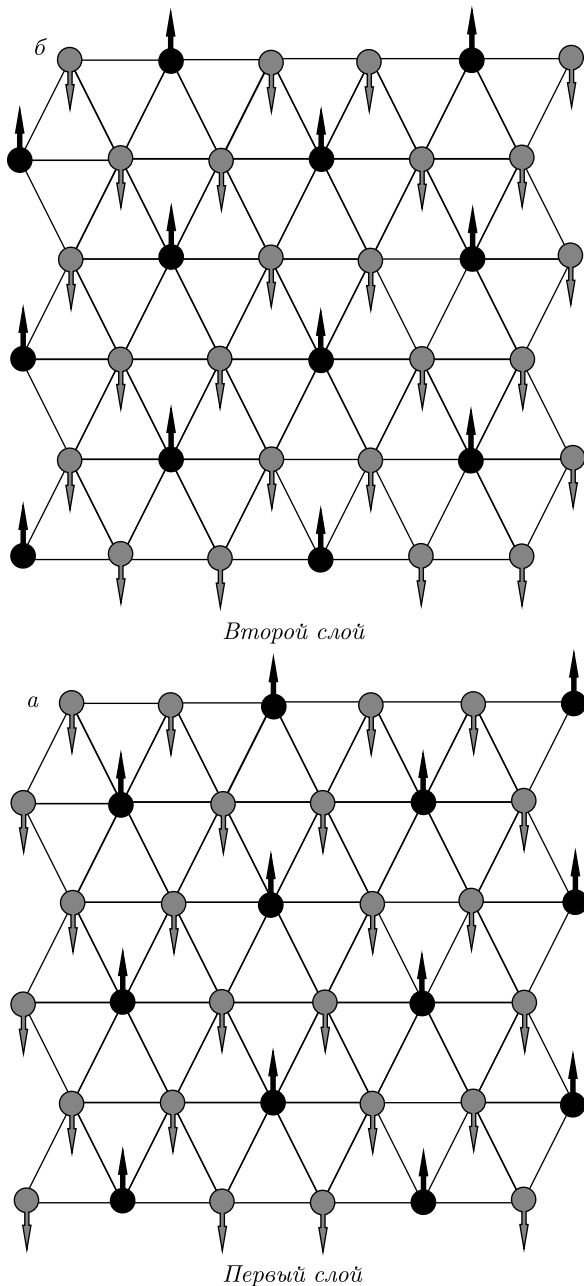


Рис. 4. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 > 0$  в интервале полей  $2 \leq h \leq 8$

дается в интервале  $4 \leq h \leq 10$ . При ферромагнитном взаимодействии вторых соседей плато намагниченности приходится на  $1/3$  намагниченности насыщения, а при антиферромагнитном взаимодействии вторых соседей плато намагниченности приходится на  $1/2$  намагниченности насыщения.

На рис. 4 приведены магнитные структуры двух слоев в интервале магнитного поля  $2 \leq h \leq 8$ , где наблюдается плато намагниченности при  $J_2 > 0$ .

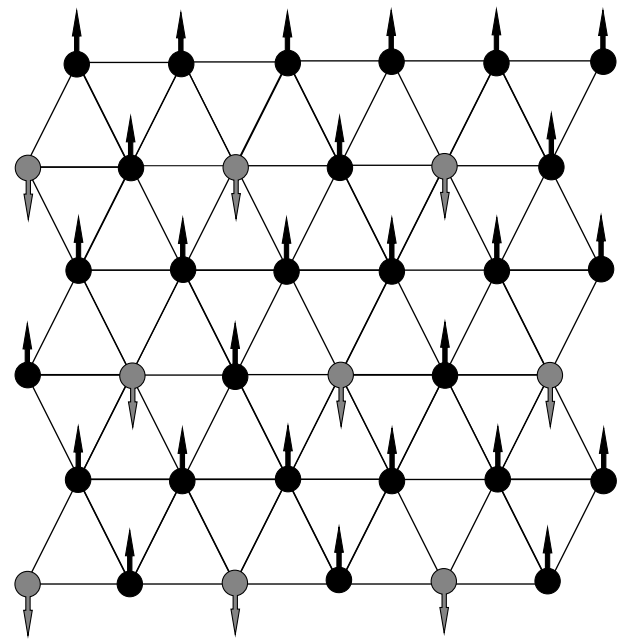


Рис. 5. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 < 0$  в интервале  $4 \leq h \leq 10$

Аналогично спиновым структурам при слабых магнитных полях видно, что спины двух подрешеток направлены в одну сторону, а спины третьей подрешетки направлены противоположно. Можно заметить, что спиновая конфигурация второго слоя смещена относительно первой. Это и приводит к возникновению плато намагниченности на графиках, величина которой равна  $1/3$  намагниченности насыщения. Упорядоченная фаза образована чередованием смещенных друг относительно друга таких слоев.

Для случая, когда взаимодействие вторых соседей — антиферромагнитное, мы также получили спиновые структуры в разных слоях. На рис. 5 приведена одна из таких структур, которая представляет собой чередующиеся антиферромагнитные и ферромагнитные полосы. С этим связано то, что плато намагниченности приходится на  $1/2$  намагниченности насыщения. На рис. 6 и 7 представлены графики зависимости минимальной энергии системы от величины магнитного поля. На рисунках мы наблюдаем три разные области зависимости энергии от магнитного поля. В первой области, где наблюдается неупорядоченная область, энергия системы не зависит от величины поля. Во второй области происходит частичное упорядочение системы. В этой области мы наблюдаем медленный спад энергии при увеличении внешнего магнитного поля. В третьей области,



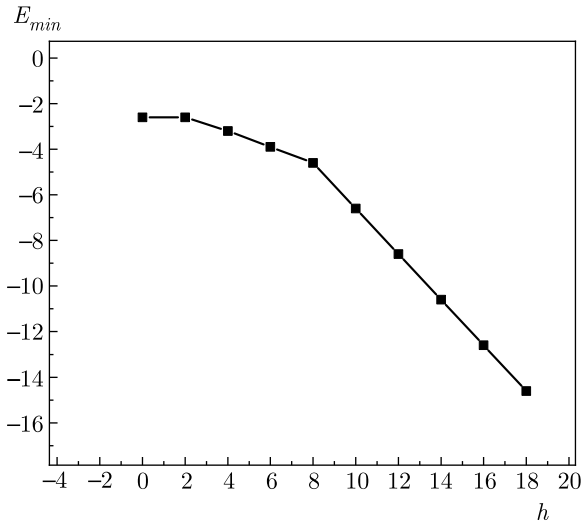


Рис. 6. Зависимость энергии от поля для  $J_2 > 0$ :  $0 \leq h \leq 2$  — неупорядоченная область,  $2 \leq h \leq 8$  — частично упорядоченная область,  $8 \leq h \leq 18$  — полностью упорядоченная область

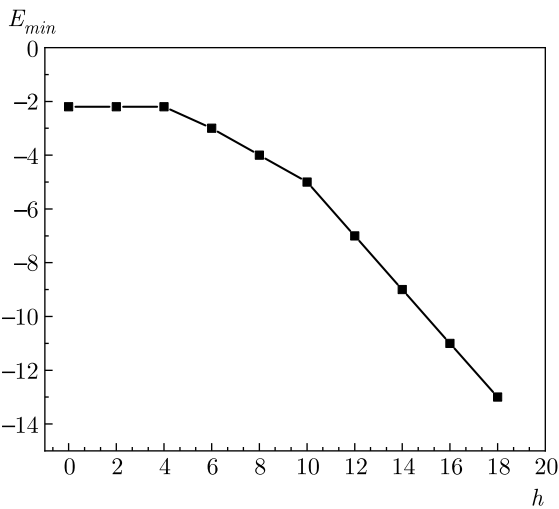


Рис. 7. Зависимость энергии от поля для  $J_2 < 0$ :  $0 \leq h \leq 4$  — неупорядоченная область,  $4 \leq h \leq 10$  — частично упорядоченная область,  $10 \leq h \leq 18$  — полностью упорядоченная область

где происходит полное упорядочение системы, мы наблюдаем при увеличении поля более резкий спад энергии. На рисунках можно заметить, что интервалы поля, в которых мы наблюдаем магнитное упорядочение, различаются и зависят от знака вторых соседей.

Зависимости намагниченности от температуры при различных значениях поля для  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$

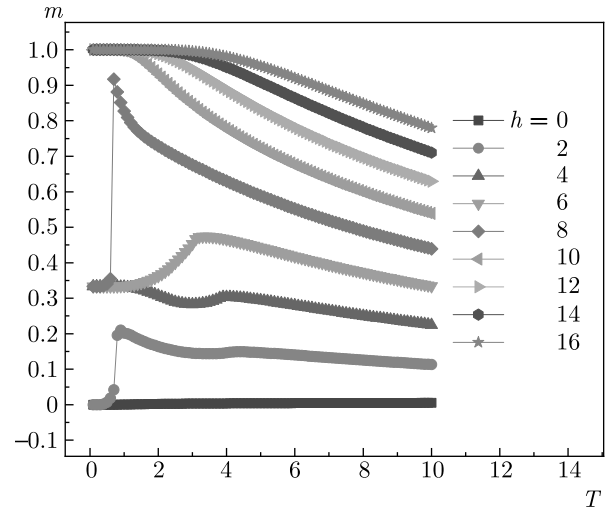


Рис. 8. Зависимость намагниченности  $m$  от температуры при разных значениях  $h$  для  $J_2 > 0$

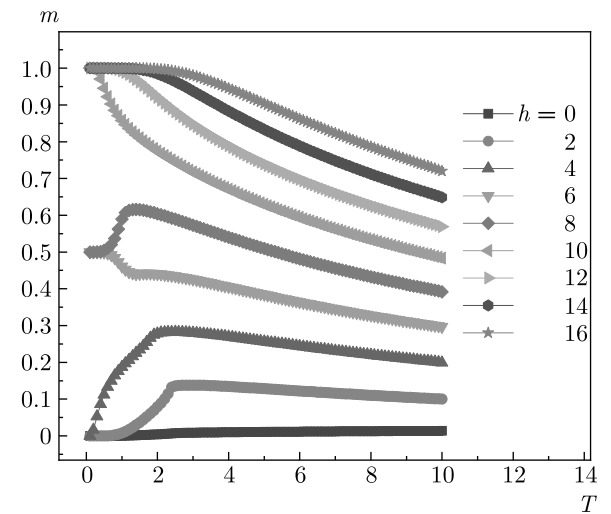


Рис. 9. Зависимость намагниченности  $m$  от температуры при разных значениях  $h$  для  $J_2 < 0$

представлены на рис. 8 и 9. На этих рисунках продемонстрировано поведение намагниченности в полях, величины которых меняются в интервале от  $0 \leq h \leq 16$ . Можно заметить, что между кривыми намагничивания имеется заметное расхождение. На рисунках видно, что намагниченность при  $T \rightarrow 0$  принимает значения 0, 1/3, 1 для  $J_2 > 0$  и 0, 1/2 и 1 для  $J_2 < 0$ . Такое поведение по-видимому связано с тем, что в рассматриваемой модели имеются магнитные подрешетки, связанные с симметрией кристаллической решетки. При увеличении температуры и поля слабая магнитная подрешетка разрушается или же выстраивается вдоль направления маг-

нитного поля. С этим связано то, что мы наблюдаем провалы или же резкий рост в зависимостях намагниченности на рисунках. Поскольку подрешетки нашей модели для  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$  обладают разной жесткостью по отношению к внешнему магнитному полю, эти провалы и скачки намагниченности приходятся на разные магнитные поля и разные температуры. При более высоких полях система упорядочивается уже при нулевых температурах. Отметим, что учет взаимодействия вторых соседей  $J_2$  оказался очень эффективным для модуляции поведения намагниченности в фрустрированной спиновой системе.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью репличного алгоритма метода Монте-Карло получены магнитные структуры основного состояния для фрустрированной трехмерной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом ферромагнитного и антиферромагнитного обменного взаимодействия вторых соседей при различных значениях магнитного поля. Полученные данные свидетельствуют о том, что знак взаимодействия вторых соседей приводит к изменению магнитной структуры основного состояния данной модели. Обнаружено плато намагниченности, величина которого равна  $1/3$  намагниченности насыщения для  $J_2 > 0$  и  $1/2$  намагниченности насыщения для  $J_2 < 0$ . Показано, что температурные зависимости намагниченности при одинаковых полях зависят от знака обменного взаимодействия вторых соседей. Можно предположить, что знак и величина обменного взаимодействия вторых и более далеких соседей играют важную роль в формировании ступенчатого поведения намагниченности в магнитном поле.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Q. A. Pankhurst, J. Connolly, S. K. Jones et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 167 (2003).
2. A. Jabar, R. Masrour, G. Kadim et al., *Commun. Theor. Phys.* **73**, 115702 (2021).
3. T. Sahdane, R. Masrour, and A. Jabar, *Physica A* **572**, 125882 (2021).
4. Y. El Krimi, R. Masrour, and A. Jabar, *Materials Today Energy* **20**, 100685 (2021).
5. S. D. Bader, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1 (2006).
6. A. N. Berker, G. S. Grest, C. M. Soukoulis et al., *J. Appl. Phys.* **55**, 2416 (1984).
7. D. Blankschtein, M. Ma, A. N. Berker et al., *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
8. S. N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **32**, 1584 (1985).
9. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **132**, 1152 (2007).
10. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **142**, 338 (2012).
11. O. Heinonen and R. G. Petschek, *Phys. Rev. B* **40**, 9052 (1989).
12. J.-J. Kim, Y. Yamada, and O. Nagai, *Phys. Rev. B* **41**, 4760 (1990).
13. R. R. Netz and A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 377 (1991).
14. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific, Singapore (2004).
15. Y. B. Kudasov, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027212 (2006).
16. O. A. Starykh, *Rep. Prog. Phys.* **78**, 052502 (2015).
17. H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **64**, 466 (1980).
18. M. Kaburagi, T. Tonegawa, and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn* **51**, 3857 (1982).
19. P. Matsubara and S. Ikeda, *Phys. Rev. B* **28**, 4064 (1983).
20. D. M. Blankschtein and A. N. Berker, *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
21. D. T. Liu, F. J. Burnell, L. D. C. Jaubert et al., *Phys. Rev. B* **94**, 224413 (2016).
22. А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев, М. К. Рамазанов et al., *Physica A* **555**, 124530 (2020).
23. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **144**, 1239 (2013).
24. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, and М. К. Бадиев, *Physica A* **507**, 210 (2018).
25. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, К. С. Муртазаев et al., *Phys. Solid State* **62**, 229 (2020).
26. А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев, М. К. Рамазанов et al., *Phase Transitions* **94**, 394 (2021).

- 27.** М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **150**, 722 (2016).
- 28.** M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Physica A **521**, 543 (2019).
- 29.** A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
- 30.** A. I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura et al., Phys. Rev. B **75**, 134412 (2007).
- 31.** Y. Shirata, Tanaka H, A. Matsuo et al., J. Phys. Soc. Jpn **80**, 093702 (2011).
- 32.** J. Hwang, E. S. Choi, F. Ye et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 257205 (2012).

# РАВНОВЕСНЫЕ КИРАЛЬНЫЕ КРАЕВЫЕ ТОКИ СПИНОВЫХ ПОДУРОВНЕЙ ЛАНДАУ

*С. И. Дорожкин\**

*Институт физики твердого тела Российской академии наук  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 5 декабря 2021 г.,  
после переработки 5 декабря 2021 г.  
Принята к публикации 12 января 2022 г.

Для двумерных электронных систем, помещенных в перпендикулярное квантующее магнитное поле, выполнен расчет равновесных краевых токов, возникающих вследствие изменения заполнения электронами отдельных спиновых подуровней Ландау около края образца. Расчет прямо применим к модели краевых полосок сжимаемой и несжимаемой электронных фаз, учитывающей самосогласованную экранировку электрического потенциала, формирующего границу образца. В такой модели рассматриваемые токи переносятся состояниями, находящимися на уровне Ферми, и текут в пространственно-разделенных полосках сжимаемой электронной фазы, в которых электрическое поле полностью заэкранировано. Величины токов в каждой из полосок сжимаемой фазы универсальны и определяются циклотронной частотой электронов, величиной  $g$ -фактора, номером уровня Ландау и проекцией спина на направление магнитного поля. Показано, что за исключением специальных случаев рассмотренные краевые токи создают диамагнитный момент образца.

DOI: 10.31857/S0044451022050145  
EDN: DTFHUN

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Значительная роль краевых бездиссипативных транспортных токов в режиме квантового эффекта Холла является хорошо установленным фактом (см., например, обзор [1]). Связанные с ними эффекты обычно проявляются в случаях, когда в образце присутствуют области с различными факторами заполнения уровней Ландау, что, очевидно, имеет место около краев ограниченных образцов, где происходит обеднение двумерного электронного газа (ДЭГ). Так, в квантующем магнитном поле описание результатов в терминах удельного сопротивления может стать неприменимым [2, 3], а измеряемое диссипативное сопротивление — связанным с холловским [3]. Бездиссипативные краевые транспортные токи возникают в результате модификации равновесных киральных краевых токов, происходящей при приложении к образцу разности потенциалов от внешнего источника. Направление равновесных токов различно на разных краях образца, в

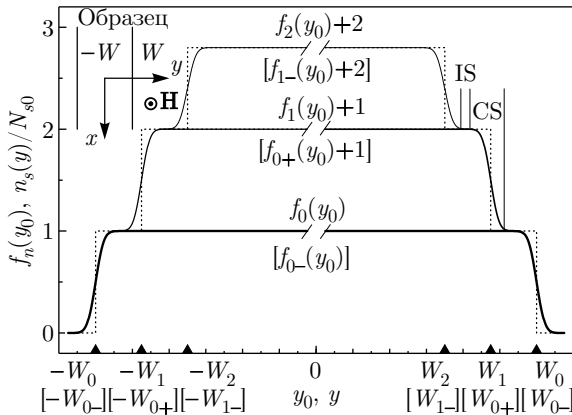
результате чего они создают магнитный момент образца при нулевом суммарном токе через образец. В широко изучавшихся бесспиновых двумерных электронных системах известны три механизма возникновения равновесных краевых киральных токов.

Механизм 1 состоит в образовании токонесящих краевых состояний вследствие обрезания циклотронных орбит около резкого края образца [4, 5] (см. также недавнюю работу [6]). В этом случае краевой ток сосредоточен на масштабе циклотронного радиуса электрона около края образца. Этот механизм лежит в основе формализма Бюттикера [7], широко используемого для интерпретации результатов в режиме квантового эффекта Холла.

В случае плавного электростатического потенциала, формирующего край образца, около него могут образовываться полоски сжимаемой и несжимаемой электронных фаз [8] (рис. 1). В полоске сжимаемой (сверхсжимаемой) фазы уровень Ландау заполнен частично, и его заполнение меняется с координатой, а электрическое поле полностью заэкранировано. Ток в такой полоске возникает за счет изменения плотности электронов с координатой (механизм 2).

В полосках несжимаемой фазы плотность электронов постоянна и соответствует заполнению цело-

\* E-mail: dorozh@issp.ac.ru



**Рис. 1.** Схематическая зависимость заполнения состояний на трех нижних уровнях Ландау бесспиновой электронной системы около краев образца согласно расчету [8], описываемая функциями распределения электронов  $f_n(y_0)$  на уровне Ландау с номером  $n$  (сплошные линии). Функции  $f_1$  и  $f_2$  сдвинуты вверх соответственно на 1 и 2, так что в результате внешняя огибающая всех кривых представляет собой зависимость плотности электронов  $n_s$  от координаты  $y$ , нормированную на вырожденность одного уровня  $N_{s0} = |e|H/hc$ . В массиве образца два нижних уровня заполнены полностью ( $f_{0,1}(y_0 = 0) = 1$ ), а третий — частично ( $f_2(y_0 = 0) = 0.8$ ). Горизонтальные участки огибающей соответствуют полоскам несжимаемой электронной фазы (IS) [8], образованным областями ДЭГ, в которых заполнено целое число уровней Ландау и уровень электрохимического потенциала находится в щели между уровнями. Изменение функций  $f_n(y_0)$  происходит в полосках сжимаемой фазы (CS), где электрическое поле заэкранировано. Пунктирные линии представляют соответствующие зависимости для случая резких краев уровней. Аналогичная картина для распределения плотности электронов ожидается в случае ДЭГ со спином с тем отличием, что представленные зависимости отражают заполнение отдельных зеемановских подуровней, обозначения для которых даны в квадратных скобках. Показанное взаимное расположение подуровней соответствует положительному  $g$ -фактору и случаю, когда спиновое расщепление меньше циклотронного. На вставке приведены рассматриваемая геометрия прямоугольного образца шириной  $2W$ , лежащего в плоскости рисунка и вытянутого вдоль оси  $x$ , а также ориентации осей и магнитного поля, которое перпендикулярно плоскости рисунка и направлено на читателя

го числа уровней Ландау. В такой полоске ток возникает за счет дрейфа в скрещенных магнитном и электрическом полях электронов всех заполненных уровней Ландау, находящихся под уровнем Ферми (механизм 3). В результате токи в соседних (сжимаемой и несжимаемой) полосках текут в противоположные стороны.

Здесь представляется уместным отметить, что, хотя в механизмах 1 и 2 краевые токи переносятся электронами на уровне Ферми, они создают качественно различный (соответственно, парамагнитный и диамагнитный) отклик бесспиновой электронной системы на внешнее магнитное поле и не могут переходить друг в друга при изменении масштаба изменения потенциала около границы. В механизме 3 краевой ток является парамагнитным. Реализация конкретного механизма возникновения бездиссипативного транспортного тока в реальных образцах до сих пор остается предметом дискуссий [9].

Необходимо отметить, что возникновение полосок сжимаемой и несжимаемой электронных фаз является следствием градиента плотности электронов в образце и необязательно связано с его краями. Равновесные токи противоположных киральностей, текущие в соседних сжимаемой и несжимаемой полосках, недавно были обнаружены в образцах графена [10] с искусственно созданной неоднородностью электронной плотности, что стимулировало новую волну интереса к таким токам.

Расчет равновесных токов в сжимаемых и несжимаемых полосках был выполнен в работе [11] для бесспиновой системы на основании модельной функции Грина. В этой работе были получены универсальные значения парамагнитного тока

$$I_{par} = \nu |e| \omega_c / 2\pi$$

в полоске несжимаемой фазы с целочисленным значением фактора заполнения уровней Ландау  $\nu = 1, 2, \dots$  и диамагнитного тока

$$I_{dia} = (n + 1/2) |e| \omega_c / 2\pi$$

в сжимаемой полоске, соответствующей опустошению на краю уровня Ландау с номером  $n$  ( $n = 0, 1, \dots$ ), полностью заполненного в массиве образца. Здесь  $\omega_c$  — циклотронная частота электронов. На рис. 1 отмечены две из таких полосок (IS и CS), соответствующие  $\nu = 2$  и  $n = 1$ .

## 2. РАСЧЕТ

В данной работе нами выполнены расчеты токов, обусловленных изменением плотности электронов на разрешенных по спину уровнях Ландау (зеемановских подуровнях), происходящим около края длинного образца с ДЭГ. Расчеты выполнены с использованием волновых функций и применимы к системам как с плавным, так и с резким профилем спинового подуровня. Расчеты основаны на вы-

ражении для плотности тока [12], модифицированном введением эффективной массы  $m^*$  и  $g$ -фактора электронов. Рассматриваемые токи являются суммой двух разных вкладов,  $I_n^{(L)}$  и  $I_{n,\pm}^{(S)}$ , обусловленных соответственно орбитальным движением электронов и их спиновой поляризацией. Задача рассматривается для образца с ДЭГ, находящегося в плоскости  $xy$  и имеющего форму полоски шириной  $2W$ , вытянутой вдоль оси  $x$ . Вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  магнитного поля  $\mathbf{H}$ , направленного вдоль оси  $z$ , выбирается в калибровке Ландау:  $A_x = -Hy$ ,  $A_y = A_z = 0$ , наилучшим образом соответствующей рассматриваемой геометрии задачи. Ориентация осей показана на вставке к рис. 1.

Энергетический спектр однородного ДЭГ в перпендикулярном квантующем магнитном поле хорошо известен и для нижней подзоны размерного квантования имеет вид

$$\varepsilon_{n,\pm} = E_0 + \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{g\mu_B H}{2}. \quad (1)$$

Здесь  $E_0$  — энергия нижнего уровня размерного квантования,  $\omega_c = |e|H/m^*c$  — циклотронная частота электрона с эффективной массой  $m^*$ ,  $\mu_B = |e|\hbar/2mc$  — магнетон Бора,  $g$  —  $g$ -фактор электрона, равный 2 для свободных электронов,  $n = 0, 1, 2, \dots$  — номер уровня Ландау, индекс «плюс» («минус») соответствует проекции спина на направление магнитного поля, равной  $+1/2$  ( $-1/2$ ). Соответствующие волновые функции являются спинорами и имеют следующий вид, обеспечивающий их нормировку:

$$\Psi_{n,\pm} = \begin{pmatrix} 1/2 \pm 1/2 \\ 1/2 \mp 1/2 \end{pmatrix} \psi_n, \quad (2)$$

$$\psi_n = e^{ikx} \phi(z) \chi_n(y - y_0) / \sqrt{L_x}. \quad (3)$$

Здесь  $L_x$  — размер образца в направлении оси  $x$ ,  $\phi(z)$  — нормированная волновая функция размерного квантования,

$$\chi_n(y - y_0) = \frac{\lambda_n}{\sqrt{l_H}} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2l_H^2}\right) \times H_n\left(\frac{y - y_0}{l_H}\right), \quad (4)$$

где  $H_n$  — полином Эрмита порядка  $n$ ,  $l_H = (\hbar c / |e|H)^{1/2}$  — магнитная длина,  $\lambda_n = 1/\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}$ , параметр  $y_0$  играет роль центра электронных орбит и связан с волновым вектором  $k$  соотношением  $y_0 = kl_H^2$ .

В полосках сжимаемой фазы электрическое поле ограничивающего потенциала полностью экранируется электронами частично заполненного уровня Ландау [8]. В результате энергетический спектр (1) в этих полосках сдвигается на величину потенциальной энергии электронов, а вид волновых функций не изменяется.

Плотность тока, создаваемого одним электронным состоянием,  $\mathbf{j}_{n,\pm} = \mathbf{j}_n^{(L)} + \mathbf{j}_{n,\pm}^{(S)}$ , где [12]

$$\mathbf{j}_n^{(L)} = \frac{ie\hbar}{2m^*} [(\nabla\psi_n^*)\psi_n - \psi_n^*\nabla\psi_n] - \frac{e^2}{m^*c} \mathbf{A}\psi_n^*\psi_n \quad (5)$$

— плотность тока, связанная с орбитальным движением электрона на уровне Ландау с номером  $n$ , одинаковая для обоих зеемановских подуровней,

$$\mathbf{j}_{n,\pm}^{(S)} = -g\mu_B c \text{rot} (\Psi_{n,\pm}^* \hat{\mathbf{s}} \Psi_{n,\pm}) \quad (6)$$

— плотность тока, связанная с соответствующим спиновым состоянием. Здесь  $\hat{\mathbf{s}} = (1/2)\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  — оператор спина и

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

— матрицы Паули.

Нетрудно проверить, что в выбранной калибровке обе компоненты тока направлены вдоль оси  $x$  и имеют следующий вид:

$$j_{n,\pm}^{(S)}(y - y_0, z) = \mp \frac{g\mu_B c}{2} \frac{|\phi(z)|^2}{L_x} \frac{\partial \chi_n^2(y - y_0)}{\partial y} = \mp \frac{g\mu_B c}{2} \frac{\partial |\psi_n|^2}{\partial y}, \quad (7)$$

$$j_n^{(L)}(y - y_0, z) = |e|\omega_c |\phi(z)|^2 (y - y_0) \chi_n^2(y - y_0) / L_x = |e|\omega_c (y - y_0) |\psi_n|^2. \quad (8)$$

Согласно соотношению (7), в каждом электронном состоянии плотность тока  $j_{n,\pm}^{(S)}$  пропорциональна производной от плотности электронов,  $\partial |\psi_n|^2 / \partial y$ , однако знак коэффициентов пропорциональности различен для состояний с противоположными проекциями спина на направление магнитного поля.

Таким образом, плотность тока, связанного со спиновой поляризацией электронов и создаваемого любым пространственным распределением электронов данного зеемановского подуровня, пропорциональна градиенту плотности электронов

на этом подуровне. Подобная пропорциональность имеет место и для плотности тока  $j_{n=0}^{(L)}$  на нижнем уровне Ландау:

$$j_0^{(L)}(y - y_0, z) = |e|\omega_c \frac{\lambda_0^2}{L_x} |\phi(z)|^2 \left( \frac{y - y_0}{l_H} \right) \times \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{l_H^2}\right) = -\frac{|e|\hbar}{2m^*} \frac{\partial |\psi_0|^2}{\partial y}. \quad (9)$$

Из формул (7) и (9) следует также взаимная компенсация плотностей тока  $j_{0,-}^{(S)}$  и  $j_0^{(L)}$  в каждом из электронных состояний при выполнении соотношения  $gm^*/2m = 1$ , справедливого для свободных электронов.

В дальнейшем нас будет интересовать полные поверхностные плотности  $\tilde{j}_{n,\pm}^{(L)}$  и  $\tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}$  каждой из компонент тока (5) и (6), создаваемые электронными состояниями, принадлежащими одному зеемановскому подуровню. Эти величины получаются интегрированием соответствующих плотностей тока отдельных состояний вдоль оси  $z$  и суммированием по заполненным электронным состояниям подуровня, т. е. по соответствующим центрам орбит  $y_0$ . Остановимся подробнее на вычислении плотности тока  $\tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}$ , даваемой формулой

$$\tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}(y) = \mp \frac{g\mu_{BC}}{2} \frac{\lambda_n^2}{l_H L_x} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(z)|^2 dz \times \sum_{y_0} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{l_H^2}\right) H_n^2\left(\frac{y - y_0}{l_H}\right) \right]. \quad (10)$$

Для орбитального тока соответствующее выражение имеет вид

$$\tilde{j}_{n,\pm}^{(L)}(y) = |e|\omega_c \frac{\lambda_n^2}{L_x} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(z)|^2 dz \times \sum_{y_0} \frac{y - y_0}{l_H} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{l_H^2}\right) H_n^2\left(\frac{y - y_0}{l_H}\right). \quad (11)$$

Интегрирование нормированной функции  $|\phi(z)|^2$  дает единицу. Суммирование по занятым состояниям в случае плавного изменения на масштабе магнитной длины функции  $f_{n,\pm}(y_0)$ , описывающей заполнение состояний на соответствующем подуровне, может быть заменено интегрированием по центрам орбит с учетом расстояния между ними  $\Delta y_0 = \Delta k l_H^2 = 2\pi l_H^2 / L_x$ . В результате выражение для плотности тока (10) может быть преобразовано к следующему интегралу:

$$\tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}(y) = \mp \frac{g\mu_{BC}}{2} \frac{\lambda_n^2}{2\pi l_H^3} \int_{-\infty}^{\infty} f_{n,\pm}(y - l_H t) \exp(-t^2) \times [-2t H_n^2(t) + 4n H_n(t) H_{n-1}(t)] dt. \quad (12)$$

Основной вклад в этот интеграл дает область около  $t = 0$ , что позволяет провести разложение функции  $f_{n,\pm}(y - l_H t)$  в ряд Тейлора по  $t$  и с учетом нечетности входящей в интеграл функции, стоящей в квадратных скобках в выражении (12), и получить следующее выражение для плотности тока:

$$\tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}(y) = \mp \frac{g\mu_{BC}}{2} \frac{\lambda_n^2}{2\pi l_H^2} \frac{df_{n,\pm}(y)}{dy} \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2) [2t^2 H_n^2(t) - 4nt H_n(t) H_{n-1}(t)] dt = \mp \frac{1}{2} \frac{|e|\omega_c}{2\pi} \frac{gm^*}{2m} \frac{df_{n,\pm}(y)}{dy}. \quad (13)$$

Отметим, что этот вклад в плотность тока зависит от номера уровня Ландау только через распределение электронов на зеемановском подуровне, а знак определяется проекцией спина на ось  $z$  и знаком  $g$ -фактора. Аналогичным образом получается выражение для плотности тока, связанной с орбитальным движением электронов на уровне Ландау с номером  $n$ :

$$\tilde{j}_{n,\pm}^{(L)}(y) = -\frac{|e|\omega_c}{2\pi} \lambda_n^2 \frac{df_{n,\pm}(y)}{dy} \times \int_{-\infty}^{\infty} t^2 \exp(-t^2) H_n^2(t) dt = -\frac{|e|\omega_c}{2\pi} \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{df_{n,\pm}(y)}{dy}. \quad (14)$$

Из полученного результата видно, что обе компоненты тока сосредоточены в областях изменения заполнения подуровней и плотность тока пропорциональна градиенту плотности электронов на подуровне. Таким образом, в картине чередующихся сжимаемых и несжимаемых полосок, показанной на рис. 1, токи, создаваемые состояниями на различных подуровнях, разделены в пространстве. В плавном потенциале пропорциональность плотности тока градиенту плотности электронов возникает и для орбитальной компоненты тока  $\tilde{j}_{n,\pm}^{(L)}$ . Существенно, что эта компонента тока всегда приводит к диамагнитному отклику системы и обычно доминирует над компонентой  $\tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}$ . Исключение составляют материалы с большим  $g$ -фактором и нижний зеемановский

подуровень нижнего ( $n = 0$ ) уровня Ландау при выполнении соотношения  $gm^*/2m = 1$ , справедливого для свободных электронов. В последнем случае орбитальная и спиновая компоненты токов компенсируют друг друга, как это уже отмечалось выше.

Легко видеть, что токи в направлении оси  $x$  в разных половинах образца ( $y \leq 0$  и  $y \geq 0$ ),

$$I_{n,\pm}^{(S,L,<)} = \int_{-\infty}^0 \tilde{j}_{n,\pm}^{(S,L)}(y) dy$$

и

$$I_{n,\pm}^{(S,L,>)} = \int_0^{\infty} \tilde{j}_{n,\pm}^{(S,L)}(y) dy,$$

равны друг другу и имеют разные знаки. Для заполненного в массиве образца зеemanовского подуровня величина  $f_{n,\pm}(y_0 = 0) = 1$  и ток, переносимый им около каждого из краев образца, принимает универсальное значение, в правой половине ( $y \geq 0$ ) образца равное

$$I_{n,\pm}^{(>)} = I_{n,\pm}^{(L,>)} + I_{n,\pm}^{(S,>)} = \frac{|e|\omega_c}{2\pi} \left( n + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \frac{|e|\omega_c}{2\pi} \frac{gm^*}{2m}. \quad (15)$$

Это соотношение составляет основной результат данной работы. Отметим, что значение орбитальной компоненты краевого тока

$$I_{n,\pm}^{(L)} = \frac{|e|\omega_c}{2\pi} \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

совпадает с полученным в работе [11] для бесспиновой системы. Нетрудно видеть, что ток  $I_{n,\pm}^{(L)}$  всегда диамагнитный (т. е. создает магнитный момент с отрицательной проекцией на направление магнитного поля), а ток  $I_{n,\pm}^{(S)}$  диамагнитный в случае  $s_z = 1/2$  и парамагнитный при  $s_z = -1/2$  (при  $g > 0$ ).

Проведенное выше рассмотрение игнорирует все эффекты электрон-электронного взаимодействия кроме экранировки, приводящей к формированию самосогласованного потенциала около края образца. Отметим, однако, что полученные выражения для краевых токов не изменятся, если учесть обменное взаимодействие в низшем порядке теории возмущений [13]. В этом случае происходит только сдвиг по энергии зеemanовских подуровней на величину вклада обменного взаимодействия в собственную энергию (self-energy), что, в частности, приводит к известному эффекту «усиления  $g$ -фактора электронов» [13, 14]. Волновые функции электронов в этом

приближении остаются неизменными. Сдвиг по энергии приведет к изменению пространственного положения краев подуровней (величин  $\pm W_{n,\pm}$ ), однако не изменит выражение для краевого тока (15), в которое по-прежнему будет входить неусиленный  $g$ -фактор.

Последовательное использование приближения Хартри–Фока может привести к заметным изменениям полученных результатов (см., например, работы [15, 16]). Так, в работе [15] предсказывается полная спонтанная спиновая поляризация в самой нижней по энергии краевой сжимаемой полоске даже в отсутствие зеemanовской энергии (при нулевом  $g$ -факторе) (см. рис. 3с и 3d в работе [15]). Для этого конкретного случая при  $g \neq 0$  мы ожидаем сохранение вычисленной величины вклада  $I_{0,-}^{(S)}$  в ток, текущий в этой полоске.

В настоящее время возможность образования полосок сжимаемой фазы отдельными зеemanовскими подуровнями не вызывает сомнений и подтверждается экспериментальными данными (см., например, работу [17]). Количественная проверка полученных результатов для величин краевых токов может выполняться на материалах с большой абсолютной величиной  $g$ -фактора (например, на двумерных электронных системах, создаваемых в квантовых ямах узкозонных полупроводников) при большой плотности электронов в них, обеспечивающей малое значение параметра взаимодействия.

Наиболее прямым методом проверки полученных нами результатов является измерение изменения магнитного поля около краев образца, допускающее восстановление распределения и величины краевых токов (см., например, работу [10], а также обзор [18]). Другим возможным методом является измерение магнитного момента образца и его квантовых осцилляций (осцилляций де Гааза–ван Альфена). Этот метод базируется на связи магнитного момента с суммарным краевым током. В этом случае изменение магнитного момента при изменении плотности электронов, сопровождающемся заполнением или опустошением одного зеemanовского подуровня, определяется током, переносимым этим подуровнем.

Приведенные выше результаты справедливы для плавного изменения плотности электронов на масштабе магнитной длины. Используемый подход, однако, может быть применен и к рассмотрению резкого края уровня Ландау, моделируемого ступенчатыми пунктирными линиями  $f_{n,\pm}(y_0)$  на рис. 1. Про-



пространственное распределение плотности тока в этом случае получается интегрированием по всем занятым состояниям и описывается формулами

$$\begin{aligned} \tilde{j}_{n,\pm}^{(S)}(y) &= \pm \frac{g\mu_{BC}}{4\pi l_H^2} \int_{-W_{n,\pm}}^{W_{n,\pm}} \frac{\partial \chi_n^2(y-y_0)}{\partial y} dy_0 = \\ &= \mp \frac{1}{2} \frac{|e|\omega_c}{2\pi l_H} \lambda_n^2 \frac{gm^*}{2m} \left[ \exp(-t^2) H_n^2(t) \right] \Bigg|_{\frac{y-W_{n,\pm}}{l_H}}^{\frac{y+W_{n,\pm}}{l_H}}, \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{j}_{n,\pm}^{(L)}(y) &= \frac{|e|\omega_c}{2\pi l_H} \int_{-W_{n,\pm}}^{W_{n,\pm}} \left( \frac{y-y_0}{l_H} \right) \chi_n^2(y-y_0) dy_0 = \\ &= \frac{|e|\omega_c}{2\pi l_H} \lambda_n^2 \exp(-t^2) \left[ t H_{n+1}(t) H_n(t) - \frac{1}{2} H_{n+1}^2(t) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2n+1}{2} H_n^2(t) \right] \Bigg|_{\frac{y-W_{n,\pm}}{l_H}}^{\frac{y+W_{n,\pm}}{l_H}}. \quad (17) \end{aligned}$$

Формула (17) здесь получена с использованием следующего выражения для интеграла:

$$\begin{aligned} \int t \exp(-t^2) H_n^2(t) dt &= \exp(-t^2) \times \\ &\times \left[ t H_{n+1}(t) H_n(t) - \frac{H_{n+1}^2(t)}{2} - \right. \\ &\quad \left. - (2n+1) \frac{H_n^2(t)}{2} \right]. \quad (18) \end{aligned}$$

Отметим, что  $\tilde{j}_{0,-}^{(L)}(y) = -\tilde{j}_{0,-}^{(S)}$  при  $gm^*/2m = 1$ , т.е. полная взаимная компенсация орбитальной и спиновой компонент поверхностной плотности тока происходит и в случае резкого края подуровня  $(0, -)$ .

Пространственные распределения токов, описываемые формулами (16) и (17), показаны на рис. 2 для случая  $n = 1$  и нижнего спинового подуровня. Необходимо отметить, что в случае резкого края заполнения уровня, показанного на рис. 1 пунктирными линиями, изменение плотности электронов не является ступенчатым в силу конечной ширины волновой функции, а также происходит сложным образом на пространственном масштабе порядка магнитной длины.

Нетрудно проверить, что краевые токи в случае резкого края заполнения уровня совпадают с токами, которые были получены для случая плавного изменения плотности электронов (см. формулу (15)).

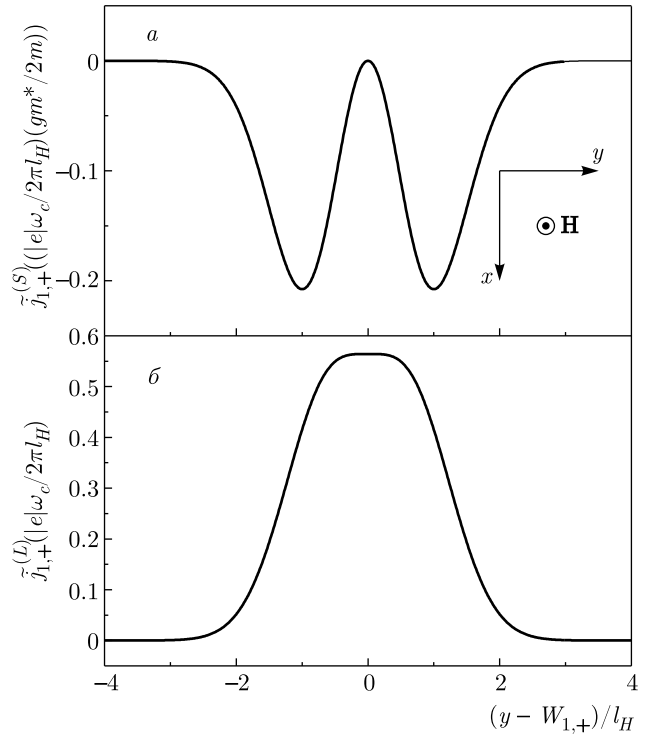


Рис. 2. Пространственное распределение поверхностных плотностей тока  $\tilde{j}_{1,+}^{(S)}$  (а) и  $\tilde{j}_{1,+}^{(L)}$  (б), создаваемых электронами подуровня  $n = 1, +$  около правой границы заполненных состояний  $y = W_{1,+}$  и текущих в направлении оси  $x$ . Распределение около левой границы отличается знаком проекции тока на ось  $x$ . На вставке показаны взаимные ориентации осей координат и магнитного поля

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе получены выражения для краевых токов, создаваемых отдельными зеемановскими подуровнями уровней Ландау и протекающих в пространственно-разделенных полосках сжимаемой электронной фазы.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках госзадания Института физики твердого тела РАН.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Э. В. Девятов, УФН **177**, 207 (2007).
2. В. Е. Kane, D. C. Tsui, and G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **59**, 1353 (1987).
3. С. И. Дорожкин, Ш. Кох, К. фон Клитцинг, Г. Дорда, Письма в ЖЭТФ **52**, 1233 (1990).
4. В. I. Halperin, Phys. Rev. B **25**, 2185 (1982).

5. A. H. MacDonald and P. Streda, *Phys. Rev. B* **29**, 1616 (1984).
6. T. Patlatiuk, C. P. Scheller, D. Hill et al., *Nature Comm.* **9**, 3692 (2018).
7. M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **38**, 9375 (1988).
8. D. B. Chklovskii, B. I. Shklovskii, and L. I. Glazman, *Phys. Rev. B* **46**, 4026 (1992).
9. P. Haremski, M. Mausser, A. Gauß et al., *Phys. Rev. B* **102**, 205306 (2020).
10. A. Uri, Y. Kim, K. Bagani et al., *Nature Phys.* **16**, 164 (2020).
11. M. R. Geller and G. Vignale, *Phys. Rev. B* **50**, 11714 (1994).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: Нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (2001).
13. T. Ando and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn* **37**, 1044 (1974).
14. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982) [перевод: Т. Андо, А. Б. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985)].
15. J. Dempsey, B. Y. Gelfand, and B. I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3639 (1993).
16. U. Khanna, G. Murthy, S. Rao, and Y. Gefen, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 186804 (2017).
17. N. B. Zhitenev, R. J. Haug, K. von Klitzing, and K. Eberl, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2292 (1993).
18. В. М. Пудалов, *УФН* **191**, 3 (2021).

# ДИАГНОСТИКА МИКРОЧАСТИЦ НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДЫ

*Е. В. Лебедева<sup>a\*</sup>, А. М. Дюгаев<sup>b</sup>, П. Д. Григорьев<sup>b,c</sup>*

<sup>a</sup> *Институт физики твердого тела Российской академии наук  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

<sup>b</sup> *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

<sup>c</sup> *Национальный исследовательский технологический университет (НИТУ) «МИСиС»  
119049, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 января 2022 г.,  
после переработки 17 января 2022 г.  
Принята к публикации 18 января 2022 г.

Предложен новый метод исследования свойств микрочастиц на поверхности жидкости. Наблюдения динамики микрогранул полиамида-12 на поверхности воды проводятся двумя способами. В первом случае капля воды с гранулами, подвешенная на стеклянной подложке, наблюдается снизу, во втором слой воды с микрочастицами на поверхности наблюдается сверху. Выяснилось, что в обоих случаях частицы покрыты пленкой воды и не имеют контакта с воздухом, так же как и стеклянные микросферы, которые легче воды в несколько раз. При высыхании воды они полностью погружены в ее отдельные лужицы. Методом интерферометрии установлено, что деформация поверхности воды в подвешенной капле с гранулами полиамида, связанная с действием сил гравитации, не может превышать нескольких десятков нанометров. Наблюдения показали, что микрочастицы полиамида-12, имеющие плотность, большую, чем плотность воды, прилипают к ее поверхности, локализуясь под ней. Прослежена связь предложенного метода с экспериментом и теорией для микрочастиц у поверхности жидкого гелия.

DOI: 10.31857/S0044451022050157  
EDN: DTLGRT

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В экспериментах по изучению вихревых течений в объеме жидкости и на ее поверхности используются декорирующие частицы. Плотность частиц  $\rho_A$  близка к плотности жидкости  $\rho_L$ , а их радиус  $R_0$  составляет десятки микрометров. Такие частицы, двигаясь в потоке жидкости, не вносят искажений в поле скоростей и дают возможность наблюдать сложные гидродинамические процессы оптическими методами. Так, например, в экспериментах [1–4] по изучению турбулентности в воде использовались гранулы полиамида-12 со средним размером 30 мкм. В работах [5–7] визуализация вихревого движения на поверхности сверхтекучего гелия осуществлялась при помощи полых стеклянных микросфер со средним диаметром 50 мкм.

Наблюдения за поведением визуализирующих частиц после прекращения внешнего возбуждения жидкости, которое использовалось для создания вихревых течений, показали, что эти частицы с течением времени слипаются в кластеры большого (до нескольких сантиметров) размера. Явление самоорганизации наблюдалось как на поверхности сверхтекучего гелия [5], так и на поверхности воды [4]. В работе [8] было показано, что стеклянные микросферы могут сформировать двумерную структуру под действием сил поверхностного натяжения. Что касается кластеризации полиамидных гранул на поверхности воды, было обнаружено, что плотность распределения кластеров по размерам имеет степенной вид [4].

В экспериментах [5–7] декорирующие частицы (трейсеры), имеющие плотность, мало отличающуюся от плотности жидкости, были локализованы под ее поверхностью. В работе [9] было показано, что для жидкого гелия при размерах частиц, много меньших капиллярной длины, их возвышение над поверхностью жидкости мало. Это означает, что для таких частиц понятие угла смачивания теря-

\* E-mail: lebedeva@issp.ac.ru

ет смысл. Кроме того, была определена глубина, на которой будет находиться легкая микрочастица под поверхностью сверхтекучего гелия. Это положение равновесия было найдено с учетом дисперсионных сил.

Взаимодействие с поверхностью жидкости плавающих макроскопических предметов, имеющих размеры порядка или больше капиллярной длины, хорошо изучено (см., например, работы [10–12]). Плавающие предметы больших размеров всегда деформируют поверхность. Имеется обширная литература по исследованиям коллоидных частиц на границе раздела жидкости и газа или двух различных жидкостей. Особенности взаимодействия таких частиц с поверхностью связаны с их субмикронными размерами, с наличием двойного электрического слоя и, в большинстве случаев, с лиофобностью, что отражено, например, в работах [13–16]. Есть еще одна актуальная тема, связанная с содержанием нашей статьи — испарение капель коллоидных растворов (см. обзор [17]).

Мы хотим исследовать, как взаимодействует с поверхностью жидкости микрочастица, определить, деформирует ли она горизонтальную поверхность жидкости, на примере полиамидных гранул и полых стеклянных микросфер, которые используются для визуализации течений в воде и жидком гелии.

## 2. МЕТОД ИЗМЕРЕНИЙ

Производители микрогранул полиамида-12 (ПА-12) приводят следующие данные о его свойствах: плотность 0.99–1.01 г/см<sup>3</sup>, коэффициент преломления 1.52–1.53. В экспериментах [18] измеряли угол смачивания водой полиамидной поверхности,  $\theta$ . Оказалось, что для ПА-12 этот угол меняется в пределах  $\theta = 55\text{--}78^\circ$ . Это означает не очень хорошую смачиваемость, и можно предположить, что при аккуратном распылении сверху сухие гранулы будут находиться на поверхности воды, деформируя ее.

Если насыпать полиамидные гранулы на поверхность неподвижной воды, почти все они останутся на поверхности. При этом почти все частицы имеют плотность, большую плотности воды, что подтверждает простой опыт. На стеклянную пластину наносили каплю дистиллированной воды диаметром 8 мм, что обеспечивало заметную кривизну поверхности. Сверху на каплю распыляли гранулы, которые перемещались на края капли (рис. 1).

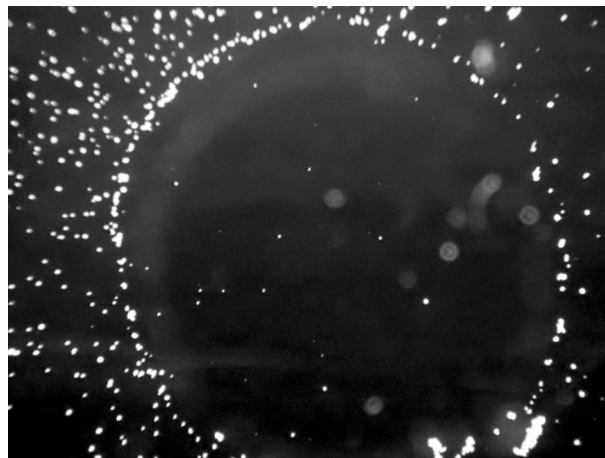


Рис. 1. Фотография капли с полиамидными гранулами на ее краях

Мы попытались выяснить, можно ли наблюдать деформацию поверхности воды находящимися у ее поверхности гранулами с помощью интерферометрических наблюдений. Для этого использовался микроинтерферометр Линника МИИ-4. Микроскоп в интерферометре, установленный снизу, позволяет рассматривать объекты, расположенные над ним. Для фиксации результатов наблюдений использовалась видеокамера Levenhuk. Микрометрические винты позволяют перемещать объектив микроскопа в горизонтальной плоскости, поле зрения составляет примерно  $300 \times 200$  мкм<sup>2</sup>. Монохроматический свет для интерференционной картины был получен с помощью желтого светофильтра  $\lambda = 586$  нм. Согласно описанию прибора, он позволяет фиксировать искажения плоской поверхности  $\delta \geq 30$  нм.

На промытое и очищенное с помощью спирта стекло с оптически полированной поверхностью после оценки его чистоты с помощью микроскопа наносили каплю дистиллированной воды с поперечным размером 3–5 мм и толщиной 0.1–0.3 мм. Толщина капли оценивалась по показаниям микрометрического винта, который фокусирует объектив прибора. Разница в показаниях в начале наблюдений, когда прибор сфокусирован на поверхности капли, и в конце, когда он сфокусирован на поверхности стекла, дает толщину капли. На поверхность капли наносили гранулы. После этого стекло переворачивалось и устанавливалось на столик интерферометра для наблюдений (рис. 2). Второй способ подготовки капли с гранулами — распыление гранул на чистое стекло, а затем нанесение капли поверх гранул.

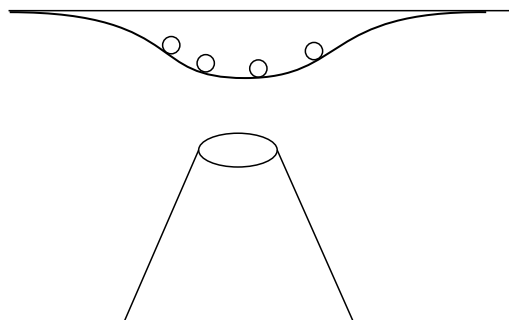


Рис. 2. Схема наблюдений

Было обнаружено, что диаметр отдельных гранул варьируется в широких пределах от 10 до 100 мкм. Выяснилось, что при первом способе нанесения гранул большая их часть покрыта «грязью». Предположительно эта грязь (микронного размера примесные частицы) прилипает к гранулам в контейнере, где они хранились. Ни на сухом стекле, ни на поверхности чистой капли воды такие частицы не наблюдались. При втором способе — нанесении капли на распыленные гранулы — «чистых» гранул наблюдается гораздо больше (рис. 3).

Наблюдения проводились в течение 20–40 мин. За это время капля полностью испарялась. Так как плотность 90 % гранул больше плотности воды, в перевернутой капле эти частицы находятся у поверхности жидкости. В начале наблюдений отдельные гранулы двигались со скоростью до 50 мкм/с. Это движение связано как с кривизной поверхности воды, так и с неравномерным нагреванием капли лучом света от лампы накаливания, которая освещает поле зрения микроскопа. В дальнейшем они слипались в комплексы разнообразной формы.

На поверхности воды можно наблюдать интерференционные полосы, связанные с разностью фаз между световой волной, отраженной от поверхности воды, и опорной световой волной интерферометра. Если на поверхности имеются плавающие частицы, выступающие над ней, то интерференционная картина искажается. Оказалось, что искажения создаются только «грязными» гранулами, на нижней поверхности которых имеются мелкие частицы примесей. Чистые гранулы, хорошо видные у поверхности воды, не искажают интерференционной картины. На рис. 4 приведены парные фотографии. Левые сделаны при обычном освещении, а на правых приведены интерференционные картины с теми же объектами, что и на левой фотографии. Так как открытие шторки интерферометра и фокусировка производятся вручную за несколько секунд, на правой фо-

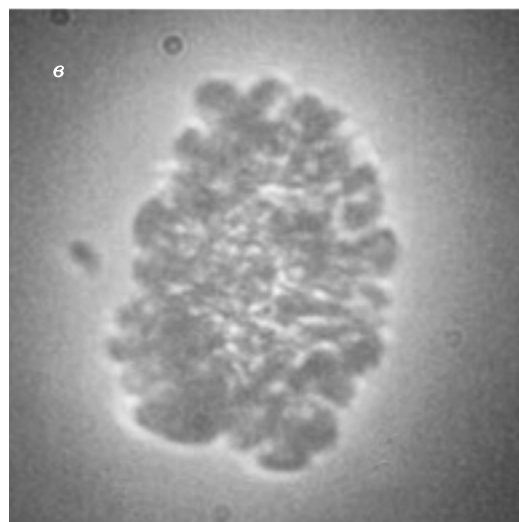
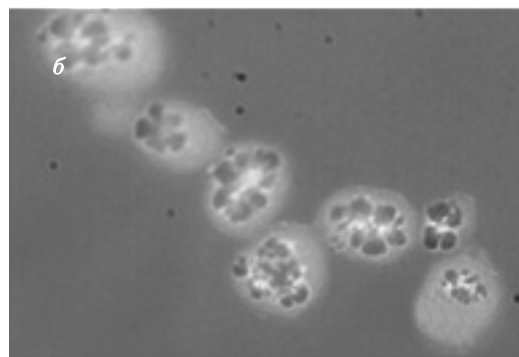
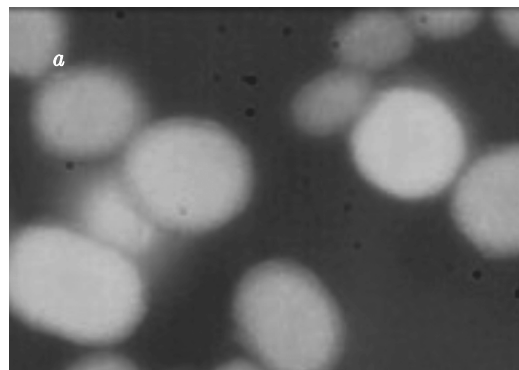


Рис. 3. Скопления чистых (а) и грязных (б) гранул. Микроскоп сфокусирован на контуре гранул, примесные частицы, которые, как выяснилось, находятся на поверхности воды, не попадают в фокус и выглядят расплывчатыми. в) Микроскоп сфокусирован на поверхности воды над грязной гранулой

тографии возможно небольшое смещение гранул по отношению к парной левой.

Оказалось, что вода хорошо смачивает гранулы. Это видно на последних стадиях высыхания капли — даже когда вода испарилась с поверхности стекла, гранулы все еще покрыты водяной пленкой (рис. 5а). Затемнение поверхности воды вблизи час-

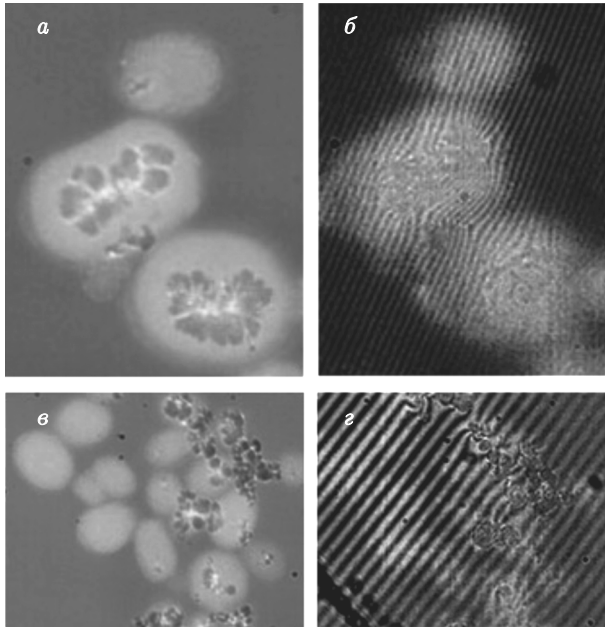


Рис. 4. Чистые и грязные гранулы при обычном освещении (а, в) и при наличии интерференционной картины (б, г)

тицы при высыхании свидетельствует о ее искривлении: искривленная поверхность сильнее рассеивает свет, действуя как линза. Высокая смачиваемость объясняет тот факт, что при распылении гранул на поверхность капли они легко проникают под воду.

Кроме экспериментов с подвешенной каплей с помощью микроскопа БМИ-1Ц мы провели наблюдения за поведением гранул ПА-12 на поверхности слоя воды толщиной 1 мм, налитой в стеклянную кювету. При этом объектив микроскопа был направлен сверху на поверхность воды. При распылении гранул над водой почти все они оставались у поверхности, собираясь за время наблюдения в комплексы.

Последовательность фотографий на рис. 5б изображает заключительную стадию высыхания слоя воды с полиамидными гранулами вблизи поверхности. В верхних частях фотографий гранулы окружены лужицами воды и покрыты водяной пленкой, в нижних видны сухие гранулы, лежащие на дне кюветы там, где вода испарилась. На фотографиях показано уменьшение размера лужиц, окружающих гранулы, и их высыхание. Чтобы добиться лучшей контрастности при обработке изображения, яркое пятно от лампы, подсвечивающей кювету с водой снизу, закрыто черным кругом.

Мы начали исследование взаимодействия с поверхностью воды легких полых стеклянных микросфер с плотностью  $\rho_A \approx 0.125 \text{ г/см}^3$  и средним ра-

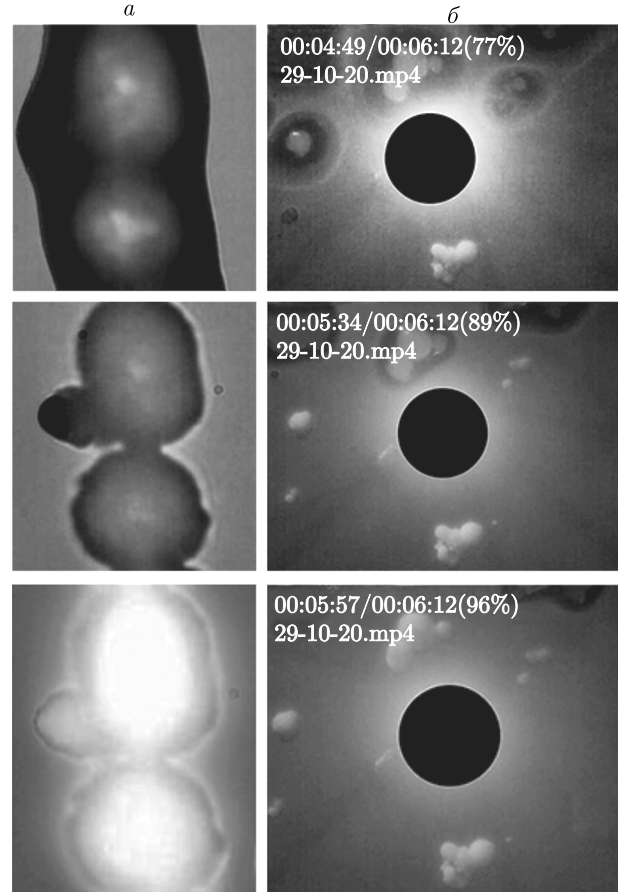


Рис. 5. Последовательные стадии высыхания перевернутой капли (а) и слоя воды с гранулами (б)

диусом  $R_0 \approx 50 \text{ мкм}$ . Они распылялись над миллиметровым слоем воды. Наблюдения проводились с помощью микроскопа БМИ-1Ц. Выяснилось, что в силу неравенства  $R_0 \ll L_k \approx 0.3 \text{ см}$  ( $L_k$  — капиллярная длина) такие микрочастицы также слабо деформируют поверхность. Они имеют почти нулевую «плавучесть» и полностью смачиваются водой, возвышаясь над ней на величину  $h_+$ , для которой получена оценка [9]

$$\frac{h_+}{R_0} \approx \left(\frac{R_0}{L_k}\right)^2 \frac{\rho_L - \rho_A}{\rho_L}. \quad (1)$$

Для стеклянных микросфер имеем  $R_0/L_k \approx 10^{-2}$ , поэтому из выражения (1) получаем  $h_+ \approx 100 \text{ \AA}$ , что сравнимо с толщиной ван-дер-ваальсовой пленки, которой покрыта частица. На рис. 6 представлен процесс высыхания слоя воды со стеклянными микросферами. В то время как вода с подложки уже испарилась, микросферы все еще покрыты водяной пленкой.

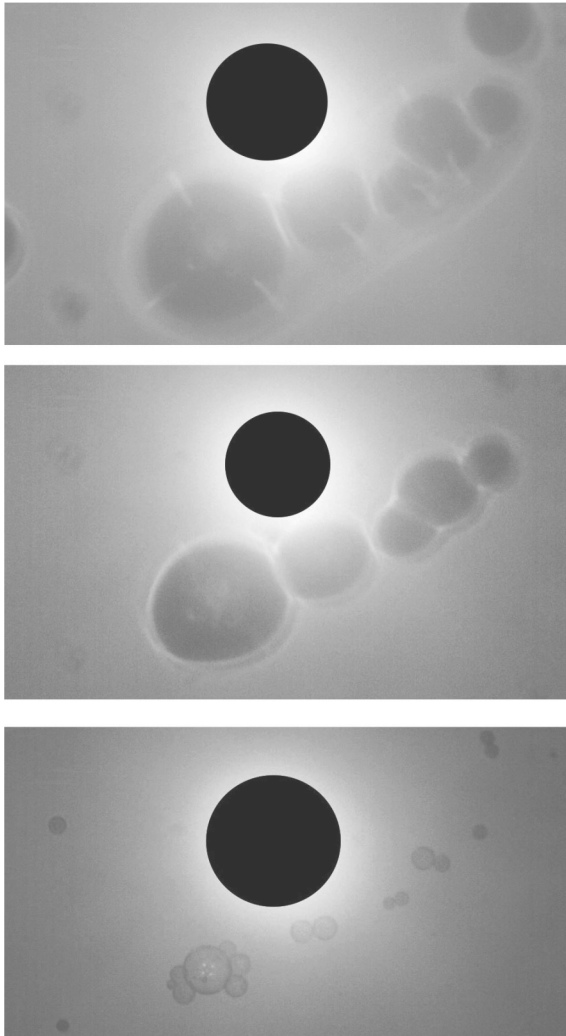


Рис. 6. Заключительная стадия высыхания слоя воды со стеклянными микросферами

На основании выполненных экспериментов можно сделать следующие утверждения.

- 1) Исследуемые нами легкие ( $\rho_A \ll \rho_L$ ) и тяжелые ( $\rho_A > \rho_L$ ) частицы полностью смачиваются водой. При высыхании слоя воды с частицами на поверхности наблюдается образование капель вокруг отдельных частиц или их скоплений.
- 2) В перевернутой капле гранулы ПА-12 находятся под поверхностью воды, не деформируя ее.
- 3) Несмотря на то, что полиамидные гранулы тяжелее воды и хорошо ею смачиваются, они не тонут, а находятся вблизи границы раздела жидкость–воздух. Это означает, что имеется дополнительное вза-

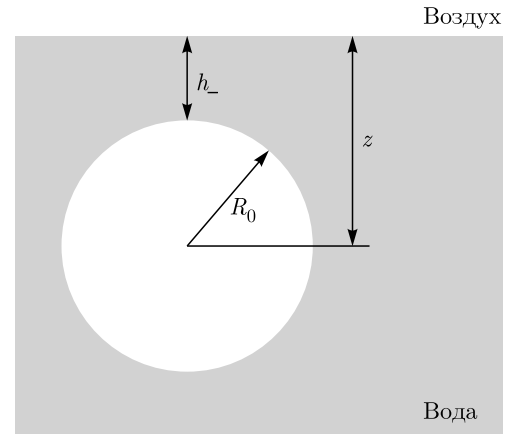


Рис. 7. Микрочастица под поверхностью воды

имодействие, удерживающее частицы у поверхности воды.

### 3. СРАВНЕНИЕ С ЖИДКИМ ГЕЛИЕМ

Взаимодействие, удерживающее частицы у поверхности воды, описывается теорией, построенной в работе [9] для объяснения поверхностных явлений в жидком гелии, который смачивает все микрочастицы. При этом реализуется картина, представленная на рис. 7 [9]. Частица радиуса  $R_0$  и объема  $V$  расположена на расстоянии  $z$  от поверхности жидкости. Взаимодействие частицы с поверхностью гелия характеризуется потенциалом [9]

$$v(z) = V \frac{23}{640\pi^2} \hbar c \frac{(\varepsilon_L - \varepsilon_V)(\varepsilon_A - \varepsilon_L)}{(z^2 - R_0^2)^2}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_V$ ,  $\varepsilon_L$  и  $\varepsilon_A$  — диэлектрические проницаемости соответственно газовой, жидкой фаз и примесной частицы.

Представление  $v(z)$  в виде (2) получено в приближении  $\varepsilon_L - 1 \ll 1$ ,  $\varepsilon_A - 1 \ll 1$ , что имеет место для шарика, выполненного из твердого водорода в жидком гелии:  $\varepsilon_L = 1.057$ ,  $\varepsilon_A = 1.25$ . Для воды мы не можем привести аналог  $v(z)$  в виде (2). Однако, согласно общей теории дисперсионных сил [19, 20], знак  $v(z)$  определяется знаком  $(\varepsilon_L - \varepsilon_V)(\varepsilon_A - \varepsilon_L)$ , что, конечно, согласуется с выражением (2). Так как всегда  $\varepsilon_L > \varepsilon_V$ , из (2) следует, что, например, пузырек ( $\varepsilon_A = 1$ ) притягивается к поверхности жидкости. Если качественно принять, что  $\varepsilon_A < \varepsilon_L$  для гранул ПА-12 в воде, это объяснит их притяжение к границе раздела вода–воздух.

## 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Главной целью нашего исследования было отделить эффекты взаимодействия частиц с водой от их взаимодействия друг с другом. Эксперименты с подвешенными каплями позволили наблюдать два типа микрочастиц — чистых и грязных. Обнаружен эффект дробления капли воды по мере ее высыхания с образованием мелких капель, покрывающих микрочастицы. Показано, что деление частиц на легкие ( $\rho_A < \rho_L$ ) и тяжелые ( $\rho_A > \rho_L$ ,  $(\rho_A - \rho_L)/\rho_L \ll 1$ ), имеющее место в объеме воды, неприменимо к ее поверхности. Тяжелые частицы прилипают к поверхности воды, локализуясь под ней.

**Благодарности.** Авторы выражают благодарность Л. П. Межову-Деглину за обсуждения и М. В. Лебедеву за помощь в выполнении эксперимента.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках Госзадания №0033-2019-001 (ИТФ) и при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант №075-15-2019-1893 (ИФТТ)).

## ЛИТЕРАТУРА

1. A. von Kameke, F. Huhn, G. Fernandez-Garcia et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 074502 (2011).
2. N. Francois, H. Xia, H. Punzmann, and M. Shats, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 194501 (2013).
3. С. В. Филатов, М. Ю. Бражников, А. А. Левченко, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 486 (2015).
4. S. V. Filatov, A. V. Poplevin, A. A. Levchenko et al., *Results Phys.* **27**, 104446 (2021).
5. А. А. Левченко, Л. П. Межов-Деглин, А. А. Пельменев, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 233 (2017).
6. A. Pelmenev, A. Levchenko, and L. Mezhev-Deglin, *J. Low Temp. Phys.* **205**, 200 (2021).
7. A. Pelmenev, A. Levchenko, and L. Mezhev-Deglin, *Materials* **14**, 7514 (2021).
8. А. А. Левченко, Е. В. Лебедева, Л. П. Межов-Деглин et al., *Low Temp. Phys.* **45**, 469 (2019).
9. А. М. Дюгаев, Е. В. Лебедева, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 755 (2017).
10. P. Singh and D. D. Joseph, *J. Fluid Mech.* **530**, 31 (2005).
11. D. Feng and A. V. Nguyen, *Adv. Colloid Interface Sci.* **248**, 69 (2017).
12. J. Lee, *Colloids Interfaces* **2**, 18 (2018).
13. A. J. Hurd and D. W. Schaefer, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1043 (1985).
14. B. P. Binks, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 6298 (2007).
15. M. P. Boneva, N. C. Christov, K. D. Danov et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 6371 (2007).
16. D. O. Grigoiev, J. Kragel, V. Dutschk et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 6447 (2007).
17. K. Kolegov and L. Barash, *Adv. Colloid Interface Sci.* **285**, 102271 (2020).
18. C. W. Extrand, *Adv. Colloid Interface Sci.* **248**, 136 (2002).
19. Е. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **29**, 94(1955).
20. И. Е. Дзялошинский, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *ЖЭТФ* **37**, 229 (1959).



## К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: [jetp@kapitza.ras.ru](mailto:jetp@kapitza.ras.ru) Телефон: +7 (499) 137 56 22

## К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу [JETP@kapitza.ras.ru](mailto:JETP@kapitza.ras.ru);

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала ([www.jetp.ac.ru](http://www.jetp.ac.ru));

в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате  $\text{\LaTeX}$  или Word, рисунки — в формате PostScript (\*.ps) или EncapsulatedPostScript (\*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать  $P_{\text{opt}}$ , а не  $P_{\text{опт}}$ . Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, *ФТТ* **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., *Phys. Rev. A* **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
  8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
  9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, condmat/0404452.
7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде \*.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
  9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

Главный редактор *А. И. Смирнов*

**Редколлегия:**

д-р физ.-мат. наук *И. Г. Зубарев*,  
д-р физ.-мат. наук *Е. И. Кац* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),  
д-р физ.-мат. наук *В. П. Крайнов*, *акад. М. В. Садовский*, *канд. физ.-мат. наук С. С. Сосин*,  
*канд. физ.-мат. наук Ю. С. Бараш*, *член-корр. РАН С. В. Троицкий* (зам. гл. редактора),  
*член-корр. РАН И. А. Фомин* (зам. гл. редактора), *д-р физ.-мат. наук А. В. Филиппов*,  
*д-р физ.-мат. наук Д. Е. Хмельницкий*  
(зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании),  
*д-р физ.-мат. наук А. А. Цейтлин*, *акад. А. М. Черепашук*

**Редакционный совет:**

*акад. А. Ф. Андреев* (председатель),  
*член-корр. РАН В. В. Лебедев*, *д-р физ.-мат. наук В. С. Попов*

Зав. редакцией *Н. Г. Церевитинова*  
Редакторы: *Л. Б. Кульчицкая*, *Т. Г. Орехова*, *Т. Н. Смирнова*