Р О С С И Й С К А Я А К А Д Е М И Я Н А У К

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

том 116

Выпуск 3

10 августа 2022

Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Pis'ma v ZhETF, vol. 116, iss. 3, pp. 137 – 138

On ambiguity of definition of shear and spin-hall contributions to Λ polarization in heavy-ion collisions

Yu. B. Ivanov[+*×1)], *A. A. Soldatov*[*]

[+] *Bogoliubov Laboratory for Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia*

[*] *National Research Nuclear University "MEPhI", 115409 Moscow, Russia*

[×] *National Research Centre "Kurchatov Institute", 123182 Moscow, Russia*

Submitted 19 June 2022
Resubmitted 23 June 2022
Accepted 24 June 2022

DOI: 10.31857/S1234567822150010, EDN: jequnw

Non-central heavy-ion collisions at high energies are characterized by a huge global angular momentum of the order of 10^3–$10^5\hbar$, depending on the collision energy and centrality. Although a large part of the angular momentum is carried away by the spectator nucleons, its sizable fraction is accumulated in the created dense and highly excited matter, that implies a strong rotational motion of this matter. This matter is conventionally associated with a (participant) fluid because it is successfully described by the fluid dynamics. Such rotation leads to a strong vortical structure inside the produced fluid. Local fluid vorticity induces a preferential orientation of spins of emitted particles through spin-orbit coupling. The STAR Collaboration at the Relativistic Heavy-Ion Collider discovered the global polarization of emitted Λ hyperons, which indicated fluid vorticity of $\omega \approx (9 \pm 1) \times 10^{21}$ s^{-1} [1]. This result exceeds the vorticity of all ever known fluids in nature. This discovery have opened an entirely new direction of research in heavy-ion physics.

The major part of applications to heavy-ion collisions was performed within thermodynamic approach in terms of hadronic degrees of freedom [2–4]. In the present paper, we discuss this thermodynamic approach. The key quantity of the thermodynamic approach is thermal vorticity

$$\varpi_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(\partial_\nu \beta_\mu - \partial_\mu \beta_\nu), \tag{1}$$

where $\beta_\mu = u_\mu/T$, u_μ is collective local four-velocity of the matter, and T is local temperature. The corresponding mean spin vector of Λ particles with four-momentum p, produced around point x on freeze-out hypersurface is

$$S^\mu_\varpi(x,p) = -\frac{1}{8m}[1 - f(x,p)]\, \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} p_\nu, \varpi_{\alpha\beta}(x), \tag{2}$$

where $f(x,p) = 1/\{\exp[(u_\nu p^\nu - \mu)/T] + 1\}$ is the Fermi–Dirac distribution function, m is mass of the Λ hyperon and μ is the baryon chemical potential.

It was recently realized [5–7] that there are other additional contributions to the mean spin vector, if the thermal equilibrium is *local*. These are the so-called thermal-shear (S^μ_ξ) and spin-Hall (S^μ_ζ) contributions:

$$S^\mu_\xi(x,p) = \frac{1}{4m}[1 - f(x,p)]\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}\frac{p_\nu n_\beta p^\rho}{(n \cdot p)}\xi_{\rho\alpha}, \tag{3}$$

$$S^\mu_\zeta(x,p) = \frac{1}{4m}[1 - f(x,p)]\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}\frac{p_\alpha n_\beta}{(n \cdot p)}\partial_\nu \zeta, \tag{4}$$

where $\zeta = \mu/T$,

$$\xi_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \beta_\nu + \partial_\nu \beta_\mu\right), \tag{5}$$

is the thermal-shear tensor, and n is a four-vector that is the main subject of the discussion below. In [5], the n four-vector is defined as the time direction in the center-of-mass frame of colliding nuclei: $n_\beta = \hat{t}_\beta = (1,0,0,0)$. Only the shear term was considered in [5]. In [6, 7], the n four-vector is identified with the four-velocity: $n_\beta = u_\beta$. In the mid-rapidity region these choices are very close because $u_\beta \approx \hat{t}_\beta$. However, at forward-backward rapidities, which are relevant to fixed-target polarization measurements [8–10], they may significantly differ.

In this paper, we consider consequences of these different choices at the example of the global polarization of Λ-hyperons. The global polarization is chosen because it allows a significant advance in the analytical treatment, if momentum acceptance is disregarded, and because it is relevant to fixed-target polarization measurements at moderately relativistic energies [8–10].

1) e-mail: yivanov@theor.jinr.ru

The polarization of the Λ hyperon is measured in its rest frame, therefore the Λ polarization is

$$P^\mu(x,p) = S^{*\mu}(x,p)/S_\Lambda, \tag{6}$$

where $S_\Lambda = 1/2$ is the spin of the Λ hyperon, $S^\mu = S^\mu_\varpi + S^\mu_\xi + S^\mu_\zeta$, and $S^{*\mu}$ is the mean Λ-spin vector in the Λ rest frame

$$\mathbf{S}^*(x,p) = \mathbf{S} - \frac{\hat{t}\cdot S}{\hat{t}\cdot p + m}\mathbf{p}_\Lambda \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{S} - \Delta\mathbf{S}, \tag{7}$$

where $\Delta\mathbf{S}$ is the boost correction. The zeroth component of $S^{*\mu}$ identically vanishes.

It is shown that alternative definitions of the thermal-shear contribution to the polarization in heavy-ion collisions, [5] on the one hand and [6, 7] on the other, result in very different corrections to the global Λ polarization averaged over wide range of momenta. The spin-Hall contribution to the polarization, defined accordingly to [6, 7], results in identicaly zero correction to the global Λ polarization, if averaged over all momenta of Λ's. Only application of restrictive momentum acceptance and the boost (to Λ rest frame) correction result in nonzero global spin-Hall polarization. If the spin-Hall contribution were defined similarly to [5], the global spin-Hall polarization would be non-zero even without any acceptance and the boost correction.

This work was supported by MEPhI within the Federal Program "Priority-2030".

This is an excerpt of the article "On ambiguity of denition of shear and spin-hall contributions to polarization in heavy-ion collisions". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601300.

1. L. Adamczyk, J.K. Adkins, G. Agakishiev et al. (STAR Collaboration), Nature **548**, 62 (2017); arXiv:1701.06657 [nucl-ex].
2. F. Becattini, V. Chandra, L. Del Zanna, and E. Grossi, Annals Phys. **338**, 32 (2013); arXiv:1303.3431 [nucl-th].
3. F. Becattini, I. Karpenko, M. Lisa, I. Upsal, and S. Voloshin, Phys. Rev. C **95**(5), 054902 (2017); arXiv:1610.02506 [nucl-th].
4. R.-h. Fang, L.-g. Pang, Q. Wang, and X.-n. Wang, Phys. Rev. C **94**(2), 024904 (2016); arXiv:1604.04036 [nucl-th].
5. F. Becattini, M. Buzzegoli, and A. Palermo, Phys. Lett. B **820**, 136519 (2021); arXiv:2103.10917 [nucl-th].
6. S.Y.F. Liu and Y. Yin, JHEP **07**, 188 (2021); arXiv:2103.09200 [hep-ph].
7. S.Y.F. Liu and Y. Yin, Phys. Rev. D **104**(5), 054043 (2021); arXiv:2006.12421 [nucl-th].
8. M.S. Abdallah, B.E. Aboona, J. Adam et al. (STAR), Phys. Rev. C **104**(6), L061901 (2021); arXiv:2108.00044 [nucl-ex].
9. K. Okubo for the STAR collaboration, EPJ Web Conf. **259**, 06003 (2022); arXiv:2108.10012 [nucl-ex].
10. R. Abou Yassine, J. Adamczewski-Musch, O. Arnold et al. (HADES Collaboration), arXiv:2205.15914 [nucl-ex]; F. J. Kornas, doi:10.26083/tuprints-00019763.

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 3, с. 139 – 145

Обнаружение осцилляций Рамсея в германии, легированном мелкими донорами, при возбуждении перехода $1s \rightarrow 2p_0$

Р. Х. Жукавин[+1)], *П. А. Бушуйкин*[+], *В. В. Кукотенко*[*×], *Ю. Ю. Чопорова*[*×], *Н. Дессманн*[○2)], *К. А. Ковалевский*[+], *В. В. Цыпленков*[+], *В. В. Герасимов*[*×], *Б. А. Князев*[*×], *Н. В. Абросимов*[∇], *В. Н. Шастин*[+]

[+]*Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н. Новгород, Россия*

[*]*Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

[×]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

[○]*FELIX Laboratory, Radboud University, Nijmegen 6525 ED, The Netherlands*

[∇]*Leibniz-Institut fur Kristallzuchtung, 12489 Berlin, Germany*

Поступила в редакцию 3 июня 2022 г.
После переработки 15 июня 2022 г.
Принята к публикации 15 июня 2022 г.

Представлены результаты экспериментальных исследований по наблюдению осцилляций Рамсея при воздействии импульсов терагерцового излучения на состояния мелкого донора в германии. В качестве источника возбуждения использовался лазер на свободных электронах (NovoFEL). При проведении экспериментов применялась стандартная методика, предполагающая воздействие последовательности двух оптических импульсов на частоте излучения, близкой к частоте примесного перехода $1s(A_1) \rightarrow 2p_0$. Когерентное состояние ансамбля доноров наблюдалось с помощью измерения фототока, обусловленного термическим выбросом электронов в зону проводимости из состояния $2p_0$. Полученный эффект оказался достаточно устойчив к используемым экспериментальным условиям, в частности, температурному режиму, что дает надежду на дальнейшее усовершенствование при переходе к искусственно созданным системам на основе мелких доноров в германии.

DOI: 10.31857/S1234567822150022, EDN: jffhsc

Введение. Состояния кулоновских центров в полупроводниках [1] привлекают внимание исследователей в качестве кандидатов для создания различных квантовых устройств. Данное обстоятельство вызвано тем, что такие объекты являются естественными нульмерными образованиями, и к настоящему моменту существуют технологии контролируемого позиционирования одиночных кулоновских центров в полупроводниковой матрице с возможностью последующей манипуляции их состоянием [2]. Наибольший интерес вызывают донорные центры в алмазе, кремнии и германии, что обусловлено, в частности, возможностью создания моноизотопной матрицы (кремний), и большими временами релаксации определенных состояний кубита (кремний, алмаз) [2–4]. Как известно, доноры в германии обладают большими радиусами основных состояний [5], что в случае реализации модели Кейна [6] снижает требования к технологии создания массивов кубитов. На данном этапе интерес вызывают методы квантовой оптики для манипуляций когерентными состояниями, включающие, в частности, фотонное эхо и интерференцию Рамсея. Последнее используется в различных экспериментальных исследованиях, таких как точное определение резонансных частот [7] и эталон секунды [8]. Как известно, метод интерферометрии Рамсея использует два оптических импульса равной интенсивности с длительностью менее продольного T_1 и поперечного T_2 релаксационных времен двухуровневой системы. Первый импульс возбуждает в системе когерентные суперпозиции состояний доноров (осциллирующие диполи), второй взаимодействует со сформированными в среде диполями, находящимися в определенной фазе и имеющими определенную амплитуду. В результате воздействия последовательности двух оптических импульсов с резонансной частотой населенность верхнего уровня донорного перехода определяется разностью фаз излучений первого и второго импульсов возбуждения (осциллирующая функция с частотой перехода/возбуждающего излучения).

1)e-mail: zhur@ipmras.ru
2)N. Deßmann.

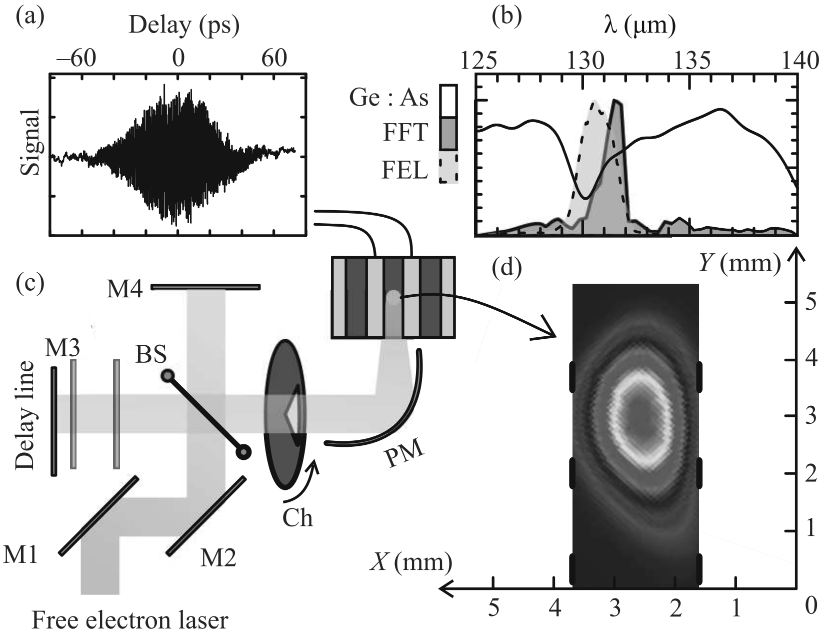


Рис. 1. (Цветной онлайн) Эксперимент по детектированию осцилляций Рамсея электрическим методом: (a) – сигнал напряжения V, снимаемый с двух средних контактов на образце; (b) – Пример преобразования Фурье полученного сигнала (см. описание эксперимента) (розовый), линия лазера на свободных электронах NovoFEL (желто-зеленый), спектральная линия $1s(\mathrm{A}_1) \to 2p_0$ в Ge : As (черный); (c) – оптическая схема эксперимента с линией задержки (M1, 2, 3 – плоское зеркало, PM – параболическое зеркало, BS – делитель пучка), Ch – модулятор; (d) – изображение луча излучения лазера в месте образца, снятое с помощью пироэлектрической камеры

Воздействие первого импульса может быть рассмотрено как запись информации, а действие второго – как последующая манипуляция или контроль существования суперпозиции состояний. Измерение зависимости населенности второго уровня как функция времени задержки между импульсами (определяет разность фаз излучения в первом и втором импульсах) в работе [9] проводилось путем измерения фототока, аналогично методу PTIS [10], в котором величина тока пропорциональна населенности возбужденного уровня и обусловлена термической ионизацией носителей заряда при конечных температурах. В работе [9] была продемонстрирована возможность сочетания оптической записи когерентного состояния и некогерентного электрического контроля на примере состояний доноров фосфора в кремнии.

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию возможности наблюдения интерференции Рамсея в системе доноров мышьяка в германии. Мелкие доноры обладают переходами, соответствующими существующим компактным источникам стимулированного терагерцового излучения, для которых продемонстрированы режимы генерации коротких импульсов (quantum cascade lasers [11], p-Ge лазер [12]). Выбор мышьяка обусловлен наибольшей энергией связи среди доноров пятой группы ($E_0 = 14.18$ мэВ, [1]), что снижает требования к температуре, а также достаточно большими временами жизни возбужденных состояний [13] в сравнении с донорами в кремнии [14], что позволяет использовать длительности импульсов ~ 100 пс, характерные для используемого в экспериментах лазера на свободных электронах NovoFEL.

Эксперимент. Кристаллы германия были выращены методом Чохральского с концентрацией мышьяка $N_0 = 5.2 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$ (образец 1) и $N_0 = 1.2 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$ (образец 2). Концентрация компенсирующих примесей имела величину $\sim 10^{12}\,\text{см}^{-3}$. Образцы имели размеры $0.5 \times 5 \times 10\,\text{мм}^3$. Угол между полированными гранями 5×10 мм составлял $\sim 1.5°$. Образец помещался в проточный гелиевый криостат Janis ST-100 с окнами TPX (полоса пропускания для длин волн больше 15 мкм).

В качестве источника использовалась установка NovoFEL при Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения [15], состоящая из трех лазеров на свободных электронах (ЛСЭ). В данном эксперименте использовался терагерцовый ЛСЭ с возможностью перестройки в диапазоне $\lambda = 90{-}340$ мкм, длительностью импульса ~ 100 пс и частотой повторения 5.6 МГц. Входной импульс излучения ослаблялся с помощью поляризатора и делился на две, приблизительно равные по интенсивности, части с помощью делителя на основе полипропилена. В соответствие со схемой (рис. 1) один из импульсов проходил через линию задержки, позволяющую варьировать в автоматическом режиме задержку между импульсами от $\tau = -200$ пс до $\tau = 500$ пс от нулевой разности хода. После прохождения интерферометра оба импульса снова сводились через тот же делитель. С помощью параболического зеркала излучение фокусировалось на поверхности образца в пятно диаметром ~ 1 мм. Излучение обоих пучков модулировалось с помощью прерывателя на частоте 140 Гц, располагающегося перед входным окном криостата с образцом. Средняя суммарная мощность излучения, падающего на образец, не превышала 10 мВт. В основном, в эксперименте использовалась длина волны $\lambda = 131.3$ мкм, соответствующая переходу $1s(A_1) \to 2p_0$ (9.44 мэВ), а также $\lambda = 160$ мкм (7.7 мэВ) для сравнения с нерезонансным фотовозбуждением.

На образцы были нанесены 4 контакта Ti/Au на расстоянии 2 мм друг от друга (рис. 1). Все измерения проводились по четырехконтактной схеме. Между внешними контактами пропускался постоянный ток до 20 мкА, а с внутренних контактов снималось напряжение и подавалось на осциллограф для снятия кинетики или на синхронный усилитель (SR-830 lock-in amplifier) с возможностью последующей записи и автоматического построения величины сигнала как функции положения подвижного зеркала. Предполагалось, что регистрируемое падение напряжения между парой средних контактов оказывается прямо пропорциональна населенности уровня $2p_0$, что вызвано выбросом электронов в зону проводимости как благодаря взаимодействию с равновесными фононами, так и вторичному поглощению квантов возбуждения.

Результаты и обсуждение. На рисунке 2 показаны интерферограммы для случая нерезонансного и резонансного возбуждения перехода $1s(A_1) \to 2p_0$ в образце 1. Рисунок 2a демонстрирует сигнал детектора как функцию времени задержки между двумя импульсами рамсеевской пары для длины волны 160 мкм (нерезонансный случай). Форма огибающей полученного сигнала соответствует автокорреляционной функции импульса возбуждения, который можно аппроксимировать гауссовой функцией с дисперсией, соответствующей длительности импульса. На рисунках 2b, c показаны сигналы интерференции при резонансном возбуждении образцов с концентрациями 1.2×10^{13} см$^{-3}$ и 5.2×10^{13} см$^{-3}$, соответствующий вид огибающих в логарифмическом масштабе показан на рис. 2d (образец 1) и рис. 2e (образец 2). Как следует из сравнения резонансного и нерезонансного случаев для огибающих, для резонанса имеется отклонение от гауссовой формы, сопровождающееся увеличением длительности. Рисунок 3 демонстрирует результаты измерения спектров для образцов 1 и 2 для различных участков интерферограммы с помощью преобразования Фурье. Показано, что спектры для обоих образцов во всех участках интерферограммы, включая времена задержки до 400 пс, превышающие длительность импульса возбуждения, содержат линию $\sim$130 мкм, что соответствует переходу $1s(A_1) \to 2p_0$ донора As.

Согласно теории, оптимальным при наблюдении осцилляций Рамсея является использование $\pi/2$ импульсов (при параметрах излучения NovoFEL для n-Ge средняя мощность излучения 8.5 мВт), соответствующих возбуждению системы на "экватор" сферы Блоха. Однако в эксперименте такое значение мощности может приводить к перегреву образца и, следовательно, к возрастанию скорости релаксации когерентности до неприемлемых значений. Поэтому, чтобы избежать перегрева образца, в основном использовались существенно меньшие значения мощности импульсов возбуждения (не более 1 мВт).

Осцилляции Рамсея можно описать в рамках двухуровневой системы с использованием полуклассического подхода [16] для описания взаимодействия поля с веществом, в котором примесный атом считается двухуровневой квантовой системой, а электромагнитное поле описывается классически. Используется приближение вращающейся волны [16]. Гамильтониан системы в пренебрежении взаимодействием с колебаниями решетки имеет вид:

$$H = H_0 + \mu E_1(t)\cos(\nu t) + \mu E_2(t-\tau)\cos(\nu t + \varphi), \quad (1)$$

где H_0 – гамильтониан невозмущенной системы, собственные функции которого Ψ_1 и Ψ_2 с энергиями $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$, μ – дипольный момент перехода, $E_{1,2}(t)$ – зависящие от времени амплитуды полей двух импульсов внешнего излучения длительностью t_0, ν – круговая частота этого излучения, φ – разность фаз излучения в первом и втором импульсах, τ – временная задержка между двумя импульсами. Волновую функцию в рамках такого описания можно записать в виде:

$$\Psi(t) = a_1(t)\Psi_1 e^{-i\omega_1 t} + a_2(t)\Psi_2 e^{-i\omega_2 t}, \qquad (2)$$

где $a_1(t)$, $a_2(t)$ – искомые амплитуды. Подставляя волновую функцию (2) в гамильтониан (1), после

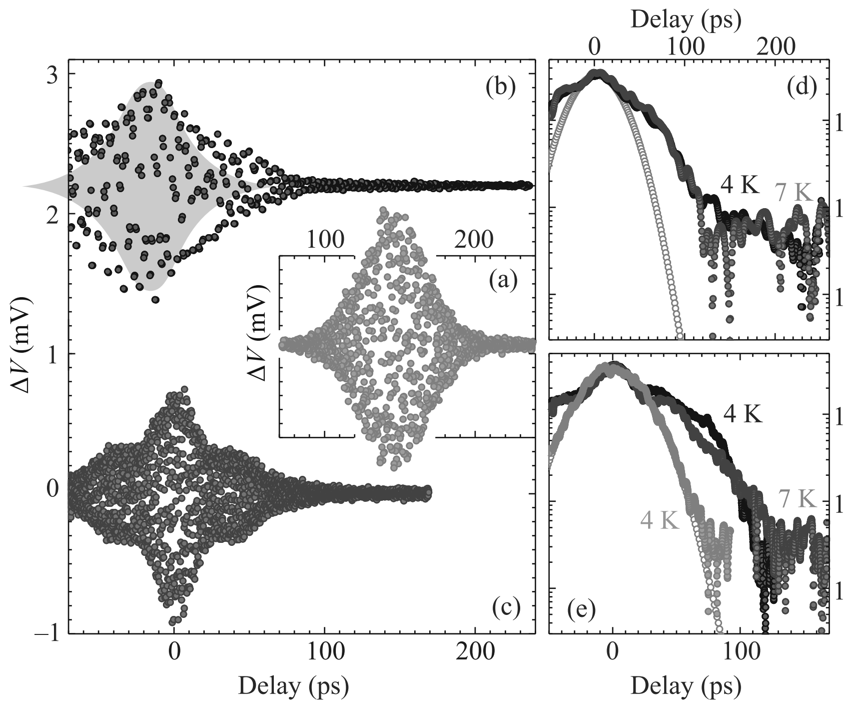


Рис. 2. (Цветной онлайн) Экспериментальный сигнал осцилляции Рамсея при фотовозбуждении на длине волны лазера $\lambda = 131$ мкм: (a) – интерферограмма для образца 2 ($N_{\mathrm{As}} = 5.3 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$), средняя мощность $P = 200$ мкВт, $T^* = 7$ К; (b) – интерферограмма для образца 1 ($N_{\mathrm{As}} = 1.2 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$), средняя мощность $P = 0.6$ мВт, $T^* = 4$ К, область, закрашенная оранжевым цветом, повторяет форму сигнала (a); (c) – интерферограмма автокорреляции на $\lambda = 160$ мкм; (d), (e) – огибающие сигнала (b) и (c) соответственно (черный – $T^* = 4$ К, синий $T^* = 7$ К, оранжевый – сигнал автокорреляции, нормированный по величине, оранжевый пустой – функция Гаусса, моделирующая сигнал (a)). T^* – температура "холодного столика" криостата

несложных преобразований можно получить систему уравнений для $a_1(t)$ и $a_2(t)$:

$$\begin{cases} a_1' = -\frac{i}{2} a_2(\Omega_1(t)e^{i\delta t} + \Omega_2(t-\tau)e^{i(\delta t+\varphi)}), \\ a_2' = -\frac{i}{2} a_1(\Omega_1(t)e^{-i\delta t} + \Omega_2(t-\tau)e^{-i(\delta t+\varphi)}), \end{cases} \tag{3}$$

где Ω_1 и Ω_2 – зависящие от времени t частоты Раби для полей, связанных с первым и вторым импульсами соответственно и определяемые выражениями:

$$\Omega_{1,2}(t) = \frac{\mu_{21} E_{1,2}(t)}{\hbar}, \tag{4}$$

где δ – отстройка частоты излучения от частоты атомного перехода, μ_{21} – матричный элемент дипольного перехода между рассматриваемыми уровнями атома. Форма импульсов излучения (следовательно, $\Omega_1(t)$ и $\Omega_2(t)$) аппроксимировались Гауссовой кривой. Учет неоднородного уширения в среде производился усреднением по δ найденных $a_1(t)$ и $a_2(t)$ и величин, производных от них, считая, что δ – случайная величина с нормальным распределением.

Описанный теоретический подход не позволяет учитывать релаксационные процессы в системе (время релаксации населенности (T_1) и релаксации когерентности (T_2)), и длительность наблюдаемых осцилляций Рамсея определяется обратной величиной неоднородного уширения линии ($\Delta\nu$) возбуждаемого примесного перехода. Таким образом, используемый теоретический подход адекватно описывает реальную ситуацию в случае, когда $\frac{1}{2\pi\Delta\nu} < T_1, T_2$, где $\Delta\nu$ – ширина неоднородно уширенной линии перехода, что в представленном случае выполняется, а существенное уменьшение $\Delta\nu$ требует сильного понижения концентрации легирования, при котором наблюдение эффекта станет затруднительным из-за низкой чувствительности. Вместе с тем, он дает понимание влияния на форму и длительность осцилляций таких параметров, как ширина линии, поле волны, отстройка и длительность импульса.

Рисунок 4 представляет примеры численного расчета населенности верхнего состояния ансамбля примесных центров от времени задержки между импульсами при различных значениях мощности излучения в импульсах и величины неоднородного уширения Δ (определена как ширина неоднородно уширенной линии перехода на полувысоте) примесного

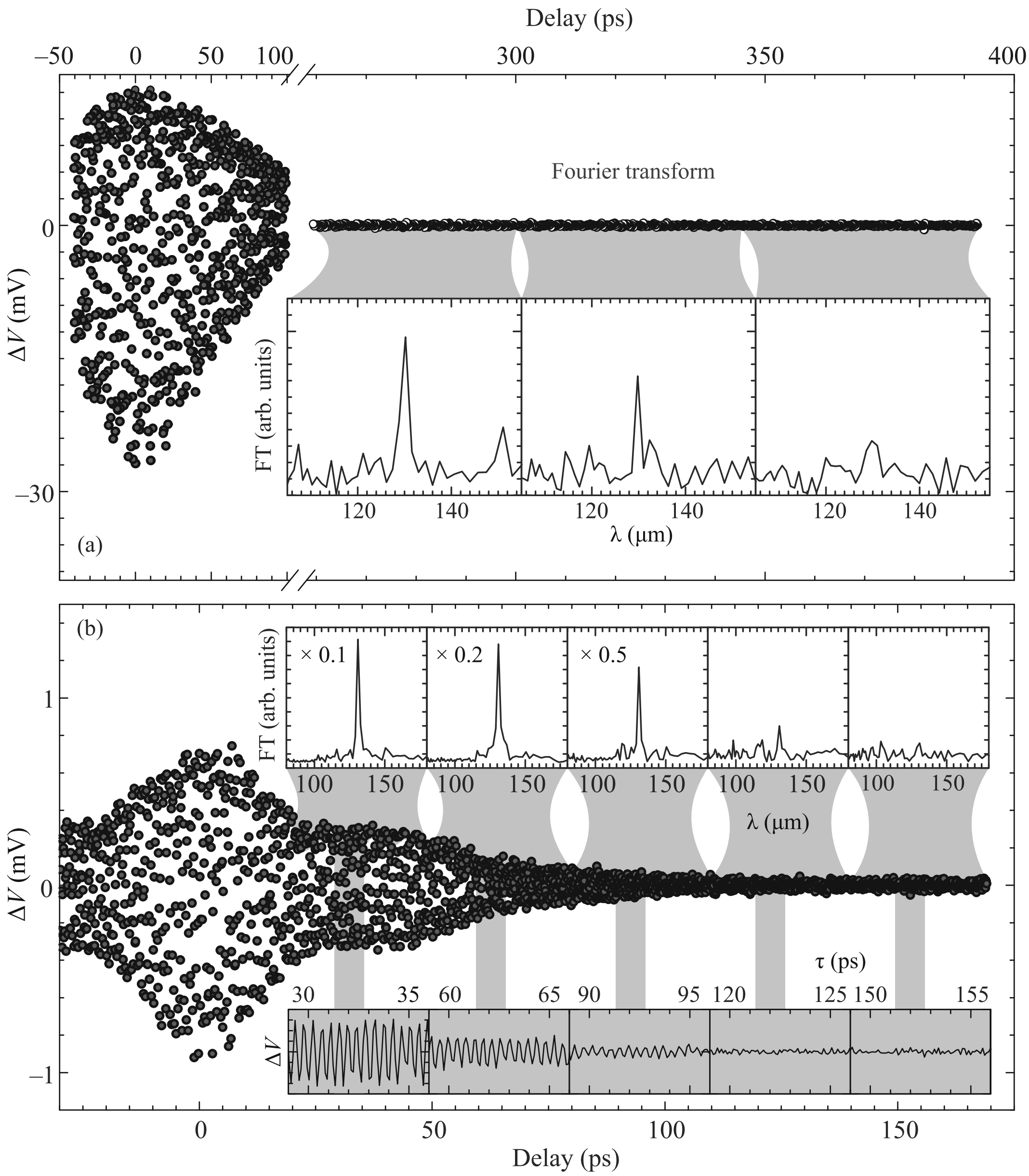


Рис. 3. (Цветной онлайн) Интерферограммы осцилляций Рамсея: (a) – образец 1 ($N_{\mathrm{As}} = 1.2 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$), средняя мощность $P = 9.5$ мВт, $T^* = 4$ К; (b) – образец 2 ($N_{\mathrm{As}} = 5.2 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$), средняя мощность $P = 200$ мкВт, $T^* = 7$ К. Голубые вставки показывают Фурье преобразование сигнала в указанных областях. Зеленые вставки демонстрируют изменение сигнала ΔV на масштабе 7 пс. T^* – температура холодного столика криостата

перехода. Расчет выполнен в пренебрежении релаксацией в системе. Зависимость представляет собой быстро осциллирующую функцию с частотой перехода/излучения накачки (осцилляции Рамсея).

Таким образом,квадраты соответствующих коэффициентов $a_{1,2}(t)$ пропорциональны населенностям уровней 1 и 2 соответственно. Как упомянуто выше, в данном эксперименте населенность верхнего уровня $2p_0$ определяет населенность континуума зоны проводимости через термоиндуцированные процессы выброса электронов, т.е. представляет собой процесс фототермоионизации. Однако, наряду с резонансным воздействием на среду возможно и нерезонансное ввиду наличия населенности состояний донора при температуре, отличной от нуля.

Сигнал фототока (рис. 2a), детектируемый в случае значительной отстройки от частоты перехода $1s(A_1) \rightarrow 2p_0$ и определяемый конечной населенностью возбужденных состояний как основной, так и остаточной примеси в образце, может служить в

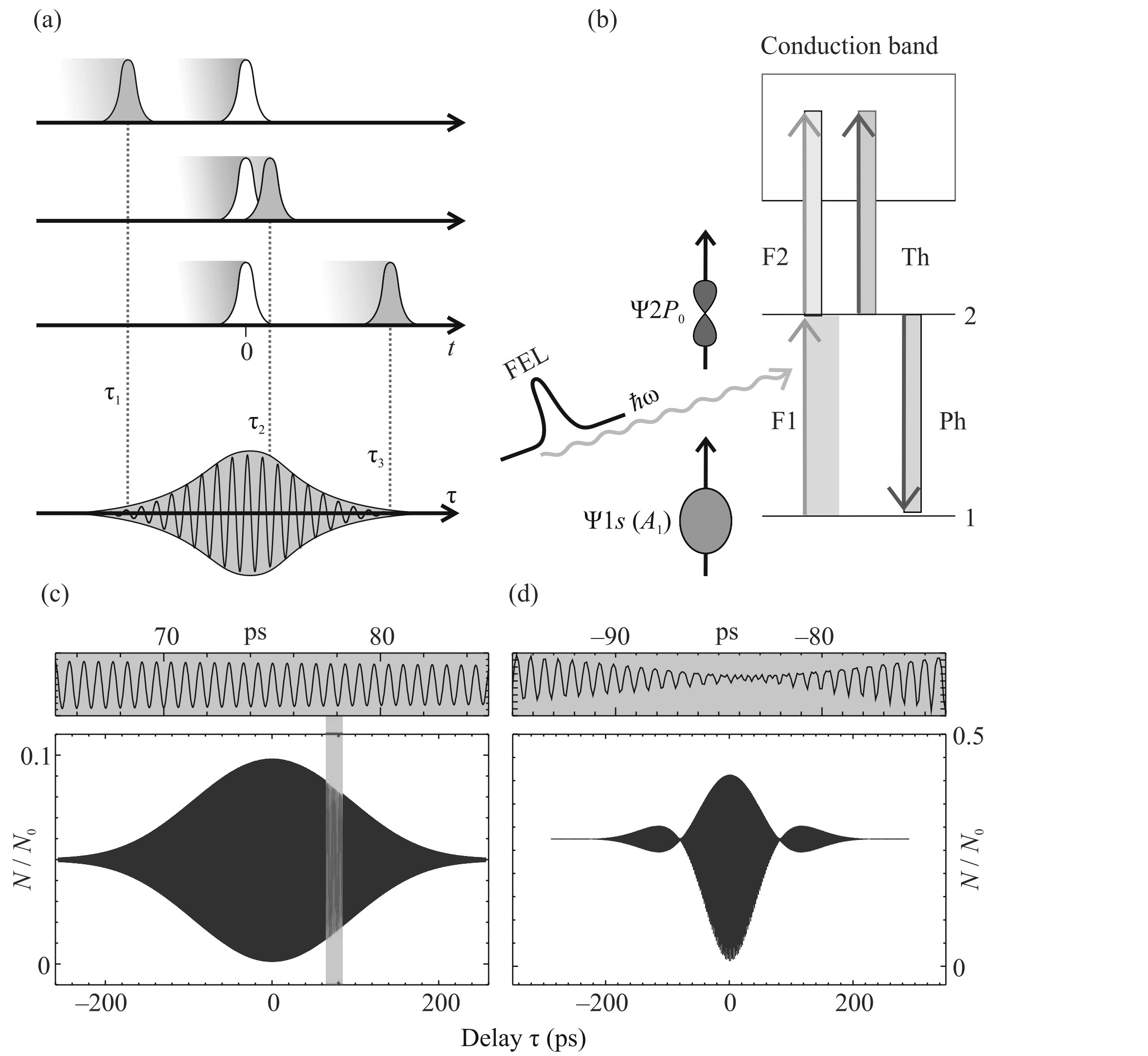


Рис. 4. (Цветной онлайн) Моделирование осцилляций населенностей уровня $2p_0$ при фотовозбуждении на частоте перехода $1s(A_1) \rightarrow 2p_0$ в Ge : As: (a) – последовательности двух оптических импульсов с разной величиной задержки τ; (b) – модель двухуровней системы для примеси As в Ge с указанием основных каналов возбуждения и релаксации (F1,F2 – оптические переходы под действием излучения FEL, Th – безизлучательный переход с участием равновесных фононов, Ph – релаксация на акустических фононах); (c), (d) – рассчитанные населенности состояния $2p_0$ от задержки τ с использованием следующих параметров (N_0 – концентрация легирования): средняя мощность $P = 0.43$ мВт (c), $P = 8.5$ мВт (d); длительность импульсов $t_0 = 100$ пкс; неоднородное уширение $\Delta = 0.02$ мэВ (c), $\Delta = 0.06$ мэВ (e). Зеленые вставки демонстрируют изменения N на масштабе 20 пс

качестве примера автокорреляционной функции импульса ЛСЭ и аппроксимируется функцией Гаусса. Как видно из рис. 2d, e форма огибающей интерферограммы в резонансом случае имеет значительное отклонение от автокорреляционной функции. Таким образом, можно констатировать, что детектируемый сигнал в случае резонансного воздействия представляет собой сумму автокорреляционной функции и более длинного сигнала, который определяется временами существования макроскопической поляризации среды. Данное предположение подтверждается анализом Фурье сигнала интерферограммы. Как следует из рис. 3, длительность осцилляций Рамсея заметно превышает длительность автокорреляционной функции импульса излучения. При этом образец с меньшей концентрацией демонстрирует наличие линии 131 мкм в большем диапазоне времени задержки, вплоть до задержек 300–400 пс, что можно связать с меньшей величиной неоднородного уширения линии перехода. Оценить характерное время спадания амплитуды осцилляций T_2 оказывается затруднительно ввиду сложной формы сигнала, причинами которой являются фактор уширения линии перехода и небольшая отстройка от центра линии поглощения (см., например, рис. 4d). Ранее проведенные эксперименты по измерению времен продольной релаксации T_1 для доноров в германии показали, что для уровня $2p_0$ время жизни оказывается порядка 800 пс, т.е. при уменьшении концентрационного уширения можно надеяться на значительное увеличение времени поперечной релаксации, а значит и существования осцилляций Рамсея. Стоит отметить, что в представленном эксперименте эффект оказался достаточно устойчив к температуре образца, которая несколько отличалась от температуры холодного "столика" и была в районе 20–25 К, что оценивалось путем сравнения вольт-амперных характеристик образцов при охлаждении в жидком гелии и оптическом криостате при различных температурах. Еще более длинные времена релаксации были получены для сурьмы в германии (2 нс) с деформацией [17], что также представляет собой дополнительную возможность, если будет осуществлен переход к гетероструктурам n-типа со встроенной деформацией.

Заключение. Экспериментально показана возможность наблюдения осцилляций Рамсея при возбуждении состояния $2p_0$ донора мышьяка в германии импульсным терагерцовым излучением лазера на свободных электронах при криогенных температурах. Регистрация осцилляций населенности состояния $2p_0$ осуществлялась благодаря наличию термического выброса электронов в зону проводимости,что можно рассматривать как демонстрацию некогерентного считывания когерентного состояния. Используемые в представленной работе образцы с концентрацией доноров $N_0 = 1.2 \times 10^{13}\,\text{см}^{-3}$ позволили наблюдать осцилляции Рамсея вплоть до времен 400 пс, что позволяет надеяться на дальнейшее увеличение времени при использовании образцов с меньшей шириной линии. Анализ экспериментальных данных и проведенные модельные расчеты показывают, что наблюдаемая форма огибающей осцилляций Рамсея зависит от ширины линии, отстройки от резонанса и интенсивности возбуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (# 19-72-20163). Авторы благодарят за участие в работе операторов лазера на свободных электронах NovoFEL. При выполнении экспериментов на ЛСЭ использовалось оборудование Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения.

1. A. K. Ramdas and S. Rodriguez, Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981).
2. M. Fuechsle, J. A. Miwa, S. Mahapatra, H. Ryu, S. Lee, O. Warschkow, L. C. L. Hollenberg, G. Klimeck, and M. Y. Simmons, Nature Nanotech. **7**, 242 (2012).
3. A. M. Stoneham, A. J. Fisher, and P. T. Greenland, J. Phys. Condens. Matter **15**, 447 (2003).
4. L. C. L. Hollenberg, C. J. Wellard, C. I. Pakes, and A. G. Fowler, Phys. Rev. B **69**, 233301 (2004).
5. A. J. Sigillito, R. M. Jock, A. M. Tyryshkin, E. E. Haller, K. M. Itoh, and S. A. Lyon, Phys. Rev. B **94**, 125204 (2016).
6. B. E. Kane, in *Scalable Quantum Computers: Paving the Way to Realization*, ed. by S. L. Braunstein, H.-K. Lo, and P. Kok, Wiley-VCH Verlag Berlin GmbH, Berlin (2000), ch. 17, p. 253.
7. N. F. Ramsey, Phys. Rev. **78**, 695 (1950).
8. L. Essen and J. V. L. Parry, Nature **176**(4476), 280 (1955).
9. K. L. Litvinenko, E. T. Bowyer, P. T. Greenland, N. Stavrias, J. Li, R. Gwilliam, B. J. Villis, G. Matmon, M. L. Y. Pang, B. Redlich, A. F. G. van der Meer, C. R. Pidgeon, G. Aeppli, and B. N. Murdin, Nature **6**, 6549 (2015).
10. Y. Kamiura, J. Broeckx, P. Clauws, and J. Vennik, Solid State Commun. **38**(10), 883 (1981).
11. A. V. Muravjov, R. C. Strijbos, C. J. Fredricksen, H. Weidner, W. Trimble, S. H. Withers, S. G. Pavlov, V. N. Shastin, and R. E. Peale, Appl. Phys. Lett. **73**, 3037 (1998).
12. D. Bachmann, M. Rosch, M. J. Süess, M. Beck, K. Unterrainer, J. Darmo, J. Faist, and G. Scalari, Optica **3**, 1087 (2016).
13. Р. Х. Жукавин, К. А. Ковалевский, Ю. Ю. Чопорова, В. В. Цыпленков, В. В. Герасимов, П. А. Бушуйкин, Б. А. Князев, Н. В. Абросимов, С. Г. Павлов, Х.-В. Хьюберс, В. Н. Шастин, Письма в ЖЭТФ **110**, 677 (2019).
14. N. Q. Vinh, B. Redlich, A. F. G. van der Meer, C. R. Pidgeon, P. T. Greenland, S. A. Lynch, G. Aeppli, and B. N. Murdin, Phys. Rev. X **3**, 011019 (2013).
15. Y. Y. Choporova, V. V. Gerasimov, B. A. Knyazev, S. M. Sergeev, O. A. Shevchenko, R. Kh. Zhukavin, N. V. Abrosimov, K. A. Kovalevsky, V. K. Ovchar, H.-W. Hübers, G. N. Kulipanov, V. N. Shastin, H. Schneider, and N. A. Vinokurov, Physics Procedia **84**, 152 (2016).
16. М. О. Скалли, М. С. Зубайри, *Квантовая оптика*, Физматлит, М. (2003).
17. Р. Х. Жукавин, К. А. Ковалевский, С. М. Сергеев и др. (Collaboration), Письма в ЖЭТФ **106**, 555 (2017).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 3, с. 146 – 150 © 2022 г. 10 августа

Фано резонанс высокого порядка в диэлектрической мезоразмерной сфере из материала с низким показателем преломления

И. В. Минин[*1)], О. В. Минин*[*], С. Джоу*[+2)]

[*] *Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия*

[+] *Jiangsu Key Laboratory of Advanced Manufacturing Technology, Faculty of Mechanical and Material Engineering, Huaiyin Institute of Technology, 223003 Huai'an, China*

Поступила в редакцию 14 июня 2022 г.
После переработки 16 июня 2022 г.
Принята к публикации 16 июня 2022 г.

Представлены результаты численного моделирования на основе теории Ми эффекта суперрезонанса для диэлектрической сферы с низким показателем преломления. Впервые показано, что не только ранее изученные слабодиссипативные мезоразмерные сферы из материала со “средним” (около 1.5) и высоким (более 2) показателем преломления, но и с низким (около 1.3) поддерживают резонанс Фано высокого порядка, связанного с внутренними модами Ми. При этом относительные интенсивности резонансных пиков как для магнитного, так и электрического полей в окрестности полюсов сферы в оптическом диапазоне могут достигать огромных значений порядка 10^6–10^7 для сферы из воды с параметром размера Ми около 70.

DOI: 10.31857/S1234567822150034, EDN: jffuvl

1 Введение. В последнее десятилетие для сферических диэлектрических частиц с размером более длины волны был обнаружен целый ряд новых необычных оптических явлений: фотонный наноджет, оптические нановихри, анапольные состояния, магнитный свет и др. [1–3]. Хотя интерес к частицам таких размеров возник еще более века назад при объяснении необычных оптических эффектов рассеяния света взвесями мелкодисперсной серы [4].

Среди многих интересных эффектов отметим резонансы Фано [5] высокого порядка в диэлектрических мезоразмерных сферах [6, 7]. Как оказалось, в отличие от частиц с радиусом, существенно меньше длины волны излучения (в которых оптические свойства обычно обусловлены, как правило, первыми тремя резонансами Ми [8–10]), в частицах с размером более длины волны наблюдаются резонансы Ми высокого ($l \geqslant 5$) порядка, что приводит к специфическим оптическим явлениям, обусловленными интерференцией широкого спектра всех внутренних мод с одиночной модой внутреннего резонанса высокого порядка. В свою очередь, эти интерференционные эффекты приводят, в частности, к формированию оптических вихрей внутри частицы [11] с характерными размерами существенно меньше дифракционного предела, аналогично рассеянию света на плазмонных наночастицах [12], и к субволновой локализации магнитных полей [6, 13]. Отметим, что резонансное возбуждение внутренних сильно локализованных, в первую очередь магнитных, полей в диэлектрической частице в оптике является нетривиальной задачей, поскольку сильный магнетизм в оптическом диапазоне не может быть достигнут при использовании природных диэлектрических материалов [14].

Ранее в [6, 7] было продемонстрировано, что реализация Фано резонансов высокого порядка, связанных с внутренними модами Ми, возникает при определенных значениях как параметра размера частицы, равного $q = 2\pi a/\lambda$ (a – радиус частицы, λ – длина волны освещающего излучения), так и ее показателя преломления, и могут давать коэффициенты усиления напряженности как магнитного, так и электрического поля порядка $10^5 \dots 10^7$, что может также вызывать новые нелинейные эффекты. Резонансы Фано высокого порядка, для которого коэффициент усиления напряженности поля может достигать указанных выше значений, и названые “суперрезонансами” [6], весьма чувствительны как к параметру размера частицы, так и диссипативным потерям в ее материале. Использование резонансов Фано высокого порядка в диэлектрических мезоразмерных сферах недавно было признано многообещающей стратегией для повышения эффективности генерации сверхсильных магнитных и электрических по-

1) e-mail: prof.minin@gmail.com
2) S. Zhou.

лей и достижения новых функциональных возможностей [15].

Однако, насколько нам известно, до сих пор не было предложено ни одного исследования, демонстрирующего эффект суперрезонанса в диэлектрической сфере с низким показателем преломления, особенно в видимом диапазоне длин волн. Ранее возможность реализации резонансов Фано высокого порядка рассматривались только для сфер со средним (около 1.5) и высоким (около 4) показателем преломления материала. С целью выяснения границ существования данного эффекта для частиц с низким коэффициентом преломления в этом письме мы используем наш более ранний подход [6, 7] для возбуждения Фано резонансов высокого порядка в диэлектрической сферической частице с показателем преломления 1.33. Мы показываем, что в окрестности полюсов такой диэлектрической сферы наблюдается гигантское локальное усиление магнитного и электрического полей. Как и ранее, мы проводим наши исследования на основе строгой теории Ми [16] и выявляем вклад отдельной моды, а также подтверждаем, что в сферической частице с низким коэффициентом преломления возможно возбуждение Фано резонансов крайне высокого ($l = 86$) порядка с существенным усилением (до 10^7) интенсивностей магнитного и электрического полей.

2. Модель. Структура волн внутри и вблизи поверхности сферической частицы может быть точно определена с использованием теории рассеяния Ми с точки зрения свойств материала частицы и окружающей среды и параметра размера этой частицы. В соответствии с теорией Ми [16] мы рассматриваем рассеяние плоской, линейно поляризованной электромагнитной волны на сферической частице с показателем преломления 1.33, характерного для капли воды [17], параметром размера $q \sim 70$ в оптическом диапазоне длин волн ($\lambda = 400\ldots700\,$нм). Не снижая общности задачи предполагается, что сфера находится в вакууме.

3. Результаты моделирования и обсуждения. Эффект определяющего влияния моды внутреннего резонанса высокого порядка на суперрезонанс продемонстрирован на рис. 1 для непоглощающей сферической частицы с показателем преломления $n = 1.33$ и параметром размера $q = 70.60$. Следуя идеологии работы [18], проведенный анализ коэффициентов Ми показал, что амплитуды всех мод достаточно малы, за исключением единственной резонансной TE моды с номером 86, амплитуда которой больше остальных примерно в 25 раз – такое высокое значение коэффициента Ми обусловлено конструктивной интерференцией единственной парциальной волны $l = 86$ внутри частицы. Параметр размера $q = 70.60$ сферы в оптическом диапазоне в данном случае был выбран исходя из того, что для меньших значений этой величины резонансные пики рассеяния имеют существенно меньшую интенсивность. На рисунке 1a, b показаны распределение интенсивностей электрического и магнитного полей, когда при моделировании были учтены все моды $1 < l < 100$. На рисунке 1e, f представлена эта же картина, где учтены все члены, кроме единственного резонансного члена с модой $l = 86$. В этом случае область локализации излучения имеет вид, характерный для фотонной струи [1, 3]. Таким образом, единственный член с единственной модой $l = 86$ в данном случае приводит к увеличению интенсивности рассеянного излучения более чем в 4000 раз.

Как видно из рис. 1a–d, в условиях суперрезонанса поле внутри сферической частицы приобретает форму, характерную для распределения поля одиночной собственной моды, находящейся в резонансе. В теории Ми это соответствует существенному преобладанию только одного члена в ряду внутренних полей (коэффициента c_n Ми [16] в данном случае), ответственного за возбужденную резонансную моду [6, 18]. В результате появляются две горячие точки в верхней и нижней вершинах сферической частицы вдоль направления распространения излучения (рис. 1a, b). При этом в резонансе резко возрастает амплитуда внутреннего магнитного и электрического полей сферической частицы вблизи ее полюсов благодаря конструктивной интерференции одной резонансной моды с широким спектром мод внутри частицы. Кроме того, конфигурация полей, соответствующих модам шепчущей галереи (МШГ) [19] (показано на рис. 1c, d соответственно для электрического и магнитного полей в логарифмическом масштабе) сохраняется, но их интенсивность на 4–5 порядков меньше интенсивности поля в горячих точках. Такая конфигурация поля характерна для резонансов Фано высокого порядка в диэлектрических сферах и не наблюдается в структуре поля, характерного для резонанса МШГ [19]. Отметим, что без учета резонансной моды $l = 86$ распределение интенсивности поля в области локализации излучения (фотонной струе) примерно одинаковы как для магнитного, так и электрического полей (рис. 1e, f) с интенсивностью существенно меньшей, чем в условиях суперрезонанса из-за радиационных потерь энергии возбужденных собственных мод через поверхность диэлектрической частицы. В то же время в условиях суперрезонанса (рис. 1a–d) интенсивность магнитного поля в

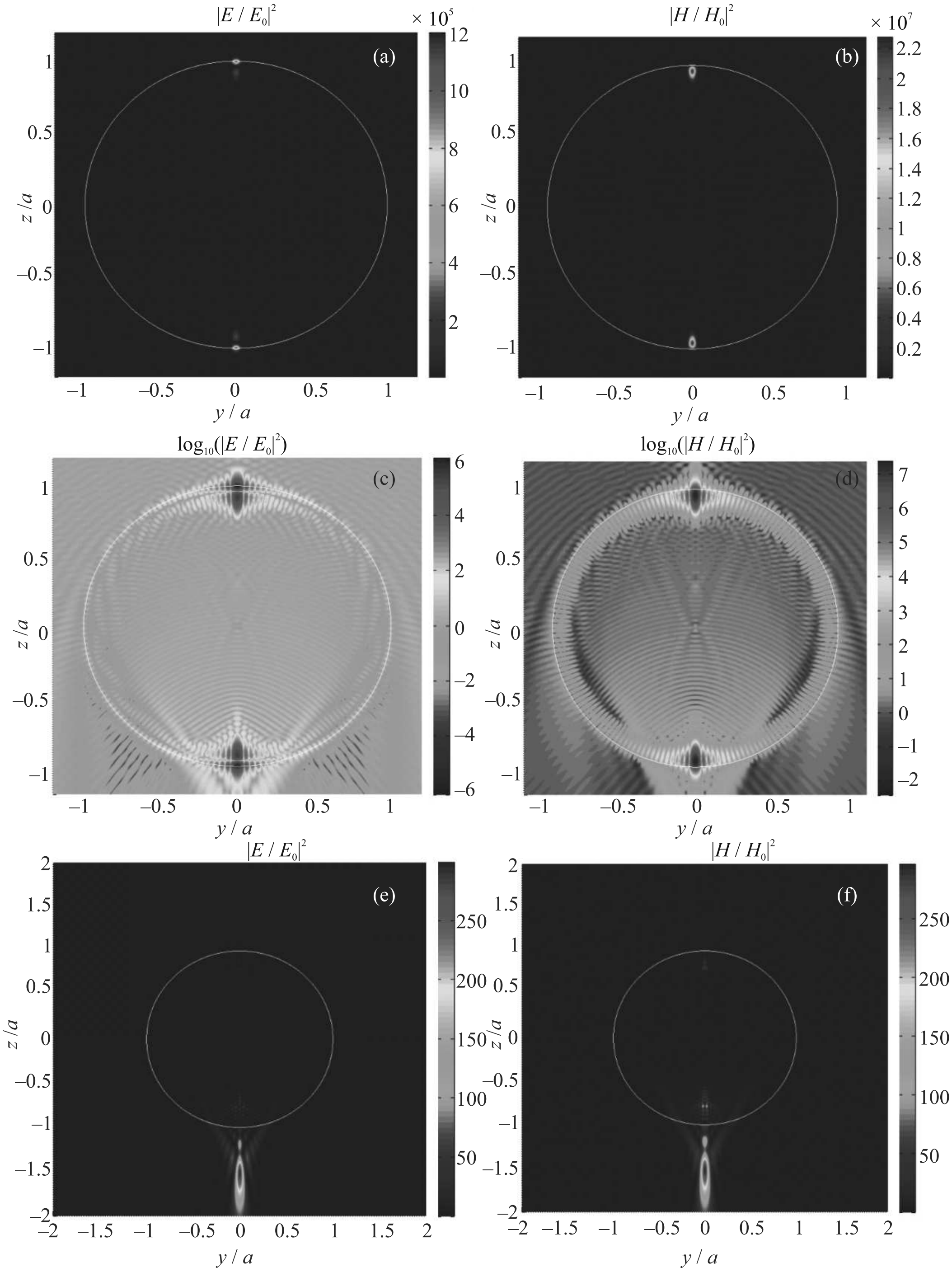


Рис. 1. (Цветной онлайн) Интенсивности электрического (левый столбец) и магнитного (правый столбец) полей в двух плоскостях для сферы. Распределения интенсивностей (a), (b) даны в линейном масштабе, (c), (d) – в логарифмическом. (a)–(d) – Учтены все моды $1 < l < 100$, (e), (f) – все моды кроме резонансной моды $l = 86$. Заметим, что масштаб картинок (e), (f) отличается от масштаба картинок (a)–(d), чтобы продемонстрировать область фокусировки без резонансной моды. Излучение падает сверху вниз

рассматриваемом случае на порядок превышает интенсивность электрического поля.

На рисунке 2 показана структура соответствующего Фано резонанса. Как видно, все резонансные линии (для E и H полей) достаточно узкие, а асимметричная форма резонансных линий характерна для резонанса Фано [5, 12, 20]. Спектральная узость собственных возбуждений частицы и соответственно узость излучаемых резонансных полос является одним из определяющих факторов. Из рисунка 2а

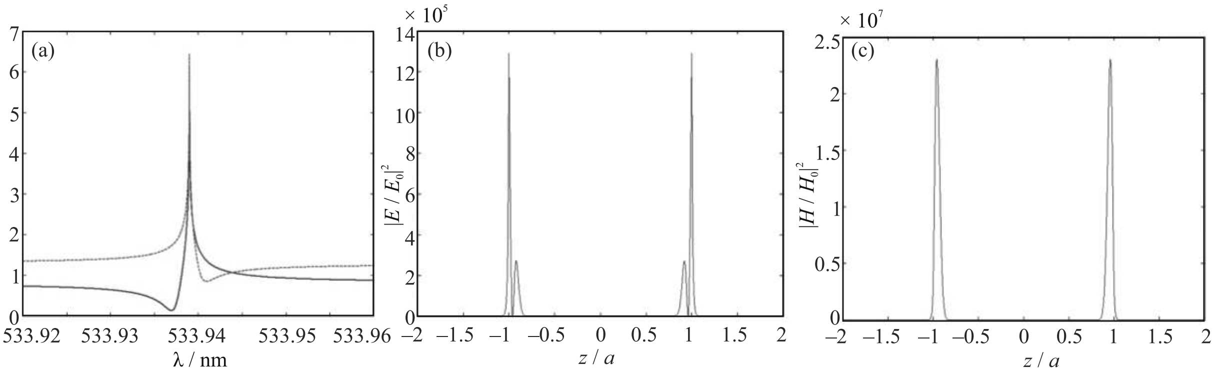


Рис. 2. (Цветной онлайн) Структура Фано резонанса (a) на $\lambda = 533.939$ нм для частицы с параметром размера $q = 70.60$. Синия линия – интенсивность электрического поля, красная – магнитного (в логарифмическом масштабе). Пики интенсивностей электрического (b) и магнитного (c) полей. Соответствующие максимальные значения равны $1.287 \cdot 10^6$ и $2.302 \cdot 10^7$. Распределения (b), (c) построены вдоль диаметра сферы в линейном масштабе

(показан в логарифмической шкале) следует, что в рассматриваемых условиях добротность сферической частицы составляет порядка $Q \sim 6 \cdot 10^8$ на резонансной длине волны $\lambda = 533.939$ нм. Ширина линий для интенсивностей электрическиго и магнитного полей на полувысоте, и соответственно, добротности примерно одинаковы.

Из рисунка 2a также отчетливо видно, что асимметрия интенсивностей резонансов для магнитного и электрического полей зеркальна. Более того, учитывая, что решающую роль в возникновении резонансов Фано играют магнитные дипольные резонансы изолированных мезоразмерных диэлектрических частиц [6, 7], то возбужденная на длине волны магнитного резонанса магнитная дипольная мода диэлектрической частицы может быть более сильной, чем отклик электрического диполя, и тем самым вносить основной вклад в эффективность рассеяния (см. рис. 2b, c). В данном случае интенсивность магнитного пика примерно на порядок больше, чем электрического.

На рисунке 3 показана строгая корреляция резонансного значения параметра размера сферы и резонансной моды от показателя преломления ее материала при фиксированном уровне интенсивности поля порядка 10^6–10^7. При этом учитывались результаты работ [6, 7] для частиц с более высоким показателем преломления.

Как и ожидалось, эти результаты подтверждают, что для наблюдения эффекта суперрезонанса, уменьшение показателя преломления сферической частицы приводит как к увеличению ее параметра размера, так и номера резонансной моды.

4. Заключение. Возбуждение резонансов Фано высокого порядка является нетривиальной задачей,

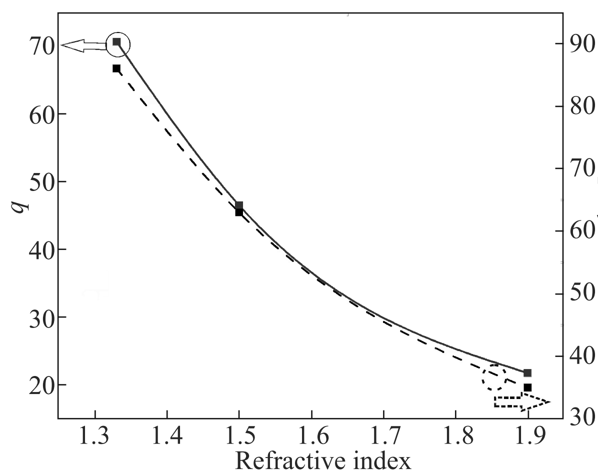


Рис. 3. Зависимость параметра размера q диэлектрической сферы и резонансной моды от показателя преломления материала частицы в области генерации максимальных магнитных и электрических полей порядка 10^6–10^7

поскольку требуется прецизионная подгонка параметра размера сферы. Мы показали, что рассеяние света мезоразмерной диэлектрической сферой с малыми потерями и низким показателем преломления позволяет повторить оптические эффекты резонанса Фано высокого порядка, обнаруженные ранее для сфер с высоким и средним показателем преломления. Так, для частицы с показателем преломления 1.33 и параметром размера $q = 70.60$ (что на длине волны около $\lambda = 534$ нм соответствует диаметру сферы около 12 микрон) обеспечивается добротность порядка $Q \sim 6 \cdot 10^8$, а резонансная мода имеет экстремально высокий номер $l = 86$. При этом возможна генерация электрического и магнитного полей с интенсивностями в полюсах сферы около 10^6 и 10^7, соответственно. Рассмотренные эффекты хорошо подходят для диэлектрической фотоники следующего поколения, мезотроники [15] и расширяют палитру средних и высоких показателей преломления. Кроме того, возбуждение Фано резонансов высокого порядка позволяет повысить чувствительность резонансных мезоразмерных диэлектрических сферических структур, в материалах которых эффект диссипации может быть небольшим [21].

Работа выполнена в рамках Программы развития Томского политехнического университета и Программы естественнонаучных исследований Хуайань (# HAB202153).

1. B. S. Luk'yanchuk, R. Paniagua-Domınguez, I. V. Minin, O. V. Minin, and Z. Wang, Opt. Mat. Express **7**, 1820 (2017).
2. B. S. Luk'yanchuk, A. Bekirov, Z. Wang, I. V. Minin, O. V. Minin, and A. Fedyanin, Physics of Wave Phenomena **30**(4), 217 (2022).
3. O. V. Minin and I. V. Minin, Photonics **8**(12), 591 (2021).
4. B. Keen and A. Porter, Roy. Soc. Proc. A **89** 370 (1913).
5. X. Kong and G. Xiao, J. Opt. Soc. Am. A **33**, 707 (2016).
6. Z. Wang, B. Luk'yanchuk, L. Yue, B. Yan, J. Monks, R. Dhama, O. V. Minin, I. V. Minin, S. Huang, and A. Fedyanin, Sci. Rep. **9**, 20293 (2019).
7. L. Yue, Z. Wang, B. Yan, J. Monks, Y. Joya, R. Dhama, O. V. Minin, and I. V. Minin, Ann. Phys. (Berlin) **532**, 2000373 (2020).
8. A. Kuznetsov, A. Miroshnichenko, M. Brongersma, Y. Kivshar, and B. Luk'yanchuk, Science **354**, 6314, aag2472 (2016).
9. S. Kruk and Y. Kivshar, ACS Photonics **4**, 2638 (2017).
10. N. Bonod and Y. Kivshar, C. R. Physique **21**(4-5), 425 (2020).
11. X. Cai, J. Wang, M. Strain, B. Johnson-Morris, J. Zhu, M. Sorel, J. L. O'Brien, M. Thompson, and S. Yu, Science **338**, 363 (2012).
12. B. S. Luk'yanchuk, A. Miroshnichenko, and Y. S. Kivshar, J. Opt. **15**, 073001 (2013).
13. L. Yue, B. Yan, J. Monks, R. Dhama, C. Jiang, O. V. Minin, I. V. Minin, and Z. Wang, Sci. Rep. **9**, 20224 (2019).
14. W. Cai, U. Chettiar, H. Yuan, V. de Silva, A. Kildishev, V. Drachev, and V. Shalaev, Opt. Express **15**, 3333 (2007).
15. I. V. Minin, O. V. Minin, and B. S. Luk'yanchuk, Proc. SPIE 12152, Mesophotonics: Physics and Systems at Mesoscale, 121520D (24 May 2022), **12152**, 121520D-1 (2022); doi: 10.1117/12.2634133.
16. C. Bohren and D. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, WILEY-VCH Verlag, N.Y. (1998).
17. G. Hale and M. Querry, Appl. Opt. **12**, 555 (1973).
18. T. Hoang, Y. Duan, X. Chen, and G. Barbastathis, Opt. Express **23**(9), 12337 (2015).
19. A. Chiasera, Y. Dumeige, P. Feron, M. Ferrari, Y. Jestin, G. Conti, S. Pelli, S. Soria, and G. Righini, Laser Photonics Rev. **4**(3), 457 (2010).
20. R. Colom, R. Mcphedran, B. Stout, and N. Bonod, J. Opt. Soc. Am. B **36**, 2052 (2019).
21. A. Rocha, J. Silva, S. Lima, L. Nunes, and L. Andrade, Appl. Opt. **55**, 6639 (2016).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 3, с. 151 – 158

Сверхизлучение протяженной резонансной среды, возбуждаемой полуцикловыми аттосекундными импульсами

А. В. Пахомов[+1)], *М. В. Архипов*[+1)], *Н. Н. Розанов*[+*1)], *Р. М. Архипов*[+*1)]

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

[*]*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 12 июня 2022 г.
После переработки 19 июня 2022 г.
Принята к публикации 19 июня 2022 г.

В данной работе продемонстрирован необычный характер сверхизлучения в протяженном слое двухуровневой среды при воздействии на нее пары униполярных импульсов. Показано, что вследствие интерференции излученных резонансной средой вторичных волн отклик такого слоя в отражении представляет собой пару полуцикловых униполярных импульсов разной полярности, следующих с временной задержкой, прямо пропорциональной толщине слоя. Источником такого сверхизлучения является монополярный полупериодный импульс остановленной поляризации, создаваемый первым возбуждающим импульсом и выключаемый вторым возбуждающим импульсом. Обнаруженный эффект может использоваться для управления формой предельно коротких импульсов в резонансных средах.

DOI: 10.31857/S1234567822150046, EDN: jfkoec

Введение. В последние годы в связи с достигнутым прогрессом в получении предельно коротких импульсов аттосекундной длительности [1, 2] все более актуальными становятся исследования по взаимодействию таких импульсов с различными средами [3–6].В отличие от длинных многоцикловых импульсов, для предельно коротких импульсов на передний план выходят другие физические величины. Одной из них является электрическая площадь импульса электромагнитного излучения, которая определяется выражением [7]:

$$S_E = \int_{-\infty}^{+\infty} E(t)dt, \tag{1}$$

где $E(t)$ – напряженность электрического поля в заданной точке пространства, t – время. Отметим, что впервые величина, определенная аналогично выражению (1), использовалась в работах [8–10] при описании распространения предельно коротких импульсов и их воздействия на многоуровневые квантовые системы. В случае обычных многоцикловых импульсов напряженность электрического поля многократно меняет знак в течение длительности импульса, так что электрическая площадь (1) таких импульсов равна нулю. Однако для субцикловых импульсов возможно получение импульсов с отличной от нуля электрической площадью, которые называются униполярными. В последние годы было предложено множество способов получения таких униполярных импульсов в терагерцовом и оптическом диапазонах, см. обзор [11] и работы [12–20]. Экспериментально униполярные импульсы были получены совсем недавно в терагерцовом диапазоне частот [21, 22]. Стоит также отметить, что электрическая площадь импульса обладает уникальным свойством сохранения при одномерном распространении [7].

Уникальной особенностью униполярных импульсов является их способность быстро и эффективно передать импульс движения квантовой системе вследствие постоянства знака электрического поля в импульсе. При условии, что длительность униполярного импульса много меньше характерного времени движения волнового пакета в квантовой системе, воздействие таких импульсов будет полностью определяться величиной электрической площади импульса [11]. Вследствие этого, униполярные импульсы могут применяться для более быстрого и эффективного управления волновыми пакетами в веществе, чем при использовании многоцикловых биполярных импульсов, а также ускорения зарядов и др. приложений, см. обзор [11] и цитируемую литературу. Также при описании взаимодействия униполярных импульсов с квантовыми системами становятся неприменимы стандартные представления, применимые при взаимодействии длинных многоцикловых импульсов – физика взаимодействия становит-

[1)]e-mail: antpakhom@gmail.com; m.arkhipov@spbu.ru; nnrosanov@mail.ru; arkhipovrostislav@gmail.com

ся иной, если длительность импульса короче орбитального периода электрона в основном состоянии [11]. Поэтому, полученные результаты обуславливают дальнейший интерес к изучению эффектов, связанных со взаимодействием униполярных импульсов с различными оптическими средами.

В данной работе теоретически исследуется возбуждение протяженного слоя двухуровневой среды парой униполярных субцикловых импульсов. В частности, мы рассматриваем случай, когда временная задержка между возбуждающими импульсами в точности равна половине периода резонансных колебаний двухуровневой среды. При таких условиях второй униполярный импульс останавливает колебания наведенной в среде поляризации после первого импульса. В работе показано, что вследствие явления сверхизлучения резонансных центров в протяженном слое среды отраженное поле будет состоять из двух униполярных импульсов разной полярности, следующих со значительной временной задержкой между ними. Полученный эффект может представлять интерес для управления формой субцикловых импульсов в резонансных оптических средах.

Излучение импульса остановленной поляризации. Ранее была предложена и активно изучалась возможность оптического управления наведённой поляризацией в нелинейной резонансной среде для получения униполярных и одноцикловых импульсов, см. обзоры [11, 23] и цитируемую литературу. Основная идея состояла в том, что пара следующих друг за другом ультракоротких возбуждающих импульсов воздействует на резонансные атомы таким образом, что первый из импульсов вызывает колебания наведенного дипольного момента атома на его резонансной частоте, а второй импульс – останавливает эти колебания. Для реализации такой динамики падающие импульсы должны удовлетворять двум условиям. Во-первых, длительность каждого из импульсов должна быть много меньше периода резонансных колебаний, чтобы воздействие на резонансные атомы можно было приблизительно считать мгновенным. Во-вторых, задержка между импульсами должна быть в точности равна половине периода резонансных колебаний, так как лишь в этом случае второй импульс полностью останавливает колебания наведенного дипольного момента. В результате излучаемое поле в дальней зоне имеет вид квазиуниполярного импульса.

Отдельный интерес представляет подобное излучение не от единичного резонансного центра, а от целого набора таких излучателей в силу возможности наблюдения эффектов коллективного излучения. Действительно, в случае подобного когерентного управления излучением множества резонансных атомов может наблюдаться явление сверхизлучения, когда происходит конструктивная интерференция излучений многих синфазно осциллирующих диполей [24–28]. В зависимости от геометрии рассматриваемой задачи в результате могут возникать более сложные формы оптического отклика среды [23].

Один из частных случаев такого коллективного излучения остановленной поляризации был исследован ранее, где рассматривалась генерация одноциклового импульса ТГц или оптического излучения от тонкого слоя нелинейной резонансной среды в одномерном приближении, см. обзор [23] и цитируемую литературу. Как было показано, интерференция откликов отдельных излучателей приводит к получению одноциклового отраженного импульса в ближнем поле. При этом слой среды предполагался оптически тонким, что обеспечивало сфазированное излучение от всего слоя при использовании возбуждающих импульсов с плоским волновым фронтом. Случай же оптически протяженной среды ранее не рассматривался.

Во всех рассмотренных работах в качестве рабочей среды использовалась модельная среда из двух нелинейно-связанных осцилляторов с сильно различающимися частотами. Практическим примером подобной среды служит рамановская, или комбинационно-активная среда, для описания которой часто используется модель нелинейно-связанных электронного и ядерного осцилляторов [29]. В то же время очевидный интерес состоит в попытке распространения полученных результатов на другие классические модели, к примеру, стандартных резонансных сред с несколькими уровнями.

В данной работе мы рассматриваем излучение импульса остановленной поляризации, во-первых, в двухуровневой системе, а во-вторых, для случая оптически протяженной среды. Двухуровневая среда является наиболее широко распространенной моделью резонансной среды, которая использовалась для теоретического изучения множества оптических явлений [30], в том числе связанных с воздействием предельно коротких импульсов на вещество [31]. Большая же толщина слоя по сравнению с длиной волны резонансного перехода может позволить получить новые эффекты, связанные с интерференцией вторичных волн отдельных излучающих центров. В частности, можно ожидать, что проявление явления сверхизлучения в такой геометрии приведет к усилению излучаемого резонансными центрами импульса остановленной поляризации и получению более сложных профилей оптического отклика слоя.

Стоит остановиться на том, в какой степени двухуровневое приближение может быть использовано для описания взаимодействия ультракоротких, в частности субцикловых, импульсов с резонансной средой. Так, во многих атомарных газах (гелий, атомарный водород и др.) высоко возбужденные уровни лежат относительно близко к первому возбужденному, так что расстояние между уровнями с ростом главного квантового числа быстро уменьшается. В результате вклад таких высоко возбужденных уровней в колебания поляризации среды будет заключаться лишь в наличии заднего фронта малой амплитуды, которым можно в первом приближении пренебречь [23]. Помимо этого, результаты численного решения временного уравнения Шредингера показали, что вероятность ионизации атома ультракороткими импульсами в ряде случаев может быть крайне мала (порядка 10^{-11}), даже несмотря на то, что энергия фотонов больше потенциала ионизации [23]. Лучше всего двухуровневое приближение будет описывать отклик среды, если два рассматриваемых квантовых уровня удалены от остальных уровней, не затрагиваемых спектром возбуждающих импульсов. В таком случае частота рассматриваемого резонансного перехода лежит в терагерцовом, дальнем или среднем инфракрасном диапазоне. Выполнение перечисленных условий в конечном итоге обосновывает возможность применения двухуровневого приближения.

Постановка задачи. Рассмотрим протяженный слой двухуровневой резонансной среды, возбуждаемый парой униполярных импульсов с плоским волновым фронтом, падающих на слой перпендикулярно (см. рис. 1). Импульсы линейно поляризованы в направлении, перпендикулярном направлению распространения. В такой постановке задачи возможно перейти от трехмерной геометрии к одномерной. Толщина слоя предполагается много большей, чем длина волны, соответствующая основному резонансному переходу в среде. Важно отметить, что сведение задачи к одномерной с практической точки зрения оправдано лишь в тех случаях, когда характерные поперечные размеры рассматриваемой системы существенно превосходят ее продольные размеры, а точнее говоря, если расстояние от слоя резонансной среды до детектора существенно меньше дифракционной длины. Другой подходящей ситуацией является распространение импульсов в коаксиальных волноводах, где ранее была продемонстрирована возможность эффективно одномерного распространения униполярных импульсов [11].

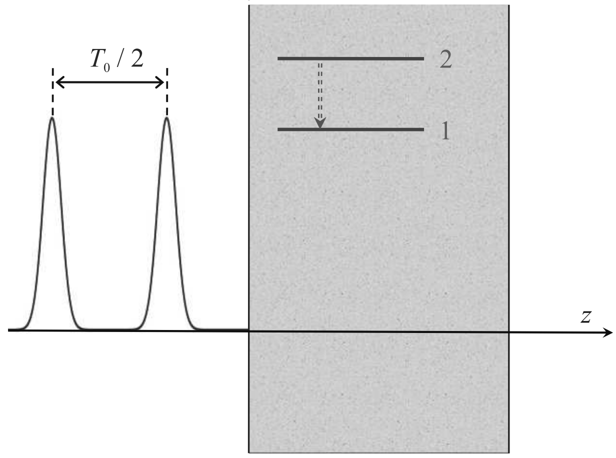


Рис. 1. (Цветной онлайн) Общая схема рассматриваемой системы: два возбуждающих униполярных импульса, следующих с временной задержкой $T_0/2$ между ними, падают на протяженный слой двухуровневой среды

Временная задержка между обоими возбуждающими униполярными импульсами выбирается равной полупериоду основного резонансного перехода в среде $T_0/2$. В таком случае, такая пара импульсов может эффективно управлять откликом среды, а именно первый импульс возбуждает осцилляции поляризации среды на резонансной частоте, тогда как второй импульс – останавливает эти колебания [11, 23]. При этом длительность возбуждающих импульсов должна быть много меньше периода резонансного перехода среды. Стоит отметить, что результат воздействия на резонансную среду не изменится, если строго униполярные импульсы заменить на более простые в получении квази-униполярные, содержащие длинный хвост малой амплитуды и противоположной полярности и потому имеющие нулевую электрическую площадь (1) [32].

Для описания отклика двухуровневой среды будем использовать стандартные уравнения для матрицы плотности резонансной среды [33]:

$$\frac{\partial \rho_{12}(z,t)}{\partial t} = = -\frac{\rho_{12}(z,t)}{T_2} + i\omega_0\rho_{12}(z,t) - \frac{i}{\hbar}d_{12}E(z,t)n(z,t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial n(z,t)}{\partial t} = = -\frac{n(z,t)-n_0(z)}{T_1} + \frac{4}{\hbar}d_{12}E(z,t)\mathrm{Im}\,\rho_{12}(z,t), \quad (3)$$

$$P(z,t) = 2N_0 d_{12}\mathrm{Re}\,\rho_{12}, \quad (4)$$

где P – поляризация среды, ρ_{12} – недиагональный элемент матрицы плотности двухуровневой среды,

$n = \rho_{11} - \rho_{22}$ – разность населенностей уровней двухуровневой среды, N_0 – объемная концентрация активных центров, d_{12} – дипольный момент рабочего перехода в среде, E – напряженность электрического поля, ω_0 – частота резонансного перехода среды ($\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ – длина волны резонансного перехода), n_0 – равновесная разность заселенностей двух рабочих уровней в отсутствие электрического поля ($n_0 = 1$ для поглощающей среды), T_1 – время релаксации населенности верхнего уровня, T_2 – время релаксации поляризации среды, c – скорость света в вакууме, $\hbar$ – приведенная постоянная Планка. Уравнения для среды должны быть дополнены одномерным волновым уравнением для электрического поля:

$$\frac{\partial E(z,t)}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E(z,t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial^2 P(z,t)}{\partial t^2}. \qquad (5)$$

Совместное решение системы уравнений (2)–(5), дополненных соответствующими начальными и граничными условиями, позволяет рассчитать как отраженное от слоя поле, так и прошедший через среду импульс.

Результаты моделирования. Уравнения (2)–(5) решались численно методом конечных разностей во времени (FDTD). Возбуждающие униполярные импульсы были взяты в форме Гауссовых импульсов:

$$E(t) = E_0 e^{-t^2/\tau_p^2} + E_0 e^{-(t-T_0/2)^2/\tau_p^2},$$

с амплитудой E_0 и длительностью τ_p. На рисунке 2 показан пример полученного в отражении от слоя импульса. Как видно из рис. 2, отраженное поле состоит из двух униполярных полуцикловых импульсов противоположной полярности, разделенных по времени. При этом в промежутке между полуцикловыми импульсами электрическое поле близко к нулю. Параметры среды, использовавшиеся при моделировании, отвечают газовым средам. Основное значение здесь играет сравнительно низкая объемная концентрация активных центров, которая легко может быть реализована в газовых средах, а также большие значения времен релаксации T_1, T_2 по сравнению с периодом резонансного перехода в среде, что также обычно имеет место в газовых средах. В то же время точные значения длины волны или периода резонансного перехода не столь существенны, так как важна лишь малость длительности возбуждающих импульсов по сравнению с периодом резонансного перехода.

Характер полученного отклика среды имеет ясное физическое объяснение. Поле, излучаемое каждым отдельным двухуровневым центром в слое, как легко показать, представляет собой одноцикловый импульс, т.е. один период синусоиды. Этот результат

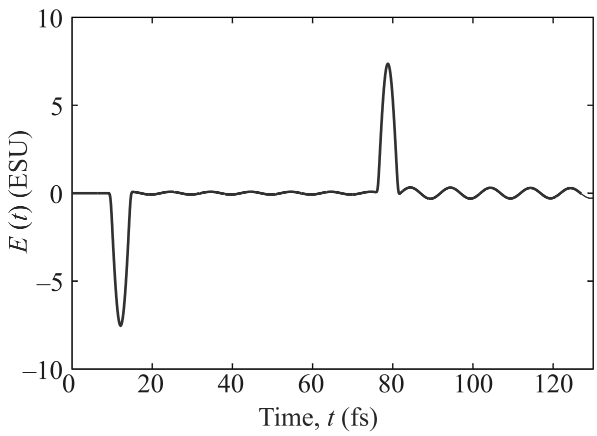


Рис. 2. (Цветной онлайн) Пример поля, полученного в отражении от протяженного слоя двухуровневой среды. Параметры системы: длина волны резонансного перехода $\lambda_0 = 3$ мкм ($T_0 = 10$ фс), дипольный момент $d_{12} = 5$ Д, концентрация активных центров $N_0 = 10^{18}$ см$^{-3}$, толщина слоя среды 10 мкм, времена релаксации $T_1 = T_2 = 1$ нс, возбуждающие униполярные импульсы имели Гауссову форму с длительностью $\tau_p = 300$ ас и амплитудой электрического поля $E_0 = 10^5$ ед. СГС

напрямую следует из выбора временной задержки между возбуждающими униполярными импульсами равной полупериоду рабочего резонансного перехода $T_0/2$. В результате первый из импульсов возбуждает среду, инициируя колебания наведенной поляризации на частоте ω_0, тогда как второй импульс за счет выбора временной задержки останавливает эти колебания. Этот результат становится особенно наглядно виден, если построить мгновенное распределение поляризации среды $P(z,t)$ внутри слоя в некоторый момент времени, когда оба возбуждающих импульса находятся внутри среды, см. рис. 3. Как хорошо видно, распределение поляризации представляет собой полуволну, зажатую между двумя возбуждающими униполярными импульсами и распространяющуюся вместе с ними. Слабые осцилляции поляризации, остающиеся в среде после прохождения импульсов, возникают вследствие неполной остановки осцилляций поляризации среды вторым униполярным импульсом из-за его постепенной трансформации в процессе распространения в слое. При этом поле, излучаемое резонансными центрами среды, в рассматриваемой одномерной геометрии пропорционально не самой поляризации среды, а ее первой производной по времени [11, 23]:

$$E_{\text{rad}}(z,t) = -\frac{2\pi}{c}\int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial P}{\partial t}\left(z', t - \frac{|z-z'|}{c}\right) dz', \qquad (6)$$

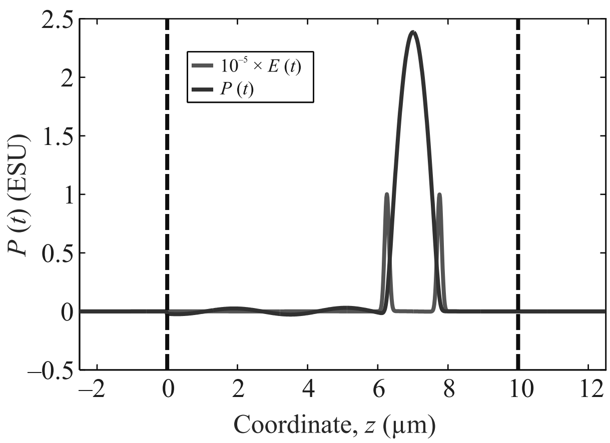


Рис. 3. (Цветной онлайн) Мгновенное распределение поляризации резонансной среды внутри слоя в некоторый момент времени (синяя линия), а также соответствующее мгновенное распределение электрического поля (красная линия). Вертикальные черные штриховые линии обозначают границы слоя резонансной среды. Параметры системы те же, что и на рис. 2

где пространственное интегрирование осуществляется по всей толщине слоя. За исключением некоторых отклонений в моменты начала и остановки колебаний поляризации, производная по времени от поляризации среды, показанной на рис. 3, представляет собой как раз один период синусоиды. Таким образом, каждый резонансный двухуровневый центр внутри слоя излучает в результате воздействия такой парой униполярных импульсов одноцикловый импульс на резонансной частоте среды.

Рассмотрим теперь, как происходит интерференция волн, излученных отдельными центрами в слое. На переднем фронте отраженного от слоя поля будет иметь место интерференция полуволн одного знака из одноцикловых импульсов от отдельных атомов, расположенных вблизи левой границы слоя на рис. 1. В результате мы получаем конструктивную интерференцию таких полуволн от отдельных центров и интенсивный униполярный полуцикловый импульс на переднем фронте отраженного от слоя сигнала. Еще один аналогичный униполярный полуцикловый импульс, но противоположной полярности, схожим образом возникнет на заднем фронте вследствие конструктивной интерференции полуволн другого знака из одноцикловых импульсов от отдельных атомов, расположенных вблизи правой границы слоя на рис. 1. В промежутке же между этими двумя униполярными всплесками полуволны разных знаков поля от разных резонансных центров в объеме слоя будут компенсировать друг друга, что приведет к полю, близкому к нулю. Таким образом, отраженное от слоя поле состоит из двух разделенных во времени униполярных полуцикловых импульсов разного знака поля, в промежутке между которыми величина поля близка к нулю, что соответствует рис. 2.

Можно привести и иную физическую интерпретацию вида отраженного сигнала на рис. 2, исходя из пространственного распределения наведенной поляризации среды на рис. 3 и уравнения (6) для излучаемого средой поля. После того, как первый из возбуждающих униполярных импульсов входит в среду, в слое начинает формироваться монополярный полупериодный импульс остановленной поляризации, показанный на рис. 3. При этом на переднем фронте этого импульса остановленной поляризации производная поляризации по времени положительна, так что согласно уравнению (6) слой среды начинает излучать униполярный всплеск с отрицательным знаком поля, который соответствует переднему фронту отраженного сигнала на рис. 2. К тому моменту, когда в слой среды входит второй из возбуждающих униполярных импульсов, в слое уже сформировался монополярный полупериодный импульс остановленной поляризации, при этом на заднем фронте импульса остановленной поляризации производная поляризации по времени отрицательна, в результате интеграл по толщине слоя в (6) становится равным нулю. В отражении при этом образуется униполярный полуцикловый импульс с отрицательным знаком поля. В дальнейшем, пока оба возбуждающих униполярных импульса распространяются внутри слоя, распределение поляризации в слое имеет вид, как показано на рис. 3. В этом промежутке времени излучение от тех частей слоя, где наведенная поляризация растет со временем, полностью компенсируется излучением от тех частей, где наведенная поляризация со временем уменьшается. В результате интеграл в уравнении (6), а значит и поле в отраженном сигнале, обращается в ноль. Наконец, после того, как первый возбуждающий импульс покидает среду, монополярный полупериодный импульс остановленной поляризации также начинает исчезать. При этом превалировать будет задний фронт импульса остановленной поляризации с отрицательной производной поляризации по времени, так что в отраженном поле согласно (6) аналогичным образом появляется униполярный полуцикловый всплеск с положительным знаком поля.

Приведенные качественные соображения могут быть дополнены более строгими теоретическими выкладками. Будем считать,что каждый отдельный двухуровневый центр в слое излучает одноцикловый импульс:

$$E(z,t) = A_0 \sin\omega_0 t, \quad \frac{z}{c} \le t \le \frac{z}{c} + T_0, \tag{7}$$

где амплитуду излучаемого импульса A_0 для простоты будем считать постоянной по всему объему слоя, что допустимо при достаточно малой концентрации резонансных центров. Если считать, что левая граница слоя соответствует $z = 0$, как показано на рис. 3, то резонансный центр, расположенный в точке с координатой z, начинает испускать одноцикловый импульс (7) в момент времени z/c, когда его достигает первый возбуждающий импульс, и прекращает спустя один полный период колебаний на резонансной частоте, т.е. в момент времени $z/c + T_0$. Полное же излучение от всего слоя среды выражается в таком случае интегралом:

$$E(t) = \int\limits_0^L N_0 E(z,t) dz. \tag{8}$$

Здесь подразумевается,что отраженное поле $E(t)$ измеряется непосредственно вблизи левой границы слоя на рис. 1, начиная с момента времени, когда первый из возбуждающих импульсов входит в среду. В частности, при $0 \le t \le T_0$ интеграл (8) приводится к следующему виду:

$$E(t) = \int\limits_0^{ct/2} N_0 A_0 \sin\omega_0 \left(t - \frac{2z}{c}\right) dz =$$

$$= N_0 A_0 \frac{c}{2\omega_0}(1 - \cos\omega_0 t),$$

т.е. мы получаем униполярный полуцикловый импульс на переднем фронте отраженного от слоя сигнала. Аналогичным образом показывается, что точно такой же униполярный полуцикловый импульс, но противоположной полярности, образуется на заднем фронте отраженного от слоя сигнала. Наконец, рассмотрим поле в центральной части отраженного сигнала, а точнее при $T_0 \le t \le 2L/c$. В этом случае выражение (8) дает:

$$E(t) = \int\limits_{c(t-T_0)/2}^{ct/2} N_0 A_0 \sin\omega_0 \left(t - \frac{2z}{c}\right) dz = 0,$$

т.е.излучения отдельных резонансных центров в объеме слоя полностью компенсируют друг друга, что обуславливает нулевое значение поля.

Строго говоря, нулевое поле в центральной части отраженного сигнала получается только в пренебрежении изменением возбуждающих импульсов по мере их распространения внутри слоя, т.е. если все двухуровневые центры возбуждаются в точности одними и теми же импульсами. Такое приближение, однако, допустимо, только если излучаемое поле намного слабее поля возбуждающих импульсов, что может быть достигнуто уменьшением концентрации резонансных центров в объеме слоя. Изменение же возбуждающих импульсов при распространении внутри слоя приводит, с одной стороны, к ненулевому полю в центральной части отраженного сигнала, а с другой стороны – к наличию слабо затухающих осцилляций сразу за вторым полуцикловым всплеском вследствие неполной остановки осцилляций наведенной поляризации среды, как видно на рис. 2.

Описанный характер конструктивной интерференции излучаемых вторичных волн позволяет говорить о проявлении эффекта сверхизлучения в рассматриваемой системе. Стоит отметить, что сам термин "сверхизлучение" в наше время трактуется в достаточно широком смысле и используется для описания явлений разной природы, принципиальное значение для которых играет сфазированное когерентное излучение ансамбля диполей-осцилляторов [28]. В нашем случае излучения отдельных резонансных центров в среде в приближении достаточно низкой объемной концентрации центров будут когерентны между собой, что позволяет нам говорить именно о явлении сверхизлучения в подобной широкой трактовке. Амплитуда электрического поля генерируемых униполярных импульсов в таком случае будет пропорциональна объемной концентрации резонансных центров. При этом, в отличие от изначально описанного Дике [24] механизма коллективного спонтанного излучения сосредоточенного ансамбля дипольных осцилляторов, где длительность излучения обратно пропорциональна числу возбужденных диполей, в нашей системе длительность получаемых униполярных импульсов от объемной концентрации резонансных центров практически не зависит. Важно также, чтобы характерное время релаксации когерентности в двухуровневой среде T_2 (время поперечной релаксации) было много больше периода резонансных колебаний T_0, так, чтобы проявляющиеся в среде механизмы дефазировки отдельных излучателей не оказывали существенного влияния на отклик слоя среды.

Продемонстрированный эффект интересен прежде всего как одно из проявлений явления сверхизлучения в резонансных средах, приводящих к получению субцикловых импульсов. Кроме того, предложенная схема может быть также использована для получения униполярных импульсов различной формы. К примеру, возможность управления формой отраженных импульсов может быть достигнута за счет создания определенного профиля объемной концентрации резонансных центров вдоль длины протяженного слоя.

Заключение. В работе предложен новый подход к получению униполярных импульсов в резонансных средах, основанный на эффекте сверхизлучения. В данном подходе используется сверхизлучение остановленной поляризации от протяженного слоя двухуровневой резонансной среды, возбуждаемой последовательностью из двух униполярных импульсов. Возбуждающие импульсы вызывают осцилляции наведенной поляризации среды, причем задержка между импульсами выбирается так, чтобы второй импульс останавливал эти осцилляции. В результате оказывается возможной генерация двух униполярных всплесков электрического поля разной полярности и разнесенных во времени вследствие конструктивной интерференции излученных средой вторичных волн. Предложенный метод применим для излучения как в терагерцовом, так и в дальнем или даже среднем инфракрасном диапазоне.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта # 21-72-10028.

Авторы выражают благодарность И. В. Бабушкину, В. В. Кочаровскому и Е. Р. Кочаровской за полезные замечания, высказанные при обсуждении результатов статьи.

---

1. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
2. K. Midorikawa, Nat.Photonics **16**, 267 (2022).
3. M. T. Hassan, T. T. Luu, A .Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, Nature **530**, 66 (2016).
4. А. М. Желтиков, УФН **191**, 386 (2021) [A. M. Zheltikov, Phys. Usp. **64**, 370 (2021)].
5. D. Hui, H. Alqattan, S. Yamada, V. Pervak, K. Yabana, and M. T. Hassan, Nat. Photonics **16**, 33 (2022).
6. P. Peng, Y. Mi, M. Lytova, M. Britton, X. Ding, A. Yu. Naumov, P. B. Corkum, and D. M. Villeneuve, Nat. Photonics **16**, 45 (2022).
7. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **107**, 761 (2009) [N. N. Rosanov, Opt. Spectr. **107**, 721 (2009)].
8. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, П. Г. Крюков, А. Н. Ораевский, А. В. Усков, Письма в ЖЭТФ **47**, 442 (1988) [E. M. Belenov, P. G. Kryukov, A. V. Nazarkin, A. N. Oraevsky, and A. V. Uskov, JETP Lett. **47**, 523 (1988)].
9. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, Письма в ЖЭТФ **51**, 252 (1990) [E. M. Belenov and A. V. Nazarkin, JETP Lett. **47**, 523 (1990)].
10. Э. М. Беленов, В. А. Исаков, А. В. Назаркин, Квантовая электроника **20**, 1045 (1993) [E. M. Belenov, V. A. Isakov, and A. V. Nazarkin, Quant. Electron. **23**, 911 (1993)].
11. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, Квантовая электроника **50**(9), 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V.Arkhipov, and N. N. Rosanov, Quant. Electron. **50**, 801 (2020)].
12. M. I. Bakunov, A. V. Maslov, and M. V. Tsarev, Phys. Rev. A **5**, 063817 (2017).
13. H.-C. Wu and J. Meyer-ter-Vehn, Nat. Photonics **6**, 304 (2012).
14. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, Sci. Rep. **8**, 2669 (2018).
15. A. V. Bogatskaya, E. A. Volkova, and A. M. Popov, Phys. Rev. E **104**, 025202 (2021).
16. A. V. Bogatskaya, E. A. Volkova, and A. M. Popov, Phys. Rev. E **105**, 055203 (2022).
17. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **114**, 160 (2021) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **114**, 132 (2021)].
18. С. В. Сазонов, Н. В. Устинов, Письма в ЖЭТФ **114**, 437 (2021) [S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, JETP Lett. **114**, 380 (2021)].
19. S. V. Sazonov, Laser Phys. Lett. **18**, 105401 (2021).
20. P. H. Bucksbaum, AIP Conf. Proc. **323**, 416 (1994).
21. М. В. Архипов, А. Н. Цыпкин, М. О. Жукова, А. О. Исмагилов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **115**, 3 (2022) [M. V. Arkhipov, A. N. Tsypkin, M. O. Zhukova, A. O. Ismagilov, A. V. Pakhomov, N. N. Rosanov, and R. M. Arkhipov, JETP Lett. **115**, 1 (2022)]. .
22. I. E. Ilyakov, B. V. Shishkin, E. S. Efimenko, S. B. Bodrov, and M. I. Bakunov, Opt. Express **30**, 14978 (2022).
23. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, М. О. Жукова, А. Н. Цыпкин, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **113**, 237 (2021) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. O. Zhukova, A. N. Tsypkin, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **113**, 242 (2021)].
24. R. H. Dicke, Phys. Rev. **93**, 99 (1954).
25. M. Gross and S. Haroche, Phys. Rep. **93**, 301 (1982).
26. В. В. Железняков, В. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский, УФН **159**, 193 (1989) [V. V. Zheleznyakov, V. V. Kocharovskii, and V. V. Kocharovskii, Sov. Phys.-Uspekhi **32**, 835 (1989)].
27. M. G. Benedict, A. M. Ermolaev, V. A. Malyshev, I. V. Sokolov, and E. D. Trifonov, *Super-radiance: Multiatomic Coherent Emission*, CRC Press, Boca Raton (1996).

28. В. В. Кочаровский, В. В. Железняков, Е. Р. Кочаровская, В. В. Кочаровский, УФН **187**, 367 (2017) [V. V. Kocharovsky, V. V. Zheleznyakov, E. R. Kocharovskaya, and V. V. Kocharovsky, Phys. Usp. **60**, 345 (2017)].
29. С. А. Ахманов, С. Ю. Никитин, *Физическая оптика*, Издательство Московского Университета, М. (2004) [S. A. Akhmanov and S. Y. Nikitin, *Physical optics*, Clarendon Press, Oxford (1997)].
30. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, М. (1978) [L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Twolevel Atoms*, Wiley, N.Y. (1975)].
31. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, В. А. Ущаповский, ЖЭТФ **100**, 762 (1991) [E. M. Belenov, A. V. Nazarkin, and V. A. Ushchapovskii, Sov. Phys. JETP **73**, 422 (1991)].
32. R. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. V. Arkhipov, A. Demircan, U. Morgner, N. N. Rosanov, and I. Babushkin, Opt. Express **28**, 17020 (2020).
33. А. Ярив, *Квантовая электроника*, Сов. радио, М. (1980) [A. Yariv, *Quantum electronics*, Wiley, N.Y. (1989)].

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 3, с. 159 – 170

Уплощение зон и слияние уровней Ландау в сильно коррелированных двумерных электронных системах (Миниобзор)

$\boxed{\text{В. Т. Долгополов}^{+}}$, М. Ю. Мельников[+], А. А. Шашкин[+1)], С. В. Кравченко[*1)]

[+]Институт физики твердого тела, 142432 Черноголовка, Россия

[*]Physics Department, Northeastern University, Boston, Massachusetts 02115, USA

Поступила в редакцию 27 апреля 2022 г.
После переработки 10 июня 2022 г.
Принята к публикации 21 июня 2022 г.

В этом обзоре мы обсуждаем недавние экспериментальные результаты, указывающие на уплощение зон и слияние уровней Ландау на уровне химического потенциала в сильно коррелированных двумерных (2D) электронных системах. В сверхчистой сильно взаимодействующей двумерной электронной системе в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe эффективная масса электрона на уровне Ферми монотонно возрастает во всем диапазоне электронных плотностей, в то время как усредненная по энергии масса насыщается при низких плотностях. Качественно различное поведение двух масс в этой электронной системе указывает на вызванное межэлектронным взаимодействием уплощение одночастичного спектра на уровне химического потенциала, при котором происходит "коденсация" электронов на уровне Ферми в диапазоне импульсов, в отличие от конденсации бозонов. В сильных магнитных полях, перпендикулярных двумерному электронному слою, аналогичный эффект разного заполнения квантовых уровней на уровне химического потенциала — слияние расщепленных по спину и долине уровней Ландау — наблюдается в инверсионных слоях на поверхности кремния и в двухслойных двумерных электронных системах на основе GaAs. Эксперименты также указывают на слияние квантовых уровней композитных фермионов с разными долинными индексами в сверхчистых квантовых ямах SiGe/Si/SiGe.

DOI: 10.31857/S1234567822150058, EDN: jfpnmo

I. Введение. В системе невзаимодействующих фермионов с непрерывным спектром вероятность заполнения квантового состояния при фиксированных химическом потенциале и температуре зависит только от одночастичной энергии [1]. Если температура стремится к нулю, энергетический интервал, разделяющий заполненные и пустые квантовые состояния, также стремится к нулю. Для свободных частиц в импульсном пространстве возникает поверхность Ферми размерности $d-1$, где d – размерность фермионов.

В общем случае это рассуждение неверно для взаимодействующих фермионов [2–8], когда одночастичная энергия зависит от распределения электронов, а числа заполнения квантовых состояний на уровне химического потенциала могут различаться, попадая в диапазон от нуля до единицы. Был предсказан топологический фазовый переход при температуре $T = 0$ в сильно коррелированных ферми-системах, связанный с появлением плоского участка одночастичного спектра на уровне химического потенциала по мере того как увеличивается энергия фермион-фермионного взаимодействия (верхняя вставка на рис. 1). Этот переход связан с уплощением зоны или распуханием поверхности Ферми в импульсном пространстве, которому предшествует возрастающая эффективная масса квазичастиц $m_{\rm F}$ на уровне Ферми, которая расходится в квантовой критической точке. Создание и исследование материалов с плоскими зонами в настоящее время является передовым направлением современной физики [9–12]. Интерес вызывает, в частности, тот факт, что из-за аномальной плотности состояний уплощение зоны может быть важно для создания сверхпроводимости при комнатной температуре. Появление плоской зоны теоретически предсказано [13–15] в ряде систем, включая тяжелые фермионы, высокотемпературные сверхпроводящие материалы, ^{3}He и двумерные электронные системы.

Роль электрон-электронных взаимодействий в поведении двумерных электронных систем возрастает по мере уменьшения электронной плотности.

1)e-mail: shashkin@issp.ac.ru; s.kravchenko@northeastern.edu

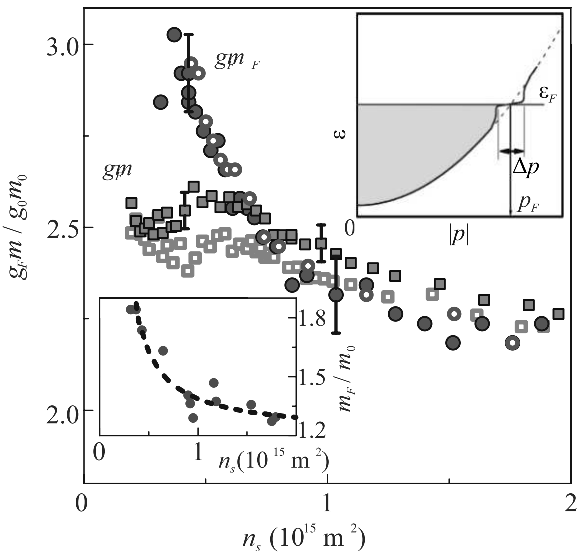


Рис. 1. (Цветной онлайн) Произведение фактора Ланде и эффективной массы в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe в зависимости от плотности электронов, определенное по измерениям поля полной спиновой поляризации (квадраты) и по осцилляциям Шубникова-де Гааза (кружки) при $T \approx 30$ мК. Пустые и заполненные символы соответствуют двум образцам. Экспериментальная неопределенность соответствует разбросу данных и составляет около 2 % для квадратов и около 4 % для кружков ($g_0 = 2$ и $m_0 = 0,19\, m_e$ – значения для невзаимодействующих электронов). На верхней вставке схематично показан одночастичный спектр электронной системы в состоянии, предшествующем уплощению зоны на уровне Ферми (сплошная черная линия). Штриховая фиолетовая линия соответствует обычному параболическому спектру. Заштрихованная область соответствует заполненным электронным состояниям при $T = 0$. Нижняя вставка: эффективная масса $m_{\rm F}$ в зависимости от плотности электронов, определенная путем анализа температурной зависимости амплитуды осцилляций Шубникова–де Гааза аналогично тому, как это было сделано в работе [38]. Пунктирная линия показывает ожидаемое по эксперименту поведение. Из работы [16]

Энергия взаимодействия характеризуется радиусом Вигнера–Зейтца, $r_s = 1/(\pi n_s)^{1/2} a_{\rm B}$ (здесь n_s – электронная плотность и $a_{\rm B}$ – эффективный боровский радиус в полупроводнике), который в однодолинном случае равен отношению кулоновской и кинетической энергий.

Экспериментально было показано, что с уменьшением электронной плотности (или с увеличением энергии взаимодействия) в сверхчистых квантовых ямах SiGe/Si/SiGe масса электронов на уровне Ферми монотонно возрастает во всем диапазоне электронных плотностей [16]. Напротив, масса, усредненная по энергии, насыщается при низких плотностях. Качественно различное поведение двух масс указывает на вызванное взаимодействием уплощение одночастичного спектра на уровне Ферми в этой электронной системе.

В системе взаимодействующих фермионов, помещенной в сильное перпендикулярное магнитное поле, можно ожидать аналогичный эффект разного заполнения квантовых уровней на уровне химического потенциала. Если энергии двух квантовых уровней пересекаются друг с другом при изменении внешнего параметра, они могут совпадать с химическим потенциалом в диапазоне значений параметра, т.е. квантовые уровни могут сливаться на уровне химического потенциала в этом диапазоне [17]. Слияние уровней подразумевает наличие притяжения между двумя частично заполненными квантовыми уровнями. Интервал слияния определяется возможностью перераспределения квазичастиц между уровнями. Эффект слияния находится в контрасте с простым пересечением квантовых уровней при некотором значении электронной плотности/магнитного поля. Экспериментально такое слияние уровней Ландау обнаружено в кремниевых полевых транзисторах металл-окисел-полупроводник (МОП) [18] и двухслойных структурах на основе GaAs [19]. Кроме того, сообщалось об указании на слияние уровней композитных фермионов с разными долинными индексами в сверхчистых квантовых ямах SiGe/Si/SiGe [20]. Ниже мы рассмотрим соответствующие недавние экспериментальные данные.

II. Уплощение зон на уровне Ферми. Начнем с указания на уплощение зоны на уровне Ферми, о котором сообщалось в работе [16]. Необработанные экспериментальные данные, полученные в сильно коррелированных двумерных электронных системах, можно разделить на две группы: данные, описывающие электронную систему как целое (такие, как магнитное поле, необходимое для полной поляризации электронных спинов, термодинамическая плотность состояний или намагниченность электронной системы) и данные, относящиеся исключительно к электронам на уровне Ферми (такие как амплитуда осцилляций Шубникова–де Гааза, дающая эффективную массу $m_{\rm F}$ и g-фактор Ланде $g_{\rm F}$ на уровне Ферми). Как правило, данные первой группы интерпретируются на языке квазичастиц, в котором используются усредненные по энергии значения эффективной массы m и g-фактора Ланде g. Для определения этих величин используются формулы, справедливые в случае невзаимодействующих электронов. Хотя такой подход идеологически неверен, результаты для m и g часто оказываются такими же, как и результаты для m_F и g_F. В частности, об одновременном увеличении усредненной по энергии эффективной массы и массы на уровне Ферми в двумерной электронной системе в кремниевых МОП-транзисторах сообщалось в более ранних публикациях [21–27]; было обнаружено, что эффективная масса сильно увеличена при низких плотностях, в то время как g-фактор остается близким к своей величине в объеме кремния, что не подтвердило существование Стонеровской нестабильности в двумерной электронной системе в кремнии. Перенормировка массы не зависит от беспорядка, будучи определяемой только электрон-электронным взаимодействием [28]. Сильно увеличенная эффективная масса в кремниевых МОП-структурах была интерпретирована в пользу формирования Вигнеровского кристалла или предшествующей промежуточной фазы, чье происхождение и существование может зависеть от уровня беспорядка в электронной системе.

Экспериментальные результаты, представленные в этом разделе, были получены в сверхчистых (001) квантовых ямах SiGe/Si/SiGe, подробно описанных в работах [29, 30]. Максимальная подвижность электронов в этих образцах достигала $240\,\text{м}^2/\text{Вс}$, что является самым высоким показателем подвижности для этой электронной системы и примерно на два порядка выше, чем максимальная подвижность электронов в наиболее чистых кремниевых МОП-структурах. Магнитосопротивление в параллельном магнитном поле позволяет определить поле полной спиновой поляризации B_c, которое соответствует отчетливому "излому" экспериментальных зависимостей с последующим насыщением сопротивления [31, 32] (см. нижнюю вставку к рис. 2). Магнитное поле, в котором наступает полная спиновая поляризация, показано как функция электронной плотности на рис. 2 для двух образцов. В диапазоне концентраций электронов $0.7 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2} < n_s < 2 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2}$ данные хорошо описываются линейной зависимостью, которая экстраполируется к нулю при $n_s \approx 0.14 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2}$ (штриховая черная линия). Однако при более низких плотностях электронов вплоть до $n_s \approx 0.2\times10^{15}\,\text{м}^{-2}$ (до $r_s \approx 12$) экспериментальная зависимость $B_c(n_s)$ отклоняется от прямой и линейно экстраполируется в начало координат.

Сплошной красной линией на рис. 2 показано поле поляризации $B_c(n_s)$, рассчитанное с использованием метода квантового Монте-Карло [33]. Экспериментальные результаты хорошо согласуются с теоретическими расчетами для чистого предела $k_\mathrm{F}l \gg 1$

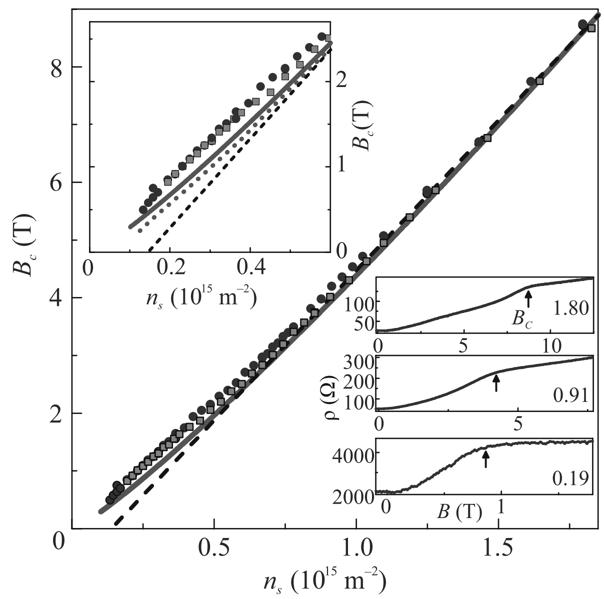


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость поля полной спиновой поляризации B_c от электронной плотности при температуре 30 мК для двух образцов SiGe/Si/SiGe (точки и квадраты). Черная пунктирная линия представляет собой линейную аппроксимацию данных при высокой плотности, которые экстраполируются в ноль при плотности $n_s \approx 0.14 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2}$. Сплошная красная линия соответствует расчету [33] для чистого предела. Верхняя вставка: область низкой плотности из основного рисунка в увеличенном масштабе. Также красной пунктирной линией показан расчет [33] с учетом рассеяния электронов. Нижняя вставка: магнитосопротивление в параллельном поле при температуре 30 мК при различных концентрациях электронов в единицах 10^{15} м$^{-2}$. Поле поляризации B_c, определяемое пересечением касательных, отмечено стрелками. Из работы [16]

(здесь k_F – волновой вектор Ферми и l – длина свободного пробега), если считать g-фактор Ланде, перенормированный электрон-электронным взаимодействием, равным 2.4. Хотя в работе [33] g-фактор Ланде был равен 2, причина 20 % расхождения между теорией и экспериментом может быть связана с конечным размером волновой функции электрона в направлении, перпендикулярном интерфейсу. Кроме того, произведение $k_\mathrm{F}l$ уменьшается с уменьшением электронной плотности, что приводит к отклонению теоретической зависимости вниз, как показано красной пунктирной линией на верхней вставке к рис. 2.

Чтобы проверить, влияет ли остаточный беспорядок на результаты для магнитного поля полной спиновой поляризации, мы сравним наши данные с данными, полученными ранее на образцах Si/SiGe с подвижностью электронов на порядок ниже, чем в наших образцах [34]. При высоких концентрациях электронов зависимость $B_c(n_s)$ в работе [34] также является линейной и экстраполируется к нулю при конечной плотности. При этом наклон зависимости равен 6×10^{-15} Тл $\cdot$ м^2 и близок к наклону 5.4×10^{-15} Тл $\cdot$ м^2, который наблюдался в нашем эксперименте. Однако электронная плотность, в которую экстраполируется зависимость $B_c(n_s)$, равна примерно 0.3×10^{15} м$^{-2}$ в [34], что заметно выше, чем в нашем случае. Таким образом, беспорядок влияет на поведение поля поляризации B_c в соответствии с работами [33, 35]. Хорошее соответствие наших экспериментальных данных для B_c и расчетов для чистого предела [33] свидетельствует о том, что электронные свойства наших образцов слабо чувствительны к остаточному беспорядку, и чистый предел в наших образцах достигнут.

Произведение $g_\mathrm{F}m$, характеризующее всю двумерную электронную систему, в чистом пределе может быть определено из равенства зеемановского расщепления и энергии Ферми полностью спинполяризованной электронной системы

$$g_\mathrm{F}\mu_\mathrm{B}B_c=\frac{2\pi\hbar^2 n_s}{mg_v}, \tag{1}$$

где $g_v=2$ – долинное вырождение и μ_B – магнетон Бора.

С другой стороны, g-фактор Ланде g_F и эффективная масса m_F *на уровне Ферми* могут быть определены из анализа осцилляций Шубникова–де Гааза в относительно слабых магнитных полях, как это было сделано в работе [16]:

$$\begin{gathered}
A=\sum_i A_i^{LK}\cos\left[\pi i\left(\frac{\hbar c\pi n_s}{eB_\perp}-1\right)\right]Z_i^sZ_i^v,\\
A_i^{LK}=4\exp\left(-\frac{2\pi^2 ik_\mathrm{B}T_\mathrm{D}}{\hbar\omega_c}\right)\frac{2\pi^2ik_\mathrm{B}T/\hbar\omega_c}{\sinh\left(2\pi^2ik_\mathrm{B}T/\hbar\omega_c\right)},\\
Z_i^s=\cos\left(\pi i\frac{\Delta_\mathrm{Z}}{\hbar\omega_c}\right)=\cos\left(\pi i\frac{g_\mathrm{F}m_\mathrm{F}}{2m_e}\right),\\
Z_i^v=\cos\left(\pi i\frac{\Delta_v}{\hbar\omega_c}\right),
\end{gathered} \tag{2}$$

где T_D – температура Дингла, T – температура, $\hbar\omega_c$ – циклотронное расщепление, Δ_Z – зеемановское расщепление, Δ_v – долинное расщепление. Из соотношения (2) видно, что если задать $Z_i^v=1$ в исследуемом диапазоне магнитных полей, подгоночными параметрами являются $T_\mathrm{D}m_\mathrm{F}$, m_F и $g_\mathrm{F}m_\mathrm{F}$ [36]. Значения $T_\mathrm{D}m_\mathrm{F}$ и m_F получены в области температур, где спиновое расщепление незначительно. Будучи слабо чувствительной к этим двум подгоночным параметрам, форма подгонки при самых низких температурах оказывается очень чувствительной к произведению $g_\mathrm{F}m_\mathrm{F}$. Качество подгонки показано на рис. 3. Нормированное на ρ_0 магнитосопротивление

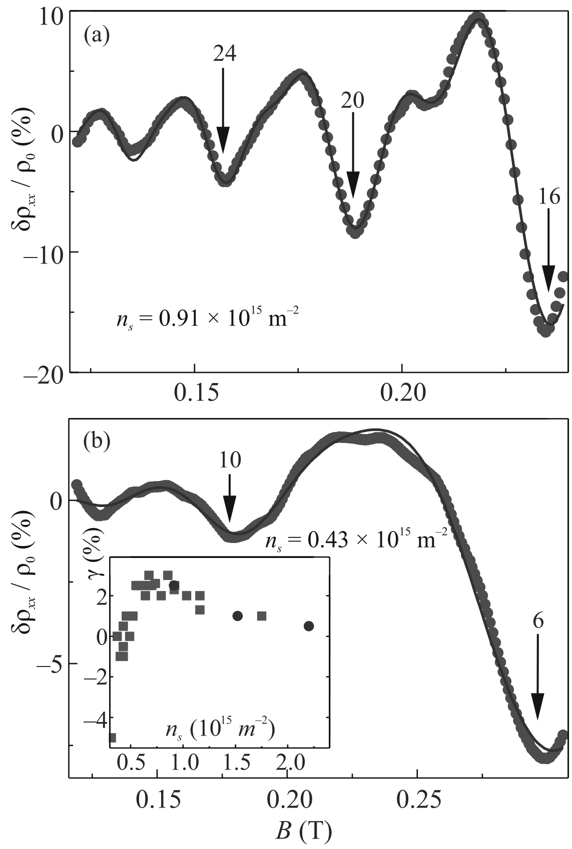


Рис. 3. (Цветной онлайн) Подгонка нормированного магнитосопротивления $\delta\rho_{xx}/\rho_0$ в квантовой яме SiGe/Si/SiGe при температуре ≈ 30 мК (точки) с использованием уравнения (2) с (a) $g_\mathrm{F}m_\mathrm{F}/m_e=0.905$, $T_\mathrm{D}=0.12$ K, $m_\mathrm{F}=0.25\,m_e$ и $\gamma=2.5$ % и (b) $g_\mathrm{F}m_\mathrm{F}/m_e=$ $=1.11$, $T_\mathrm{D}=0.15$ K, $m_\mathrm{F}=0.33\,m_e$ и $\gamma=-0.5$ %. Указаны факторы заполнения $\nu=n_shc/eB_\perp$ в минимумах. Вставка: коэффициент асимметрии γ [36], который описывает немного разные температуры Дингла $T_D^{u,d}=T_D(1\pm\gamma)$ для двух спиновых подзон, в зависимости от плотности электронов для двух образцов. Температура Дингла для энергетически выгодного направления спина меньше в диапазоне электронных плотностей 0.6×10^{15} м$^{-2}$ $<n_s<2\times10^{15}$ м$^{-2}$, тогда как при меньших плотностях величина γ меняет знак. Из работы [16]

$\delta\rho_{xx}=\rho_{xx}-\rho_0$ (где ρ_0 – монотонное изменение диссипативного сопротивления с магнитным полем) хорошо описывается уравнением (2).

Основной результат, показанный на рис. 1, состоит в том, что произведения усредненного значения $g_\mathrm{F}m$ и $g_\mathrm{F}m_\mathrm{F}$ на уровне Ферми ведут себя аналогично при высоких плотностях электронов, когда электрон-электронные взаимодействия относительно слабы, но качественно отличаются при низких плотностях, где взаимодействия становятся особенно сильными [37]. Произведение $g_{\mathrm{F}}m_{\mathrm{F}}$ монотонно возрастает с уменьшением электронной плотности во всем диапазоне концентраций электронов, а произведение $g_{\mathrm{F}}m$ выходит на насыщение при малых n_s. Подчеркнем, что важна качественная разница в поведении двух наборов данных, а не сравнение абсолютных значений. Принимая во внимание слабость обменных эффектов в двумерной электронной системе в кремнии [21, 22], это различие можно объяснить только разным поведением двух эффективных масс. Качественно различное их поведение свидетельствует о вызванном взаимодействием уплощении зоны на уровне Ферми в этой электронной системе. Для большей уверенности в наших результатах и выводах на нижней вставке к рис. 1 приведены данные для эффективной массы m_{F}, определенной из анализа температурной зависимости амплитуды осцилляции Шубникова–де Гааза, как это было сделано в работе [38]. Аналогичное поведение m_{F} и $g_{\mathrm{F}}m_{\mathrm{F}}$ как функции электронной плотности позволяет исключить возможное влияние g-фактора на поведение произведения эффективной массы и g-фактора, что согласуется с ранее полученными результатами для двумерной электронной системы в кремнии.

Экспериментальные результаты естественным образом интерпретируются в рамках концепции фермионной конденсации [2, 4, 8], происходящей на уровне Ферми в диапазоне импульсов, в отличие от конденсации бозонов. С увеличением энергии электрон-электронного взаимодействия одночастичный спектр становится все более плоским в области Δp вблизи импульса Ферми p_{F} (верхняя вставка к рис. 1). При относительно высоких концентрациях электронов $n_s > 0.7 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2}$ этот эффект несущественен, так как одночастичный спектр не меняется заметным образом в интервале Δp, и поведение усредненной по энергии эффективной массы и массы на уровне Ферми практически одинаковы. Уменьшение электронной плотности в диапазоне $n_s < 0.7 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2}$ приводит к уплощению спектра, так что эффективная масса на уровне Ферми, $m_{\mathrm{F}} = p_{\mathrm{F}}/v_{\mathrm{F}}$, продолжает возрастать (здесь v_{F} – скорость Ферми). Напротив, с усредненной по энергии эффективной массой этого не происходит, поскольку она не особенно чувствительна к этому уплощению. Ожидается, что в критической области, где эффективная масса на уровне Ферми расходится, m_{F} будет зависеть от температуры. Слабое уменьшение величины $g_{\mathrm{F}}m_{\mathrm{F}}$ с температурой действительно наблюдается в точке наименьшей плотности на рис. 1. В критической области рост m_{F} ограничивается предельным значением, определяемым температурой: $m_{\mathrm{F}} < p_{\mathrm{F}}\Delta p/4k_{\mathrm{B}}T$. В наших экспериментах увеличение m_{F} достигает примерно двух раз при $n_s = 0.3 \times 10^{15}\,\text{м}^{-2}$ и $T \approx 30\,\text{мК}$, что позволяет оценить отношение $\Delta p/p_{\mathrm{F}} \sim 0.06$. Именно малость интервала Δp обеспечивает хорошее согласие расчета [33] с нашим экспериментом.

Следует отметить, что эффективная масса на уровне Ферми имеет тенденцию расходиться при плотности n_m, выше критической плотности электронов n_c перехода металл-изолятор, что свидетельствует о качественном различии между квантовыми ямами SiGe/Si/SiGe со сверхнизким беспорядком и наименее разупорядоченными кремниевыми МОП-структурами, в которых наблюдается обратное соотношение $n_c \geq n_m$ [39]. Это указывает на то, что эти две плотности не связаны напрямую, а фермионная конденсация и переход металл-изолятор являются двумя разными переходами.

III. Слияние уровней Ландау в сильно взаимодействующей двумерной электронной системе. Другим примером нетривиального проявления межфермионных взаимодействий в сильно коррелированных Ферми-жидкостях является слияние квантовых уровней в Ферми-системе с дискретным спектром, когда заполнения двух квантовых уровней на уровне химического потенциала различны [18].

Приложение перпендикулярного магнитного поля B к однородной двумерной электронной системе создает две подсистемы уровней Ландау с номерами i, отличающиеся $\pm$-проекциями спина электрона на направление поля. Энергетические уровни $\varepsilon_i^{\pm}$ в каждом наборе разделены циклотронным расщеплением $\hbar\omega_c = \hbar eB/m^*c$, а два набора уровней Ландау сдвинуты относительно друг друга спиновым расщеплением $\Delta_{\mathrm{Z}} = g\mu_{\mathrm{B}}B$, где m^* и g – значения массы и Ланде g-фактора, перенормированные электронным взаимодействием (долинным вырождением для простоты пока пренебрегается). Уровни Ландау с противоположными направлениями спина должны пересекаться при изменении электронной плотности, что обусловлено сильной зависимостью эффективной массы от n_s при слабой зависимости g-фактора от n_s. В частности, при больших плотностях электронов циклотронное расщепление обычно превышает спиновое, тогда как при малых плотностях должно иметь место противоположное соотношение $\hbar\omega_c < \Delta_{\mathrm{Z}}$ из-за резко возрастающей массы.

Как термодинамические, так и кинетические свойства электронной системы определяются положением химического потенциала относительно квантовых уровней, которое, в свою очередь, определяется магнитным полем и плотностью электронов. Фактор заполнения равен $\nu = n_s/n_0$, где $n_0 = eB/hc$ – вырождение уровня. Когда ν является дробным, химический потенциал совпадает с частично заполненным квантовым уровнем. Вероятность найти электрон на уровне химического потенциала определяется дробной частью фактора заполнения и может варьироваться от нуля до единицы. При целочисленном факторе заполнения наблюдается скачок химического потенциала. В эксперименте скачок проявляется как минимум продольного электрического сопротивления. Минимумы сопротивления в плоскости (B, n_s) соответствуют веерной диаграмме уровней Ландау.

При фиксированном внешнем магнитном поле и заполнении многих квантовых уровней изменение электронной плотности на квантовом уровне мало по сравнению с n_s. Изменение энергии ε_λ оценивается с помощью соотношения Ландау

$$\delta\varepsilon_\lambda = \sum_\sigma \Gamma_{\lambda\sigma}\delta n_\sigma, \tag{3}$$

где $\Gamma_{\lambda\sigma}$ – амплитуда электрон-электронного взаимодействия, являющаяся феноменологической компонентой теории ферми-жидкости [1]. Выбирая магнитное поле, при котором разность между соседними уровнями Ландау ε_i^+ и ε_{i+1}^-

$$D = \varepsilon_i^+ - \varepsilon_{i+1}^- = \Delta_Z(n_s, B) - \hbar\omega_c(n_s, B) \tag{4}$$

зануляется при факторе заполнения $\nu = n_s hc/eB = 2i + 2$, стартуем с более высокой плотности, где оба уровня $(i+1)^-$ и i^+ полностью заполнены при $\nu = N = 2i + 3$, причем разность $D(N)$ отрицательна. Удаление электронов с уровня $(i+1)^-$ означает уменьшение электронной плотности и увеличение D. Пересечение уровней происходит в точке $\nu = 2i + 2$, т.е. уровень i^+ становится пустым, а уровень $(i+1)^-$ полностью заполнен при условии $\Gamma(i) = (\Gamma_{i+1,i+1}^{--} - \Gamma_{i,i+1}^{+-}) - (\Gamma_{i+1,i}^{-+} - \Gamma_{i,i}^{++}) \leq 0$.

В противоположном случае

$$\Gamma(i) > 0 \tag{5}$$

одночастичные уровни притягиваются друг к другу и сливаются на уровне химического потенциала μ согласно условию $\varepsilon_{i+1}^- = \varepsilon_i^+ = \mu$. Оба уровня частично заполнены с долями пустых состояний $0 < f_i < 1$ и $0 < f_{i+1} < 1$, удовлетворяющими условию нормировки $f_i + f_{i+1} = f = N - \nu$. Слияние начинается, когда на уровне ε_i^+ появляются пустые состояния, и заканчивается, когда этот уровень полностью опустошается. Это соответствует увеличению доли пустых состояний f в диапазоне между $f = 1$ (или $\nu = 2i + 2$) и $f = \min(1 + \Gamma(i)/(\Gamma_{i+1,i+1}^{--} - \Gamma_{i,i+1}^{+-}), 2)$. Вне области слияния реализуется обычная диаграмма уровней Ландау. Отметим, что щель между соседними уровнями Ландау ε_i^+ и ε_{i+1}^- оказывается невидимой в транспортных и термодинамических экспериментах. Верхняя граница области слияния $n_m(B)$ может быть записана

$$\hbar\omega_c - \Delta_Z = 0. \tag{6}$$

Электронная система в (100) кремниевых МОП-структурах характеризуется наличием в спектре двух долин, так что каждый энергетический уровень $\varepsilon_i^\pm$ расщепляется на два уровня, как схематично показано на рис. 4. Легко видеть, что долинное расщепление Δ_v способствует слиянию квантовых уровней. Чем больше долинное расщепление, тем выше плотность электронов, при которой уровни $(i+1)^-$ и i^+ с разными долинными индексами должны сливаться на уровне химического потенциала при факторе заполнения $\nu = 4i + 4$. Верхняя граница области слияния $n_m(B)$ определяется соотношением

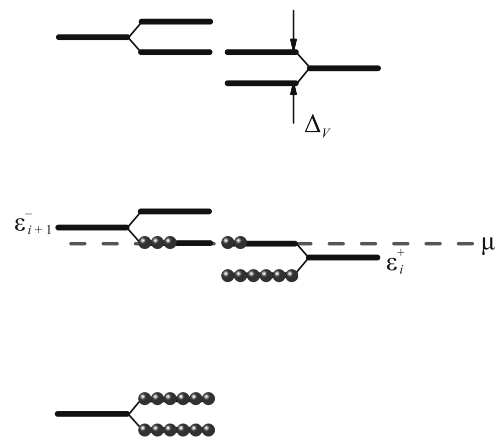


Рис. 4. (Цветной онлайн) Схема слияния расщепленных по спину и долине уровней Ландау на уровне химического потенциала. Занятые уровни обозначены точками. Заполнения двух квантовых уровней на уровне химического потенциала изменяются при изменении электронной плотности. Из работы [18]

$$\hbar\omega_c - \Delta_Z - \Delta_v = 0, \tag{7}$$

которое отличается от уравнения (6) наличием долинного расщепления. Поскольку распределения электронной плотности, соответствующие двум долинам, разнесены на расстояние α в направлении, перпендикулярном границе раздела Si-SiO_2, междолинный перенос заряда создает добавочное электрическое поле, приводящее к $\Gamma(i) = 4\pi e^2\alpha/\kappa$, где κ – диэлектрическая проницаемость. $\Gamma(i)$ определяет силу эффекта слияния, а нижняя граница области слияния соседних уровней Ландау описывается выражением $\hbar\omega_c + n_0\Gamma(i) - \Delta_Z - \Delta_v = 0$.

В пределе высокой плотности, когда эффекты электрон-электронного взаимодействия пренебрежимо малы, эффективная масса и g-фактор равны $m_0 = 0.19\, m_e$ и $g_0 = 2$, так что циклотронное расщепление значительно превышает спиновое. При низких плотностях электронов, когда эффекты взаимодействия сильны, эффективная масса $m^*(n_s)$, как обнаружено, расходится согласно $m_0/m^* \simeq (n_s - n_c)/n_s$ в квантовой критической точке, близкой к переходу металл-изолятор, который происходит при $n_c \simeq 8 \times 10^{10}$ см$^{-2}$, в то время как g-фактор остается близким к g_0, будучи равным $g \simeq 1.4\, g_0$ [21, 22, 24, 25]. Веерная диаграмма уровней Ландау для этой электронной системы в перпендикулярных магнитных полях представлена на рис. 5. Минимумы квантовых осцилляций при факторе заполнения $\nu = 4i + 4$ исчезают ниже некоторой электронной плотности n^*, зависящей от ν, в то время как минимумы при $\nu = 4i + 2$ сохраняются вплоть до существенно меньших плотностей. Хотя такое поведение согласуется с резким ростом эффективной массы при уменьшении n_s, зависимость плотности n^* от фактора заполнения (или B) оказывается аномально сильной, что объяснить не удается. В частности, эта зависимость не может быть объяснена вызванным примесями уширением квантовых уровней согласно $\omega_c\tau \sim 1$ (где τ – время упругого рассеяния), когда падение подвижности $e\tau/m^*$ при низких плотностях электронов определяется увеличением массы [24].

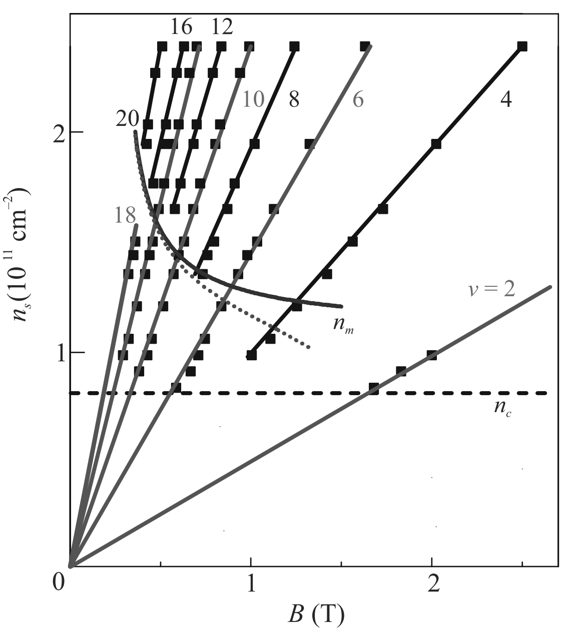


Рис. 5. (Цветной онлайн) Положения минимумов осцилляций Шубникова–де Гааза в кремниевой МОП-структуре в координатах (B, n_s) (квадраты) и ожидаемые положения циклотронного и спинового минимумов, рассчитанные по формуле $n_s = \nu eB/hc$ (сплошные линии). Указано положение перехода металл-изолятор в $B = 0$. Расчетная граница слияния $n_m(B)$ показана сплошной синей линией при использовании уравнения (7) и пунктирной фиолетовой линией при учете нелинейных (кубических) поправок к спектру вблизи поверхности Ферми. Из работы [18]

Ожидаемая верхняя граница области слияния $n_m(B)$, показанная сплошной синей линией на рис. 5, определена в работе [18]. Расчетная граница согласуется с экспериментальной плотностью $n^*(B)$, при которой исчезают минимумы осцилляций при $\nu = 4i + 4$. Этот факт свидетельствует о слиянии уровней в двумерной электронной системе в кремнии.

Описание данных $n^*(B)$ в сильном магнитном поле улучшается в картине слияния, если учесть нелинейные (кубические) поправки к спектру на поверхности Ферми вблизи квантовой критической точки, которые естественным образом приводят к уменьшению эффективной массы с возрастанием магнитного поля. Скорректированная зависимость $n_m(B)$ показана пунктирной фиолетовой линией на рис. 5; подробнее об этом см. [18].

IV. Вызванное взаимодействием слияние уровней Ландау в электронной системе двойных квантовых ям. Как обсуждалось в предыдущем разделе, спектр двумерной электронной системы, находящейся в перпендикулярном магнитном поле, состоит из двух эквидистантных лестниц квантовых уровней, соответствующих направлениям спина вверх и вниз. Если магнитное поле наклонено на угол β, расстояние между квантовыми уровнями в каждой из спиновых лестниц равно $\hbar\omega_c = \hbar eB\cos(\beta)/m^*c$, а сдвиг между лестницами равен $g\mu_B B$. Увеличение угла наклона приводит к пересечению квантовых уровней двух лестниц. В первый раз пересечение происходит при значении угла β_1, удовлетворяющем условию $\cos(\beta_1) = gm^*/2m_e$. При $\beta = \beta_1$ скачки химического потенциала при четных факторах заполнения и соответствующие линии веерной диаграммы должны исчезнуть. Если учесть взаимодействие между электронами соседних квантовых уровней и увеличивать угол наклона в окрестности β_1, то квантовый уровень, заполненный до пересечения, должен с ростом β опустошаться. Однако предположим, что одночастичная энергия электронов на опустошающемся уровне уменьшается за счет электронного взаимодействия. В этом случае оба уровня остаются прикрепленными к химическому потенциалу в широком диапазоне углов $\Delta\beta_1$, определяемом силой взаимодействия. Вероятность найти электрон на уровне химического потенциала различна для противоположных ориентаций спина, будучи зависящей от внешнего параметра, угла наклона. Такое поведение соответствует слиянию квантовых уровней.

В приведенном выше гипотетическом рассмотрении пересечение или слияние квантовых уровней контролируется углом наклона магнитного поля. В экспериментах с сильно взаимодействующей двумерной электронной системой в (100) кремниевых МОП-структурах анализировалось исчезновение минимумов продольного сопротивления при изменении как перпендикулярного магнитного поля, так и электронной плотности при фиксированном факторе заполнения $\nu = 4(i+1)$, где i – целое число. В этом случае слияние уровней происходит вблизи квантовой критической точки, как это контролируется эффективной массой, зависящей от электронной плотности [18]. Можно было бы думать, что слияние уровней является предвестником распухания поверхности Ферми. На самом деле, эти два эффекта не обязательно связаны друг с другом. Ниже продемонстрировано, что эффект слияния уровней имеет место в двухслойной 2D-электронной системе с туннельным барьером между электронными слоями [19]. Отметим, что увеличение эффективной массы несущественно в этом случае.

Образец, использованный в этом разделе, представляет собой параболическую квантовую яму с узким туннельным барьером, выращенную на подложке GaAs (подробное описание см. в работе [19]). Приложение напряжения V_g между затвором и контактом к квантовой яме позволяет регулировать плотность электронов. Электроны появляются в задней части квантовой ямы при напряжении на затворе выше $V_{\mathrm{th1}} \approx -0.7$ В и заполняют одну подзону вплоть до $V_g = V_{\mathrm{th2}} \approx -0.3$ В (рис. 6). При $V_g > V_{\mathrm{th2}}$ электроны появляются в передней части ямы и заполняют вторую подзону вплоть до точки баланса $V_g = V_{\mathrm{balance}} \approx 0$.

Авторы ориентируются на диапазон затворных напряжений между V_{th2} и V_{balance}, где электроны в перпендикулярных магнитных полях заполняют две квантовые лестницы. Положения квантовых уровней определяются магнитным полем и напряжением на затворе. В заштрихованных областях на рис. 6 щели в одночастичном спектре и скачки химического потенциала защищены квантовыми эффектами [40]. В остальных областях слияние квантовых уровней в принципе возможно.

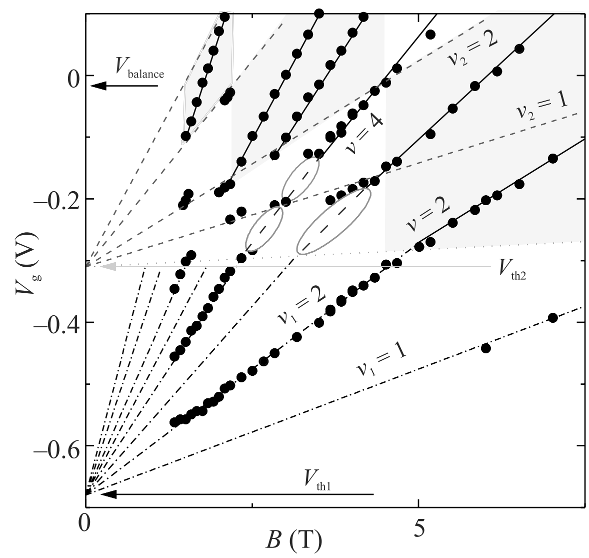


Рис. 6. (Цветной онлайн) Веерная диаграмма уровней Ландау для двойной квантовой ямы AlGaAs, исследованной в работе [19]. Положения минимумов продольного сопротивления в плоскости (B, V_g) отмечены точками. Указаны фактор заполнения ν для двухслойной электронной системы, а также фактор заполнения ν_1 (ν_2) для заднего (переднего) слоя. В заштрихованных областях слияние квантовых уровней в перпендикулярных магнитных полях невозможно. В областях, отмеченных овалами, минимумы сопротивления в перпендикулярном магнитном поле не наблюдаются, тогда как в наклонном магнитном поле они появляются. Из работы [19]

Рассмотрим фактор заполнения $\nu = 3$. При $V_g = V_{\mathrm{th2}}$ магнитное поле равно $B_\nu = n_1(V_{\mathrm{th2}})hc/3e$, где $n_1(V_{\mathrm{th2}})$ – плотность электронов в заднем слое. Энергия $\varepsilon_0 - g\mu_{\mathrm{B}}B_\nu/2$ уровня со спином вверх лестницы переднего слоя совпадает с энергией $\varepsilon_1 - g\mu_{\mathrm{B}}B_\nu/2$ уровня со спином вверх лестницы заднего слоя (рис. 7а). Поскольку вдали от точки баланса плотность электронов в заднем слое практически не меняется при увеличении V_g выше V_{th2} (см., например, рис. 6b работы [41]), плотность электронов в переднем слое в магнитном поле $B = B_\nu + \Delta B$ вдоль штриховой линии при $\nu = 3$, ограниченной овалом на рис. 6, равна $n_2 \simeq \Delta n = 3e\Delta B/hc$. Чтобы сбалансировать изменение циклотронной энергии $\hbar e\Delta B/m^*c$ и прикрепить оба уровня к химическому потенциалу μ, необходимо перенести небольшое количество электронов между уровнями

$$\delta n_2 = -\delta n_1 > 0, \tag{8}$$

что приводит к сдвигу одночастичных уровней

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_1^b &= \Gamma_1^{bb}\delta n_1 + \Gamma_1^{bf}\delta n_2, \\ \delta\varepsilon_0^f &= \Gamma_0^{fb}\delta n_1 + \Gamma_0^{ff}\delta n_2, \end{aligned} \tag{9}$$

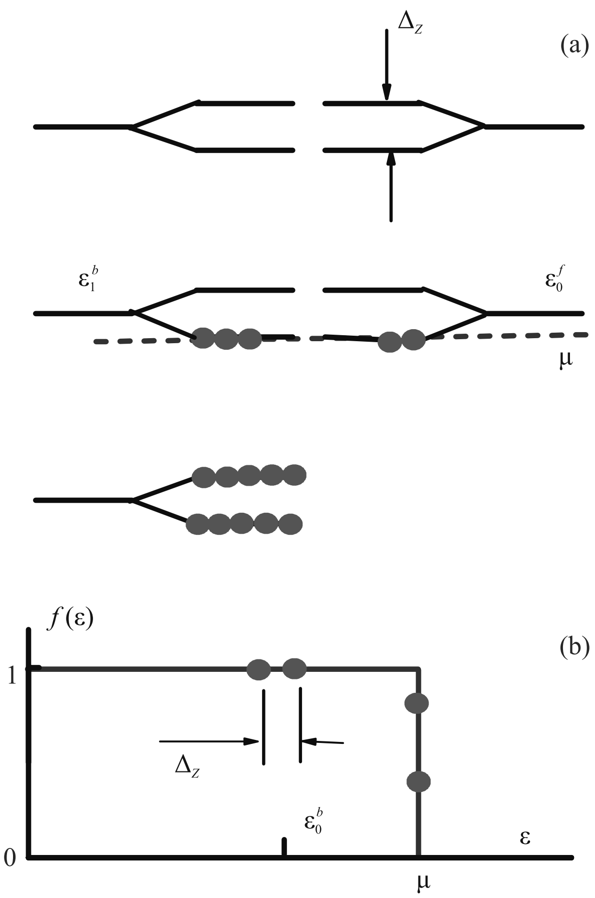


Рис. 7. (Цветной онлайн) (a) – Расположение и заполнение квантовых уровней в двухслойной электронной системе в режиме слияния при факторе заполнения $\nu = 3$. (b) – Функция распределения электронов в режиме слияния при $\nu = 3$. Из работы [19]

где $\Gamma_j^{\lambda\sigma}$ – амплитуда электронного взаимодействия, индекс b (f) относится к заднему (переднему) слою, и $j = 0.1$ – номер уровня Ландау. Оба уровня прикрепляются к химическому потенциалу при условии $\delta\varepsilon_0 - \delta\varepsilon_1 = \hbar e\Delta B/m^* c$, что дает

$$\delta n_2 = \frac{\hbar e \Delta B}{m^* c\,\Gamma}, \tag{10}$$

где $\Gamma = \Gamma_1^{bb} + \Gamma_0^{ff} - \Gamma_1^{bf} - \Gamma_0^{fb}$. В приближении плоского конденсатора получаем

$$\Gamma \simeq \frac{4\pi e^2 a}{\kappa}, \tag{11}$$

где a – расстояние между центрами масс распределений электронной концентрации в направлении z в обеих подзонах. Слияние уровней справедливо для фактора заполнения

$$\nu_2 = \frac{(n_2 + \delta n_2)hc}{eB} < 1. \tag{12}$$

Авторы подчеркивают, что в широком диапазоне магнитных полей при фиксированном факторе заполнения ν вероятность найти электрон с энергией, равной химическому потенциалу, различна для двух слившихся уровней, как показано на рис. 7b.

Хотя для простоты выше был рассмотрен случай фактора заполнения $\nu = 3$, те же аргументы справедливы и для более высоких факторов заполнения.

Факт слияния квантовых уровней в эксперименте подтверждается использованием наклонных магнитных полей. С наклоном магнитного поля минимумы магнитосопротивления и скачки химического потенциала возникают [42], в частности, вдоль штриховых линий при $\nu = 3$ и $\nu = 4$, указанных овалами на рис. 6. Появление скачков химического потенциала в двухслойной электронной системе в наклонных магнитных полях свидетельствует о том, что квантовые уровни достаточно узкие.

Как упоминалось выше, скачки химического потенциала могут быть защищены квантовыми эффектами. В общем случае перенос электронов между квантовыми уровнями разных подзон приводит к смешиванию волновых функций подзон и открытию энергетической щели, если недиагональные матричные элементы не равны нулю [40]. Это реализуется в заштрихованных областях на рис. 6. Напротив, в областях слияния при $\nu = 3$ и $\nu = 4$, указанных овалами на рис. 6, недиагональные матричные элементы в перпендикулярных магнитных полях равны нулю из-за ортогональности находящейся в плоскости части волновых функций в двухслойной электронной системе. Наклон магнитного поля нарушает ортогональность волновых функций соседних квантовых уровней, и возникает энергетическая щель [42, 43].

V. Слияние квантовых уровней композитных фермионов. Наконец, рассмотрим указание на слияние квантовых уровней композитных фермионов с разными долинными индексами [20]. Концепция композитных фермионов [44–48] успешно описывает дробный квантовый эффект Холла с нечетными знаменателями, сводя его к обычному целочисленному квантовому эффекту Холла для композитных частиц. В простейшем случае композитный фермион состоит из электрона и двух квантов магнитного потока и движется в эффективном магнитном поле B^*, определяемом разностью внешнего магнитного поля B и поля, соответствующего фактору заполнения электронов $\nu = 1/2$. Фактор заполнения для композитных фермионов p связан с ν согласно выражению $\nu = p/(2p \pm 1)$. Дробная энергетическая щель, которая, как предсказано, определяется кулоновским взаимодействием в виде $e^2/\kappa l_{\mathrm{B}}$, соответствует циклотронной энергии композитных фермионов $\hbar\omega_c^* = \hbar eB^*/m_{\rm CF}c$, где $l_{\rm B} = (\hbar c/eB)^{1/2}$ – магнитная длина и $m_{\rm CF}$ – эффективная масса композитного фермиона. Электрон-электронное взаимодействие входит в теорию неявно, поскольку используется приближение среднего поля в предположении, что флуктуации электронной плотности малы. Теория подтверждается экспериментальным наблюдением масштаба, соответствующего фермиевскому импульсу композитных фермионов в нулевом эффективном магнитном поле при $\nu = 1/2$.

Образцы, изучаемые в этом разделе, представляют собой сверхчистые двухдолинные (001) квантовые ямы SiGe/Si/SiGe, аналогичные описанным в работах [29, 30]. Продольное удельное сопротивление ρ_{xx} как функция обратного фактора заполнения показано для различных электронных плотностей на рис. 8a. Минимумы сопротивления наблюдаются при квантовых числах композитных фермионов $p = 1$, 2, 3, 4 и 6 вблизи $\nu = 1/2$ в положительных и отрицательных эффективных полях B^*, что свидетельствует о высоком качестве образцов. Высокое качество квантовой ямы также подтверждается наличием дробей $\nu = 4/5$ и $\nu = 4/11$ [49], соответствующих $p = 4/3$, которые могут быть описаны в терминах второго поколения композитных фермионов. Минимумы при $p = 3$ исчезают ниже определенной электронной плотности, хотя окружающие минимумы при $p = 2$ и $p = 4$ сохраняются до значительно более низких плотностей. Ясно, что выделенность минимумов при $p = 3$ при низких концентрациях электронов нельзя объяснить уширением уровней. С другой стороны, такое поведение удивительно похоже на эффект исчезновения циклотронных минимумов магнитосопротивления при низких плотностях электронов в кремниевых МОП транзисторах, в то время как спиновые минимумы сохраняются вплоть до заметно более низких плотностей [50], что означает, что циклотронное расщепление становится равным сумме спинового и долинного расщеплений, а соответствующие долинные подуровни сливаются [18].

Измерения в наклонных магнитных полях позволяют сделать выбор между спиновым и долинным происхождением эффекта. Зависимость магнитосопротивления от обратного фактора заполнения показана для угла наклона $\Theta \approx 61^\circ$ при различных плотностях электронов на рис. 8b. Здесь авторы ориентируются на минимум сопротивления при $\nu = 3/5$. Поведение, наблюдаемое для минимума $\nu = 3/5$, очень похоже на поведение в перпендикулярных магнитных полях, что справедливо для всех образцов и углов наклона. Определяем плотность n_s^*, при которой

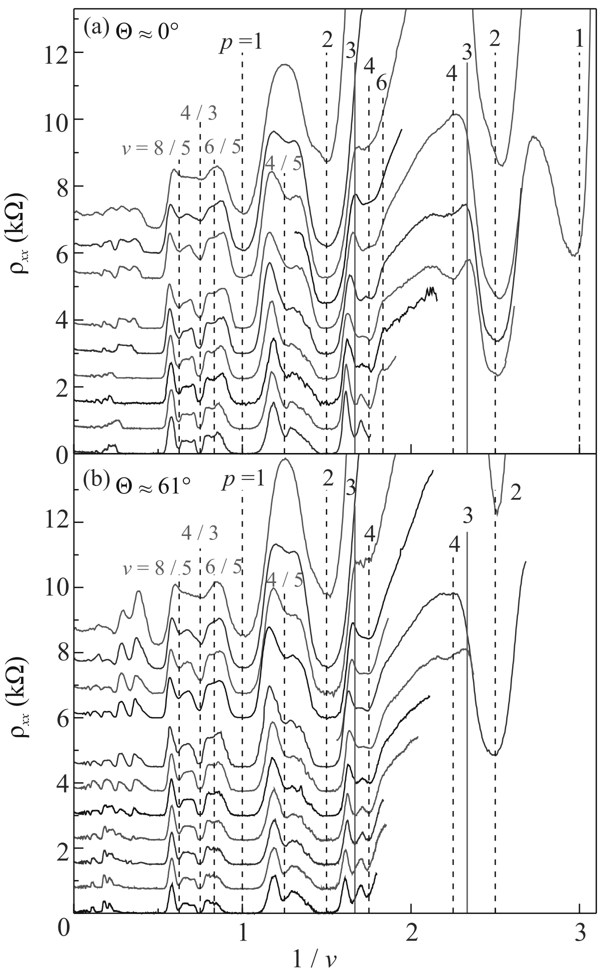


Рис. 8. (Цветной онлайн) Магнитосопротивление в квантовой яме SiGe/Si/SiGe при $T \approx 0.03$ K (a) – в перпендикулярных магнитных полях при плотностях электронов (сверху вниз) 2.14, 2.81, 3.48, 3.81, 4.15, 4.82, 5.49, 6.15, 6.82 и 7.49×10^{10} см$^{-2}$, и (b) – в наклонных магнитных полях при плотностях электронов (сверху вниз) 2.14, 2.81, 3.48, 4.15, 4.48, 4.82, 5.49, 6.15, 6.82, 7.49, 8.16 и 8.83×10^{10} см$^{-2}$. Кривые сдвинуты по вертикали на 750 Ω для ясности. Штриховыми вертикальными линиями отмечены ожидаемые положения наблюдаемых минимумов сопротивления, а сплошными вертикальными линиями – ожидаемые, но не наблюдаемые минимумы сопротивления при низких плотностях. Из работы [20]

начинает наблюдаться минимум сопротивления при $\nu = 3/5$, и строим ее зависимость от угла наклона, как показано на рис. 9b. Величина n_s^* оказывается независимой в пределах экспериментальной погрешности от угла наклона магнитного поля. Поскольку спиновое расщепление определяется полным магнитным полем $\Delta_s = g\mu_{\rm B}B_{\rm tot}$, можно ожидать, что значение n_s^* должно уменьшаться с углом наклона (вставка к рис. 9b), что противоречит эксперименту. Авто-

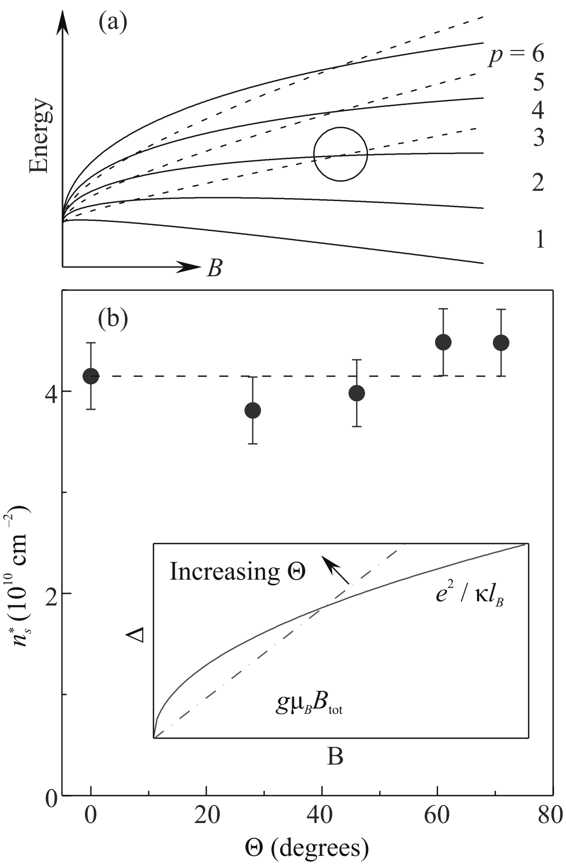


Рис. 9. (Цветной онлайн) (a) – Схематическое поведение уровней композитных фермионов с учетом расщепления между верхней (штриховые линии) и нижней (сплошные линии) долинами при изменении магнитного поля B при фиксированном p. В интересной области при $p = 3$, отмеченной кружком, происходит либо простое пересечение уровней, либо слияние/зацепление уровней, сопровождаемое постепенным изменением заполнений обоих уровней. (b) – Плотность n_s^*, при которой начинает наблюдаться минимум сопротивления при $\nu = 3/5$ в квантовой яме SiGe/Si/SiGe, как функция угла наклона. Штриховая горизонтальная линия — линейная апроксимация данных. На вставке схематично (с точностью до численного множителя) показаны зависимости циклотронной энергии композитных фермионов (сплошная линия) и зеемановской энергии (штрих-пунктирная линия) от магнитного поля B при фиксированном угле наклона. Наклон прямой линии увеличивается с увеличением Θ. Из работы [20]

ры заключают, что спиновое происхождение эффекта можно исключить, выявляя его долинное происхождение. Долинное расщепление Δ_v, как ожидается, нечувствительно к параллельной компоненте магнитного поля [51], так что величина n_s^* не должна зависеть от угла наклона, что согласуется с экспериментом. Таким образом, эти результаты указывают на пересечение или слияние квантовых уровней композитных фермионов с разными долинными индексами, что свидетельствует о влиянии долин на дроби.

Понятно, что для пересечения или слияния уровней композитных фермионов с разными долинными индексами функциональные зависимости обоих расщеплений от магнитного поля (или электронной плотности) при фиксированном p должны различаться. Действительно, циклотронная энергия композитных фермионов $\hbar\omega_c^*$ определяется энергией кулоновского взаимодействия $e^2/\kappa l_{\mathrm{B}}$, а долинное расщепление Δ_v в двумерной электронной системе в Si изменяется линейно с изменением магнитного поля (или плотности электронов) [52]. В сильных магнитных полях долинное расщепление сильно превышает циклотронную энергию композитных фермионов, так что для случая $p = 3$ все три заполненных уровня композитных фермионов принадлежат одной долине (рис. 9a). При уменьшении магнитного поля при фиксированном p нижайший уровень с противоположным долинным индексом должен совпасть с верхним заполненным уровнем, приводя к исчезновению энергетической щели и исчезновению минимума сопротивления при $p = 3$. При дальнейшем уменьшении магнитного поля должно происходить либо простое пересечение уровней и повторное появление щели, либо слияние/зацепление уровней, сопровождаемое постепенным изменением заполнений обоих уровней [18]. По аналогии с кремниевыми МОП-транзисторами весьма вероятно, что слияние уровней композитных фермионов с разными долинными индексами происходит в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe со сверхнизким беспорядком.

VI. Заключение. Мы обсудили недавние экспериментальные результаты, указывающие на уплощение зон и слияние уровней Ландау на уровне химического потенциала в сильно коррелированных двумерных электронных системах. Показано, что числа заполнения квантовых состояний на уровне химического потенциала могут быть разными в диапазоне от нуля до единицы, что свидетельствует о не ферми-жидкостном виде функции распределения.

Группа из Института физики твердого тела была поддержана в рамках госзадания. С. В. Кравченко был поддержан грантом National Science Foundation # 1904024.

1. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Part 2*, Pergamon, Oxford (1980).
2. V. A. Khodel and V. R. Shaginyan, JETP Lett. **51**, 553 (1990).
3. G. E. Volovik, JETP Lett. **53**, 222 (1991).

4. P. Noziéres, J. Phys. I (France) **2**, 443 (1992).
5. V. A. Khodel, J. W. Clark, and M. V. Zverev, Phys. Rev. B **78**, 075120 (2008).
6. V. R. Shaginyan, M. Y. Amusia, A. Z. Msezane, and K. G. Popov, Phys. Rep. **492**, 31 (2010).
7. J. Clark, M. Zverev, and V. Khodel, Ann. Phys. **327**, 3063 (2012).
8. M. V. Zverev, V. A. Khodel, and S. S. Pankratov, JETP Lett. **96**, 192 (2012).
9. T. T. Heikkila, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, JETP Lett. **94**, 233 (2011).
10. Ed. by K. Bennemann and J. Ketterson, *Novel Superfluids*, Oxford University Press, Oxford (2013).
11. S. Peotta and P. Torma, Nat. Commun. **6**, 8944 (2015).
12. G. E. Volovik, Phys. Scr. T **164**, 014014 (2015).
13. M. Amusia, K. Popov, V. Shaginyan, and W. Stefanowicz, *Theory of Heavy-Fermion Compounds*, Springer International Publishing, N.Y. (2015).
14. A. Camjayi, K. Haule, V. Dobrosavljević, and G. Kotliar, Nat. Phys. **4**, 932 (2008).
15. D. Yudin, D. Hirschmeier, H. Hafermann, O. Eriksson, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. Lett. **112**, 070403 (2014).
16. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, Sci. Rep. **7**, 14539 (2017).
17. V. A. Khodel, J. W. Clark, H. Li, and M. V. Zverev, Phys. Rev. Lett. **98**, 216404 (2007).
18. A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, J. W. Clark, V. R. Shaginyan, M. V. Zverev, and V. A. Khodel, Phys. Rev. Lett. **112**, 186402 (2014).
19. A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, J. W. Clark, V. R. Shaginyan, M. V. Zverev, and V. A. Khodel, JETP Lett. **102**, 36 (2015).
20. V. T. Dolgopolov, M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, Phys. Rev. B **103**, L161302 (2021).
21. S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik, Rep. Prog. Phys. **67**, 1 (2004).
22. A. A. Shashkin, Phys.-Uspekhi **48**, 129 (2005).
23. V. M. Pudalov, Phys.-Uspekhi **49**, 203 (2006).
24. A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgopolov, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 073303 (2002).
25. A. Mokashi, S. Li, B. Wen, S. V. Kravchenko, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, and M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. **109**, 096405 (2012).
26. V. T. Dolgopolov, JETP Lett. **101**, 282 (2015).
27. A. Y. Kuntsevich, Y. V. Tupikov, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, Nat. Commun. **6**, 7298 (2015).
28. A. A. Shashkin, A. A. Kapustin, E. V. Deviatov, V. T. Dolgopolov, and Z. D. Kvon, Phys. Rev. B **76**, 241302 (2007).
29. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, Appl. Phys. Lett. **106**, 092102 (2015).
30. M. Y. Melnikov, V. T. Dolgopolov, A. A. Shashkin, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, J. Appl. Phys. **122**, 224301 (2017).
31. T. Okamoto, K. Hosoya, S. Kawaji, and A. Yagi, Phys. Rev. Lett. **82**, 3875 (1999).
32. S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **85**, 2164 (2000).
33. G. Fleury and X. Waintal, Phys. Rev. B **81**, 165117 (2010).
34. T. M. Lu, L. Sun, D. C. Tsui, S. Lyon, W. Pan, M. Mühlberger, F. Schäffler, J. Liu, and Y. H. Xie, Phys. Rev. B **78**, 233309 (2008).
35. V. T. Renard, B. A. Piot, X. Waintal, G. Fleury, D. Cooper, Y. Niida, D. Tregurtha, A. Fujiwara, Y. Hirayama, and K. Takashina, Nat. Commun. **6**, 7230 (2015).
36. V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, and H. Kojima, Phys. Rev. B **90**, 075147 (2014).
37. V. T. Dolgopolov, Phys.-Uspekhi **62**, 633 (2019).
38. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, S. V. Kravchenko, S.-H. Huang, and C. W. Liu, JETP Lett. **100**, 114 (2014).
39. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, A. Y. X. Zhu, S. V. Kravchenko, S.-H. Huang, and C. W. Liu, Phys. Rev. B **99**, 081106(R) (2019).
40. V. T. Dolgopolov, A. A. Shashkin, E. V. Deviatov, F. Hastreiter, M. Hartung, A. Wixforth, K. L. Campman, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **59**, 13235 (1999).
41. A. G. Davies, C. H. W. Barnes, K. R. Zolleis, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **54**, R17331 (1996).
42. E. V. Deviatov, V. S. Khrapai, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, F. Hastreiter, A. Wixforth, K. L. Campman, and A. C. Gossard, JETP Lett. **71**, 496 (2000).
43. C. A. Duarte, G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, A. K. Bakarov, and J. C. Portal, Phys. Rev. B **76**, 075346 (2007).
44. J. K. Jain, Phys. Rev. Lett. **63**, 199 (1989).
45. B. I. Halperin, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **47**, 7312 (1993).
46. J. K. Jain, Science **266**, 1199 (1994).
47. T. Chakraborty, Adv. Phys. **49**, 959 (2000).
48. J. K. Jain, *Composite Fermions*, Cambridge University Press, N.Y. (2007).
49. V. T. Dolgopolov, M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, JETP Lett. **107**, 794 (2018).
50. S. V. Kravchenko, A. A. Shashkin, D. A. Bloore, and T. M. Klapwijk, Solid State Commun. **116**, 495 (2000).
51. V. S. Khrapai, A. A. Shashkin, and V. T. Dolgopolov, Phys. Rev. Lett. **91**, 126404 (2003).
52. V. S. Khrapai, A. A. Shashkin, and V. T. Dolgopolov, Phys. Rev. B **67**, 113305 (2003).

Pis'ma v ZhETF, vol. 116, iss. 3, pp. 171 – 172

Dynamics of nonequilibrium conduction electrons in ferromagnetic metal layer in spin pumping experiments

K. L. Stankevich[1)]

Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics Russian Academy of Sciences, 125009 Moscow, Russia

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

Submitted 4 May 2022
Resubmitted 14 June 2022
Accepted 14 June 2022

DOI: 10.31857/S123456782215006X, EDN: jfryij

Spin pumping experiments play a key role in fundamental research in spintronics. The spin pumping effect, that is usually studied in ferromagnet/normal metal (F/NM) bilayers, originates from the exchange interaction between conduction electrons and localized electrons of magnetisation. The localized spins in the ferromagnetic layer precess under the ferromagnetic resonance (FMR). This precession is steadily transferred through the exchange interaction to the conduction electrons that propagate due to diffusion motion into the metal layer resulting in the pure spin current without electric charge transfer. This phenomenon underlies many different spintronic technologies.

In this work we develop a new theoretical model, based on classical diffusive equations, to describe the effect of spin pumping in bilayers with a ferromagnetic metal (FM) layer. The proposed model includes the effect of spin memory loss that arises due to possible spin relaxation at FM/NM interface. Within this model we have obtained explicit expressions for the nonequilibrium magnetization carried by the conduction electrons in ferromagnetic and metallic layers. It allowed us to obtain analytical expressions for the effective spin mixing conductance, inverse Edelstein effect and spin-memory loss parameter. Within our model we have also described for the first time the effect of self induced ISHE that was recently observed in permalloy and FeGaB.

We base our theoretical model on classical diffusive equation for the conduction electrons that was derived in [1] for the FM layer and in [2] for the NM layer. We consider that the sample is located in the xz plane, external magnetic field is directed along $\hat{z}$ axis. The spin current flows perpendicular to the plane of the sample along $\hat{y}$ axis. The thickness of the FM (NM) layer is t_F (t_N).

We use the boundary conditions at the edges of the sample ($y = -t_F$ and $y = t_N$) that displays the zero spin current

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial \boldsymbol{\delta}\mathbf{m}}{\partial y}\right|_{y=-t_F} = 0, \\[2ex] \left.\dfrac{\partial \boldsymbol{\delta\mu}}{\partial y}\right|_{y=t_N} = 0. \end{cases} \tag{1}$$

At the FM/NM ($y = 0$) interface we use the following boundary conditions

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\boldsymbol{\delta}\mathbf{m}}{\chi_F}\right|_{y=0} = \left.\dfrac{\boldsymbol{\delta\mu}}{\chi_N}\right|_{y=0}, \\[2ex] \left.\left(D_F\dfrac{\partial \boldsymbol{\delta}\mathbf{m}}{\partial y} + \beta\boldsymbol{\delta}\mathbf{m}\right)\right|_{y=0} = \left.D_N\dfrac{\partial \boldsymbol{\delta\mu}}{\partial y}\right|_{y=0}, \end{cases} \tag{2}$$

where $\boldsymbol{\delta}\mathbf{m}$ ($\boldsymbol{\delta\mu}$) is the nonequilibrium magnetization, D_F (D_N) is the diffusive constant, χ_F (χ_N) is the spin susceptibility of the conduction electrons in FM (NM) layer.

The first boundary condition was derived in [3]. This condition expresses the equality of free energy at FM/NM interface (see [3] for the details). The second one expresses the flow of a spin current across the interface with spin relaxation. The amplitude of the spin relaxation at the interface is given by the parameter β. We have introduced the spin relaxation at the interface in the similar way as it is done for the spin relaxation in the bulk of a metal layer. The amplitude of the spin relaxation at the interface should be found with the use of the quantum theory. Therefore, in this paper we fix the term with spin relaxation at the interface *ad hoc.*

[1)]e-mail: kl.stankevich@physics.msu.ru

We have obtained the following solutions for the nonequilibrium magnetization in FM and NM layers

$$\boldsymbol{\delta\mu}(y) = -\frac{\mathrm{Re}\,[A]}{\cosh\left(\frac{t_N}{\lambda}\right)}\cosh\left(\frac{t_N - y}{\lambda}\right)\hat{\mathbf{M}}\times \times\frac{\partial\hat{\mathbf{M}}}{\partial t} + \frac{\mathrm{Im}\,[A]}{\cosh\left(\frac{t_N}{\lambda}\right)}\cosh\left(\frac{t_N - y}{\lambda}\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{M}}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\delta m}(y) = -\,\mathrm{Re}\left[\frac{\bar{A}}{\sinh\left(\frac{t_F}{\Lambda}\right)}\cosh\left(\frac{t_F + y}{\Lambda}\right) - \bar{A}_0\right]\hat{\mathbf{M}}\times \times\frac{\partial\hat{\mathbf{M}}}{\partial t} + \mathrm{Im}\left[\frac{\bar{A}}{\sinh\left(\frac{t_F}{\Lambda}\right)}\cosh\left(\frac{t_F + y}{\Lambda}\right) - \bar{A}_0\right]\frac{\partial\hat{\mathbf{M}}}{\partial t}, \quad (4)$$

where $\Lambda = \sqrt{D_F\left(1/\tau_F - i/\tau_{ex}^F\right)^{-1}}$ is the complex spin diffusion length in ferromagnet (τ_{ex}^F describes the strength of the exchange interaction between localized and conduction electrons), λ is the spin diffusion constant in NM. The amplitudes of the nonequilibrium magnetization are expressed through the complex constants A, $\bar{A}$ and $\bar{A}_0$ which are given by

$$A = -i\frac{\chi_N}{\tau_{ex}^F D_F\gamma}\Lambda^2\frac{\lambda_{av}}{\Lambda_{\text{eff}}\coth\left(\dfrac{t_F}{\Lambda}\right) + \lambda_{av}}, \quad (5)$$

$$\bar{A} = i\frac{\chi_F}{\tau_{ex}^F D_F\gamma}\Lambda^2\frac{\Lambda_{\text{eff}}}{\Lambda_{\text{eff}}\coth\left(\dfrac{t_F}{\Lambda}\right) + \lambda_{av}}, \quad (6)$$

$$\bar{A}_0 = i\frac{\chi_F}{\tau_{ex}^F D_F\gamma}\Lambda^2. \quad (7)$$

We have defined new effective spin diffusion lengths λ_{eff} and Λ_{eff} in order not to overload equations (5)–(7)

$$\lambda_{\text{eff}} = \lambda\frac{D_F\chi_F + D_N\chi_N}{2D_N\chi_N}, \quad (8)$$

$$\Lambda_{\text{eff}} = \Lambda\frac{D_F\chi_F + D_N\chi_N}{2D_F\chi_F}. \quad (9)$$

The effect of the spin relaxation at the FM/NM interface is expressed by the constant λ_{so} that can be considered as an effective spin diffusion length at the FM/NM interface

$$\lambda_{so} = \frac{D_F\chi_F + D_N\chi_N}{2\beta\chi_F}. \quad (10)$$

The spin diffusion length λ_{so} plays the similar role as the spin diffusion length in the metal layer. As it was mentioned earlier, the spin relaxation at the interface was introduced in the similar way to the relaxation in the bulk. Therefore, we will use the averaged spin diffusion length that takes into account the relaxation both at the interface and in the bulk of a metal layer

$$\lambda_{av} = \frac{\lambda_{so}\lambda_{\text{eff}}}{\lambda_{so}\tanh\left(\frac{t_N}{\lambda}\right) + \lambda_{\text{eff}}}. \quad (11)$$

This notation gives possibility to consider easily the case without interface spin relaxation if one substitutes in solutions $\lambda_{av} \to \lambda_{\text{eff}}\coth\left(\frac{t_N}{\lambda}\right)$. At the same time we can consider the case of the spin pumping in the single ferromagnetic layer when only spin relaxation at the layer interface plays role $\lambda_{av} \to \lambda_{so}$. Such situation is realized in experiments on self-induced inverse spin Hall effect that are discussed below.

The complex amplitudes A and $\bar{A}$ set the inhomogeneous nonequilibrium magnetization in the bulk of FM. The term proportional to the amplitude $\bar{A}_0$ describes the nonequilibrium magnetization of the conduction electrons in the single ferromagnetic layer evenly distributed over the sample. This term coincides with [1] where the boundary conditions were neglected.

Solutions (3)–(7) for the nonequilibrium magnetization in FM/NM bilayers are the main result of the paper. It describes the evolution of the nonequilibrium magnetization under the spin pumping conditions. Using these equations we reproduce the main results for the spin pumping in heterostructure. The advantage of the used approach and corresponding solutions for the nonequilibrium magnetization is that it allows one to express all physical quantities in terms of fundamental constants, that can be useful in an analysis of the experimental data.

This work was supported by the Russian Science Foundation under Grant # 21-79-10396.

This is an excerpt of the article "Dynamics of nonequilibrium conduction electrons in ferromagnetic metal layer in spin pumping experiments". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022600835.

1. Sh. Zhang and Z. Li, Phys. Rev. Lett. **93**(12), 127204 (2004).
2. Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh, Nature **464**(7286), 262 (2010).
3. R.H. Silsbee, A. Janossy, and P. Monod, Phys. Rev B **19**(9), 4382 (1979).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 3, с. 173 – 178 © 2022 г. 10 августа

Вклад флуктуаций параметра порядка в генерацию второй гармоники в двумерных мономолекулярных сверхпроводниках[1)]

М. В. Боев[+*2)], *В. М. Ковалев*[+]

[+]*Новосибирский государственный технический университет, 630073 Новосибирск, Россия*

[*]*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 13 мая 2022 г.
После переработки 22 июня 2022 г.
Принята к публикации 22 июня 2022 г.

В рамках подхода, основанного на временном уравнении Гинзбурга–Ландау, построена теория генерации второй гармоники в двумерном сверхпроводнике во флуктуационном температурном режиме. Получены выражения для наведенного электрического тока, обусловленного флуктуациями параметра порядка, и осциллирующего на удвоенной частоте падающей внешней электромагнитной волны. Показано, что эффект имеет существенную сингулярность по температуре: кинетические коэффициенты, описывающие генерацию второй гармоники, обратно пропорциональны квадрату приведенной температуры. Оценка величины эффекта для двумерного сверхпроводника на базе мономолекулярного слоя дисульфида молибдена демонстрирует возможность экспериментальной проверки теории.

DOI: 10.31857/S1234567822150071, EDN: jgdzeo

1. Введение. Квадратичный отклик подвижных носителей заряда на воздействие внешней монохроматической электромагнитной (ЭМ) волны можно условно разделять на два типа. Первый тип отклика заключается в возникновении стационарной во времени реакции системы и, например, возбуждении в системе стационарного электрического тока. Второй тип квадратичного отклика является принципиально динамическим и в результате отклик различных физических величин системы (плотность тока, поляризация и т.п.) проявляется в виде осциллирующих во времени величин на удвоенной частоте падающей внешней монохроматической ЭМ волны. Теоретическое изучение второго типа отклика в двумерных сверхпроводниках составляет содержание настоящей работы.

Как известно, осцилляции плотности электрического заряда (или плотности тока) на удвоенной частоте выступают источником вторичного ЭМ излучения на удвоенной частоте – генерации в системе второй гармоники монхроматического ЭМ поля. Физические характеристики, описывающие эффект генерации второй гармоники (коэффициент конверсии, поляризация) являются предметом теоретического и экспериментального исследования во многих системах, в частности: в обычных полупроводниках [1], графене [2–4], вейлевских полуметаллах [5], дихалькогенидах переходных металлов [6, 7], сверхпроводниках [8].

Совершенствование технологий получения двумерных структур значительно расширило возможности экспериментальных исследований двумерных сверхпроводников. В настоящее время ведется активное экспериментальное изучение сверхпроводящих пленок толщиной вплоть до монослоя [9]. Интересным открытием явилось обнаружение сверхпроводящих свойств у ряда полупроводниковых материалов, принадлежащих к группе дихалькогенидов, при достаточно высоких концентрациях электронов [10, 11]. В частности, значительное внимание привлекает дисульфид молибдена, MoS_2, как типичный представитель семейства мономолекулярных слоев дихалькогенидов переходных металлов [12, 13]. Экспериментальное открытие сверхпроводящих свойств монослоев на основе дихалькогенидов переходных металлов, в частности, и в MoS_2, стимулировало активное исследование их сверхпроводящих свойств. Структура спин-орбитального взаимодействия в этих материалах такова, что спины электронов и дырок направлены строго перпендикулярно плоскости монослоя, что часто описывается как эффективное зеемановское расщепление спинов встроенным полем, направленным противоположно в неэквивалентных долинах. В результате при описании сверхпроводящих свойств этих материалов часто применяют термин “изинговское спин-орбитальное

[1)]См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru.

[1)]e-mail: boevm@isp.nsc.ru

взаимодействие” и “изинговские сверхпроводники” (*Ising superconductors*) [14, 15]. В настоящее время принято считать, что спаривание в этих материалах имеет s-волновой характер с возможным подмешиванием спаривания в триплетном канале. В рамках теоретических исследований основное внимание уделяется изучению равновесных свойств этих материалов: фазовых диаграмм [16], изучению смешанного синглет-триплетного типа спаривания [17], влияния эффектов примесного рассеяния на величину сверхпроводящей щели [18, 19]. Важно отметить, что область температур вблизи критической точки перехода, $T \gtrsim T_c$, остается слабо изученной в этих материалах. Учитывая прогресс исследований флуктуационных явлений в сверхпроводниках [20], в настоящей работе мы развиваем теорию, описывающую осцилляции (на удвоенной частоте) тока флуктуаций параметра порядка в двумерном сверхпроводнике как отклик на внешнее монохроматическое электромагнитное воздействие, и приводим оценки величины эффекта для монослоевого сверхпроводника на базе соединения MoS_2.

2. Модель. Пусть на двумерный сверхпроводник падает плоская монохроматическая электромагнитная волна с углом скольжения θ (рис. 1). Представим

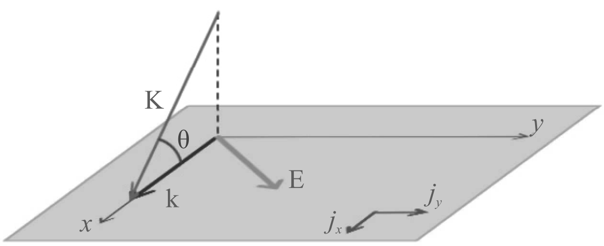


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема геометрии изучаемой системы. $\mathbf{K}$ – волновой вектор падающей электромагнитной волны, $\mathbf{k}$ – его внутриплоскостная проекция

вектор напряженности электрического поля волны в комплексной форме:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}e^{i\mathbf{kr}-i\Omega t} + \mathbf{E}^* e^{-i\mathbf{kr}+i\Omega t}, \tag{1}$$

где Ω – частота ЭМ волны, $k \equiv |\mathbf{k}| = \cos(\theta)\Omega/c$ и $\mathbf{E}$ – проекции ее волнового вектора и комплексной амплитуды на плоскость сверхпроводника соответственно, c – скорость света. В общем виде отклик второго порядка на монохроматическую плоскую волну имеет вид

$$j_\alpha(\mathbf{r},t) = \sigma_{\alpha\beta\gamma}(\Omega,\mathbf{k})E_\beta(\mathbf{r},t)E_\gamma(\mathbf{r},t), \tag{2}$$

где $j_\alpha(\mathbf{r},t)$ – индуцированный ЭМ волной электрический ток, а $\sigma_{\alpha\beta\gamma}$ – функция квадратичного отклика системы. В данной работе нас интересует осциллирующая компонента электрического тока. Чтобы выделить ее, подставим в (2) выражение (1) и опустим члены типа $E_\beta E_\gamma^*$, отвечающие за возбуждение однородного стационарного тока:

$$\begin{gathered} j_\alpha(\mathbf{r},t) = j_\alpha(\Omega,\mathbf{k})e^{2i\mathbf{kr}-2i\Omega t} + \text{c.c.}, \\ j_\alpha(\Omega,\mathbf{k}) = \tilde{\sigma}_{\alpha\beta\gamma}(\Omega,\mathbf{k})E_\beta E_\gamma. \end{gathered} \tag{3}$$

Условимся считать, что ось x ориентирована по волновому вектору $\mathbf{k}$ (рис. 1), тогда система симметрична относительно зеркального отображения $y \to -y$, и из всех компонент тензора $\tilde{\sigma}_{\alpha\beta\gamma}$ не равны нулю лишь три: $\tilde{\sigma}_{xxx}$, $\tilde{\sigma}_{xyy}$ и $\tilde{\sigma}_{yxy}$. В силу симметрии системы относительно вращений в плоскости сверхпроводника только две из трех компонент тензора являются независимыми, а именно, имеет место соотношение $\tilde{\sigma}_{yxy} = \tilde{\sigma}_{xxx} - \tilde{\sigma}_{xyy}$. В этой связи удобно представить искомые токи в следующем виде:

$$j_x(\Omega,\mathbf{k}) = Q_1(\Omega,\mathbf{k})(E_x^2 + E_y^2) + Q_2(\Omega,\mathbf{k})(E_x^2 - E_y^2), \tag{4a}$$

$$j_y(\Omega,\mathbf{k}) = 2Q_2(\Omega,\mathbf{k})E_xE_y, \tag{4b}$$

где $Q_{1,2} = (\tilde{\sigma}_{xxx} \pm \tilde{\sigma}_{xyy})/2$. Анализ частотной и температурной зависимостей функций Q_1 и Q_2 является целью настоящей работы.

Отыскание функций квадратичного отклика флуктуаций параметра порядка будем проводить в рамках подхода [21], в основе которого лежит анализ временного уравнения Гинзбурга–Ландау (ГЛ) для двумерного сверхпроводника в поле электромагнитной волны:

$$\left\{\gamma\frac{\partial}{\partial t} + \alpha T_c\left[\epsilon + \xi^2\left(\hat{\mathbf{p}} - 2e\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2\right]\right\}\psi(\mathbf{r},t) = f(\mathbf{r},t), \tag{5}$$

где ψ – волновая функция флуктуационных куперовских пар, $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ – оператор импульса, ξ – корреляционная длина, $\epsilon = (T-T_c)/T_c$ – приведенная температура, T_c – температура сверхпроводящего перехода, α – параметр разложения ГЛ, $e = -|e|$ – заряд электрона, $\mathbf{A}$ – проекция векторного потенциала ЭМ волны на плоскость сверхпроводника, причем выбрана калибровка $\mathbf{E} = -\partial_t\mathbf{A}$, $f(\mathbf{r},t)$ – сила Ланжевена, моделирующая белый шум равновесных флуктуаций параметра порядка в системе. Здесь и далее мы положили $\hbar = k_B = 1$. Параметр $\gamma = \gamma' + i\gamma''$ является комплекснозначной величиной. Вещественная часть этого параметра пропорциональна времени ГЛ $\gamma' = \alpha T_c\epsilon\tau_{GL}$, которое в рамках теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) имеет простой вид $\tau_{GL} = \pi/8(T-T_c)$, и, таким образом, $\gamma' = \pi\alpha/8$. Наличие мнимой части, $\gamma'' = -(\alpha T_c/2)\partial T_c/\partial E_F$, обусловлено требованием калибровочной инвариантности временного уравнения ГЛ [22] и может иметь различную микроскопическую природу (например, быть следствием асимметрии электрон-дырочного спектра [23]). Роль параметра γ'' различна в отдельных эффектах. Так, например, он не входит в функции линейного отклика флуктуаций на электрическое поле, но является ключевым во флуктуационном эффекте Холла [20]. Далее предполагается, что мнимая часть параметра γ мала по сравнению с вещественной, $\eta \equiv \gamma''/\gamma' \ll 1$.

Перепишем уравнение (5) в операторной форме:

$$\left\{\hat{L}^{-1} - \hat{M}_1 - \hat{M}_2\right\}\psi(\mathbf{r},t) = f(\mathbf{r},t), \tag{6}$$

где

$$\hat{L}^{-1} = \gamma\frac{\partial}{\partial t} + \alpha T_c[\epsilon + \xi^2\mathbf{p}^2], \tag{7a}$$

$$\hat{M}_1 = \alpha T_c\xi^2 2e(\mathbf{pA} + \mathbf{Ap}), \tag{7b}$$

$$\hat{M}_2 = -\alpha T_c\xi^2(2e)^2\mathbf{A}^2. \tag{7c}$$

Будем искать решение в виде разложения по степеням амплитуды электромагнитной волны $\psi \approx \psi_0 hm + \psi_1 + \psi_2$. Так как нас интересуют эффекты второго порядка, то и разложение ведем до слагаемых $\sim A_iA_j$. Формальное решение уравнения (6) можно представить в виде

$$\psi_0(\mathbf{r},t) = \hat{L}f(\mathbf{r},t), \tag{8a}$$

$$\psi_1(\mathbf{r},t) = \hat{L}\hat{M}_1\hat{L}f(\mathbf{r},t), \tag{8b}$$

$$\psi_2(\mathbf{r},t) = (\hat{L}\hat{M}_1\hat{L}\hat{M}_1 + \hat{L}\hat{M}_2)\hat{L}f(\mathbf{r},t). \tag{8c}$$

Для определения измеримых величин, в частности – электрического тока, достаточно знать лишь корреляционные свойства флуктуаций. Спектральные характеристики сил Ланжевена выражаются следующим образом:

$$\langle f^*(\mathbf{r},t)f(\mathbf{r}',t')\rangle = 2T_c\gamma'\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t'), \tag{9}$$

где $\langle ...\rangle$ означает операцию усреднения по флуктуациям. Так как интересующие нас физические величины определяются усреднением соответствующих операторов по флуктуациям, знание лишь корреляционной функции (9) достаточно для определения отклика системы.

Задача состоит в вычислении флуктуационных поправок к электрическому току, индуцированному электромагнитным излучением. Выражение для оператора плотности тока получаем варьированием функционала ГЛ $\mathcal{F}$ по векторному потенциалу $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{j} \equiv -\left\langle\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mathbf{A}}\right\rangle. \tag{10}$$

Как обычно, в случае квадратичного закона дисперсии, общее выражение для тока удобно разделить на пара- и диамагнитный вклады:

$$\mathbf{j}^P = 4e\alpha T_c\xi^2\mathrm{Re}[\langle\psi^*\hat{\mathbf{p}}\psi\rangle], \tag{11a}$$

$$\mathbf{j}^D = -8e^2\alpha T_c\xi^2\langle|\psi|^2\rangle\mathbf{A}. \tag{11b}$$

Далее под обозначением $\mathbf{j}$ мы будем подразумевать только квадратичные поправки к току.

Рассмотрим вначале диамагнитный вклад:

$$\mathbf{j}^D = -8e^2\alpha T_c\xi^2\big(\langle\psi_0^*\psi_1\rangle + \langle\psi_1^*\psi_0\rangle\big)\mathbf{A}. \tag{12}$$

В формуле (12) мы ограничились учетом линейной поправки ψ_1 к параметру порядка, так как нас интересует отклик второго порядка по амплитуде волны. Выполним усреднение первого слагаемого в выражении (12):

$$\langle\psi_0^*\psi_1\rangle = \alpha T_c\xi^2 2e\langle\psi_0^*\hat{L}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}})\psi_0\rangle. \tag{13}$$

Разлагая все величины по Фурье-компонентам и используя спектральные свойства белого шума (9), получаем:

$$\langle\psi_0^*\psi_1\rangle = 4e\alpha T_c^2\xi^2\gamma'\int\frac{d\mathbf{q}d\omega}{(2\pi)^3}|L_{\mathbf{q}}(\omega)|^2 \Bigg[L_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}(\omega+\Omega)[2\mathbf{q}+\mathbf{k}]\mathbf{a}_0e^{i\mathbf{kr}-i\Omega t} + L_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}(\omega-\Omega)[2\mathbf{q}-\mathbf{k}]\mathbf{a}_0^*e^{-i\mathbf{kr}+i\Omega t}\Bigg], \tag{14}$$

где

$$L_{\mathbf{q}\omega} = \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - i\gamma\omega}, \tag{15a}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = \alpha T_c[\epsilon + \xi^2\mathbf{q}^2], \tag{15b}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{a}_0e^{i\mathbf{kr}-i\Omega t} + \mathbf{a}_0^*e^{-i\mathbf{kr}+i\Omega t}. \tag{15c}$$

После подстановки (14) в выражение (12) и выполнения замен $\mathbf{q}\to\mathbf{q}\pm\mathbf{k}/2$ и $\omega\to\omega\pm\Omega/2$, выражение для диамагнитного вклада принимает вид:

$$\mathbf{j}^D(\mathbf{r},t) = -64e^3(\alpha T_c\xi^2)^2T_c\gamma'\mathbf{a}_0e^{2(i\mathbf{kr}-i\Omega t)} \int\frac{d\mathbf{q}d\omega}{(2\pi)^3}(\mathbf{qa}_0)\Big[|L_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2}(\omega-\Omega/2)|^2L_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}(\omega+\Omega/2) + |L_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}(\omega+\Omega/2)|^2L^*_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2}(\omega-\Omega/2)\Big], \tag{16}$$

где для краткости представлено лишь слагаемое, осциллирующее на удвоенной частоте, $\sim e^{2(i\mathbf{kr}-i\Omega t)}$. Вычисление интеграла по частоте в (16) проводится обычным образом с помощью теории вычетов. Раскладывая получившееся выражение по малому параметру $\eta = \gamma''/\gamma'$, приходим к

$$\mathbf{j}^D(\mathbf{r},t) = 64i\eta e^3(\alpha T_c\xi^2)^2 T_c \mathbf{a}_0 e^{2(i\mathbf{kr}-i\Omega t)} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{(\mathbf{q}\mathbf{a}_0)}{\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2}[\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}+\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2}-i\gamma'\Omega]} \left\{1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}-\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2}}{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}+\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2}-i\gamma'\Omega}\right\}. \quad (17)$$

В выражении (17) возможно аналитически провести интегрирование по полярному углу. Выбирая вектор $\mathbf{k}$ в качестве направления оси x и используя формулу $\mathbf{a}_0 = i\mathbf{E}/\Omega$, запишем ответ в следующей форме:

$$\mathbf{j}^D(\Omega,\theta) = -\sigma_0 I_1\left(\frac{\epsilon}{k^2\xi^2}, \frac{\pi\Omega}{16T_c k^2\xi^2}\right)\begin{pmatrix} E_x^2 \\ E_xE_y\end{pmatrix}, \quad (18)$$

где I_1 – безразмерный однократный интеграл, зависящий от двух параметров и

$$\sigma_0 = \frac{\eta e^3}{4\Omega k^3\xi^2}. \quad (19)$$

Явный вид I_1 приведен в дополнительных материалах.

Вычисление парамагнитной части тока (11a) выполняется аналогично. Прежде всего, формула (11a) для квадратичного отклика принимает вид

$$\mathbf{j}^P(\mathbf{r},t) = 4e\alpha T_c\xi^2 \mathrm{Re}[\langle\psi_0^*\hat{\mathbf{p}}\psi_2\rangle + \langle\psi_1^*\hat{\mathbf{p}}\psi_1\rangle + \langle\psi_2^*\hat{\mathbf{p}}\psi_0\rangle]. \quad (20)$$

После подстановки в выражение (20) операторов взаимодействия с электромагнитной волной (8b) и (8c) удобно разделить парамагнитный вклад на две части:

$$\mathbf{j}_1^P(\mathbf{r},t) = 4e\alpha T_c\xi^2 \mathrm{Re}\left[\langle\psi_0^*\Big(\hat{\mathbf{p}}\hat{L}\hat{M}_2 + (\hat{L}\hat{M}_2)^+\hat{\mathbf{p}}\Big)\psi_0\rangle\right], \quad (21a)$$

$$\mathbf{j}_2^P(\mathbf{r},t) = 4e\alpha T_c\xi^2 \mathrm{Re}\left[\langle\psi_0^*\Big(\hat{\mathbf{p}}\hat{L}\hat{M}_1\hat{L}\hat{M}_1 + (\hat{L}\hat{M}_1)^+\hat{\mathbf{p}}\hat{L}\hat{M}_1 + (\hat{L}\hat{M}_1\hat{L}\hat{M}_1)^+\hat{\mathbf{p}}\Big)\psi_0\rangle\right]. \quad (21b)$$

После интегрирования по частоте имеем:

$$\mathbf{j}_1^P = 32i\eta e^3(\alpha T_c\xi^2)^2 T_c \mathbf{a}_0^2 e^{2i(\mathbf{kr}-\Omega t)} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{\mathbf{q}}{\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}[\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}-2i\gamma'\Omega]} \left\{1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}-2i\gamma'\Omega}\right\}. \quad (22a)$$

$$\mathbf{j}_2^P = 32i\eta e^3(\alpha T_c\xi^2)^3 T_c e^{2i(\mathbf{kr}-\Omega t)} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{\mathbf{q}\big((2\mathbf{q}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{a}_0\big)\big((2\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{a}_0\big)}{(\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}-2i\gamma'\Omega)(\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{q}}-i\gamma'\Omega)} \left\{\frac{2}{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}} + \left[\frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}}+\frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right] \times\left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}-2i\gamma'\Omega} + \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{q}}-i\gamma'\Omega}\right]\right\}. \quad (22b)$$

Наконец, интегрируя по полярному углу, приходим к выражениям

$$\mathbf{j}_1^P(\Omega,\theta) = -\sigma_0 I_2\left(\frac{\epsilon}{k^2\xi^2}, \frac{\pi\Omega}{16T_c k^2\xi^2}\right)\begin{pmatrix} E_x^2+E_y^2 \\ 0\end{pmatrix} \quad (23a)$$

$$\mathbf{j}_2^P(\Omega,\theta) = -\sigma_0 I_3\left(\frac{\epsilon}{k^2\xi^2}, \frac{\pi\Omega}{16T_c k^2\xi^2}\right)\begin{pmatrix} 3E_x^2+E_y^2 \\ 2E_xE_y\end{pmatrix}. \quad (23b)$$

Явный вид I_2 и I_3 приведен в дополнительных материалах.

3. Обсуждение результатов. На рисунке 2 представлены зависимости функций квадратичного отклика Q_1 и Q_2 от безразмерной величины $k\xi$. Для построения зависимостей использованы следующие параметры. Корреляционная длина полагалась равной $\xi = 10$ нм, критическая температура $T_c = 9$ K, угол скольжения $\theta = \pi/4$, а значение приведенной температуры $\epsilon = 0.1$ выбрано так, чтобы удовлетворить условиям применимости теории ГЛ. Разложение ГЛ справедливо при условии $\epsilon \ll 1$. С другой стороны, при приближении к точке фазового перехода флуктуации параметра усиливаются, и с определенного момента их взаимодействием нельзя пренебрегать. Температурную область сильных флуктуаций ограничивает параметр Гинзбурга–Леванюка $\epsilon \gg \mathrm{Gi} \sim T_c/E_F$. Для сверхпроводящих структур на базе MoS_2 с критической температурой $T_c = 9$ K, эффективной массой электрона $m \approx 0.5m_0$ [24] (где m_0 – масса свободного электрона) и концентрацией электронов $n = 10^{14}\,\text{см}^{-2}$ данный параметр имеет значение порядка $\mathrm{Gi} \sim 10^{-3}$, где использовано определение энергии Ферми с учетом спинового и долинного вырождений, $E_F = \pi n/2m$. Как видно из графиков рис. 2, квадратичный отклик наиболее силен в области малых частот, $k\xi \ll 1$.

Влияние температуры на величину индуцированных токов особенно заметно в области малых частот (рис. 3). Температурная зависимость функций отклика явно нелинейная, например, изменение приведенной температуры на 50 процентов увеличивает высоту максимума $\mathrm{Im}Q_2$ более, чем в два раза.

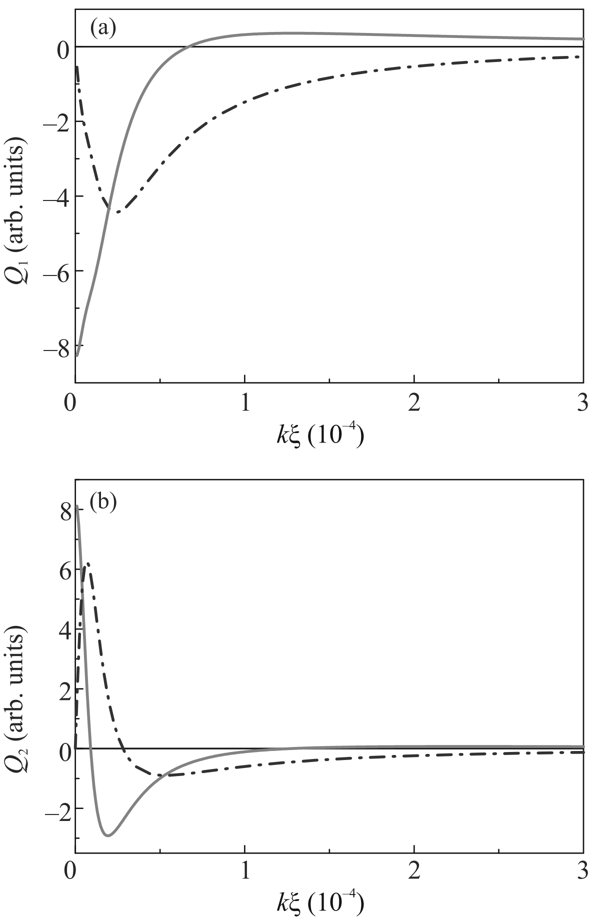


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость функций отклика Q_1 (a) и Q_2 (b) от безразмерной величины $k\xi$. Зеленые сплошные кривые соответствуют вещественным частям функций Q_1 и Q_2, синие штрихпунктирные – мнимым

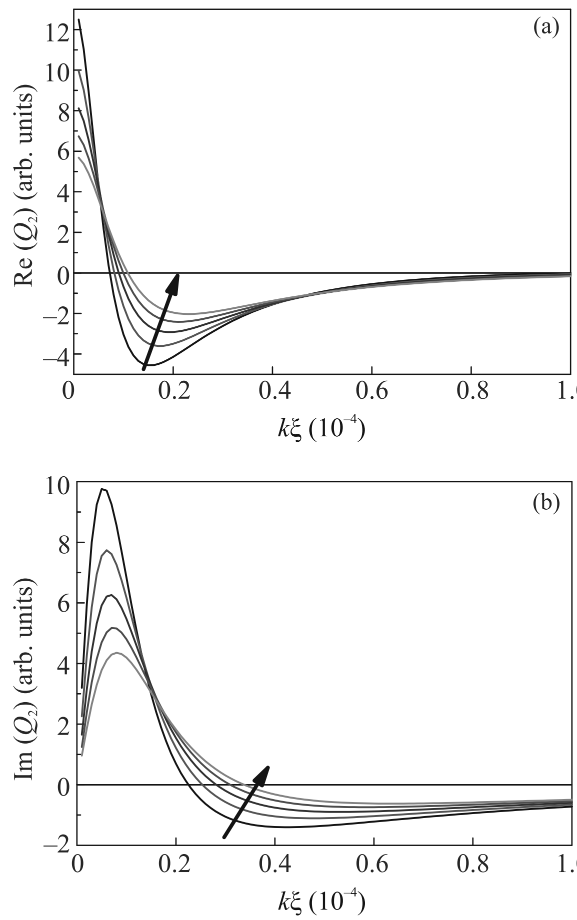


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость вещественной (a) и мнимой (b) частей функции отклика Q_2 от безразмерной величины $k\xi$ при различных значениях приведенной температуры. Стрелка обозначает рост приведенной температуры ϵ от 0.08 до 0.12

Явный вид однократных интегралов I_1, I_2, I_3 позволяет легко исследовать асимптотическое поведение функций отклика. В пределе стационарного поля, $\Omega \to 0$, вещественные части функций отклика принимают конечные значения:

$$\mathrm{Re}\big[Q_1(\Omega = 0)\big] = -\mathrm{Re}\big[Q_2(\Omega = 0)\big] = -\frac{\eta e^3 \xi^2 \cos(\theta)}{48 c \epsilon^2}. \tag{24}$$

В свою очередь мнимые части стремятся к нулю. Этот естественный результат подтверждает, что в пределе стационарного поля эффект запаздывания отклика отсутствует. По предельному выражению (24) возможно делать выводы о влиянии различных параметров на величину изучаемого эффекта. В частности, обратная пропорциональность квадрату приведенной температуры, $\sim \epsilon^{-2}$, объясняет резкое усиление отклика системы при приближении к критической температуре (рис. 3). Кроме того, квадратичный отклик оказывается крайне чувствительным к корреляционной длине, $\sim \xi^2$, что делает этот параметр одним из ключевых в рассматриваемом эффекте.

Выражение (24) также позволяет оценить величину амплитуды осцилляций тока. Эксперименты по измерению параметра η в $\mathrm{MoS_2}$ неизвестны авторам. Однако его величину можно оценить по формуле $\eta \propto |\partial T_c/\partial E_F| \propto T_c/E_F \sim 10^{-3}$ при концентрации электронов $n = 10^{14}$ см$^{-2}$ и критической температуре $T_c = 9$ K. Для сравнения, экспериментально измеренное значение этого параметра в пленках TaN имеет такой же порядок величины [25]. Длина когерентности $\xi \approx \xi_0$ и $\xi \approx \sqrt{\xi_0 l}$ в чистом и грязном пределах соответственно (ξ_0 – длина когерентности БКШ, l – длина свободного пробега). Таким образом, $\xi \sim 10{-}100$ нм. Используя указанные параметры, получаем оценку $j/I \sim [0.01 - 0.1]\cos(\theta)$ нА·см/Вт, где I – интенсивность ЭМ волны.

4. Заключение. Изложенная в настоящей работе теория квадратичного отклика флуктуаций параметра порядка показывает, что частотная зависимость эффекта генерации второй гармоники, обусловленная флуктуациями параметра порядка, качественно подобна вкладу нормальных электронов в генерацию второй гармоники [3]. В то же время, имеют место и существенные отличия, позволяющие разделить оба вклада. Во-первых, температурная зависимость отклика флуктуаций ожидается очень резкой, $\sim \epsilon^{-2}$. Во-вторых, как и для стационарной компоненты электрического тока [26], эффект оказывается пропорциональным параметру γ''. Как упоминалось выше, величина и знак этого интегрального параметра определяется особенностями спектра нормальных электронов, и эффект генерации второй гармоники может выступать здесь как дополнительный независимый метод определения этого параметра наряду с флуктуационным эффектом Холла.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики БАЗИС и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Проект # FSUN-2020-0004).

1. H. V. K. Tom, T. F. Heinz, and Y. R. Shen, Phys. Rev. Lett. **51**, 1983 (1983).
2. J. J. Dean and H. M. van Driel, Phys. Rev. B **82**, 125411 (2010).
3. M. M. Glazov, Письма в ЖЭТФ **93**, 408 (2011).
4. S. Wu, L. Mao, A. M. Jones, W. Yao, C. Zhang, and X. Xu, Nano Lett. **12**, 2032 (2012).
5. L. Wu, S. Patankar, T. Morimoto, N. L. Nair, E. Thewalt, A. Little, J. G. Analytis, J. E. Moore, and J. Orenstein, Nature Phys. **13**, 350 (2017).
6. N. Kumar, S. Najmaei, Q. Cui, et al., Phys. Rev. B **87**, 161403 (2013).
7. L. M. Malard, T. V. Alencar, A. P. M. Barboza, et al., Phys. Rev. B **87**, 201401 (2013).
8. S. Nakamura, K. Katsumi, H. Terai, et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 097004 (2020).
9. Y. Saito, T. Nojima, and Y. Iwasa, Nat. Rev. Mater. **2**, 16094 (2016).
10. W. Shi, J. Ye, Y. Zhang, R. Suzuki, M. Yoshida, J. Miyazaki, N. Inoue, Y. Saito, and Y. Iwasa, Sci. Rep. **5**, 12534 (2015).
11. X. Xi, Z. Wang, W. Zhao, J.-H. Park, K. T. Law, H. Berger, L. Forró, J. Shan, and K. F. Mak, Nature Phys. **12**, 139 (2016).
12. J. M. Lu, O. Zheliuk, I. Leermakers, N. F. Q. Yuan, U. Zeitler, K. T. Law, and J. T. Ye, Science **350**, 1353 (2015).
13. D. Costanzo, S. Jo, H. Berger, and A. F. Morpurgo, Nat. Nanotechnol. **11**, 339 (2016).
14. S. C. de la Barrera, M. R. Sinko, D. P. Gopalan, N. Sivadas, K. L. Seyler, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. W. Tsen, X. Xu, D. Xiao, and B. M. Hunt, Nat. Commun. **9**, 1427 (2018).
15. G. Tang, R. L. Klees, C. Bruder, and W. Belzig, Phys. Rev. B **104**, L241413 (2021).
16. S. Ilic, J. S. Meyer, and M. Houzet, Phys. Rev. Lett. **119**, 117001 (2017).
17. N. F. Q. Yuan, K. F. Mak, and K. T. Law, Phys. Rev. Lett. **113**, 097001 (2014).
18. D. Mockli and M. Khodas, Phys. Rev. B **101**, 014510 (2020).
19. D. Mockli, M. Haim, and M. Khodas, J. Appl. Phys. **128**, 053903 (2020).
20. A. A. Varlamov, A. Galda, and A. Glatz, Rev. Mod. Phys. **90**, 015009 (2018).
21. А. А. Варламов, А. И. Ларкин, *Теория флуктуаций в сверхпроводниках*, Добросвет (2007).
22. A. G. Aronov, S. Hikami, and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **51**, 3880 (1995).
23. K. Michaeli, K. S. Tikhonov, and A. M. Finkel'stein, Phys. Rev. B **86**, 014515 (2012).
24. A. Kormanyos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and V. Fal'ko, 2D Mater. **2**, 022001 (2015).
25. N. P. Breznay, K. Michaeli, K. S. Tikhonov, A. M. Finkel'stein, M. Tendulkar, and A. Kapitulnik, Phys. Rev. B **86**, 014514 (2012).
26. M. V. Boev, Phys. Rev. B **101**, 104512 (2020).

Pis'ma v ZhETF, vol. 116, iss. 3, pp. 179 – 180

Minlos–Faddeev regularization of zero-range interactions in the three-body problem

O. I. Kartavtsev, A. V. Malykh[1)]

Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia

Submitted 10 May 2022
Resubmitted 9 June 2022
Accepted 13 June 2022

DOI: 10.31857/S1234567822150083, EDN: jggeos

In studies of the universal low-energy dynamics, it is natural to use a zero-range model for short-range two-body interactions. Nevertheless, in the few-body problem this leads to essential difficulties, which manifest, e.g., in the appearance of Efimov or Thomas effects. Minlos and Faddeev suggested a modification of zero-range interactions in the influential paper [1]. A main idea was to add a regularizing term, which diminishes the interaction strength in vicinity of the triple-collision point. It was shown that the Efimov or Thomas effects are suppressed if a strength of the regularizing term σ exceeds the critical value σ_c. Later on it was declared [2–4] that $\sigma \ge \sigma_c$ is sufficient for unambiguous formulation of the three-body problem.

The present work is aimed to study the Minlos–Faddeev regularization both for the two-component system consisting of two identical bosons of mass m interacting with distinct particle of mass m_1 and for the system consisting of three identical bosons. The zero-range interaction is completely determined by the scattering length, which could be taken as a length scale, as a result, the mass ratio m/m_1 becomes a single essential parameter in the problem.

In terms of the scaled Jacobi variables $\mathbf{x}$ and $\mathbf{y}$, the Hamiltonian in the center-of-mass frame is formally defined as the six-dimensional Laplace operator supplemented by the boundary conditions at zero distance between the interacting particles,

$$\lim_{x\to 0}\left[\frac{\partial \log(x\Psi)}{\partial x} - \frac{\sigma}{\cos\omega}\frac{\theta(y)}{y}\right] = -\mathrm{sign}(a), \qquad (1)$$

where $\theta(y)$ is an arbitrary bounded function normalized by $\theta(0) = 1$ and $\theta'(0) = 0$. The factor $1/\cos\omega$ is introduced for convenience and the kinematic angle ω is defined by $\sin\omega = 1/(1 + m_1/m)$. It is sufficient to impose only one boundary condition of the form (1) if the symmetry under permutations of identical particles is taken into account. As is well established, the regularization is required for the $L^P = 0^+$ states, therefore, namely this case will be considered here.

To analyze the proposed regularization, the problem is transformed to a system of the hyper-radial equations [5–7] and the solution near the triple-collision point, i.e., for small hyper-radius ρ ($\rho^2 = x^2 + y^2$) is studied. In the $\rho \to 0$ limit, the problem reduces to the two-body Schrödinger equation with the singular potential of the form $V_{\mathrm{sing}}(\rho) = \dfrac{\tilde\gamma^2 - 1/4}{\rho^2} + \dfrac{q}{\rho}$, which was multiply discussed in literature, e. g., in [7–9].

The results of [7] on the quantum problem for $V_{\mathrm{sing}}(\rho)$ are briefly summarized below. In the case $\tilde\gamma^2 \ge 1$ the problem is unambigouosly defined by the condition of square integrability. To define the problem for $0 \le \tilde\gamma^2 < 1$ one should introduce an additional real-valued parameter b by imposing the boundary condition, e.g., of the form proposed in [7]

$$f(\rho) \xrightarrow[\rho\to 0]{} \rho^{\frac12+\tilde\gamma} - \mathrm{sign}(b)|b|^{2\tilde\gamma}\rho^{\frac12-\tilde\gamma}\left(1 + \frac{q\rho}{1-2\tilde\gamma}\right), \quad (2)$$

where the q-dependent term can be omitted for $0 \le \tilde\gamma^2 < 1/4$. Finally, for $\tilde\gamma^2 < 0$, i.e., pure imaginary $\tilde\gamma$, one could define the unambiguous problem, e. g., by the requirement $f(\rho) \xrightarrow[\rho\to 0]{} \rho^{1/2}\sin(|\tilde\gamma|\log(\rho) + \delta)$ [8, 9]. This results in the asymptotic energy spectrum, $E_n \sim e^{-2\pi n/|\tilde\gamma|}$, which depends exponentially on the level's number. In fact, these considerations explain the Efimov effect in the three-body problem [1, 10].

Both $\tilde\gamma$ and q are single-valued functions of σ, which are obtained by solving the auxiliary eigenvalue problem on a hyper-sphere (for fixed ρ) with the boundary condition (1). Similar to [6, 7] one finds the equations

$$\sigma\sin\tilde\gamma\frac{\pi}{2} = \frac{\sin\tilde\gamma\omega}{\sin\omega} - \tilde\gamma\cos\omega\cos\tilde\gamma\frac{\pi}{2} \qquad (3)$$

for the two-component system and

$$\sigma\sin\tilde\gamma\frac{\pi}{2} = 4\sin\tilde\gamma\frac{\pi}{6} - \frac{\sqrt{3}}{2}\tilde\gamma\cos\tilde\gamma\frac{\pi}{2} \qquad (4)$$

[1)]e-mail: maw@theor.jinr.ru

for three identical bosons. These equations implicitly determine monotonically increasing functions $\tilde{\gamma}^2(\sigma)$ shown in Fig. 1 both for the two-component system for $m/m_1 = 1$ and for three identical bosons.

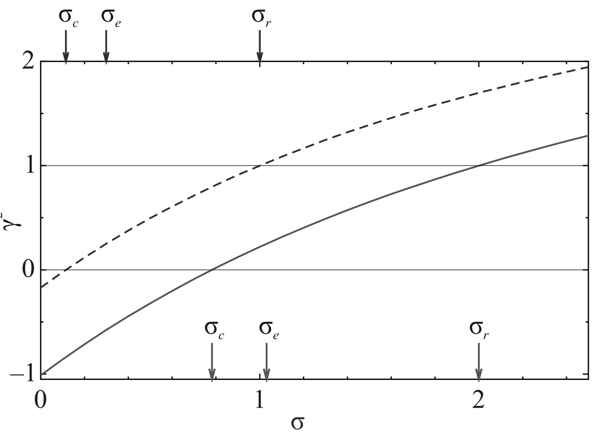


Fig. 1. (Color online) Dependence $\tilde{\gamma}^2$ on the regularization parameter σ are plotted by solid (red) line for three identical bosons and by dashed (blue) line for two identical bosons and a distinct particle of the same mass ($m/m_1 = 1$). Arrows indicate the critical values σ_c, σ_e, and σ_r at lower (upper) border for the former (latter) case

From the previous discussion one concludes that the Minlos–Faddeev regularization gives rise to four different types of description in four different intervals of the parameter σ separated by the critical values σ_c, σ_e, and σ_r, which correspond to $\tilde{\gamma}^2 = 0$, $1/4$, and 1, respectively. The critical values for the two-component system follow from (3),

$$\sigma_c = \frac{2}{\pi}\left(\frac{\omega}{\sin\omega} - \cos\omega\right), \tag{5}$$

$$\sigma_e = \frac{1}{\sqrt{2}\cos\dfrac{\omega}{2}} - \frac{1}{2}\cos\omega, \tag{6}$$

and $\sigma_r = 1$. In the case of equal masses ($m/m_1 = 1$) Eqs. (5) and (6) give $\sigma_c = 2/3 - \sqrt{3}/\pi \approx 0.11534$ and $\sigma_e = 3\sqrt{3}/4 - 1 \approx 0.29904$. The same value of σ_c was given in [4]. From (4) one finds $\sigma_c = 4/3 - \sqrt{3}/\pi \approx \approx 0.78200$, $\sigma_e = 7\sqrt{3}/4 - 2 \approx 1.03109$, and $\sigma_r = 2$ for three identical bosons. The value of σ_c is the same as in [1–3].

Starting from the Minlos and Faddeev suggestion to modify the two-body zero-range interaction [1] it was declared [2–4] that the three-body problem becomes regularized, if the regularization parameter σ exceeds the critical value σ_c, i.e., if σ is sufficiently large to suppress the Efimov or Thomas effects.

In this work it is shown that the Minlos–Faddeev regularization gives different results in four intervals of the non-negative parameter σ, in particular, more strict condition on the regularization parameter, $\sigma > \sigma_r > \sigma_c$, is necessary for unambiguous description of the three-body problem. Within the interval $\sigma_c \le \sigma < \sigma_r$, it is necessary to set a boundary condition of the form (2) depending on a real-valued parameter b and the q-dependence can be safely omitted if $\sigma_c \le \sigma < \sigma_e$. At last, the Efimov or Thomas effect takes place for $\sigma < \sigma_c$ and the famous exponential asymptotic of the energy spectrum is obtained by imposing the boundary condition at $\rho \to 0$. To exemplify in details the main conclusions, three critical values σ_c, σ_e, and σ_r are determined both for the two-component system consisting of two identical bosons and a distinct particle and for the system consisting of three identical bosons. The effect of regularization is additionally demonstrated by the calculation of the bound-state energy for three identical bosons as a function of σ and b.

It is worthwhile to mention that the described scenario is anticipated for any problem, whose properties are essentially determined by the effective potential with the inverse square singularity, which strength goes through the critical values. Besides the two-component system consisting of two identical fermions and a distinct particle, which was described in [7], this scenario could be of importance also for the three-body problem in the mixed dimensions and in presence of the spin-orbit interaction.

This is an excerpt of the article "Minlos–Faddeev regularization of zero-range interactions in the three-body problem". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S002136402260118X.

1. R. Minlos and L. Faddeev, Dokl. Akad. Nauk SSSR **141**, 1335 (1961) [Sov. Phys. Doklady **141**, 1335 (1962)].
2. S. Albeverio, R. Hoegh-Krohn, and T. T. Wu, Phys. Lett. A **83**, 105 (1981).
3. G. Basti, C. Cacciapuoti, D. Finco, and A. Teta, math-ph/2107.07188.
4. D. Ferretti and A. Teta, math-ph/2202.12765.
5. O. I. Kartavtsev and A. V. Malykh, Pis'ma v ZhETF **86**, 713 (2007) [JETP Lett. **86**, 625 (2007)].
6. O. I. Kartavtsev and A. V. Malykh, J. Phys. B **40**, 1429 (2007).
7. O. I. Kartavtsev and A. V. Malykh, EPL **115**, 36005 (2016).
8. K. M. Case, Phys. Rev. **80**, 797 (1950).
9. E. Braaten and D. Phillips, Phys. Rev. A **70**, 052111 (2004).
10. V. Efimov, Nucl. Phys. A **210**, 157 (1973).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 3, с. 181 – 188

Инварианты узлов в корнях из единицы

Л. Бишлер[1)]

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

Институт проблем передачи информации, 127994 Москва, Россия

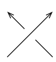
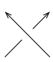
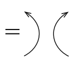
Поступила в редакцию 2 июня 2022 г.
После переработки 24 июня 2022 г.
Принята к публикации 26 июня 2022 г.

Мы обсуждаем различные инварианты узлов и зацеплений, зависящие от первообразного корня из единицы. Мы уточняем определения существующих инвариантов с помощью метода Решетихина–Тураева, представляем обобщение инвариантов АДО на квантовую алгебру $\mathcal{U}_q(sl_N)$ и подчеркиваем связи между различными инвариантами.

DOI: 10.31857/S1234567822150095, EDN: jgndjq

1. Введение. Знаменитый полином Джонса $J^{\mathcal{K}}(q)$, открытый в 1984 г. В. Джонсом [1], является полиномиальным инвариантом узлов и зацеплений, зависящим от одной переменной. Полином Джонса был определен с помощью скейн-соотношений, которые позволяют его вычислять. Скейн-соотношения (1) связывают полиномы Джонса трех узлов, которые отличаются друг от друга одним пересечением (2).

$$J^{\mathcal{K}}(q) - q^{-2}J^{\mathcal{K}'}(q) = (q-q^{-1})J^{\mathcal{K}''}(q). \tag{1}$$

$\mathcal{K} =$  , $\quad \mathcal{K}' =$  , $\quad \mathcal{K}'' =$  . (2)

Вскоре после определения полинома Джонса Э. Виттен и Н. Решетихин и В. Тураев сделали два важных открытия. Э. Виттен [2] нашел квантовую теорию поля – теорию Черна–Саймонса (ЧС) с калибровочной группой SU_2 – наблюдаемые в которой (средние значения петель Вильсона) совпадают с полиномами Джонса. Таким образом Виттен предложил физическое определение для математического объекта. Н. Решетихин [3] и В. Тураев [4] в свою очередь открыли новый способ вычисления инвариантов узлов с помощью специального оператора – $\mathcal{R}$-матрицы. Они связали полином Джонса с универсальной $\mathcal{R}$-матрицей в фундаментальном представлении квантованной универсальной обертывающей алгебры $\mathcal{U}_q(sl_2)$. Метод Решетихина–Тураева (РТ) позволил определить цветные полиномы Джонса, которые вычисляются с помощью $\mathcal{R}$-матриц в других представлениях $\mathcal{U}_q(sl_2)$.

Эти результаты позже были обобщены на полиномы ХОМФЛИ-ПТ [5, 6], теорию ЧС с калибровочной группой SU_N и универсальную $\mathcal{R}$-матрицу в представлениях $\mathcal{U}_q(sl_N)$.

$\mathcal{U}_q(sl_N)$ является ассоциативной алгеброй с генераторами E_i, F_i, $K_i = q^{h_i}$ $(i = 1, \ldots, N-1)$, которые удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} K_iE_j &= q^{a_{ij}}E_jK_i, \quad [K_i, K_j] = 0, \\ K_iF_j &= q^{-a_{ij}}F_jK_i, \quad [E_i, F_j] = \delta_{ij}\tfrac{K_i - K_i^{-1}}{q-q^{-1}}. \end{aligned} \tag{3}$$

Универсальная $\mathcal{R}$-матрица имеет следующий вид:

$$\mathcal{R}_u = Pq^{\sum_{i,j} a_{i,j}^{-1} h_i \otimes h_j} \overrightarrow{\prod_{\beta \in \Phi^+}} \exp_q\left((q-q^{-1})E_\beta \otimes F_\beta\right), \tag{4}$$

где $P(x \otimes y) = y \otimes x$, Φ^+ – положительные корни, $\exp_q A = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{A^m}{[m]_q!} q^{m(m-1)/2}$, $[m]_q = (q^m - q^{-m})/(q - q^{-1})$.

Теория ЧС – это трехмерная квантовая теория поля с действием

$$\mathcal{S}_{CS} = \frac{k}{4\pi} \int_{\mathcal{M}} \mathrm{Tr}\left(\mathcal{A} \wedge d\mathcal{A} + \frac{2}{3}\mathcal{A} \wedge \mathcal{A} \wedge \mathcal{A}\right). \tag{5}$$

Ненулевыми корреляторами в теории ЧС являются корреляторы особого типа – средние значения петли Вильсона. Когда калибровочной группой теории является группа SU_N, они совпадают с полиномами ХОМФЛИ-ПТ $H_R^{\mathcal{K}}(q, A)$.

$$H_R^{\mathcal{K}}(q, A) = \frac{1}{d_R(N)} \left\langle \mathrm{Tr}_R P \exp\left(\oint_{\mathcal{K}} \mathcal{A}\right)\right\rangle_{\mathrm{CS}(N,k)}. \tag{6}$$

Вильсоновские средние зависят от контура $\mathcal{K}$ (узла или зацепления), ранга $N-1$ калибровочной группы SU_N, ее представления (соответствующего диаграмме Юнга) R, от квантовой размерности $d_R(N)$ и

[1)]e-mail: bishlerlv@lebedev.ru

константы связи теории ЧС k. Это среднее представляет собой полином от переменных $q = \exp\left(\frac{2\pi i}{N+k}\right)$ и $A = q^N$. Было показано [7], что теория ЧС калибровочно-инвариантна, когда константа связи k является целым числом, что означает, что q является корнем из единицы. Поэтому инварианты в корнях из единицы заслуживают особого внимания.

Очевидным подходом к получению инвариантов в корнях из единицы является замена переменных в полиномах ХОМФЛИ-ПТ $H_R^{\mathcal{K}}(q,A)$ и Джонса $J_{[r]}^{\mathcal{K}}(q)$.

Существуют также инварианты $\langle K\rangle_{m,N}$, определенные Р. Кашаевым [8–10] с $\mathcal{R}$-матрицей, зависящей от переменной ω (которая является N-м корнем из единицы) и целочисленного параметра m. Инварианты Кашаева не связаны с квантовыми алгебрами, однако они совпадают с цветными полиномами Джонса.

Другая возможность построения инвариантов в корнях из единицы возникает, когда мы рассматриваем представления $\mathcal{U}_q(sl_N)$, при параметре квантования, равном корню из единицы. В этом случае у квантовой алгебры появляются новые типы представлений с параметрами λ, позволяющие строить $\mathcal{R}$-матрицы с параметрами и определять новые инварианты узлов и зацеплений в корнях из единицы. Таким образом получаются инварианты АДО [11] или цветные инварианты Александера [12] $\Phi_m^{\mathcal{L}}(q,\lambda)$ для алгебры $\mathcal{U}_q(sl_2)$. В этом случае q – корень степени $2m$ из единицы, а λ – произвольный параметр. Инварианты АДО совпадают с полиномами Александера $\mathcal{A}(q) = H_{[1]}^{\mathcal{K}}(q, A=1)$, когда q является корнем из единицы 4-й степени. Они также связаны с полиномами Джонса.

Новый результат, который мы хотим подчеркнуть в этом письме, – это обобщение инвариантов АДО на алгебру $\mathcal{U}_q(sl_N)$. Это инварианты $\mathcal{P}_{m,N}^{\mathcal{L}}(q,\lambda_i)$ (29) [13] узлов и зацеплений, которые определяются с помощью нильпотентных представлений с параметрами алгебры $\mathcal{U}_q(sl_N)$ в корнях из единицы ($q^{2m}=1$). Они зависят от набора параметров $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_{N-1}\}$ и связаны с полиномами Александера и ХОМФЛИ-ПТ. Инварианты АДО и инварианты $\mathcal{P}_{m,N}^{\mathcal{L}}(q,\lambda_i)$ определяются модифицированным методом Решетихина–Тураева, который требует введения специального нормировочного коэффициента (27), который мы представляем в этом письме.

Схематическое соответствие между описанными выше инвариантами представлено на рис. 1.

Цель этого письма – уточнить определение различных инвариантов в корнях из единицы и установить отношения между ними. Структура письма

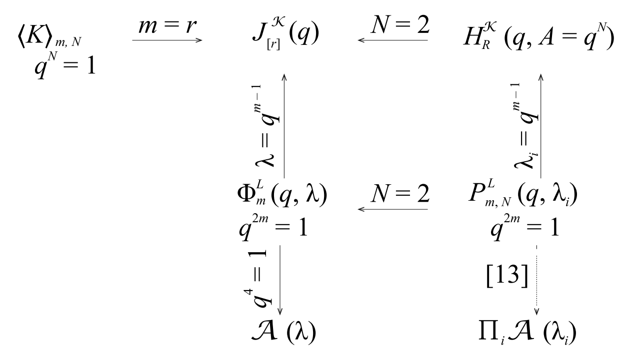


Рис. 1. Соответствие между инвариантами в корнях из единицы

следующая. Мы начнем с метода РТ (раздел 2), который используется для определения всех инвариантов, рассматриваемых в этом письме. Затем мы обсудим структуру представления $\mathcal{U}_q(sl_2)$ для различных значений q (раздел 3). Мы определим инварианты АДО (раздел 4) и их обобщение (раздел 5) и обсудим модификации метода РТ, необходимые для их определения. Наконец, мы рассмотрим понятие длинных узлов и определим инвариант Кашаева (раздел 6). Новые результаты, которые мы представляем в этом письме, находятся в разделе 5.

2. Метод Решетихина–Тураева. Метод РТ [9, 14, 15] позволяет определить цветные инварианты узлов и зацеплений [16, 17]. Существуют также модификации этого метода, которые существенно упрощают вычисления в некоторых случаях [18, 19]. В этом разделе мы обсуждаем наиболее общую версию метода РТ и придерживаемся описания из [15].

Метод РТ основан на использовании двумерной ориентированной проекции узла или зацепления на плоскость с фиксированным направлением, представляющей собой диаграмму узла или зацепления. На диаграмме показано, какая нить находится над другой в каждом пересечении. Диаграмма разбивается на элементы, играющие роль в построении инварианта узла: пересечения и точки поворота (относительно выбранного направления). Существует восемь типов пересечений и четыре типа точек поворота (рис. 2). Все точки поворота и пересечения можно выразить с помощью операторов $\mathcal{R}$, $\mathcal{M}$ и $\overline{\mathcal{M}}$:

$$= \mathcal{R} \qquad = \mathcal{M} \qquad = \overline{\mathcal{M}}\,. \tag{7}$$

Операторы $\mathcal{R}$, $\mathcal{M}$ и $\overline{\mathcal{M}}$ удовлетворяют уравнениям, которые следуют из движений Рейдемейстера (рис. 3):

$$\mathrm{Tr}_2(I\otimes\mathcal{W})\,\mathcal{R} = q^{\Omega} I, \tag{8}$$

$$\mathcal{R}_1\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_2\mathcal{R}_1\mathcal{R}_2, \tag{9}$$

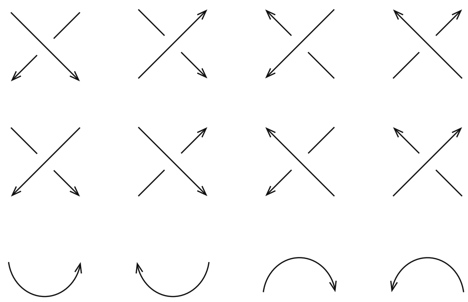


Рис. 2. Различные типы пересечений и точек поворота

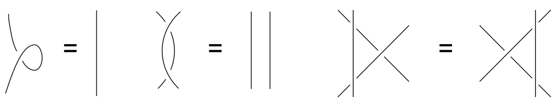


Рис. 3. Движения Рейдемейстера

где $\mathcal{R}_1 = \mathcal{R} \otimes I$, $\mathcal{R}_2 = I \otimes \mathcal{R}$, $\mathcal{W} = \mathcal{M}\overline{\mathcal{M}}$, I – единичный оператор. Уравнения (8) и (9) фиксируют только операторы $\mathcal{R}$ и $\mathcal{W}$, поэтому в определении операторов $\mathcal{M}$ и $\overline{\mathcal{M}}$ есть неоднозначность. Разный выбор операторов $\mathcal{R}$ и $\mathcal{W}$ приводит к разным типам инвариантов. Цветные полиномы Джонса и ХОМФЛИ-ПТ связаны с универсальной $\mathcal{R}$-матрицей (4) в представлениях алгебр $\mathcal{U}_q(sl_2)$ и $\mathcal{U}_q(sl_N)$ соответственно, инварианты АДО и их обобщения связаны с универсальной $\mathcal{R}$-матрицей в нильпотентных представлениях с параметрами алгебр $\mathcal{U}_q(sl_2)$ и $\mathcal{U}_q(sl_N)$ в корнях из единицы. Инвариант Кашаева основан на $\mathcal{R}$-матрице (37), не связанной с квантовыми алгебрами.

Коэффициент q^{Ω} в уравнении (8) называется коэффициентом оснащения (фрейминга). Он возникает, когда мы рассматриваем узел, сделанный из ленты. В этом случае первое движение Рейдемейстера разрешается с коэффициентом. В топологическом оснащении, которое мы используем при определении инвариантов АДО, матрицы $\mathcal{R}$ и $\mathcal{W}$ удовлетворяют уравнению

$$\mathrm{Tr}_2(I \otimes \mathcal{W})\,\mathcal{R} = I. \tag{10}$$

Полиномиальный инвариант узла или зацепления определяется как свертка всех операторов, связанных с элементами на конкретной диаграмме.

Если мы выбираем универсальную $\mathcal{R}$-матрицу в представлении R алгебры $\mathcal{U}_q(sl_N)$, с помощью метода РТ мы вычисляем ненормированный полином ХОМФЛИ-ПТ $\mathcal{H}_R^{\mathcal{K}}$. Можно определить нормированный полином $H_R^{\mathcal{K}} = \mathcal{H}_R^{\mathcal{K}}/\mathcal{H}_R^{\circ}$, где $\mathcal{H}_R^{\circ}$ – ненормированный полином неузла (тривиального узла).

Удобно использовать диаграммы узлов и зацеплений в виде кос (рис. 4), которые существуют для любого узла и зацепления. В этом случае определение инвариантов можно переформулировать в терминах следа Маркова Tr_q (квантового следа) и оператора $\mathcal{W} = \mathcal{M}\overline{\mathcal{M}}$, который называют весовой матрицей.

$$\mathcal{H}_R^{\mathcal{K}} = \mathrm{Tr}_q \prod_i \mathcal{R}_i = \mathrm{Tr}\, \overbrace{\mathcal{W} \otimes \cdots \otimes \mathcal{W}}^{s} \prod_i \mathcal{R}_i, \tag{11}$$

где s – количество нитей в косе, в произведение входят все пересечения в косе.

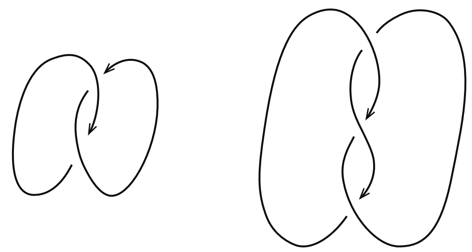


Рис. 4. Диаграммы зацепления Хопфа и трилистника в виде кос

3. Представления $\mathcal{U}_q(sl_2)$ в корнях из единицы. $\mathcal{U}_q(sl_2)$ порождается элементами e, f, $k = q^h$ и $k^{-1} = q^{-h}$, удовлетворяющими соотношениям

$$kk^{-1} = k^{-1}k = 1, \quad kek^{-1} = q^2 e, \tag{12}$$
$$kfk^{-1} = q^{-1}f, \quad [e,f] = ef - fe = \frac{k-k^{-1}}{q-q^{-1}}.$$

Универсальная $\mathcal{R}$-матрица имеет следующий вид

$$\mathcal{R} = P\, q^{h\otimes h/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{q^{m(m+1)/2}(1-q^{-2})^m}{[m]_q!}\, e^m \otimes f^m, \tag{13}$$

и соответствующая весовая матрица совпадает с оператором k: $\mathcal{W} = k$.

Когда q не является корнем из единицы, неприводимые конечномерные представления L_r алгебры $\mathcal{U}_q(sl_2)$ являются симметрическими представлениями, нумерованными диаграммами Юнга, состоящими из одной строки $[r]$. L_r – представления со старшим и младшим весами, действующие на векторном пространстве $\mathcal{V}_{r+1}$ размерности $r+1$ с базисными векторами v_i, $i = \{0,\ldots,r\}$, где v_0 и v_r – векторы старшего и младшего весов соответственно.

$$\begin{aligned} &L_r(k)v_i = q^{r-2i}v_i, \\ &L_r(e)v_i = [i]_q[r-i+1]_q v_{i-1}, \quad L_r(e)v_0 = 0, \\ &L_r(f)v_i = v_{i+1}, \quad L_r(f)v_r = 0. \end{aligned} \tag{14}$$

В этом случае фиксирован старший вес $L_r(k)v_0 = \lambda v_0$, $\lambda = q^r$. Условие, фиксирующее вес, возникает при построении модуля Верма. Мы выбираем собственный вектор v_0 оператора k, удовлетворяющий условию $e\,v_0 = 0$. Остальные векторы модуля Верма получаем действием оператора f на v_0: $f\,v_0 = v_1$, $f^2\,v_0 = v_2$, $\ldots$, $f^n\,v_0 = v_n$. Затем ищем инвариантное подпространство с условием $e\,v_{r+1} = 0$, которое является следующим:

$$[r+1]_q(\lambda q^{-r} - \lambda^{-1}q^r) = 0. \tag{15}$$

Это условие фиксирует вес λ только в том случае, если $[r+1] \neq 0$, а это означает, что когда q – корень из единицы, существуют представления, в которых вес произволен.

Пусть q – первообразный корень из единицы степени $2m$, т.е. не существует $p < 2m$, для которого $q^p = 1$. В этом случае операторы e^m, f^m и k^m являются центральными, что следует непосредственно из определяющих соотношений (12). Центральность k^m приводит к тому, что вес представлений размерности m не фиксирован и является параметром представлений. Тот факт, что e^m и f^m являются центральными, является причиной того, что появляются новые типы представлений: циклическое и полуциклическое.

Существует четыре типа неприводимых представлений (любое неприводимое представление $\mathcal{U}_q(sl_2)$ в корнях из единицы конечномерно):

1) L_r (14) при $r \leq m-2$;

2) циклические $U_m^{a,b,\lambda}$;

3) полуциклические $V_m^{a,\lambda} = U_m^{a,0,\lambda}$ или $V_m^{b,\lambda} = U_m^{0,b,\lambda}$;

4) нильпотентные представления $W_m^\lambda = U_m^{0,0,\lambda}$.

Последние три представления имеют одинаковую размерность m и могут быть описаны следующими операторами, действующими в m-мерном векторном пространстве $\mathcal{V}_m$ с базисом v_i, $i = 0, 1, \ldots, m-1$.

$$\begin{aligned}
&U_m^{\lambda,a,b}(k)v_i = q^{-2i}\lambda v_i, \qquad (16)\\
&U_m^{\lambda,a,b}(e)v_i = \left(ab + [i]_q \frac{\lambda q^{1-i} - \lambda^{-1}q^{i-1}}{q-q^{-1}}\right) v_{i-1}, \quad i > 0,\\
&U_m^{\lambda,a,b}(e)v_0 = a v_{m-1},\\
&U_m^{\lambda,a,b}(f)v_i = v_{i+1}, \quad i < m-1,\\
&U_m^{\lambda,a,b}(f)v_{m-1} = b v_0,
\end{aligned}$$

где a, b, λ – произвольные комплексные числа, $\lambda \neq 0$. Можно проверить, что эти операторы удовлетворяют определяющим соотношениям (12) алгебры $\mathcal{U}_q(sl_2)$.

Представления W_m^λ позволяют получить нетривиальные $\mathcal{R}$-матрицы и определять с их помощью инварианты узлов и зацеплений, известные как АДО или цветные инварианты Александера.

4. Инварианты АДО или цветные инварианты Александера. Инварианты АДО узлов и зацеплений [11] можно определить методом РТ, который применяется к $(1,1)$-сплетениям – узлам и зацеплениям, у которых одна нить разрезана (рис. 5). Рассмотрение сплетений вместо узлов и зацеплений возможно проводить благодаря существующему взаимно однозначному соответствию между ними [20]. Этот важный шаг позволяет вычислять ненулевые инварианты. Инварианты, которые вычисляются на основе узлов и зацеплений, равны нулю из-за свойств следа Маркова в представлениях W_m^λ.

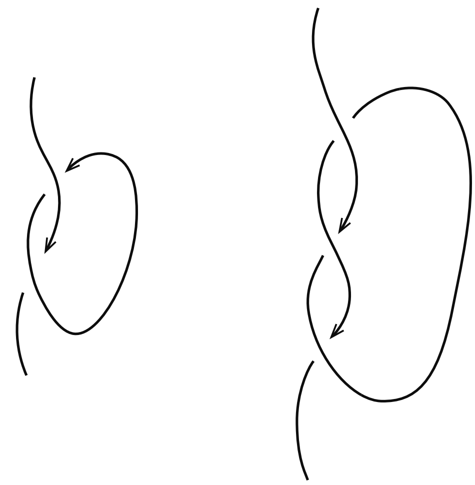


Рис. 5. $(1,1)$-сплетения зацепления Хопфа и трилистника

Давайте определим инварианты АДО. Необходимо сделать две важные модификации метода РТ. Прежде всего, мы должны переопределить след Маркова следующим образом:

$$\boxed{\mathrm{Tr}^*{}_q \cdots = \mathrm{Tr}\; I \otimes \overbrace{\mathcal{W} \otimes \cdots \otimes \mathcal{W}}^{s-1} \ldots,} \tag{17}$$

т.е. опустить одну весовую матрицу, связанную с разрезанной нитью. Тогда нормировочный коэффициент полиномов (ненормированный полином неузла) равен классической размерности представления.

Переход от узлов и зацеплений к сплетениям заставляет нас выбирать нить, которая будет разрезана и вносит асимметрию в определение инварианта. Поэтому также необходимо ввести нормировочный коэффициент. Коэффициент, вычисленный в [11] с точностью до коэффициента нормировки q^m, выглядит следующим образом:

$$\boxed{\Xi_m^{sl_2}(\lambda_1) = \prod_{i=0}^{m-2} \{\lambda_1 q^{-i}\},} \tag{18}$$

где $\{x\} = x - x^{-1}$, λ_1 – цвет разрезанной нити.

Теперь мы можем определить инвариант АДО $\Phi^{\mathcal{L}}_m(\lambda_1,\dots)$:

$$\boxed{\Phi^{\mathcal{L}}_m(\lambda_1,\dots)=\frac{\mathrm{Tr}\ I\otimes\overbrace{\mathcal{W}\otimes\dots\otimes\mathcal{W}}^{s-2}\prod_i\mathcal{R}_i}{\Xi^{sl_2}_m(\lambda_1)}.}\qquad(19)$$

В этом определении $\mathcal{R}$ – универсальная $\mathcal{R}$-матрица в представлении W^λ_m алгебры $\mathcal{U}_q(sl_2)$ в корнях из единицы. В общем случае она зависит от двух цветов $\lambda_1=q^{\mu_1}$ и $\lambda_2=q^{\mu_2}$:

$$\mathcal{R}_m(v^{\mu_1}_i\otimes v^{\mu_2}_j)$$
$$=\sum_{n=0}^{m-1}q^{\mu_2(m-1-i+n)-\mu_1(j+n)+2(i-n)(j+n)+\frac{n(n-1)}{2}}$$
$$\frac{(q-q^{-1})^n}{[n]!}[i-n+1;n][\mu_1-i+n;n]\,(v^{\mu_2}_{j+n}\otimes v^{\mu_1}_{i-n})\qquad(20)$$

и

$$\mathcal{W}_m\,v^\mu_i=q^{-\mu(m-1)-2i}v_i=q^{-\mu\,m}kv^\mu_i.\qquad(21)$$

Инварианты АДО $\Phi^{\mathcal{L}}_m$ связаны с полиномами Александера и Джонса. Для простоты определим полиномы АДО узлов и одноцветных зацеплений:

$$\hat{\Phi}^{\mathcal{L}}_m(\lambda)=\Phi^{\mathcal{L}}_m(\lambda)\,\Xi^{sl_2}_m(\lambda),\qquad(22)$$

тогда

$$\hat{\Phi}^{\mathcal{K}}_2(\lambda)=\mathcal{A}^{\mathcal{K}}(q=\lambda),\qquad(23)$$

т.е. полиномы АДО для 4-го корня из единицы совпадают с полиномами Александера узлов, а инварианты АДО для 4-го корня из единицы совпадают с полиномами Александера от многих переменных (полиномами Александера зацеплений)

$$\Phi^{\mathcal{L}}_2(\lambda_1,\dots)=\Delta^{\mathcal{L}}(\lambda_1,\dots),\qquad(24)$$

поэтому инварианты АДО также называют цветными инвариантами Александера.

Связь с полиномами Джонса следующая:

$$\hat{\Phi}^{\Lambda}_m(\lambda=q^{m-1})=J^{\mathcal{L}}_{[m-1]}(q)\Big|_{q^{2m}=1},\qquad(25)$$

где $J^{\mathcal{L}}_{[m-1]}(q)$ – нормированные полиномы Джонса в представлении L_{m-1}. Это следует из того, что представления W^λ_m совпадают с представлениями L_{m-1} при правильном выборе значения веса $\lambda=q^{m-1}$.

Недавнее исследование С. Уиллетса [21] показало, что инварианты АДО и цветные полиномы Джонса можно обобщить с помощью универсального инварианта узла, который содержит в себе оба инварианта: АДО и Джонса. И существует отображение, позволяющее получить инварианты АДО из цветных полиномов Джонса.

5. Обобщение инвариантов АДО на алгебру $\mathcal{U}_q(sl_N)$. Полиномы Джонса были обобщены на полиномы ХОМФЛИ-ПТ, и аналогичным образом инварианты АДО можно обобщить на инварианты $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda^{(j)}_i)$, связанные с представлениями алгебры $\mathcal{U}_q(sl_N)$ (3) в корнях из единицы.

Пусть q – первообразный корень из единицы степени $2m$. В этом случае структура представления $\mathcal{U}_q(sl_N)$ [22] очень похожа на структуру представления $\mathcal{U}_q(sl_2)$, которую мы обсуждали ранее. Операторы K^m_i центральны и существуют представления размерности $m^{N(N-1)/2}$ с произвольными весами – нильпотентные представления $W^{\lambda_i}_{m,N}$ с $N-1$ параметрами λ_i. Среди представлений $\mathcal{U}_q(sl_N)$ появляются также циклические и полуциклические представления, так как E^m_i и F^m_i центральны, но эти представления не дают нетривиальных инвариантов узлов и зацеплений [13]. Представления $W^{\lambda_i}_{m,N}$ связаны с нетривиальными инвариантами, которые мы обозначаем $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda^{(j)}_i)$.

Определение инвариантов $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda^{(j)}_i)$ повторяет определение инвариантов АДО. Мы раскрашиваем зацепление, состоящее из l компонент, представлениями $W^{\lambda^{(j)}_i}_{m,N}$ $(j=1,\dots,l)$, зависящими от наборов параметров λ_i $(i=1,\dots,N-1)$, делаем его проекцию на плоскость и разрезаем одну нить на диаграмме. Затем мы применяем метод РТ к $(1,1)$-сплетениям и получаем полиномы $P^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda^{(j)}_i)$. В качестве операторов $\mathcal{R}$ и $\mathcal{W}$ в методе РТ используются универсальная $\mathcal{R}$-матрица (4) и оператор $\mathcal{W}$ в представлениях $W^{\lambda_i}_{m,N}$. Оператор $\mathcal{W}$ имеет следующий вид:

$$\mathcal{W}=q^{2h_\rho},\quad h_\rho=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\in\Phi^+}h_\alpha.\qquad(26)$$

Нам также необходимо нормировать полиномы $P^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda^{(j)}_i)$, чтобы восстановить симметрию между компонентами зацепления. Если цвет открытой компоненты $\lambda^{(1)}$ (рис. 6), то нормировочный коэффициент $\Xi_{m,N}(\lambda^{(1)})$ равен

$$\boxed{\Xi_{m,N}(\lambda^{(1)})=\prod_{\alpha\in\Phi^+_N}\xi_m(\lambda^{(1)}_\alpha q^{|\alpha|}),}\qquad(27)$$

где α – положительные корни Φ^+_N алгебры sl_N, $\alpha=\sum_{k=i}^j\alpha_k$ $(i\le j<N)$, α_k – простые корни sl_N, $|\alpha|=j-i$. Определение $\xi_m(\lambda)$ повторяет опреде-

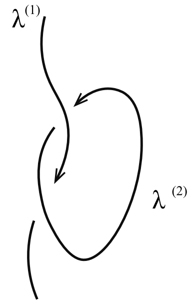


Рис. 6. Цветное $(1,1)$-сплетение, соответствующее зацеплению Хопфа

ление нормировочного коэффициента инвариантов АДО (18):

$$\xi_m(\lambda) = \prod_{i=0}^{m-2} \{\lambda q^{-i}\}. \tag{28}$$

Теперь мы можем определить инварианты $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda_i^{(j)})$ в корнях из единицы с параметрами $\lambda_i^{(j)}$ $(i = 1,\ldots,N-1,\ j = 1,\ldots,l,\ l$ – количество компонентов в зацеплении), $\lambda_i^{(1)}$ – цвет открытой компоненты:

$$\boxed{\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda_i^{(j)}) = \frac{P^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda_i^{(j)})}{\Xi_{m,N}(\lambda_i^{(1)})}.} \tag{29}$$

Инварианты $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda_i^{(j)})$ совпадают с полиномами ХОМФЛИ-ПТ в представлениях $R_{m,N}$, соответствующих диаграммам Юнга $[(N-1)(m-1),(N-2)(m-1),\ldots,(m-1)]$, когда параметры $\lambda_i^{(j)}$ совпадают со старшими весами представления $R_{m,N}$:

$$P^{\mathcal{L}}_{m,N}\,(\lambda_i^{(j)} = q^{m-1})\Big|_{q^{2m}=1} = H^{\mathcal{L}}_{R_{m,N}}(A = q^N, q)\Big|_{q^{2m}=1}. \tag{30}$$

Инварианты $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda_i^{(j)})$ также связаны с полиномами Александера, однако соотношения не так просты, как в случае инвариантов АДО. Они перечислены в [13]. Например, для $N=3$:

$$P^{\mathcal{K}}_{2,3}\,(\lambda_1, \lambda_2 = 1) = \mathcal{A}^{\mathcal{K}}(\lambda_1^2), \tag{31}$$

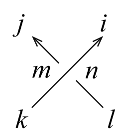
$$P^{\mathcal{K}}_{3,3}\,(q, \lambda_1, \lambda_2 = 1) = \mathcal{A}^{\mathcal{K}}(\lambda_1)\mathcal{A}^{\mathcal{K}}(\lambda_1^3). \tag{32}$$

Инварианты $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda^{(j)})$ совпадают с инвариантами АДО $\Phi^{\mathcal{L}}_m(\lambda^{(1)},\ldots)$ при $N=2$.

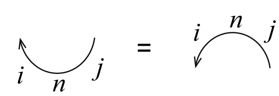
6. Инвариант Кашаева. Существует другой тип инварианта узла, определенный для переменной, равной корню из единицы, определение которого не опирается на представления квантовых алгебр. В этом разделе мы обсуждаем инвариант Кашаева $\langle K\rangle_{m,N}$.

Инвариант Кашаева был определен Ринатом Кашаевым в его работе [10] для так называемых длинных узлов. Он основан на $\mathcal{R}$-матрице, полученной из решений соотношения пентагона, которая зависит от переменной ω, равной корню из единицы, и двух целочисленных спектральных параметров (m и n), связанных с двумя цветами на двух нитях в пересечении. Для определения инварианта Кашаев использует метод РТ, примененный к $(1,1)$-сплетениям – двумерным проекциям длинных узлов. Длинные узлы – это трехмерные аналоги $(1,1)$-сплетений. По определению длинный узел – это вложение $f\colon \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^3$ и существуют $a,\ b \in \mathbb{R}$ такие, что $f(t) = (0,0,t)$ для любых $t < a$ или $t > b$. Вычисление инвариантов длинных узлов позволяет избежать проблемы с нормировочным коэффициентом.

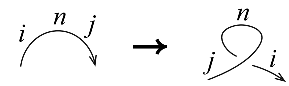
Для определения инварианта Кашаева нужно сделать следующие шаги. Прежде всего фиксируем первообразный корень из единицы ω порядка N, раскрашиваем нити узла или зацепления целыми числами n_i: $0 \le n_i < N$, делаем двумерную проекцию на плоскость, расставляем $\mathcal{R}$-матрицы и операторы точек поворота в соответствии с приведенными ниже правилами и суммируем по всем индексам. Инвариантность полученной суммы показана в [9].



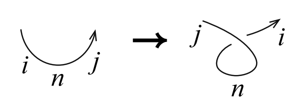
$$= \langle i, j\,|\, r\,(m,n)\,|\, k, l\rangle \tag{33}$$



$$= \delta_{i,j} \tag{34}$$



$$= \omega^{-n}\,\delta_{i,[j+1]_N} \tag{35}$$



$$= \omega^{n}\,\delta_{i,[j+1]_N} \tag{36}$$

$$\langle i,j|r(m,n)|k,l\rangle = V_{i,j-m,k-n,l}(\omega)\omega^{k-l-n+(k-i-n)m}, \tag{37}$$

где

$$V_{i,j,k,l}(\omega) := \frac{N\theta_N([j-i-1]_N + [l-k]_N)\theta_N[(i-l]_N + [k-j]_N)}{(\bar\omega)_{[j-i-1]_N}(\omega)_{[i-l]_N}(\bar\omega)_{[l-k]_N}(\omega)_{[k-j]_N}} \tag{38}$$

и $[k]_n = k \bmod n$, $\theta_n(k) = \delta_{k,[k]_n}$, $(x)_n = \prod_{k=1}^{n}(1-x^k)$.

Как было сказано ранее, для определения инварианта Кашаева мы основываем наши вычисления на $(1,1)$-сплетениях и получаем матричный инвариант. Это инвариант равен единичной матрице $N \times N$, умноженной на цветной полином Джонса в $(m+1)$-мерном представлении L_m (14) (соответствующем диаграмме Юнга $[m]$), вычисленный в точке $q = \omega$:

$$\langle K \rangle_{N,m} = J_{[m]}(\omega) I_N. \tag{39}$$

Этот результат является гипотезой, основанной на рассмотрении различных примеров. Несмотря на то, что Кашаев построил $\mathcal{R}$-матрицу, не основанную на представлениях $\mathcal{U}_q(sl_2)$, полученный инвариант совпадает с полиномом Джонса.

7. Заключение. В этом письме мы рассмотрели разные инварианты узлов и зацеплений в корнях из единицы. Среди них цветные полиномы Джонса и ХОМФЛИ-ПТ (11), вычисленные в корнях из единицы, инварианты АДО или цветные инварианты Александера и их обобщение, а также инвариант Кашаева.

Все эти инварианты можно определить и вычислить методом РТ, однако для определения инвариантов в корнях из единицы необходимо модифицировать метод: вместо узлов и зацеплений рассматривать $(1,1)$-сплетения и вводить нормировочный коэффициент (18), (27).

Мы определили инварианты АДО (19). Они зависят от переменной, равной корню из единицы и произвольного параметра и соответствуют нильпотентным представлениям с параметрами алгебры $\mathcal{U}_q(sl_2)$ в корнях из единицы. Инварианты АДО связаны с полиномами Джонса (25) и Александера (22) и, согласно последним исследованиям, эквивалентны полиномам Джонса [21].

Мы также обсудили инварианты Кашаева, которые определяются с помощью $\mathcal{R}$-матрицы с целочисленными параметрами, которая зависит от переменной, равной корню из единицы, и не определяется с помощью представлений $\mathcal{U}_q(sl_N)$. Полученный полином, предположительно, совпадает с цветным полиномом Джонса (39).

Это письмо также содержит краткое изложение определения инвариантов $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}_{m,N}(\lambda_i^{(j)})$ (30), являющихся обобщением инвариантов АДО. Это новый тип инвариантов, определенных для нильпотентных представлений с параметрами $W^{\lambda_i}_{m,N}$ алгебры $\mathcal{U}_q(sl_N)$ в корнях из единицы. Они связаны с полиномами ХОМФЛИ-ПТ (30) и Александера (31), (32) [13]. Остается вопрос, являются ли эти инварианты независимыми или они эквивалентны цветным полиномам ХОМФЛИ-ПТ.

Работа частично поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований 21-52-52004.

Автор чрезвычайно благодарен своим научным руководителям А. Миронову и Ан. Морозову за руководство, терпение и понимание, а также благодарит В. Алексеева, Т. Григорьева, С. Миронова, А. Морозова, А. Слепцова, Н. Целоусова за плодотворные обсуждения.

---

1. V. F. R. Jones, Bull. Amer. Math. Soc. **12**, 103 (1985).
2. E. Witten, Commun. Math. Phys. **121**, 351 (1989).
3. N. Reshetikhin, *Quantized universal enveloping algebras, the Yang-Baxter equation and invariants of links I, II*, LOMI preprints. Technical report, E-4-87, E-17-87 (1988).
4. V. Turaev, Inventiones Mathematicae **92**(3), 527 (1988).
5. P. Freyd, D. Yetter, J. Hoste, W. B. R. Lickorish, K. Millett, and A. Ocneanu, Am. Math. Soc. **12**, 239 (1985).
6. J. H. Przytycki and P. Traczyk, J. Knot Theor. **4**, 115 (1987); arXiv:1610.06679.
7. M. Marino, Commun. Math. Phys. **253**, 25 (2004); arXiv:hep-th/0207096.
8. S. Garoufalidis and R. Kashaev, arXiv:2108.07553.
9. R. Kashaev, *Invariants of long knots*, Preprint (2019); arXiv:1908.00118.
10. R. Kashaev, *The algebraic nature of quantum dilogarithm, Geometry and integrable models (Dubna, 1994)*, World Sci. Publ., River Edge, NJ (1996), p. 32.
11. Y. Akutsu, T. Deguchi, and T. Ohtsuki, J. Knot Theory Ramif. **01**(02), 161 (1992).
12. J. Murakami, Osaka J. Math. **45**(2), 541 (2008).
13. L. Bishler, A. Mironov, and A. Morozov, arXiv:2205.05650.
14. N. Yu. Reshetikhin and V. G. Turaev, Comm. Math. Phys. **127**, 1 (1990).
15. A. Morozov and A. Smirnov, Nucl. Phys. B **835**, 284 (2010).
16. L. Bishler, S. Dhara, T. Grigoryev, A. Mironov, A. Morozov, An. Morozov, P. Ramadevi, V. Kumar Singh, and A. Sleptsov, JETP Lett. **111**(9), 494 (2020); arXiv:2004.06598.
17. L. Bishler, S. Dhara, T. Grigoryev, A. Mironov, A. Morozov, An. Morozov, P. Ramadevi, V. Kumar Singh, and A. Sleptsov, J. Geom. Phys. **159**, 103928 (2021); arXiv:2007.12532.
18. A. Mironov, A. Morozov, and An. Morozov, *Character expansion for HOMFLY polynomials. I. Integrability and difference equations*, in *Strings, Gauge Fields,*

and the Geometry Behind: The Legacy of Maximilian Kreuzer, World Scietific Publishing, Hackensack (2013); arXiv:1112.5754.

19. A. Mironov, A. Morozov, and An. Morozov, JHEP **03**, 034 (2012); arXiv:1112.2654.
20. L. Kauffman, *Knots, abstract tensors and Yang-Baxter equation*, in *Knots, Topology and Quantum Field Theory*, World Scientific Publishing, Singapore (1991).
21. S. Willetts, arXiv:2003.09854.
22. B. Abdesselam, D. Arnaudon, and A. Chakrabarti, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 5495 (1995); arXiv:q-alg/9504006v2.

Р О С С И Й С К А Я   А К А Д Е М И Я   Н А У К

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

том 116

Выпуск 4

25 августа 2022

Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН

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

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

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 191 – 196 © 2022 г. 25 августа

Процессы $e^+e^- \to a_1\pi$ и $e^+e^- \to [K_1(1270), K_1(1400)]K$ в киральной кварковой модели НИЛ

М. К. Волков[+1)], *К. Нурлан*[+*× 1)]

[+]*Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия*

[*]*Институт ядерной физики, 050032 Алматы, Казахстан*

[×]*Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, 01008 Нур-Султан, Казахстан*

Поступила в редакцию 7 июня 2022 г.
После переработки 6 июля 2022 г.
Принята к публикации 6 июля 2022 г.

В $U(3) \times U(3)$ киральной модели Намбу–Иона–Лазинио вычислены полные сечения процессов $e^+e^- \to a_1\pi$ и $e^+e^- \to [K_1(1270), K_1(1400)]K$. В настоящее время экспериментальные данные по исследуемым процессам отсутствуют, поэтому полученные теоретические результаты следует рассматривать как предсказания.

DOI: 10.31857/S1234567822160017, EDN: jhagis

1. Введение. Ускорители, использующие встречные e^+e^- пучки, являются хорошим инструментом для изучения внутренних свойств и взаимодействия мезонов в широком спектре энергий. При низких энергиях было получено много важных результатов в экспериментах на LEP (ЦЕРН), ВЭПП (ИЯФ им. Г. И. Будкера), PEP II (BaBar, SLAC), Belle (KEK) и др. За последнее время были построены и планируются ряд новых электрон-позитронных коллайдеров, позволяющих исследовать взаимодействия элементарных частиц при более высоких энергиях и с большой статистикой (Belle II, BESIII, Super Charm-Tau Factory и др.). На указанных ускорителях уже сделан ряд важных открытий, в частности, открыты новые частицы с массами тяжелее 2 ГэВ [1–6]. Однако, в области более низких энергий до сих пор остаются нерешенным целый ряд вопросов. В частности, это касается исследований некоторых важных свойств аксиально-векторных мезонов. Например, не были исследованы процессы $e^+e^- \to a_1\pi$ и $e^+e^- \to [K_1(1270), K_1(1400)]K$. Изучение этих процессов представляет большой интерес поскольку в случае с a_1 мезоном до сих пор нет точного определения как массы этого мезона, так и ширины распада [7, 8]. В то же время, экспериментально достаточно точно измерен процесс $e^+e^- \to \pi^+\pi^-\pi^0\pi^0$, где важную роль играют промежуточные каналы с $\omega\pi$ и $a_1\pi$ мезонами [9–11]. Важность детального понимания этих процессов обусловлена тем, что они дают существенный вклад в определение аномального магнитного момента мюона [12, 13].

В случае странных аксиально-векторных мезонов интерес представляет изучение смешивания состояний K_{1A} и K_{1B}. Кроме того, наши теоретические исследования процессов $e^+e^- \to K_1(1270)K$ и $e^+e^- \to K_1(1400)K$ мотивированы недавними измерениями на ВЭПП в ИЯФ им. Г.И. Будкера, где было показано, что полное сечение процесса $e^+e^- \to K^+K^-\pi^+\pi^-$ на 50–90 % определяется промежуточными каналами $K_1(1270, 1400)K$ [14]. Независимое рассмотрение двух каналов относительно друг друга позволяет более детально изучить вышеуказанный процесс.

В настоящей работе мы даем теоретические оценки полных сечений процессов $e^+e^- \to a_1\pi$ и $e^+e^- \to K_1(1270, 1400)K$ в области энергий до 2 ГэВ в рамках $U(3)\times U(3)$ киральной кварковой модели Намбу–Иона–Лазинио (НИЛ) [15–23].

Статья построена следующим образом. Во второй главе приведены кварк-мезонные лагранжианы, необходимые для описания процессов. В главе 3 показаны амплитуды и сечения процессов. Последняя глава 4 посвящена краткому обсуждению полученных результатов.

2. Эффективный кварк-мезонный лагранжиан. Для описания процессов $e^+e^- \to a_1\pi$ и $e^+e^- \to (K_1(1270, 1400))K$ будем использовать эффективный кварк-мезонный лагранжиан, полученный в расширенной модели НИЛ. Модель описывает псевдоскалярные, векторные и аксиально-

[1)]e-mail: volkov@theor.jinr.ru; nurlan@theor.jinr.ru

векторные мезоны в основном и первом радиально-возбужденном состоянии. Лагранжиан взаимодействия кварков с мезонами принимает вид [21, 23]:

$$\Delta L_{\rm int} = \bar{q} \sum_{i=0,\pm} \left[iA_\pi \gamma^5 \lambda_i^\pi \pi^i + \frac{1}{2} A_{a_1} \gamma^\mu \gamma^5 \lambda_i^\rho a_{1\mu}^i + \right.$$
$$\left. + iA_K \gamma^5 \lambda_i^K K^i + \frac{1}{2} A_{K_1} \gamma^\mu \gamma^5 \lambda_i^K K_{1\mu}^i \right] q +$$
$$+ \bar{q} \left[\frac{1}{2} \gamma^\mu \lambda_i^\omega (A_\omega \omega_\mu + B_\omega \omega_\mu) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2} \gamma^\mu \lambda^\phi (A_\phi \phi_\mu + B_\phi \phi_\mu) + \frac{1}{2} \gamma^\mu \lambda^\rho (A_\rho \rho_\mu + B_\rho \rho'_\mu) \right] q, \tag{1}$$

где q и $\bar{q}$ – поля u-, d- и s-кварков с составляющими массами $m_u = m_d = 270\,$МэВ, $m_s = 420\,$МэВ; матрицы λ являются линейными комбинациями матриц Гелл–Манна. Первые радиально возбужденные мезонные состояния отмечены штрихом. Мезоны в основном и первом радиально-возбужденном состоянии связаны с кварковыми полями множителями A_M и B_M [23]

$$A_M = A_M^0 \times$$
$$\times \left[g_M \sin(\theta_M + \theta_M^0) + g_M^{'} f_M(k_\perp^2) \sin(\theta_M - \theta_M^0) \right],$$
$$B_M = -A_M^0 \times$$
$$\times \left[g_M \cos(\theta_M + \theta_M^0) + g_M^{'} f_M(k_\perp^2) \cos(\theta_M - \theta_M^0) \right], \tag{2}$$

где $A_M^0 = 1/\sin(2\theta_M^0)$, $f_M\left(k_\perp^2\right) = \left(1 + d_M k_\perp^2\right) \Theta(\Lambda^2 - - k_\perp^2)$ – формфактор, описывающий первые радиально возбужденные состояния. Параметр наклона d_M зависит только от кваркового состава мезона [23], k – относительный импульс кварков в мезоне. Индекс M указывает соответствующий мезон. Углы смешивания θ_M, возникающие в результате диагонализации исходного лагранжиана, принимают значения:

$$\theta_\rho = \theta_\omega = \theta_{a_1} = 81.8^\circ, \quad \theta_K = 58.11^\circ,$$
$$\theta_{K_1} = 84.74^\circ, \quad \theta_\phi = 68.4^\circ,$$
$$\theta_\rho^0 = \theta_\omega^0 = \theta_{a_1}^0 = 61.5^\circ, \quad \theta_K^0 = 55.52^\circ,$$
$$\theta_{K_1}^0 = 59.56^\circ, \quad \theta_\phi^0 = 57.13^\circ. \tag{3}$$

В случае пионов можно принять $\theta_\pi \approx \theta_\pi^0 \approx \approx 59.12^\circ$ [23].

Константы перенормировки мезонных полей принимают вид

$$g_\pi = \sqrt{\frac{Z_\pi}{4I_{20}}}, \quad g_\rho = g_{a_1} = \sqrt{\frac{3}{2I_{20}}},$$
$$g_K = \sqrt{\frac{Z_K}{4I_{11}}}, \quad g_{K_1} = \sqrt{\frac{3}{2I_{11}}},$$
$$g_\pi^{'} = \sqrt{\frac{1}{4I_{20}^{f^2}}}, \quad g_\rho^{'} = g_{a_1}^{'} = \sqrt{\frac{3}{2I_{20}^{f^2}}},$$
$$g_K^{'} = \sqrt{\frac{1}{4I_{11}^{f^2}}}, \quad g_{K_1}^{'} = \sqrt{\frac{3}{2I_{11}^{f^2}}}, \tag{4}$$

где Z_π и Z_K – дополнительные константы перенормировки, возникающие при учете переходов $\pi - a_1$ и $K - K_1$ [21, 23].

Интегралы, фигурирующие в определении констант связи, имеют вид

$$I_{n_1 n_2}^{f^m} = -i \frac{N_c}{(2\pi)^4} \times$$
$$\times \int \frac{f^m(k_\perp^2)}{(m_u^2 - k^2)^{n_1} (m_s^2 - k^2)^{n_2}} \Theta(\Lambda^2 - k_\perp^2) \mathrm{d}^4 k, \tag{5}$$

где $\Lambda = 1.03$ ГэВ – параметр ультрафиолетового обрезания [23].

3. Амплитуды и полные сечения процессов $e^+e^- \to a_1\pi$ и $e^+e^- \to (K_1(1270, 1400))K$. Диаграммы, описывающие процесс $e^+e^- \to a_1\pi$, представлены на рис. 1 и 2.

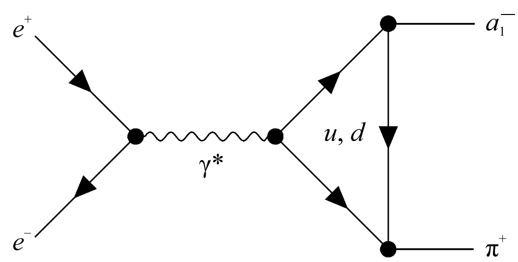


Рис. 1. Контактная диаграмма процесса $e^+e^- \to a_1\pi$

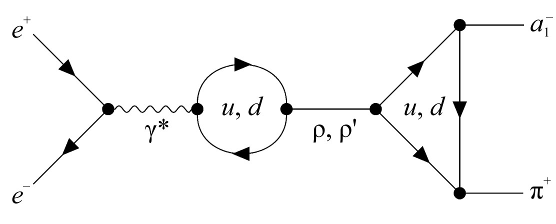


Рис. 2. Диаграмма с промежуточными ρ и ρ' мезонами для процесса $e^+e^- \to a_1\pi$

Полная амплитуда процесса $e^+e^- \to a_1\pi$ в расширенной модели НИЛ принимает вид:

$$\mathcal{M}(e^+e^- \to a_1\pi) = \\ = \frac{16\pi\alpha_{em}}{s} m_u g_\pi l_\mu \Big[B_{(\gamma)} + B_{(\rho+\rho')}\Big]_{\mu\nu} e_\nu(a_1), \quad (6)$$

где $s = (p(e^-) + p(e^+))^2$, $l^\mu = \bar{e}\gamma^\mu e$ – лептонный ток. Члены в квадратной скобке в полученной амплитуде описывают вклады от контактной диаграммы и от диаграмм с промежуточными ρ и ρ' мезонами. Значения масс и ширин мезонов взяты из PDG [24]. Для вычисления кварковых петель используются методы, отработанные в модели НИЛ и успешно апробированные на других физических процессах [21, 23]. Петлевые интегралы разлагаются по импульсам внешних полей и сохраняются только логарифмический расходящиеся части. Учет таких членов позволяет сохранить киральную симметрию в модели [17]. В частности, в описании процесса $e^+e^- \to a_1\pi$ основные вклады вносят члены, содержащие логарифмический расходящиеся интегралы $I_{20}^{M,\dots,M',\dots}$. Использование этих интегралов привело к успешному описанию распада $\tau \to \pi[\rho,\rho']\nu_\tau$ [23, 25].

Вклад от контактной диаграммы имеет вид

$$B_{(\gamma)\mu\nu} = g_{\mu\nu} I_{20}^{a_1}. \quad (7)$$

Сумма вкладов векторных ρ и ρ' мезонов принимает вид

$$B_{(\rho+\rho')\mu\nu} = \frac{C_\rho}{g_\rho}\frac{g_{\mu\nu}s - p_\mu p_\nu}{M_\rho^2 - s - i\sqrt{s}\Gamma_\rho} I_{20}^{\rho a_1} + \\ + \frac{C_{\rho'}}{g_\rho}\frac{g_{\mu\nu}s - p_\mu p_\nu}{M_{\rho'}^2 - s - i\sqrt{s}\Gamma_{\rho'}} I_{20}^{\rho' a_1}, \quad (8)$$

где $r_\rho = 1/2$. Константы C_ρ и $C_{\rho'}$ появляются в кварковых петлях перехода $\gamma \to \rho(\rho')$

$$C_\rho = A_\rho^0\Big[\sin(\theta_\rho + \theta_\rho^0) + R_\rho \sin(\theta_\rho - \theta_\rho^0)\Big], \\ C_{\rho'} = -A_\rho^0\Big[\cos(\theta_\rho + \theta_\rho^0) + R_\rho \cos(\theta_\rho - \theta_\rho^0)\Big], \quad (9)$$

где $R_\rho \approx 0.55$ [23].

Интегралы с вершинами из лагранжиана (1) в числителе, которые также использовались в амплитуде, принимают вид:

$$I_{n_1 n_2}^{M,\dots,M',\dots} = -i\frac{N_c}{(2\pi)^4} \times \\ \times \int \frac{A_M \dots B_M \dots}{(k^2 - m_u^2)^{n_1}(k^2 - m_s^2)^{n_2}} \Theta(\Lambda^2 - k_\perp^2) \mathrm{d}^4 k, \quad (10)$$

где A_M, B_M определены в (2).

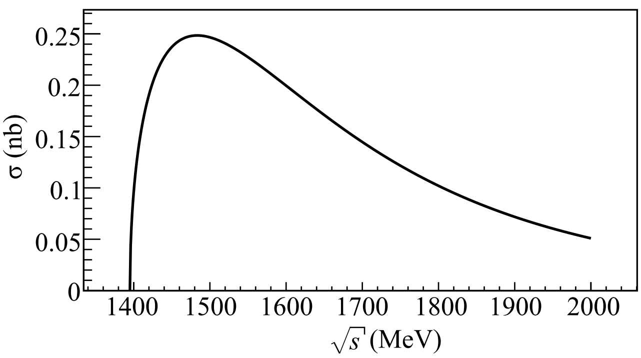


Рис. 3. Сечение процесса $e^+e^- \to a_1\pi$

Вычисленное в модели НИЛ сечение процесса $e^+e^- \to a_1\pi$ приведено на рис. 3.

Рассмотрим теперь процессы с рождением странных мезонов $e^+e^- \to K_1(1270)K$ и $e^+e^- \to K_1(1400)K$. Соответствующие диаграммы представлены на рис. 4 и 5. Здесь важную

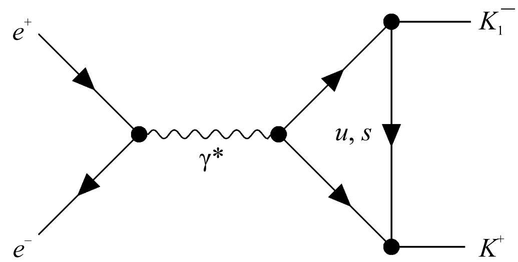


Рис. 4. Контактная диаграмма процесса $e^+e^- \to K_1K$

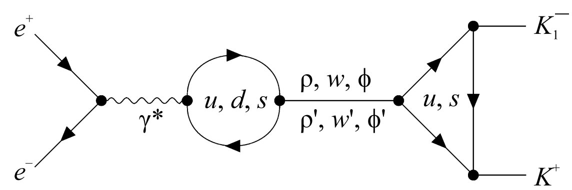


Рис. 5. Диаграмма с промежуточными векторными мезонами в основном и первом радиально-возбужденном состоянии для процесса $e^+e^- \to K_1K$

роль играет учет смешивания аксиально-векторных состояний K_{1A} и K_{1B}. Такое смешение описывается следующей формулой [17, 26–29]

$$K_1(1270) = K_{1A}\sin\alpha + K_{1B}\cos\alpha, \\ K_1(1400) = K_{1A}\cos\alpha - K_{1B}\sin\alpha. \quad (11)$$

Мезон K_1, входящий в лагранжиан (1), соответствует состоянию K_{1A}. Для состояния K_{1B}, не описываемого моделью НИЛ, применим следующую вершину его взаимодействия с кварками [17]:

$$L = \frac{g_B}{2} \sum_{j=0,\pm} K_{1B}^{\mu j} \left(\bar{q} \lambda_j^K \gamma^5 \overset{\leftrightarrow}{\partial}_\mu q \right), \tag{12}$$

где константа связи определяется следующим образом [29]:

$$g_B = (I_{10} + I_{01})^{-1/2}. \tag{13}$$

Заметим, что интегралы, входящие в определение (13), регуляризуются параметром обрезания модели НИЛ [29, 30].

В результате для полной амплитуды процесса $e^+e^- \to K_1(1270)K$ с учетом смешивании K_{1A} и K_{1B} получаем

$$\mathcal{M}(e^+e^- \to K_1(1270)K) = \tag{14}$$
$$= \frac{8\pi\alpha_{em}}{s} l_\mu \Big[B_\gamma + B_{\rho+\rho'} + B_{\omega+\omega'} + e^{i\pi} B_{\phi+\phi'} \Big]_{\mu\nu} e_\nu(K_1).$$

Здесь мы берем фазу в соответствии с экспериментами [31, 32] (фактор $e^{i\pi}$ для ϕ и ϕ' мезонов). Члены в квадратной скобке в амплитуде описывают вклады от контактной диаграммы и от диаграмм с промежуточными ρ, ω и ϕ мезонами в основном и первом радиально-возбужденном состоянии. Во всех диаграммах учитываются вклады от аксиально-векторных состоянии K_{1A} и K_{1B}. Здесь основные вклады от кварковых петель вносят члены, содержащие логарифмический расходящиеся интегралы с участием s-кварка $I_{11}^{M,\dots,M',\dots}$. Такие интегралы ранее использовались для описания распадов $\tau \to [\omega,\phi]K\nu_\tau$ [23]. Более сложные выражения получаются при описании переходов $V \to K_{1B}K$. Здесь возникают, дополнительно, квадратично расходящиеся интегралы. Вычисления кварковых петель с участием мезона K_{1B} выходят за рамки модели и здесь мы для оценки интегралов по аналогии модели НИЛ сохраняем расходящиеся части [23, 30].

Для вклада от контактной диаграммы получаем

$$B_{(\gamma)_{\mu\nu}} = i(m_s + m_u)\sin\alpha I_{11}^{K_1K} g_{\mu\nu} + g_B g_K \cos\alpha \times$$
$$\Big[\frac{2}{3}\left(I_{10} - \left((m_s - m_u)^2 + m_u^2 \right) I_{11} - 2m_u^2(m_s - m_u) I_{21} \right) \tag{15}$$
$$+ \frac{1}{3}\left(I_{01} - \left((m_u - m_s)^2 + m_s^2 \right) I_{11} - \right.$$
$$\left. - 2m_s^2(m_u - m_s) I_{12} \right) \Big] g_{\mu\nu}. \tag{16}$$

Вклады промежуточных векторных мезонов имеют вид

$$B_{(V+V')\mu\nu} = r_V \left[\frac{C_V}{g_V} \frac{g_{\mu\nu}s - p_\mu p_\nu}{M_V^2 - s - i\sqrt{s}\Gamma_V} \times \right.$$
$$\times (i \sin\alpha C_{VK_{1A}K} + \cos\alpha C_{VK_{1B}K}) +$$
$$+ \frac{C_{V'}}{g_V} \frac{g_{\mu\nu}s - p_\mu p_\nu}{M_{V'}^2 - s - i\sqrt{s}\Gamma_{V'}} \times$$
$$\left. \times (i \sin\alpha C_{V'K_{1A}K} + \cos\alpha C_{V'K_{1B}K}) \right], \tag{17}$$

где $V = \rho, \omega, \phi$ и $V' = \rho', \omega', \phi'$ векторные мезоны; $r_\rho = 1/2$, $r_\omega = 1/6$, $r_\phi = 1/3$;

$$C_{VK_{1A}K} = (m_s + m_u) I_{11}^{VK_1K},$$
$$C_{V'K_{1A}K} = (m_s + m_u) I_{11}^{V'K_1K}. \tag{18}$$

Константы, описывающие вклады мезона K_{1B} в промежуточные каналы, принимают вид

$$C_{\rho K_{1B}K} = g_B \Big[I_{10}^{\rho K} - \left((m_s - m_u)^2 + m_u^2 \right) I_{11}^{\rho K} -$$
$$- 2m_u^2 (m_s - m_u) I_{21}^{\rho K} \Big], \tag{19}$$

$$C_{\rho' K_{1B}K} = g_B \Big[I_{10}^{\rho' K} - \left((m_s - m_u)^2 + m_u^2 \right) I_{11}^{\rho' K} -$$
$$- 2m_u^2 (m_s - m_u) I_{21}^{\rho' K} \Big]. \tag{20}$$

Константы $C_{\phi K_{1B}K}$ и $C_{\phi' K_{1B}K}$ получаются путем замены $m_u \to m_s$ и соответствующих вершин $\rho \to \phi, \rho' \to \phi'$ в формулах (19) и (20).

Полная амплитуда для процесса $e^+e^- \to K_1(1400)K$ получается путем замены $\sin\alpha \to \cos\alpha$ и массы $M_{K_1(1270)} \to M_{K_1(1400)}$ в амплитуде (14).

Предсказания, полученные в модели НИЛ, для полных сечений процессов $e^+e^- \to K_1(1270)K$ и $e^+e^- \to K_1(1400)K$ приведены на рис. 6 и 7. Неопределенности расчетов, проведенных в $U(3) \times U(3)$ киральной кварковой модели НИЛ, можно оценить на уровне 15 % [23].

Заключение. В настоящее время для процессов $e^+e^- \to a_1\pi$, $e^+e^- \to K_1(1270)K$ и $e^+e^- \to K_1(1400)K$ нет экспериментальных данных. Однако, эти процессы могут играть важную роль в качестве промежуточных каналов в процессах с рождением четырех псевдоскалярных мезонов в конечном состоянии. Это такие процессы, как $e^+e^- \to \pi^+\pi^-2\pi^0$ и $e^+e^- \to K^+K^-\pi^+\pi^-$ [9, 10, 11, 14, 33].

Эксперименты по измерению сечения процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-2\pi^0$ проводились в диапазоне энергий $1.05 - 1.38$ ГэВ на детекторе CMD-2 в ВЭПП [9, 10]. Результаты детальных анализов процесса показал,

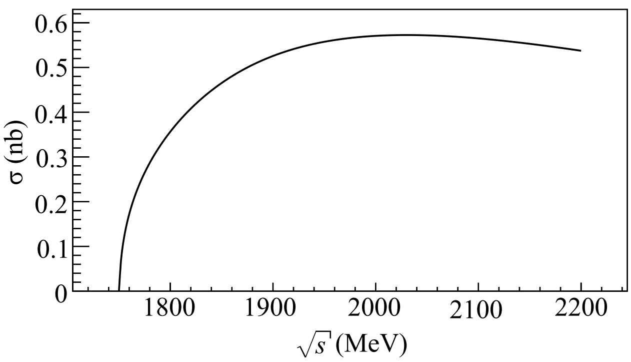


Рис. 6. Сечение процесса $e^+e^- \to K_1(1270)K$

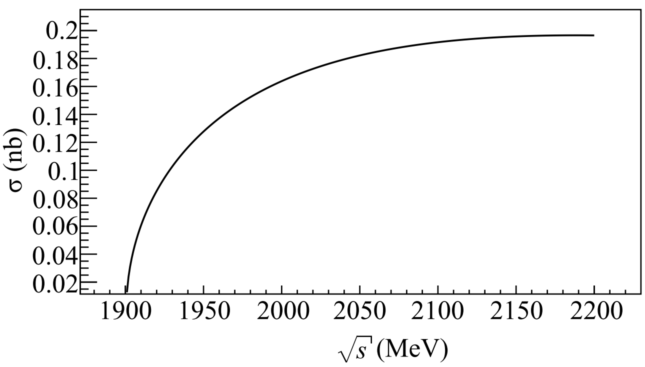


Рис. 7. Сечение процесса $e^+e^- \to K_1(1400)K$

что доминирующий вклад в сечение вносят промежуточные состояния $\omega\pi$ и $a_1\pi$. Также было установлено, канал с $a_1\pi$ мезонами играет важную роль при описании экспериментальных спектров инвариантных масс и угловых распределений [9]. В более поздних экспериментах BaBar также отмечалась заметная роль канала $a_1\pi$, однако, отдельно данный канал не был измерен из-за большой ширины резонанса a_1 [11]. В то же время, вклад канала с $\omega\pi$ мезонами был исследован более точно в широком диапазоне энергий до 4.5 ГэВ. Заметим, что процесс $e^+e^- \to \omega\pi$ ранее уже описывался в модели НИЛ в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными [34]. Приведенные эксперименты показывают важность изучения процесса $e^+e^- \to a_1\pi$ в дальнейших исследованиях при наличии большой статистики.

Что касается процессов с рождением странных мезонов, в недавних экспериментах по измерению полного сечения процесса $e^+e^- \to K^+K^-\pi^+\pi^-$ установлено, что основными промежуточными механизмами являются $e^+e^- \to (K_1(1270, 1400))K$. Вклад этих каналов в полное сечение составляет около 50–90 % [14]. Вследствие того, что резонансы $K_1(1270)$ и $K_1(1400)$ являются широкими, их смешивание не принималось во внимание при проведении экспериментов при энергий < 2 ГэВ. Однако, рассмотрение процессов $e^+e^- \to K_1(1270)K$ и $e^+e^- \to K_1(1400)K$ независимо друг от друга позволяет более детально изучить вышеуказанные процессы.

Интересно отметить, что механизмы рождения мезонов в процессах электрон-позитронных столкновений и τ-лептонных распадах достаточно близки и могут быть описаны в едином подходе. В последние годы в модели НИЛ были описаны целый ряд τ-распадов, в частности, с участием аксиально-векторных мезонов $K_1(1270)$ и $K_1(1400)$ [22, 23]. Причем в распадах с участием странных мезонов $\tau \to [K\omega, K\phi, K^*\pi, K^*\eta]\nu_\tau$ аксиально-векторный канал вносил основной вклад в ширину распада. Также, важную роль играет учет смешивания состоянии K_{1A} и K_{1B}. В указанных τ распадах в модели НИЛ удалось получить удовлетворительное согласие с экспериментальными данными [23]. Это позволяет надеяться на достоверность полученных в данной работе предсказаний для процессов e^+e^- аннигиляции.

Авторы благодарят профессора А. Б. Арбузова за полезные обсуждения.

Работа поддержана грантом Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (номер гранта AP15473301).

1. S. K. Choi, S. L. Olsen, K. Abe et al. (Belle Collaboration), Phys. Rev. Lett. **91**, 262001 (2003).
2. D. Acosta, T. Affolder, M. H. Ahn et al. (CDF Collaboration), Phys. Rev. Lett. **93**, 072001 (2004).
3. B. Aubert, R. Barate, D. Boutigny et al. (BaBar Collaboration), Phys. Rev. D **71**, 071103 (2005).
4. S. K. Choi, S. L. Olsen, I. Adachi et al. (Belle Collaboration), Phys. Rev. Lett. **100**, 142001 (2008).
5. T. Aaltonen, Jahred A. Adelman, T. Akimoto et al. (CDF Collaboration), Phys. Rev. Lett. **102**, 242002 (2009).
6. M. Ablikim, M. N. Achasov, X. C. Ai et al. (BESIII Collaboration), Phys. Rev. Lett. **112**(9), 092001 (2014).
7. M. Aghasyan, M. G. Alexeev, G. D. Alexeev et al. (COMPASS Collaboration), Phys. Rev. D **98**(9), 092003 (2018).
8. M. Mikhasenko, A. Pilloni, M. Albaladejo, C. Fernández-Ramírez, A. Jackura, V. Mathieu, J. Nys, A. Rodas, B. Ketzer, A. P. Szczepaniak (JPAC Collaboration), Phys. Rev. D **98**(9), 096021 (2018).
9. R. R. Akhmetshin, E. V. Anashkin, M. Arpagaus et al. (CMD-2 Collaboration), Phys. Lett. B **466**, 392 (1999).
10. M. N. Achasov, K. I. Beloborodov, A. V. Berdyugin et al. (Collaboration), JETP **96**, 789 (2003).
11. J. P. Lees, V. Poireau, V. Tisserand et al. (BaBar Collaboration), Phys. Rev. D **96**(9), 092009 (2017).

12. M. Davier, S. Eidelman, A. Hocker, and Z. Zhang, Eur. Phys. J. C **27**, 497 (2003).
13. S. Actis, A. Arbuzov, G. Balossini et al. (Collaboration), Eur. Phys. J. C **66**, 585 (2010).
14. D. N. Shemyakin, G. V. Fedotovich, R. R. Akhmetshin et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **756**, 153 (2016).
15. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
16. M. K. Volkov, Annals Phys. **157**, 282 (1984).
17. M. K. Volkov, Sov. J. Part. Nucl. **17**, 186 (1986).
18. D. Ebert and H. Reinhardt, Nucl. Phys. B **271**, 188 (1986).
19. U. Vogl and W. Weise, Prog. Part. Nucl. Phys. **27**, 195 (1991).
20. T. Hatsuda and T. Kunihiro, Phys. Rept. **247**, 221 (1994).
21. M. K. Volkov and A. E. Radzhabov, Phys.-Uspekhi **49**, 551 (2006).
22. M. K. Volkov and A. B. Arbuzov, Phys.-Uspekhi **60**(7), 643 (2017).
23. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Symmetry **14**(2), 308 (2022).
24. P. A. Zyla, R. M. Barnett, J. Beringer et al. (Particle Data Group), PTEP **2020**(8), 083C01 (2020).
25. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, Pis'ma v ZhETF **109**(4), 219 (2019).
26. M. K. Volkov and A. A. Osipov, Sov. J. Nucl. Phys. **41**, 500 (1985).
27. M. Suzuki, Phys. Rev. D **47**, 1252 (1993).
28. X. W. Kang, T. Luo, Y. Zhang, L. Y. Dai, and C. Wang, Eur. Phys. J. C **78**(11), 909 (2018).
29. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, Phys. Part. Nucl. Lett. **16**(6), 565 (2019).
30. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, arXiv:2205.02810 [hep-ph].
31. M. N. Achasov, K. I. Beloborodov, A. V. Berdyugin et al. (Collaboration), Phys. Rev. D **63**, 072002 (2001).
32. M. N. Achasov, K. I. Beloborodov, A. V. Berdyugin et al. (Collaboration), Phys. Rev. D **76**, 072012 (2007).
33. J. P. Lees, V. Poireau, E. Prencipe et al. (BaBar Collaboration) Phys. Rev. D **86**, 012008 (2012).
34. M. K. Volkov, A. B. Arbuzov, and D. G. Kostunin, Phys. Rev. D **86**, 057301 (2012).

Эффекты электрослабых радиационных поправок в процессах электрон-позитронной аннигиляции $e^+e^- \to ll$ с учетом поляризации при низких энергиях

А. Б. Арбузов[+], *С. Г. Бондаренко*[+1)], *Е. В. Дыдышко*[*×], *Л. В. Калиновская*[*], *Л. А. Румянцев*[*], *Р. Р. Садыков*[*], *В. Л. Ермольчик*[*×], *Ю. В. Ермольчик*[*×]

[+]*Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия*

[*]*Лаборатория ядерных проблем им. В. П. Джелепова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия*

[×]*Институт ядерных проблем, Белорусский государственный университет, 220006 Минск, Беларусь*

Поступила в редакцию 19 июня 2022 г.
После переработки 12 июля 2022 г.
Принята к публикации 13 июля 2022 г.

В статье приводятся полные однопетлевые электрослабые радиационные поправки к сечению процесса $e^+e^- \to \mu^-\mu^+(\tau^-\tau^+)$, рассчитанные с помощью системы SANC. Вклады высших порядков излучения в начальном состоянии вычислены в формализме структурных функций КЭД. Численные результаты приведены для энергий в системе центра масс $\sqrt{s} = 5,\ 7$ ГэВ для различных степеней поляризации начальных частиц. Это исследование является вкладом в исследовательскую программу проекта Супер чарм-тау фабрики, который рассматривается для реализации в Сарове, Россия.

DOI: 10.31857/S1234567822160029, EDN: jhblwu

1. Введение. Процессы электрон-позитронной аннигиляции — это мощный инструмент для изучения свойств элементарных частиц. В частности, современные e^+e^- коллайдеры, такие как VEPP-2000 (Новосибирск), BEPC II (Пекин), KEKB (Цукуба) и др., хорошо подходят для получения адронов и изучения их с высокой точностью. Существенные плюсы электрон-позитронных коллайдеров — это хорошее отношение сигнал-шум, высокие производительность и разрешение. Постоянно увеличивающаяся экспериментальная точность создает вызов для теории, требуя все более и более аккуратных предсказаний. Например, текущие и предстоящие эксперименты SuperKEKB [1], BES-III [2], Супер чарм-тау фабрика (Super Charm-Tau Factory) [3] и Super Tau-Charm Facility [4] нацелены на достижение погрешности в единицы промилле в измерениях светимости. Это требует новых теоретических результатов с учетом пертурбативных поправок высших порядков и других эффектов, включая и вклады электрослабых взаимодействий.

Другим важным преимуществом e^+e^- коллайдеров является то, что на них возможно использовать поляризованные пучки частиц. Несколько будущих проектов установок учитывают использование, по крайней мере, продольно поляризованных пучков электронов. Это откроет новые возможности для высокоточных исследований физики очарованного кварка и тау-лептона. Будет достигнута высокая точность и в проверке лептонной универсальности, и в поисках CP-нарушения. Измеряя асимметрию вправо-влево, можно будет получить новую независимую оценку эффективного электрослабого (ЭС) параметра смешивания $\sin^2\theta_W$ в дополнение к исследованиям при более высоких энергиях. Измерения с поляризованными пучками также нужны для уточнения элементов матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскавы, изучения КХД и экзотических адронов при низких энергиях, поиска новой физики и обширного изучения физики двухфотонного взаимодействия. Команда SuperKEKB (коллаборация Belle) [5] рассматривает возможность добавить продольную поляризацию для пучка электронов при модернизации [6, 7]. Это серьезно расширит возможности коллайдера для исследования сектора ЭС взаимодействия.

Эксперимент BES-III достиг более 35 фб$^{-1}$ интегральной светимости при энергиях от 2.0 до 4.94 ГэВ в системе центра масс (с.ц.м.). Модернизация BES-III увеличит пиковую светимость в 3 раза для энер-

1)e-mail: bondarenko@jinr.ru

гии пучка от 2.0 до 2.8 ГэВ (энергия в с.ц.м. от 4.0 до 5.6 ГэВ). Будущие фабрики очарованных кварков и тау-лептонов (проект Супер чарм-тау фабрики [3] и Современная электрон-позитронная установка с высокой интенсивностью (High Intensity Electron Positron Advanced Facility, HIEPAF) [4]) представляют собой ускорительные комплексы для измерений в диапазоне от 2 до 5(7) ГэВ со светимостью до 10^{35} см$^{-2}$ с$^{-1}$ и продольной поляризацией. Они будут обеспечивать до 1 аб$^{-1}$ интегральной светимости в год.

В связи с перечисленными задачами, одним из наиболее востребованных процессов для теоретической поддержки эксперимента и моделирования является процесс аннигиляции в лептонную пару. Он используется как для оценки светимости коллайдеров, так и в физической программе исследований. Различные экспериментальные установки, работающие при низких энергиях, которые планируются или уже запущены, требуют соответствующего программного обеспечения для получения теоретических предсказаний. В настоящее время наиболее продвинутыми и широко используемыми генераторами с радиационными поправками на однопетлевом уровне точности для оценки данного процесса при низких энергиях являются: BabaYaga [8–11], `KKMC` [12, 13], и `MCJPG` [14]. Недавно появился новый Монте-Карло генератор [15] для моделирования рождения лептонных пар и распадов тау-лептонов при энергиях вплоть до 11 ГэВ.

Монте-Карло генератор событий `ReneSANCe` [16] и интегратор `MCSANCee` проекта `SANC` – это относительно новые инструменты. Их можно использовать в описанном промежутке энергий для моделирования процессов аннигиляции в лептонную пару и Баба-рассеяния на электрон-позитронных коллайдерах. С помощью этих программ можно оценить полные однопетлевые КЭД и ЭС радиационные поправки. Также реализованы некоторые поправки высших порядков. Кроме того, эти инструменты позволяют получать результат в полном фазовом объеме и учитывать продольную поляризацию пучков. Чтобы соответствовать высокой точности текущих и будущих экспериментов, мы планируем реализовать следующие за ведущими КЭД радиационные поправки.

В этой статье мы анализируем эффекты, обусловленные электрослабыми радиационными поправками и поляризацией сталкивающихся пучков с помощью программного обеспечения `SANC`. Мы рассматриваем процессы электрон-позитронной аннигиляции в лептонные пары с учетом произвольной продольной поляризации начальных частиц (χ_i соответствуют спиральностям частиц)

$$e^+(p_1,\chi_1)+e^-(p_2,\chi_2)\to \\ \to l^-(p_3,\chi_3)+l^+(p_4,\chi_4)(+\gamma(p_5,\chi_5)), \qquad (1)$$

где $l=\mu,\tau$. Мы рассматриваем эксперименты при относительно низких энергиях в с.ц.м. вплоть до 7 ГэВ, что соответствует условиям Супер чарм-тау фабрики. Наша цель – проанализировать величину различных вкладов радиационных поправок, оценить результирующую теоретическую неопределенность и проверить необходимость включения других поправок более высокого порядка.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 мы обсуждаем различные вклады в сечения. В разделе 3 приводятся соответствующие численные результаты для полного и дифференциального сечений. Мы рассматриваем подробно все возможные вклады в сечения при энергиях в с.ц.м. $\sqrt{s}=5$ и 7 ГэВ. Численные оценки проведены с учетом поляризации пучков частиц. В разделе 4 мы анализируем полученные результаты.

2. Статус радиационных поправок при низких энергиях в `SANC`. В ходе подробного анализа мы разделяем вклады в полное сечение на несколько частей: сечение на борновском уровне, ЭС поправки, вклады поляризации вакуума и многофотонного излучения.

Борновский уровень. Мы оцениваем вклад борновского сечения (*leading order*, LO) для двух случаев: 1) только с фотонным обменом $\sigma^{\rm Born}_{\rm QED}(\gamma)$ и 2) с одновременным фотонным и Z-бозонным обменом $\sigma^{\rm Born}_{\rm QED}(Z/\gamma)$.

Электрослабые поправки. Мы уже подробно описали технику и результаты аналитических расчетов скалярных формфакторов и спиральных амплитуд процесса (1) в нашей недавней работе [17]. Для ЭС поправок мы вычисляем следующие вклады и вводим для них обозначения:

- Уровень КЭД.

Калибровочно-инвариантные наборы КЭД поправок оцениваются отдельно, т.е. излучение из начального состояния (ISR), излучение из конечного состояния (FSR), и интерференция излучения из начального и конечного состояний (IFI).

- Слабые поправки и поправки высших порядков.

При низких энергиях вклад слабого взаимодействия обычно мал, поскольку он подавляется соотношением s/M_Z^2. Но для высокоточных измерений они все еще могут быть численно значимы. Мы сочли целесообразным объединить вклады одного и того же порядка малости, т.е. слабые поправки и поправки высших порядков. Соответствующие относительные вклады будут далее обозначены как δ^{weak} и δ^{ho}. Мы также различаем здесь два варианта: 1) полная однопетлевая поправка δ^{weak}, где учитываются чисто слабое взаимодействие и вклад поляризации вакуума (VP)[2)]; и 2) вклад чистого слабого взаимодействия $\delta^{\text{weak - VP}} = \delta^{\text{weak}} - \delta^{\text{VP}}$.

Мы оцениваем ведущие ЭС поправки высшего порядка δ^{ho} к четырехфермионным процессам с помощью параметров $\Delta\alpha$ и $\Delta\rho$. Подробное описание того, как этот вклад учитывается в `SANC`, представлено в работе [18].

Поляризация вакуума.

Мы рассматриваем два варианта при учете вклада поляризации вакуума: δ_1^{VP}, где для адронной части поляризации вакуума $\Delta\alpha^{(5)}_{\text{had}}(M_Z)$ используется параметризация со вспомогательными массами кварков; и δ_2^{VP} – вариант, использующий общедоступные версии библиотеки `AlphaQED` [19].

Мультифотонные эффекты.

Реализация в `SANC` мультифотонных эффектов, т.е. ISR и FSR в приближении ведущих логарифмов (LLA), проведена с помощью аппарата структурных функций КЭД [20, 21], который был подробно описан в [22]. Результаты показаны вплоть до конечных членов $\mathcal{O}(\alpha^3 L^3)$ для экспоненцированного представления и до $\mathcal{O}(\alpha^4 L^4)$ для вычислений порядок за порядком.

Отдельные вклады ISR (FSR) в поправки очень чувствительны к кинематическим ограничениям. Наши кинематические ограничения соответствуют типичным условиям проекта Супер чарм-тау фабрики.

Основная формула для сечения рассеяния при e^+e^- аннигиляции с КЭД поправками в ведущем логарифмическом приближении к начальному состоянию имеет ту же структуру, что и формула для сечения для процесса Дрелла–Яна. Для ISR поправок в канале аннигиляции большой логарифм выглядит как $L = \ln(s/m_e^2)$, где суммарная энергия в с.ц.м. $\sqrt{s}$ выбрана в качестве масштаба факторизации.

В приближении ведущих логарифмов мы выделяем чисто фотонные поправки (обозначено как “γ”) и оставшиеся, которые включают эффекты рождения чистых пар и смешанных фотон-парных эффектов (обозначено как “e^+e^-” или “$\mu^+\mu^-$”). Здесь мы не рассматриваем поправки, обусловленные излучением пар легких адронов. По величине они сравнимы с вкладом мюонных пар, но сильно зависят от процедуры отбора событий. Поэтому поправки, обусловленные адронными эффектами, будут рассмотрены в другой работе. Соответствующие относительные поправки обозначаются как $\delta^{\text{LLA},i}(k)$, где i = ISR, FSR, IFI, а k указывает на тип поправки: γ, e^+e^- пары и $\mu^+\mu^-$ пары.

3. Численные результаты и сравнение. В этом разделе мы демонстрируем численные результаты для электрослабых радиационных поправок к процессу аннигиляции (1), полученные с помощью программ `SANC`. Численные результаты содержат оценку эффектов поляризации. Мы приводим полные сечения и угловые распределения на однопетлевом уровне. Здесь мы использовали следующий набор входных параметров:

$$\begin{gathered}\alpha^{-1}(0) = 137.035999084, \\ M_W = 80.379 \text{ ГэВ}, \quad M_Z = 91.1876 \text{ ГэВ}, \\ \Gamma_Z = 2.4952 \text{ ГэВ}, \quad m_e = 0.51099895000 \text{ МэВ}, \\ m_\mu = 0.1056583745 \text{ ГэВ}, \quad m_\tau = 1.77686 \text{ ГэВ}, \\ m_d = 0.083 \text{ ГэВ}, \quad m_s = 0.215 \text{ ГэВ}, \\ m_b = 4.7 \text{ ГэВ}, \quad m_u = 0.062 \text{ ГэВ}, \\ m_c = 1.5 \text{ ГэВ}, \quad m_t = 172.76 \text{ ГэВ}.\end{gathered} \tag{2}$$

При расчетах использовались ограничения на углы вылета и инвариантную массу конечных лептонов:

$$\begin{gathered}|\cos\theta_{\mu^-}| < 0.9, \ |\cos\theta_{\mu^+}| < 0.9, \\ M_{l^+l^-} \geq 1 \text{ ГэВ},\end{gathered} \tag{3}$$

где $\theta_{\mu^\pm}$ – углы по отношению к оси пучков.

Все расчеты проведены в ЭС схеме входных параметров $\alpha(0)$, чтобы отдельно оценить вклад поляризации вакуума. В этой схеме входными параметрами являются постоянная тонкой структуры $\alpha(0)$ и все массы частиц. Результаты получены для энергий в с.ц.м. $\sqrt{s} = 5$ и 7 ГэВ и для следующих трех сочетаний степеней поляризации пучков электронов (P_{e^-}) и позитронов (P_{e^+}):

$$(P_{e^+}, P_{e^-}) = (0,0), \ (0,-0.8), \ (0,0.8). \tag{4}$$

Для того чтобы количественно оценить вклады различных поправок, мы разделили их на несколько частей: три калибровочно инвариантных набора однопетлевых КЭД поправок, вклад поляризации вакуума, вклад эффектов слабого взаимодействия и КЭД

[2)] В `SANC` принято включение вклада поляризации вакуума в набор *слабых* поправок.

вклады более высокого порядка в приближении ведущих логарифмов. Три набора радиационных КЭД поправок учитывают излучение из начального состояния (ISR), излучение из конечного состояния (FSR) и интерференцию излучения из начального и конечного состояний (IFI). Соответствующие результаты для полного сечения аннигиляции в лептонную пару представлены в табл. 1, где относительные поправки δ^i вычисляются как отношения (в процентах) соответствующих вкладов радиационных поправок к сечению борновского уровня. Таблица 2 показывает величину поправков высших порядков, которые учитывают излучение из начального состояния, вычисленные в коллинеарном ведущем логарифмическом приближении.

Таблица 1. Борновские и однопетлевые интегральные сечения, а также относительные поправки к процессу $e^+e^- \to \to \mu^-\mu^+(\gamma)$ для энергий $\sqrt{s} = 5$ и 7 ГэВ

$\sqrt{s}$, ГэВ	5	7
σ^{Born}, пб	2978.58 (1)	1519.55 (1)
$\delta^{\text{weak-VP}}$, %	0.029 (1)	0.005 (1)
δ_1^{VP}, %	5.467 (1)	6.272 (1)
δ_2^{VP}, %	5.430 (1)	6.250 (1)
δ^{ho}, %	0.224 (1)	0.294 (1)
$\delta^{\text{QED, ISR}}$, %	8.455 (2)	9.063 (1)
$\delta^{\text{QED, FSR}}$, %	−0.016 (1)	−0.014 (1)
$\delta^{\text{QED, IFI}}$, %	0.012 (2)	0.017 (1)
$\delta^{\text{LLA, ISR}}$, %	0.668 (1)	0.850 (1)
$\delta^{\text{LLA, FSR}}$, %	0.047 (1)	0.070 (1)

Таблица 2. Поправки высших порядков, учитывающие излучение начального состояния (ISR), вычисленные в ведущем логарифмическом приближении (LLA), к сечению процесса $e^+e^- \to \mu^-\mu^+(n\gamma)$ при энергиях $\sqrt{s} = 5$ и 7 ГэВ. Здесь $\delta_{\text{ISR LLA}} \equiv \delta\sigma_{\text{ISR LLA}}/\sigma_0 \times 100\,\%$

	δ, %	
$\sqrt{s}$, ГэВ	5	7
$\mathcal{O}(\alpha^2L^2)$, γ	0.315 (1)	0.436 (1)
$\mathcal{O}(\alpha^2L^2)$, e^+e^-	0.238 (1)	0.258 (1)
$\mathcal{O}(\alpha^2L^2)$, $\mu^+\mu^-$	0.100 (1)	0.114 (1)
$\mathcal{O}(\alpha^3L^3)$, γ	−0.008 (1)	−0.004 (1)
$\mathcal{O}(\alpha^3L^3)$, e^+e^-	0.016 (1)	0.033 (1)
$\mathcal{O}(\alpha^3L^3)$, $\mu^+\mu^-$	0.007 (1)	0.015 (1)

В верхней части рис. 1 показаны борновское сечение и сечение с поправками, которое включает электрослабые однопетлевые (*next-to-leading order*, NLO) и поправки высших порядков, как функции энергии ($\sqrt{s} = 2{-}12$ ГэВ) пучков электронов и позитронов. Сечения быстро уменьшаются от 20 нанобарн при энергии 2 ГэВ до половины нанобарна при 12 ГэВ.

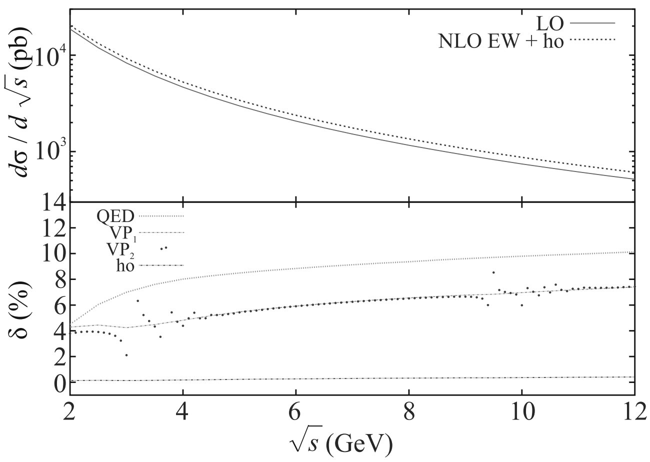


Рис. 1. (Цветной онлайн) Сечение процесса $e^+e^- \to \to \mu^-\mu^+(\gamma)$ на борновском уровне (LO) и с поправками (NLO EW + ho) для энергий $\sqrt{s} = 2 - 12$ ГэВ (верхняя часть). Относительные вклады КЭД поправок, поляризации вакуума и высших порядков (нижняя часть)

В нижней части рис. 1 показаны относительные поправки к борновскому сечению по вкладам, а именно, КЭД, вакуумная поляризация (VP) и ЭС вклады высших порядков. Основное влияние оказывают КЭД эффекты, составляющие от 5 до 10 %. Вклад поляризации вакуума также велик и составляет от 4 до 8 %. Вклад поправок высших порядков пропорционален α^n ($n \geq 2$) и составляет около 0.1–0.4 % по причине того, что усиливается большими логарифмами. Вакуумную поляризацию мы рассматриваем двумя способами. В первом случае адронная часть поляризации вакуума параметризуется вспомогательными массами кварков (этот случай обозначен "VP$_1$" на графике). Во втором случае мы используем параметризацию из работы [19], которая учитывает адронные резонансы (на графике она обозначена "VP$_2$"). В обоих случаях также учитываются лептонные вклады. Видно, что обе параметризации хорошо согласуются в областях без резонансов при более высоких энергиях. Однако в целом для данного диапазона энергий вторая параметризация подходит лучше.

4. Сравнение с программой BabaYaga. В таблице 3 мы приводим детальное сравнение борновского и однопетлевого (без вклада поляризации вакуума) интегральных сечений, полученных с помощью программ SANC и BabaYaga. Результаты получены для двух энергий $\sqrt{s} = 5$ и 7 ГэВ с ограничениями (3). Обнаружено очень хорошее согласие для результатов двух программ в пределах статистических погрешностей.

Таблица 3. Детальное сравнение борновского и однопетлевого сечений, вычисленных с помощью программ `SANC` и `BabaYaga`

$\sqrt{s}$, ГэВ	5	7
Born, нб		
`SANC` (Z/γ)	2.9786 (1)	1.5195 (1)
`SANC` (only γ)	2.9786 (1)	1.5196 (1)
`BabaYaga`	2.9786 (1)	1.5196 (1)
NLO QED, нб		
`SANC` (Z/γ)	3.2304 (1)	1.6575 (1)
`SANC` (only γ)	3.2287 (1)	1.6565 (1)
`BabaYaga`	3.2285 (1)	1.6565 (1)

Рисунки 2 и 3 показывают сравнение результатов моделирования при помощи программ `SANC` и `BabaYaga` для двух энергий $\sqrt{s} = 5$ и 7 ГэВ. В верхних частях рисунков построены угловые распределения для борновского и однопетлевого уровней дифференциальных сечений как функций косинуса угла конечного мюона. В нижних частях сравниваются относительные поправки. Для обеих энергий сечения и относительные поправки хорошо согласуются. При получении численных результатов, приведенных в табл. 3 и на рис. 2 и 3, в кодах `SANC` был дополнительно отключен вклад от обмена Z-бозоном на борновском и однопетлевом уровнях.

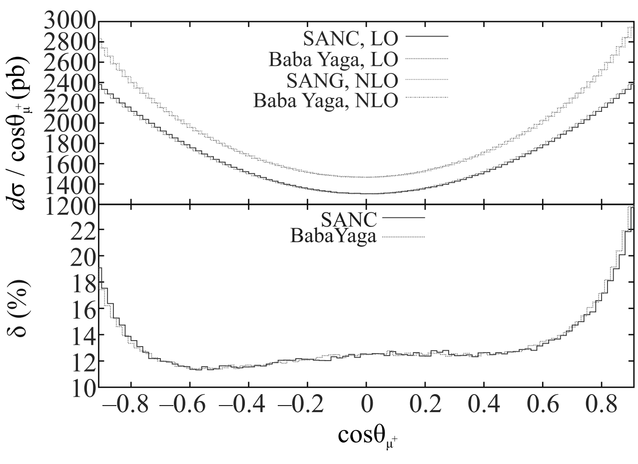


Рис. 2. (Цветной онлайн) Угловые распределения для неполяризованных дифференциальных сечений процесса $e^+e^- \to \mu^-\mu^+(\gamma)$ – борновского и однопетлевого (верхняя часть) и относительные поправки (нижняя часть), построенные с помощью программ `SANC` и `BabaYaga` для энергии 5 ГэВ по углу $\cos\theta_{\mu^+}$

5. Зависимость сечений от поляризации. В таблицах 4 и 5 представлены интегральные борновские и однопетлевые сечения в пикобарнах, и относительные поправки в процентах для процесса $e^+e^- \to l^-l^+$ при энергии 5 ГэВ для набора (4) степеней поляризации начальных частиц в ЭС $\alpha(0)$ схеме. Для энергии 7 ГэВ соответствующие сечения приводятся в табл. 6 и 7. Интересно, что борновские сечения и сечения с поправками заметно зависят от степени поляризации пучков, в то время как относительная поправка почти не меняется.

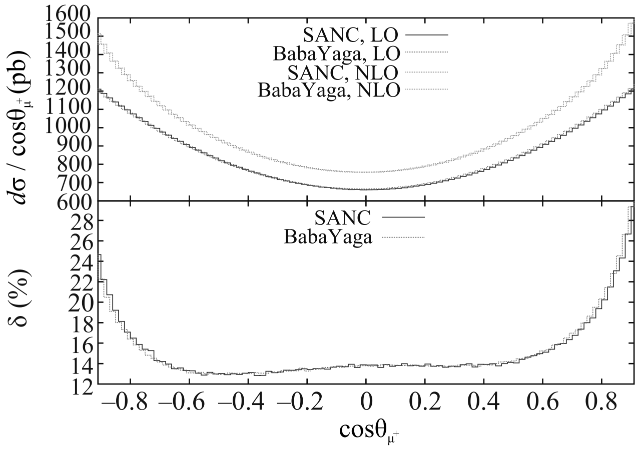


Рис. 3. (Цветной онлайн) Те же распределения, как на рис. 2, но для энергии 7 ГэВ

Таблица 4. Поляризованные интегральные сечения в борновском и однопетлевом приближениях и относительные поправки для процесса рассеяния $e^+e^- \to \mu^-\mu^+(\gamma)$ при энергии $\sqrt{s} = 5$ ГэВ для различных степеней поляризации начальных частиц

P_{e^+}, P_{e^-}	σ^{Born}, пб	$\sigma^{\text{1-loop}}$, пб	δ, %
0, 0	2978.6 (1)	3434.2 (1)	15.30 (1)
0, +0.8	2979.1 (1)	3434.6 (1)	15.29 (1)
0, −0.8	2978.0 (1)	3433.7 (1)	15.30 (1)

Таблица 5. Поляризованные интегральные борновское и однопетлевое сечения, а также относительные поправки для процесса рассеяния $e^+e^- \to \tau^-\tau^+(\gamma)$ при энергии $\sqrt{s} = 5$ ГэВ

P_{e^+}, P_{e^-}	σ^{Born}, пб	$\sigma^{\text{1-loop}}$, пб	δ, %
0, 0	2703.3 (1)	2816.7 (1)	4.20 (1)
0, +0.8	2703.8 (1)	2816.9 (1)	4.18 (1)
0, −0.8	2702.8 (1)	2816.5 (1)	4.21 (1)

6. Асимметрия вперед-назад. Асимметрия вперед-назад A_{FB} определяется как

$$A_{\text{FB}} = \frac{\sigma_{\text{F}} - \sigma_{\text{B}}}{\sigma_{\text{F}} + \sigma_{\text{B}}}, \tag{5}$$

$$\sigma_{\text{F}} = \int\limits_0^1 \frac{d\sigma}{d\cos\vartheta_f} d\cos\vartheta_f, \quad \sigma_{\text{B}} = \int\limits_{-1}^0 \frac{d\sigma}{d\cos\vartheta_f} d\cos\vartheta_f,$$

Таблица 6. То же, что и в таблице 4, но для энергии 7 ГэВ

P_{e^+}, P_{e^-}	σ^{Born}, пб	$\sigma^{\text{1-loop}}$, пб	δ, %
0, 0	1519.6 (1)	1773.8 (1)	16.73 (1)
0, +0.8	1520.1 (1)	1774.1 (1)	16.71 (1)
0, −0.8	1519.0 (1)	1773.6 (1)	16.76 (1)

Таблица 7. То же, что и в табл. 5, но для энергии 7 ГэВ

P_{e^+}, P_{e^-}	σ^{Born}, пб	$\sigma^{\text{1-loop}}$, пб	δ, %
0, 0	1503.0 (1)	1648.8 (1)	9.70 (1)
0, +0.8	1503.6 (1)	1649.1 (1)	9.68 (1)
0, −0.8	1502.4 (1)	1648.5 (1)	9.72(1)

где ϑ_f – это угол между импульсом входящего электрона и импульсом исходящего отрицательно заряженного фермиона. Он может быть измерен в любом канале процесса $e^+e^- \to f\bar{f}$, но для точных измерений удобнее всего использовать $f = e, \mu$.

На рисунке 4 показано поведение асимметрии A_{FB} в борновском и однопетлевом приближениях (со слабым, КЭД или полным ЭС вкладом радиационных поправок) и соответствующими разницами ΔA_{FB} для энергий $2 \leq \sqrt{s} \leq 12$ ГэВ. Асимметрия в первом приближении возникает из-за вклада Z-бозонного обмена на древесном уровне. Можно видеть, что для более высоких энергий он сравним по величине с вкладом КЭД от однопетлевых радиационных поправок.

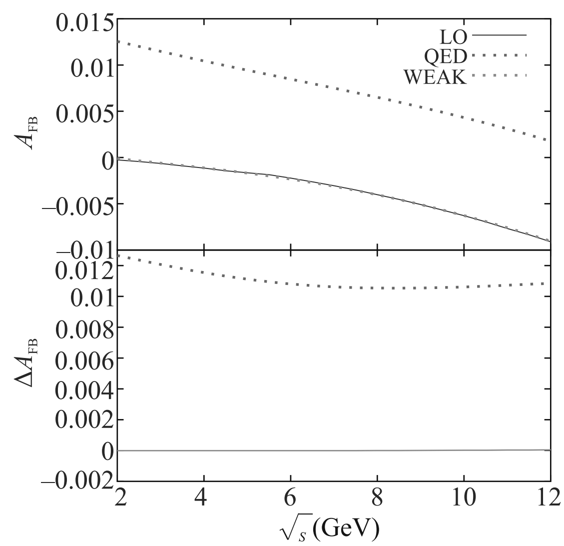


Рис. 4. (Цветной онлайн) A_{FB} асимметрия для борновского и однопетлевого сечений и соответствующая разница ΔA_{FB} для энергий $\sqrt{s} = 2{-}12$ ГэВ

7. Заключение. В этой работе мы рассмотрели разные вклады ЭС поправок в сечения процессов электрон-позитронной аннигиляции в пару лептонов. Поправки были рассчитаны с помощью системы `SANC` в ЭС $\alpha(0)$ схеме для энергий в с.ц.м. до 12 ГэВ, которые соответствуют диапазону энергий действующих и планируемых мезонных фабрик. В частности, наши результаты актуальны для проекта Супер чарм-тау фабрики. Рассчитаны и изучены полные однопетлевые электрослабые поправки, а также некоторые ведущие поправки высших порядков. Мы показали, что КЭД поправки и вклад поляризации вакуума превалируют на этом отрезке энергий, однако величина амплитуды Z-бозонного обмена в некоторых случаях тоже становится заметной. В частности, эта амплитуда существенно влияет на асимметрию вперед-назад.

Для получения численных результатов использовались программы системы `SANC`: Монте-Карло генератор событий `ReneSANCe` и интегратор `MCSANCee`. При сравнении с результатами, полученными в программе `BabaYaga` для однопетлевого уровня КЭД поправок без учета поляризации пучков, было достигнуто хорошее согласие. Плюсы наших программ в том, что в них реализован учет полных однопетлевых ЭС поправок и поляризации входящих и исходящих частиц. Исходя из результатов табл. 2, можно видеть, что учет поправок второго порядка за счет излучения из начального состояния достаточен для поддержки высокоточных экспериментов.

Таким образом, мы приходим к выводу, что для уменьшения теоретической неопределенности необходимо реализовать полные двухпетлевые, т.е. $\mathcal{O}(\alpha^2)$ поправки КЭД, в то время как поправки третьего порядка и далее могут быть вычислены приближенно в виде КЭД ливней или в коллинеарном ведущем логарифмическом приближении.

Эта работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект # 20-02-00441.

1. SuperKEKB Collaboration, K. Akai, K. Furukawa, and H. Koiso, Nucl. Instrum. Meth. A **907**, 188 (2018); 1809.01958.
2. D. M. Asner, T. Barnes, J. M. Bian et al. (Collaboration), Int. J. Mod. Phys. A **24**, S1 (2009); 0809.1869.
3. SCTF Collaboration, D. A. Epifanov, Phys. Atom. Nucl. **83**(6), 944 (2020).
4. H. P. Peng, Y. H. Zheng, and X. R. Zhou, Physics **49**(8), 513 (2020).
5. E. Kou, P. Urquijo, W. Altmannshofer et al. (Belle-II Collaboration), PTEP **2019**(12) 123C01 (2019); Erratum: PTEP **2020**, 029201 (2020); 1808.10567.

6. M. Roney, PoS **ICHEP2020**, 699 (2021).
7. Z. Liptak, M. Kuriki, and J. Roney, Proc. IPAC'21 **12**, 3799 (2021).
8. C. M. Carloni Calame, C. Lunardini, G. Montagna, O. Nicrosini, and F. Piccinini, Nucl. Phys. B **584**, 459 (2000); hep-ph/0003268.
9. C. M. Carloni Calame, Phys. Lett. B **520**, 16 (2001); hep-ph/0103117.
10. G. Balossini, C. M. Carloni Calame, G. Montagna, O. Nicrosini, and F. Piccinini, Nucl. Phys. B **758**, 227 (2006); hep-ph/0607181.
11. G. Balossini, C. Bignamini, C. M. C. Calame, G. Montagna, O. Nicrosini, and F. Piccinini, Phys. Lett. B **663**, 209 (2008); 0801.3360.
12. S. Jadach, B. Ward, and Z. Was, Comput. Phys. Commun. **130**, 260 (2000); hep-ph/9912214.
13. S. Jadach, B. F. L. Ward, and Z. Was, Phys. Rev. D **88**(11), 114022 (2013); 1307.4037.
14. A. B. Arbuzov, G. V. Fedotovich, F. V. Ignatov, E. A. Kuraev, and A. L. Sibidanov, Eur. Phys. J. C **46**, 689 (2006); hep-ph/0504233.
15. I. M. Nugent, Preprint **4** (2022); 2204.02318.
16. R. Sadykov and V. Yermolchyk, Comput. Phys. Commun. **256**, 107445 (2020); 2001.10755.
17. S. Bondarenko, Y. Dydyshka, L. Kalinovskaya, R. Sadykov, and V. Yermolchyk, Phys. Rev. D **102**(3), 033004 (2020); 2005.04748.
18. A. B. Arbuzov, S. G. Bondarenko, L. V. Kalinovskaya, L. A. Rumyantsev, and V. L. Yermolchyk, Phys. Rev. D **105**(3), 033009 (2022); 2112.09361.
19. F. Jegerlehner, EPJ Web Conf. **218**, 01003 (2019); 1711.06089.
20. E. A. Kuraev and V. S. Fadin, Sov. J. Nucl. Phys. **41**, 466 (1985).
21. O. Nicrosini and L. Trentadue, Phys. Lett. B **196**, 551 (1987).
22. A. Arbuzov, S. Bondarenko, L. Kalinovskaya, R. Sadykov, and V. Yermolchyk, Symmetry **13**(7), 1256 (2021).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 204 – 210

Связанные состояния в континууме в квантово-механическом волноводе с резонатором субволнового размера

Н. М. Шубин, В. В. Капаев, А. А. Горбацевич[1)]

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

Поступила в редакцию 24 мая 2022 г.
После переработки 24 июня 2022 г.
Принята к публикации 4 июля 2022 г.

Рассмотрена модель симметричного квантово-механического волновода с резонатором. Показана возможность формирования связанного состояния в континууме в такой системе при сколь угодно малой длине резонатора. Этот эффект не может быть объяснен в рамках простейшего двухмодового приближения в модели Фридриха–Винтгена, так как происходит в силу многомодовой интерференции и требует учета, как минимум, трех мод. Выводы аналитической модели подтверждены результатами численного моделирования волновода с расширением и притягивающим потенциалом примеси в резонаторе.

DOI: 10.31857/S1234567822160030, EDN: jhgiak

Введение. Связанные состояния в континууме (ССК) – это локализованные состояния с квадратично интегрируемой волновой функцией и энергией, лежащей в области непрерывного спектра. Первоначально они были описаны фон Нейманом и Вигнером как чисто математическая конструкция в квантовой механике. В последнее время предложено множество способов реализации ССК в реальных физических, преимущественно оптических, системах (см., например, обзоры [1, 2]). С позиций теории рассеяния, ССК представляет собой резонанс с нулевой шириной [3], возникающий, например, в результате коллапса резонанса Фано [4–6]. При этом ширина резонанса обращается в нуль вследствие деструктивной интерференции рассеянных волн. Как показали Фридрих и Винтген (ФВ), такая ситуация имеет место при рассеянии волн на двух локализованных состояниях [7]. В пространстве физических параметров ССК соответствует выделенной точке, небольшое отклонение от которой трансформирует ССК в резонанс со (сверх-) высокой добротностью (квази-ССК), что определяет широкий спектр его практических применений [8–10].

С точки зрения перспектив создания компактных оптических и фотонных систем в интегральном исполнении особый интерес вызывают резонансные структуры субволновых размеров [11]. Примером могут служить спазеры [12], в которых резонатор настроен на длину волны поверхностного плазмон-поляритона и имеет размеры много меньше длины волны излучаемого света. Существенный недостаток плазмон-поляритонных резонаторов связан с неизбежными потерями в металлических элементах конструкции. Поэтому в последнее время активно исследуются диэлектрические резонаторы [13]. Недавно были предложены и экспериментально реализованы квази-ССК в субволновых диэлектрических резонаторах [14, 15]. При этом субволновая природа таких квази-ССК непосредственно связана с тем, что механизм ФВ действует в результате сильного интерференционного взаимодействия двух локализованных мод (например, резонанса Ми и резонанса Фабри–Перо [14], двух резонансов Ми [15]), принадлежащих одному и тому же диэлектрическому резонатору. Характерная длина волны получающейся высокодобротной моды при этом определяется длиной волны резонанса Ми [16] и может быть существенно больше размера резонатора.

В квантово-механических волноводах ССК были подробно исследованы в двумерных структурах с различным соотношением между шириной волноводов h и резонатора H: начиная от "квантовых биллиардов" [17–19] с $h/H \ll 1$, где хорошо определены собственные состояния резонатора, и заканчивая однородными волноводами с протяженной примесью (квантовой ямой внутри волновода) [4, 5], где $h/H = 1$ и выделение собственных состояний области рассеяния представляется неоднозначным [20]. Примером физической реализации квантово-механического волновода может служить электронный проводник. При этом необходимо отметить, что в электронных проводниках существенны межэлектронные взаимодействия [21, 22], которые изменяют условия образования ССК, а также могут приводить к появле-

[1)]e-mail: gorbatsevichaa@lebedev.ru

нию новых ССК за счет кулоновского отталкивания. Механизм формирования ССК в системах, рассмотренных в работах [4, 5, 18, 19], соответствует двухмодовой модели ФВ, для которой характерный масштаб локализации (определяется длиной волны де Бройля) сопоставим с геометрическими размерами резонатора. Отметим, что ССК в двумерных неодносвязных акустических волноводах было подробно исследовано в работах [23, 24]. В частности, для граничных условий фон Неймана была показана возможность формирования ССК в волноводе с непроницаемым рассеивающим центром малого размера вдоль направления распространения (длины), создающим неодносвязность системы [24].

В настоящей работе на примере двумерного квантово-механического волновода с относительно большим соотношением h/H показано, что протяженное ССК может образовываться и в односвязной системе при сколь угодно малой длине рассеивающей области. Эффект имеет существенно многомодовую природу и его описание требует выхода за рамки двухмодовой модели ФВ. Предложено наглядное трехмодовое описание, демонстрирующее хорошее согласие с численными расчетами.

Аналитическая модель. Пусть имеется расположенный вдоль оси x симметричный (относительно зеркального отражения $x \mapsto -x$) двумерный квантово-механический волновод с резонатором. Задача рассеяния или задача на собственные значения в такой системе решается через двумерное уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + [E - U(x,y)]\,\Psi = 0 \qquad (1)$$

с соответствующими граничными условиями на бесконечности для волновой функции $\Psi(x,y)$. Для удобства аналитического рассмотрения выбраны единицы измерения, при которых $\hbar^2(2m)^{-1} = 1$.

Рассмотрим ситуацию, когда потенциальная энергия $U(x,y)$ есть кусочно-постоянная функция от координаты x: $U(x,y) = U_j(y)$ при $x_{j-1} < x \le x_j$, где индекс $j = \{1,2,3\}$ соответствует номеру области (1 и 3 – волновод, 2 – резонатор). В описываемой системе с одним резонатором (расширением) имеются только две границы, координаты которых в силу симметрии структуры равны: $x_1 = -x_2 = -L/2$, где L – длина резонатора. Наиболее удобным способом решения уравнения (1) в этом случае будет метод разделения переменных и разложения по собственным модам в поперечном направлении [25–28]. При этом решение в j-й области будет иметь вид:

$$\Psi_j(x,y) = \sum_m \left(a_m^j e^{ik_m^j x} + b_m^j e^{-ik_m^j x}\right) Y_m^j(y), \qquad (2)$$

где $Y_m^j(y)$ есть волновая функция m-ой моды в поперечном направлении с энергией (порогом моды) γ_m^j и $k_m^j = \sqrt{E - \gamma_m^j}$. Суммирование в разложении (2) осуществляется по всему бесконечному набору мод дискретного и непрерывного спектра. Коэффициенты a_m^j и b_m^j определяются из условия непрерывности волновой функции и ее производной на каждой границе и граничных условий на бесконечности. Таким образом, общее число неизвестных в рассматриваемой задаче рассеяния равно $2MN$, где M – число границ кусочно-постоянных областей, а N – число учитываемых мод.

В такой постановке задача легко решается численно, а количество учитываемых мод определяет точность расчета. Тем не менее, качественная физическая картина явления может быть получена при использовании аналитических моделей с малым числом мод, например $N = 2$ [4, 5]. При этом естественным образом возникает понятие межмодовых состояний, т.е. состояний, локализованных в разных модах в области резонатора и волновода. Далее мы будем обозначать состояния, локализованные в m-й моде в волноводе и в n-й моде в резонаторе как m-n-m. Энергии таких симметричных межмодовых состояний определяются из следующего уравнения:

$$A_{mnm} = k_n^2 \sin\left(\frac{k_n^2 L}{2}\right) - \kappa_m^{1,3} \cos\left(\frac{k_n^2 L}{2}\right) = 0, \qquad (3)$$

где $\kappa_m^{1,3} = \sqrt{\gamma_m^{1,3} - E}$ и $\gamma_m^1 = \gamma_m^3$ – пороги m-й моды в волноводе (по обе стороны от резонатора, в областях 1 и 3). Аналогичное рассмотрение может быть проведено и для антисимметричных состояний, но, как будет показано ниже, описываемый в работе ССК имеет место для основных (и как следствие – симметричных) состояний в таких межмодовых квантовых ямах (КЯ).

Формирование ССК в простейшем двухмодовом приближении происходит при вырождении состояний 2-2-2 и 2-1-2 одной четности, т.е. при выполнении равенства

$$A_{222} = A_{212} = 0. \qquad (4)$$

Этот результат был впервые получен в работе [4]. Он позволяет наглядно интерпретировать формирование ССК в рассматриваемой системе в рамках двухуровневой модели ФВ, в которой один уровень соответствует связанному состоянию во "внутримодовой" КЯ (рис. 1b), а второй – в "межмодовой" (рис. 1c). Численный многомодовый расчет параметров системы, удовлетворяющих условию существования ССК, дает значения, несколько отличающиеся от тех, при которых выполняется условие (4) [18, 29]. Тем не менее, условие (4) может при этом служить хорошим исходным приближением.

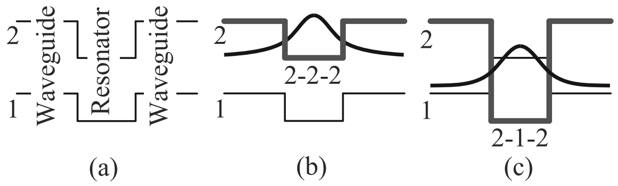


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема порогов первых мод поперечного квантования в волноводе с резонатором (a) и эффективный потенциал для образования внутримодовых состояний 2-2-2 (b) и межмодовых состояний 2-1-2 (c)

Условие (4) удовлетворяется, например, для ССК, описанных в работах [4, 5], а также [18]. В этих работах размер области формирования ССК (резонатора или примеси) был сопоставим или больше, чем длина волны де Бройля частицы в резонаторе [4, 5]. Формально условие (4) выполнено также при $L = 0$ и $\kappa_2^{1,3} = 0$ ($E = \gamma_2^{1,3}$). Однако соответствующее собственное состояние квадратично неинтегрируемо и, следовательно, не является ССК. Вблизи точки $L = 0$ и $\kappa_2^{1,3} = 0$ система (4) становится несовместной относительно малых величин $L > 0$ и $\kappa_2^{1,3} > 0$. Как будет показано ниже, учет трех и более мод позволяет непрерывным образом проследить эволюцию такого решения, превращающегося в ССК при $L > 0$ и $\kappa_2^{1,3} > 0$. С точки зрения двухмодового приближения, подобные ССК, обнаруженные, например, в результате численного расчета, могут интерпретироваться как “случайные” [30]. Само по себе условие существования ССК в трехмодовом приближении, как мы покажем ниже, имеет вид более сложный, чем простое требование вырождения уровней (4) в двухмодовой модели.

В трехмодовом приближении после простых, но трудоемких вычислений (12 уравнений для 12 неизвестных) можно получить следующие условия для формирования ССК:

$$\begin{cases} \mu_{21}\mu_{33}A_{212}A_{333} - \mu_{31}\mu_{23}A_{232}A_{313} = 0, \\ \mu_{22}\mu_{33}A_{222}A_{333} - \mu_{23}\mu_{32}A_{232}A_{323} = 0, \\ \mu_{32}\mu_{21}A_{212}A_{323} - \mu_{31}\mu_{22}A_{222}A_{313} = 0, \end{cases} \tag{5}$$

где матричные элементы μ_{mn} определяют перемешивание между различными модами на границе:

$$\mu_{mn} = \int \left[Y_m^{\text{wav}}(y)\right]^* Y_n^{\text{res}}(y) dy. \tag{6}$$

Здесь $Y_m^{\text{wav}}(y)$ суть поперечная волновая функция m-й моды в области волновода и $Y_n^{\text{res}}(y)$ – n-й моды в резонаторе. Важно отметить, что среди трех уравнений (5) независимы только любые два из них. Уравнения (5) можно рассматривать как расширение двухмодовой модели, и с этой точки зрения ССК может образоваться при вырождении двух межмодовых состояний 2-1-2 и 2-3-2 с внутримодовым 2-2-2 ($A_{212} = A_{222} = A_{232} = 0$) или межмодовых состояний 3-1-3 и 3-2-3 с внутримодовым 3-3-3 ($A_{313} = A_{323} = A_{333} = 0$), что, конечно же, представляется существенно более трудно выполнимым условием на практике, чем условие вырождения двух состояний (4). Отметим, что если потенциальный профиль m-n-m представляет собой барьер, а не яму, то связанные состояния типа m-n-m не существуют, и величина A_{mnm} никогда не обращается в нуль.

В отличие от двухмодового случая, в трехмодовом приближении может возникнуть новый тип ССК, в котором ни одна из величин A_{mnm} не обращается в нуль, что означает межмодовое перемешивание различных состояний и, в определенном смысле, отвечает режиму антикроссинга в модели ФВ [7]. Важным следствием этого служит, например, возможность наличия решения при произвольно малой, но ненулевой длине резонатора L. В самом деле, можно линеаризовать уравнения (5) для симметричных состояний по переменным L и $\kappa_2^{1,3}$ и рассмотреть их решение при малой длине резонатора и энергии, близкой к порогу второй моды в волноводе. В этом случае любая пара уравнений для симметричных состояний из (5) становится однородной системой относительно L и $\kappa_2^{1,3}$, и условие наличия ее нетривиальных решений оказывается независящим от энергии:

$$\theta = \mu_{33}\mu_{22}\mu_{21}\left(\frac{\gamma_1^2}{\gamma_3^2} - \frac{\gamma_2^2}{\gamma_3^2}\right) + \mu_{32}\mu_{23}\mu_{21}\left(1 - \frac{\gamma_1^2}{\gamma_3^2}\right) + \\ + \mu_{31}\mu_{22}\mu_{23}\left(\frac{\gamma_2^2}{\gamma_3^2} - 1\right) = 0. \tag{7}$$

Нетрудно убедиться, что подобные независящие от энергии условия разрешимости системы для определения параметров и энергии ССК при сколь угодно малой длине резонатора имеют место и при учете любого числа мод больше трех. Как уже было отмечено выше, аналогичное условие образования ССК в рамках двухмодового приближения (4) приводит к несовместной системе уравнений относительно малых L и $\kappa_2^{1,3}$.

Участие более чем двух резонансов в формировании ССК в различных системах рассматривалось и ранее [31–33]. В этих работах, по сути, речь идет об обобщении модели ФВ на случай нескольких континуумов, предложенном в статье [34]. В рамках такого подхода в системе, связанной с K континуума-ми, требуется вырождение $K + 1$ состояний. Соответственно, ССК в исследуемой в настоящей работе симметричной системе с $K = 1$ должен проявляться уже в двухмодовом приближении. Однако, как было показано выше, представленный механизм образования ССК принципиально не может быть описан в рамках двухмодового приближения (уже для $K = 1$) и требует учета не менее трех мод даже для качественного объяснения.

Пример численного расчета. В качестве конкретного примера рассмотрим электронный волновод с резонатором в виде расширения и дополнительным притягивающим потенциалом внутри (см. вставку на рис. 2a). Подобный объект, представляющий собой синтез структур, исследованных, например, в работах [18] и [4, 5], уже рассматривался в [35]. Однако описываемое в настоящей работе явление образования ССК в резонаторе субволнового размера не было обнаружено ранее. Такой выбор структуры обусловлен возможностью изменения в ней матричных элементов μ_{mn} в широких пределах, что позволяет ожидать выполнения условия (7) при некоторой вариации параметров. Для системы с шириной резонатора $H = 10$ нм, шириной $w = 4$ нм области притягивающего потенциала величиной $U_w = -0.1$ эВ и высотой потенциального барьера, ограничивающего волновод $U_0 = 1$ эВ, можно получить, что условие $\theta = 0$ выполняется при ширине подводящего волновода $h \approx 5.96$ нм (см. рис. 2a). Следовательно, при таких параметрах в системе можно ожидать образование ССК в резонаторе субволнового (по сравнению с длиной волны электрона в волноводе) размера. На рисунке 2b приведены численно рассчитанные зависимости энергии E_{BIC} и длины резонатора L_{BIC}, соответствующие ССК при различных значениях h. Значения получены из условия обращения ширины резонанса Фано в нуль при решении задачи рассеяния [29]. Сходимость численного моделирования обеспечивалась при учете 20–40 мод. Результаты численного расчета имеют хорошее согласие с трехмодовым приближением и в самом деле демонстрируют возможность образования ССК при сколь угодно малом продольном размере резонатора. Точный численный расчет дает ССК с $L_{BIC} \to 0$ при $h \approx 5.76$ нм. При этом видно, что условие $\theta = 0$, полученное в трехмодовой модели, служит хорошим начальным приближением для поиска ССК с $L_{BIC} \to 0$, так как ССК, обнаруженный в точном расчете, соответствует $\theta \approx 6 \times 10^{-3}$ (см. рис. 2a).

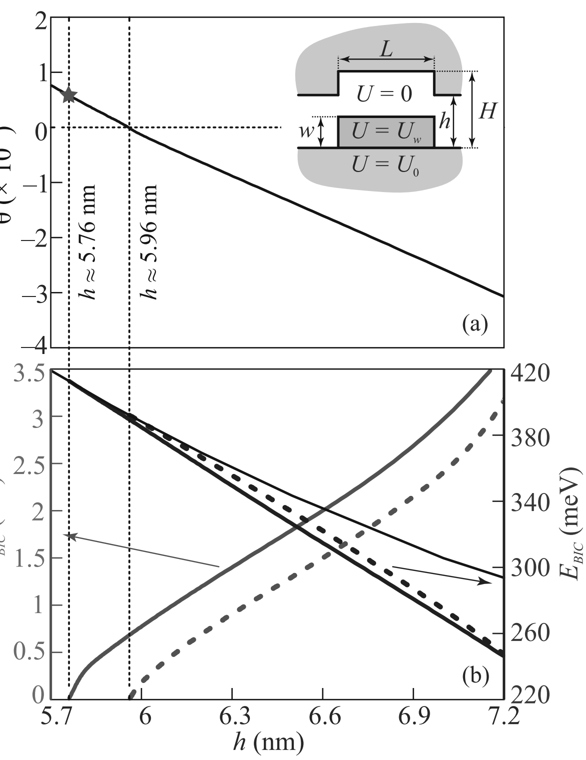


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость безразмерного параметра θ (a), а также L_{BIC} и E_{BIC} (b) для ССК в системе, показанной на вставке к рисунку (a), от ширины подводящих волноводов h при $H = 10$ нм, $w = 4$ нм, $U_w = -0.1$ эВ, $U_0 = 1$ эВ и эффективной массе электрона $0.0665 m_0$. На рисунке (a) значения h и θ, соответствующие численно рассчитанному ССК при $L_{BIC} \to 0$ отмечены красной звездой. На рисунке (b) жирные сплошные линии показывают результат численного расчета, а пунктирные – трехмодовое приближение (5). Красные линии соответствуют L_{BIC} (левая ось), синие линии – E_{BIC} (правая ось). Тонкая сплошная черная линия показывает верхнюю границу рассматриваемого диапазона энергий – порог второй моды в волноводе ($\gamma_2^{1,3}$)

Различие результатов численного счета и трехмодовой модели связано с вкладом высших мод. Если вклад высших мод (в меру соответствующих матричных элементов μ_{mn}) существенно превышает вклад третьей моды, то отличие трехмодового приближения от точного решения может быть уже не только количественным, но и качественным (наличие или отсутствие ССК). Например, как видно из рис. 2b, при $5.76\,\text{нм} \lesssim h \lesssim 5.96$ нм численный многомодовый расчет показывает наличие ССК при малой длине резонатора, а трехмодовое приближение – нет.

Описанный механизм формирования субволнового ССК при сколь угодно малом L требует тонкого подбора параметров модели на основе расчетов интегралов перекрытия μ_{mn}. Исходя из аналитической модели, параметры системы, удовлетворяющие условию (7), могут быть использованы в качестве исходного приближения. Вообще говоря, параметры структуры, для которых возможно образование ССК при малой длине резонатора не уникальны, и существует некоторый диапазон соответствующих значений, например, ширины w и глубины потенциала U_w примеси в резонаторе. Рисунок 3 иллюстрирует этот

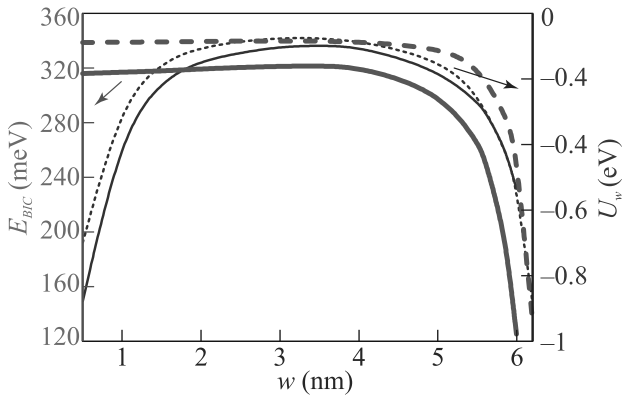


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость энергии ССК E_{BIC} (жирные красные линии) и величины притягивающего потенциала примеси U_w (тонкие синие линии), при которой наблюдается ССК, от ширины примеси w при $h = 6.5$ нм, $H = 10$ нм и $L_{BIC} = 1$ (пунктирные линии) и 2 нм (сплошные линии)

факт и показывает численно рассчитанные зависимости энергии ССК E_{BIC} и потенциала U_w, при котором наблюдается ССК, от ширины w при фиксированном значении L_{BIC}. При w, стремящимся к нулю, E_{BIC} стремится к энергии состояния 2-2-2 вблизи порога второй моды в волноводах $\gamma_2^{1,3} \approx 343.3$ мэВ. Энергия ССК (E_{BIC}) испытывает незначительный рост при увеличении w до $w = 4$ нм. После чего E_{BIC} начинает падать с ростом w вплоть до предельного значения порога первой моды в волноводе $\gamma_1^{1,3} \approx 87.5$ мэВ при $w \approx h$. Необходимая для образования ССК глубина потенциала примеси имеет зависимость от w практически симметричную относительно $w = h/2$. Если пренебречь расширением, то это вполне естественно, так как предельный случай $w = h$ по интегралам перекрытия μ_{mn} эквивалентен предельному случаю $w = 0$. При этом, как видно из рис. 3, в случае $w < h/2$ мощность потенциала примеси ($w \times U_w$) слабо зависит от w, вследствие чего E_{BIC} практически не зависит от w. В тоже время, при $w > h/2$ необходимая для образования ССК отрицательная мощность примеси существенно увеличивается по абсолютной величине, что приводит и к снижению энергии ССК.

На рисунке 4 показаны примеры распределения плотности вероятности в ССК при $H = 10$ нм, $h = 6.5$ нм, $L_{BIC} = 1$ нм и различных значениях w, U_w и энергии ССК E_{BIC}. Нетрудно оценить, что при таких значениях параметров длина волны де Бройля электрона в волноводе оказывается почти на порядок больше длины резонатора. Наибольшая область локализации наблюдается при максимальной энергии ССК (рис. 4b), а наименьшая – при минимальной энергии ССК (рис. 4c), поскольку коэффициент затухания волновой функции ССК в волноводе пропорционален $\sqrt{\gamma_2^{1,3} - E_{BIC}}$, т.е. корню из энергии связанного состояния с энергией E_{BIC} в КЯ с барьером, определяемым порогом второй моды в волноводе (минимальным расстоянием по энергии до состояний континуума). ССК, волновые функции которых показаны на рис. 4, непрерывным образом переходят друг в друга при изменении параметров системы. Однако между ССК на рис. 4a, b и c есть важное отличие помимо размеров области локализации волновой функции. На рисунке 5a–c показаны численные решения уравнения (3) для симметричных состояний 2-1-2, 2-2-2, 3-1-3 и 3-2-3, а также положение нуля прозрачности при тех же параметрах, что и на соответствующих частях рис. 4a–c. Видно, что положение антирезонанса на рис. 5a, b примерно равноудалено по энергии от состояний 2-2-2 и 3-2-3, в то же время на рис. 5c линия нулей прозрачности с графической точностью следует за линией состояния 2-2-2. При этом для бóльших значений длины резонатора (не показаны на рис. 5) положение нулей пропускания в структурах (a) и (b) следует за состоянием 3-2-3. Таким образом, многомодовая природа описываемого ССК существенно сильнее проявляется в первых двух случаях, чем в последнем.

Заключение. Универсальный механизм ФВ позволяет описать формирование ССК в результате двухмодовой интерференции (см. условие (4)). Однако, при малых размерах резонатора условия на фазы рассеяния, обеспечивающие существование ССК в результате деструктивной интерференции, в двухмодовом приближении не могут быть выполнены, несмотря на то, что квантово-механическое связанное состояние существует и в этом случае. Как показано в данной работе, включение дополнительных интерферирующих траекторий через высоко лежащие моды, например, третью, позволяет получить решение для ССК и в пределе стремящейся к нулю длине резонатора. Таким образом, оказывается возможным сформировать ССК в резонаторе с размерами, много меньшими области локализации волновой функции ССК. Критерием, позволяющим определить применимость конечно-модового (в нашем случае – трехмодового) приближения для опи-

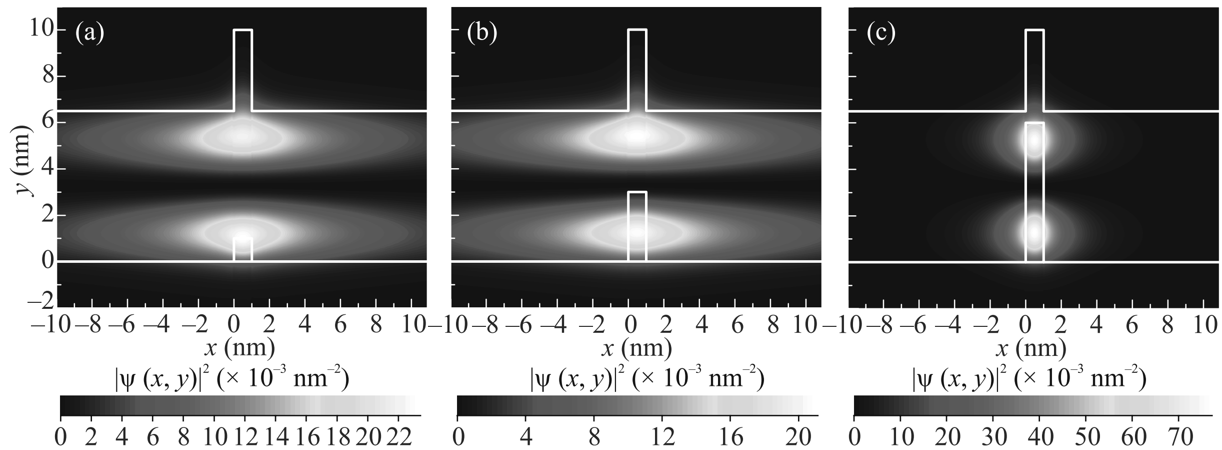


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение плотности вероятности, соответствующей ССК, при $H = 10$ нм, $h = 6.5$ нм, $L_{BIC} = 1$ нм и различных значениях w, U_w и энергии ССК E_{BIC}: (a) – $w = 1$ нм, $U_w \approx -0.27$ эВ, $E_{BIC} \approx 338.9$ мэВ; (b) – $w = 3$ нм, $U_w \approx -0.07$ эВ, $E_{BIC} \approx 339.9$ мэВ; (c) – $w = 6$ нм, $U_w \approx -0.53$ эВ, $E_{BIC} \approx 257.6$ мэВ

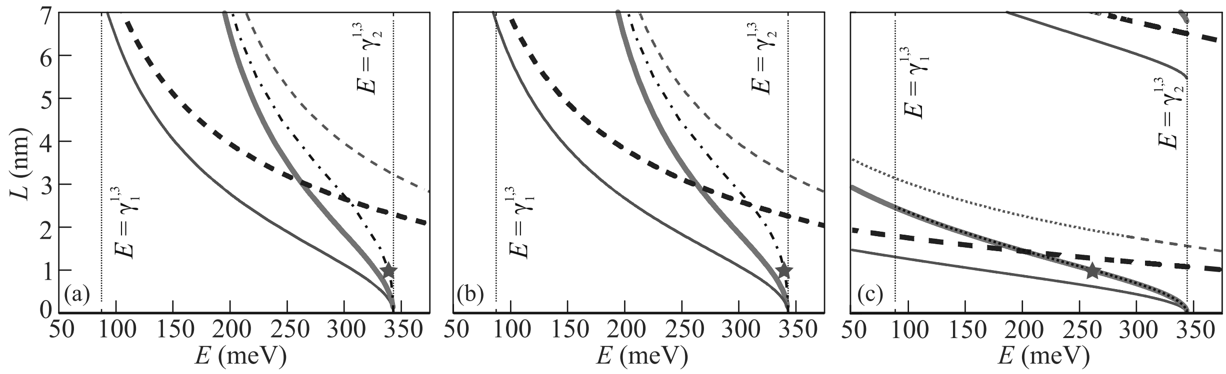


Рис. 5. (Цветной онлайн) Численные решения уравнения (3) для симметричных межмодовых состояний 2-1-2 (красные тонкие сплошные линии), 2-2-2 (зеленые жирные сплошные линии), 3-1-3 (синие жирные штриховые линии) и 3-2-3 (розовые тонкие штриховые линии). Положение нуля пропускания (антирезонанс Фано) показано тонкой черной штрихпунктирной линией. ССК отмечен красной звездой. Тонкие вертикальные штриховые линии отмечают границы рассматриваемого диапазона энергий (между порогами первой и второй моды в волноводе). Параметры системы выбраны следующими: $H = 10$ нм, $h = 6.5$ нм, а w и U_w в случаях (a), (b) и (c) имеют те же значения, что и в случаях (a), (b) и (c) на рис. 4 соответственно

сания ССК, может служить малость матричных элементов (6) между рассматриваемыми и остальными модами. При этом для выполнения условия реализации ССК, помимо матричных элементов, необходимо управлять также порогами мод в волноводе и резонаторе, что в нашей модели осуществляется с помощью дополнительной квантовой ямы (примеси) в резонаторе.

Важно отметить, что в оптическом аналоге рассмотренного двумерного волновода условие формирования ССК в пределе нулевой длины резонатора в трехмодовом приближении (7) или его обобщение на большее число мод имеет тот же вид. Однако, в силу особенности соответствующего уравнения Гельмгольца, в отличие от уравнения Шредингера, матричные элементы μ_{nm} в оптической системе становятся зависящими от длины волны излучения. Более того, в чисто диэлектрических оптических волноводных системах формирование связанных состояний, в частности и межмодовых, возможно только при ограничении света в поперечном направлении [36] или использования дополнительной размерности [37]. В связи с этим, нельзя непосредственно перенести полученный результат на оптические волноводные системы, где он бы имел первостепенное значение. Вопрос о возможности существования ССК в оптических волноводах с размерами резонатора, много меньше размера локализации электромагнитного поля (равно как и вопрос о существовании ССК в субволновых неодносвязных резонаторах), представляет значительный теоретический и практический интерес и требует специального рассмотрения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 21-19-00808).

---

1. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, Nat. Rev. Mater. **1**, 16048 (2016).
2. A. F. Sadreev, Rep. Prog. Phys. **84**, 055901 (2021).
3. N. M. Shubin and A. A. Gorbatsevich, Phys. Rev. B **96**, 205441 (2017).
4. C. S. Kim, A. M. Satanin, Y. S Joe, and R. M. Cosby, Phys. Rev. B **60**, 10962 (1999).
5. Ч. С. Ким, О. Н. Рознова, А. М. Сатанин, В. Б. Штенберг, ЖЭТФ **121**, 1157 (2002).
6. M. L. L. De Guevara, F. Claro, and P. A. Orellana, Phys. Rev. B **67**, 195335 (2003).
7. H. Friedrich and D. Wintgen, Phys. Rev. A **32**, 3231 (1985).
8. K. Koshelev, S. Lepeshov, M. Liu, A. Bogdanov, and Yu. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **121**, 193903 (2018).
9. S. A. Dyakov, M. V. Stepikhova, A. A. Bogdanov, A. V. Novikov, D. V. Yurasov, M. V. Shaleev, Z. F. Krasilnik, S. G. Tikhodeev, and N. A. Gippius, Laser Photonics Rev. **15**, 2000242 (2021).
10. E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, Phys. Rev. A **99**, 033851 (2019).
11. K. Koshelev, A. Bogdanov, and Yu. Kivshar, Sci. Bull. **64**, 836 (2019).
12. S. I. Azzam, A. V. Kildishev, R.-M. Ma, C.-Z. Ning, R. Oulton, V. M. Shalaev, M. I. Stockman, J.-L. Xu, and X. Zhang, Light Sci. Appl. **9**, 1 (2020).
13. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, M. L. Brongersma, Yu. S. Kivshar, and B. Lukyanchuk, Science **354**, aag2472 (2016).
14. A. A. Bogdanov, K. L. Koshelev, P. V. Kapitanova, M. V. Rybin, S. A. Gladyshev, Z. F. Sadrieva, K. B. Samusev, Yu. S. Kivshar, and M. F. Limonov, Advanced Photonics **1**, 016001 (2019).
15. K. Koshelev, S. Kruk, E. Melik-Gaykazyan, J. H. Choi, A. Bogdanov, H. G. Park, and Yu. Kivshar, Science **367**, 288 (2020).
16. В. В. Климов, *Наноплазмоника*, Физматлит, М. (2009).
17. A. F. Sadreev, E. N. Bulgakov, and I. Rotter, JETP Lett. **82**, 498 (2005).
18. A. F. Sadreev, E. N. Bulgakov, and I. Rotter, Phys. Rev. B **73**, 235342 (2006).
19. А. Ф. Садреев, А. С. Пилипчук, Письма в ЖЭТФ **100**, 664 (2014).
20. K. Pichugin, H. Schanz, and P. Seba, Phys. Rev. E **64**, 056227 (2001).
21. C. F. Sadreev and T. V. Babushkina, JETP Lett. **88**, 312 (2008).
22. С. В. Аксенов, М. Ю. Каган, Письма в ЖЭТФ **111**, 321 (2020).
23. D. V. Evans and R. Porter, Q. J. Mech. Appl. Math. **51**, 263 (1998).
24. C. M. Linton, M. McIver, P. McIver, K. Ratcliffe, and J. Zhang, Wave Motion **36**, 67 (2002).
25. G. N. Henderson, T. K. Gaylord, and E. N. Glytsis, Proc. IEEE. **79**, 1643 (1991).
26. M. Asada, Y. Miyamoto, and Y. Suematsu, IEEE J. Quantum Electron. **22**, 1915 (1986).
27. J. Sancheza-Dehesa, J. A. Porto, F. Agullo-Rueda, and F. Meseguer, J. Appl. Phys. **73**, 5027 (1993).
28. А. А. Горбацевич, В. В. Капаев, Микроэлектроника **36**, 3 (2007).
29. N. M. Shubin, A. V. Friman, V. V. Kapaev, and A. A. Gorbatsevich, Phys. Rev. B **104**, 125414 (2021).
30. A. S. Pilipchuk and A. F. Sadreev, Phys. Lett. A **381**, 720 (2017).
31. E. Bulgakov and A. Sadreev, Phys. Rev. B **83**, 235321 (2011).
32. A. S. Pilipchuk, A. A. Pilipchuk, and A. F. Sadreev, Phys. Scr. **94**, 115004 (2019).
33. A. S. Pilipchuk, A. A. Pilipchuk, and A. F. Sadreev, Phys. Scr. **95**, 085002 (2020).
34. F. Remacle, M. Munster, V. B. Pavlov-Verevkin, and M. Desouter-Lecomte, Phys. Lett. A **145**, 265 (1990).
35. G. Cattapan and P. Lotti, Eur. Phys. J. B **60**, 51 (2007).
36. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals*, Princeton University Press, Princeton, NJ (2011).
37. D. Dragoman and M. Dragoman, Prog. Quant. Electron. **23**, 131 (1999).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 211 – 216

Стимулирование неупругого рассеяния света в плазмонных структурах с гигантским усилением рамановского сигнала

В. И. Кукушкин[1)], *В. Е. Кирпичев, Е. Н. Морозова, А. С. Астраханцева, В. В. Соловьев, И. В. Кукушкин*

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 12 июля 2022 г.
После переработки 12 июля 2022 г.
Принята к публикации 14 июля 2022 г.

В плазмон-диэлектрических структурах, оптимизированных для получения гигантского усиления рамановского рассеяния (surface enhanced Raman scattering, SERS) света в ИК-области спектра (для лазера 1064 нм коэффициент SERS-усиления составляет 10^8), исследованы зависимости интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент спектра рассеяния от мощности накачки. Обнаружено, что интенсивность антистоксового канала рассеяния растет сверхлинейно с мощностью возбуждения, а после некоторого значения мощности начинает расти пороговым образом. При этом интенсивность стоксового рассеяния демонстрирует линейное и затем сублинейное (при больших накачках) поведение от мощности лазерного возбуждения. Показано, что значение пороговой мощности зависит от концентрации органических молекул, нанесенных на усиливающую структуру, а также от коэффициента SERS-усиления. Обнаруженное поведение интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент спектра рамановского рассеяния указывает на важность стимулированного механизма рассеяния света в SERS-структурах. Из анализа спектрального положения линий рассеяния следует, что в условиях сверхпороговой лазерной накачки происходит возбуждение молекул на высокие номера уровней энергии колебательных степеней свободы, что проявляется в красном сдвиге линий антистоксового рассеяния.

DOI: 10.31857/S1234567822160042, EDN: jhjnkd

Гигантское усиление амплитуды электромагнитного поля в эффекте поверхностного усиленного рамановского рассеяния света (surface enhanced Raman scattering – SERS, SERS-эффект [1–3]) приводит к необходимости рассматривать в этом случае влияние нелинейных эффектов. Действительно, амплитуда электрического поля в атоме ($E \approx e/(a_B)^2$, где e – заряд электрона, a_B – боровский радиус) составляет порядка $5 \cdot 10^9$ В/см, а амплитуда внешнего электромагнитного поля, при котором следует ожидать разрушение молекул при мощном фотовозбуждении, имеет масштаб 10^7 В/см. Интересно сравнить эту оценку с амплитудой электрического поля в электромагнитной волне с плотностью мощности, которая используется в типичных экспериментах по рамановскому рассеянию света. При мощности лазерного излучения 0.1 Вт, сфокусированной в пятно диаметром 10 микрон (плотность мощности $I = 10^5$ Вт/см^2), получается, что амплитуда поля в волне $E^2 \approx I \cdot [\mu_0/\epsilon_0]^{1/2}$ (μ_0 и ϵ_0 – магнитная и диэлектрическая проницаемости вакуума) оказывается порядка $E \approx 2 \cdot 10^4$ В/см. Таким образом, поскольку в условиях SERS-эффекта может наблюдаться усиление амплитуды электрического поля на 2–3 порядка [2–4], то уже при типичных накачках можно ожидать, что нелинейные эффекты будут доминировать. Одним из возможных проявлений нелинейных эффектов в рамановском рассеянии с гигантским усилением является наблюдение вынужденного (стимулированного) рассеяния света. В литературе уже много лет обсуждается этот механизм в случае SERS и сообщалось о некоторых нелинейных зависимостях отношения интенсивностей антистоксовой (АС) и стоксовой (С) компонент рассеяния АС/С от мощности лазерной накачки, которые были объяснены в терминах вынужденного рассеяния [5–10]. Следует отметить, что обнаруженное нелинейное поведение наблюдалось лишь для длинноволновой лазерной накачки (для длин волн около 830 нм) и отсутствовало при меньших длинах волн (например, в случае типичных для SERS-экспериментов длин волн 450–500 нм). Вместе с тем, в последующих статьях высказывались сомнения в правильности этой интерпретации, поскольку обнаруженные зависимости не были убедительными [9, 10]. Действительно, общепринятыми признаками вынужденного рамановского рассеяния является наблюдение порогового роста интенсивности антистоксовской компоненты рассеяния на

1)e-mail: kukush@issp.ac.ru

фоне сублинейной зависимости интенсивности стоксовского канала рассеяния от мощности [5, 9].

В настоящей работе мы исследовали SERS структуры в ИК области, дизайн которых обеспечивал отсутствие "горячих точек", и нами было обнаружено, что интенсивность антистоксового канала рассеяния растет сверхлинейно с мощностью возбуждения, а после некоторого значения мощности начинает расти пороговым образом. При этом интенсивность стоксового рассеяния демонстрирует линейное и сублинейное (при больших накачках) поведение от мощности лазерного возбуждения. Показано, что значение пороговой мощности зависит от концентрации органических молекул, нанесенных на SERS-структуру, а также от коэффициента SERS-усиления. Обнаруженное поведение интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент спектра рамановского рассеяния указывает на важность стимулированного механизма рассеяния света в SERS-структурах.

Из теории неупругого рассеяния света следует, что вероятность процесса рассеяния содержит линейный член, пропорциональный плотности возбуждающего излучения, а также нелинейный член, пропорциональный произведению плотности возбуждающего излучения и плотности излучения на смещенной частоте, возникающей в результате процесса неупругого рассеяния. Именно нелинейный член, который становится существенным только при больших амплитудах электрической компоненты электромагнитной волны, описывает индуцированное или вынужденное рассеяние света. Следует отметить, что яркие плазменные свойства металлов проявляются именно в ИК-области спектра, где из-за подавления затухания плазменных волн их добротность увеличивается на порядки (по сравнению с видимой областью спектра) и достигает нескольких тысяч (например, в серебре добротность равна 5000 при длине волны 1064 нм [11–13]). Этот факт обеспечивает максимальное усиление электромагнитного поля (более чем в 100 раз) в ИК-области спектра, что делает наиболее перспективными поиски вынужденного неупругого рассеяния света на SERS-структурах именно для длин волн лазерного излучения в области 1000–1500 нм [13–15]. Кроме того, в таких структурах важным параметром является высота модуляции микроструктур, и, как было показано в нашей работе [16], за счет эффекта типа Фабри–Перо можно получать дополнительное усиление амплитуды электромагнитного поля и увеличивать SERS-сигнал еще в несколько десятков раз. Важно, в таких структурах расстояние между толстыми металлическими слоями составляло около 800 нм, что позволяет исключить из рассмотрения вклад от горячих точек в усиление сигнала рамановского рассеяния.

Исследованные структуры создавались методом, подробно описанным в работах [13, 15, 17] с той лишь разницей, что вместо термически оксидированной кремниевой подложки использовались пластины кристаллического кварца толщиной 600 микрон. На кварцевой пластине были изготовлены активные (содержащие периодическую структуру со столбиками) поля размером 2 мм $\times$ 2 мм. Активные поля содержали квадратные столбики размером $a = 500$ нм, периодом $p = 1000$ нм и высотой $h = 800$ нм, что отвечало максимальному усилению рамановского сигнала при длине волны лазерного излучения 1064 нм [13]. Вся структура (активные и неактивные поля) покрывалась толстым слоем серебра с толщиной $t = 80$ нм с помощью метода термического напыления. Исследования пространственного распределения интенсивности рамановского рассеяния на таких структурах проводились с помощью рамановского микроскопа, который позволял получать пространственное разрешение до 1 микрона, однако в качестве оптимального диаметра пятна сфокусированного лазерного луча мы выбрали размер 10 микрон (шаг сканирования при этом также составлял 10 микрон). Рамановский микроскоп, который использовался в настоящей работе, позволял проводить измерения стоксовой и антистоксовой компонент рамановского спектра при лазерной накачке на длине волны 1064 нм. Было установлено, что на площади 2 мм $\times$ 2 мм, в которой были расположены 2000×2000 столбиков, после высыхания капли спиртового раствора аналита 4АВТ (4-аминобензентиол) с типичной весовой концентрацией ($\approx 10^{-5}$), наблюдался практически идентичный в каждой точке структуры спектр рамановского рассеяния света. При этом в местах с гладким металлическим покрытием, которые располагались между активными областями, не наблюдалось никакого усиления интенсивности рамановского рассеяния, а вместо этого происходило его подавление, сопровождавшееся уменьшением сигнала люминесценции. Напротив, в местах, где присутствовали периодические структуры со столбиками, покрытые толстым слоем серебра, наблюдалось гигантское (более 8 порядков) усиление стоксового сигнала рамановского рассеяния. Ранее было установлено [13, 15, 17], что наблюдаемое резонансное усиление рамановского сигнала связано с преобразованием электромагнитного излучения в плазмон-поляритонные моды, и эффективность такого преобразования определяется соизмеримостью длины волны плазмон-поляритонной моды с периодом структуры, а также с высотой диэлектрических столбиков. Все измерения проводились в условиях непрерывного лазерного возбуждения, и вплоть до максимальных плотностей мощности обеспечивалась неизменность рамановского сигнала (как в стоксовой, так и в антистоксовой компонентах спектра) в течение всего эксперимента.

На рисунке 1 представлены стоксовая (S) и антистоксовая (AS) компоненты спектра неупругого рассеяния света, измеренные при мощности фотовозбуждения 280 мВт на SERS-структуре, параметры которой были описаны выше. Из этого рисунка видно, что все основные линии рассеяния наблюдаются в обеих компонентах SERS-спектра, причем интенсивности соответствующих линий оказываются одного порядка. Ключевой результат состоит в том, что при уменьшении мощности лазерной накачки примерно в два раза интенсивности всех линий в стоксовой компоненте спектра уменьшаются почти линейно (также в два раза), в то время как интенсивность основных рамановских линий в антистоксовой компоненте падает более чем в 10 раз (см. рис. 2). Этот факт однозначно указывает на аномально большую нелинейность в зависимости интенсивности антистоксовых линий рассеяния от мощности лазерной накачки. На рисунке 3 представлены зависимости интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент линий, у которых рамановский сдвиг составляет ≈ 1144 и $\approx 1136\,\text{см}^{-1}$ соответственно, от мощности фотовозбуждения. Из этого рисунка видно, что в пределе больших накачек стоксовая компонента демонстрирует сублинейную зависимость от мощности, в то

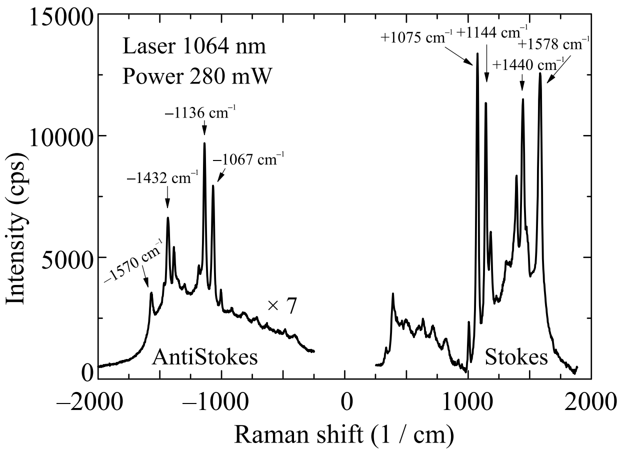


Рис. 1. Стоксовая и антистоксовая компоненты спектра неупругого рассеяния света, измеренные на SERS-структуре для аналита 4ABT на лазере с длиной волны 1064 нм при мощности фотовозбуждения 280 мВт

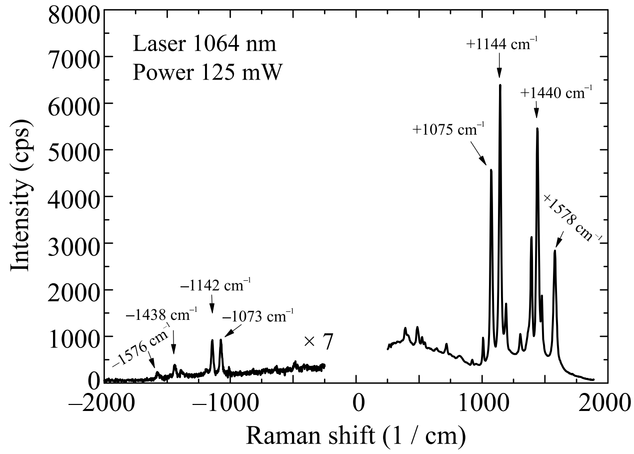


Рис. 2. Стоксовая и антистоксовая компоненты спектра неупругого рассеяния света, измеренные на SERS-структуре для аналита 4ABT на лазере с длиной волны 1064 нм при мощности фотовозбуждения 125 мВт

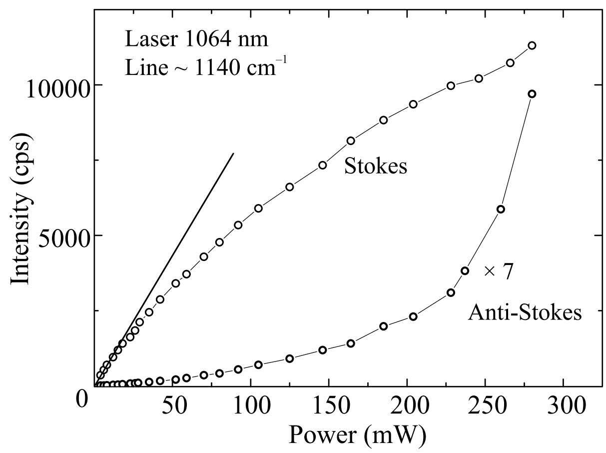


Рис. 3. Зависимости интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент линий, у которых рамановский сдвиг составляет $\approx 1140\,\text{см}^{-1}$ от мощности фотовозбуждения

время как для антистоксовой компоненты наблюдается яркая сверхлинейная зависимость.

Хорошо известно, что отношение интенсивностей стоксовой (I_S) и антистоксовой (I_{AS}) компонент спонтанного неупругого рассеяния света с рамановским сдвигом E при температуре T описывается соотношением: $I_{AS}/I_S = \exp(-E/kT)$, которое отражает температурную заселенность энергетических состояний системы. Поэтому, анализируя зависимость отношения I_{AS}/I_S от мощности лазерной накачки, можно оценивать характерную температуру системы или выявлять несоответствие спонтанному механизму рассеяния. На рисунке 4 представлена зависимость отношения I_{AS}/I_S от мощности, измерен-

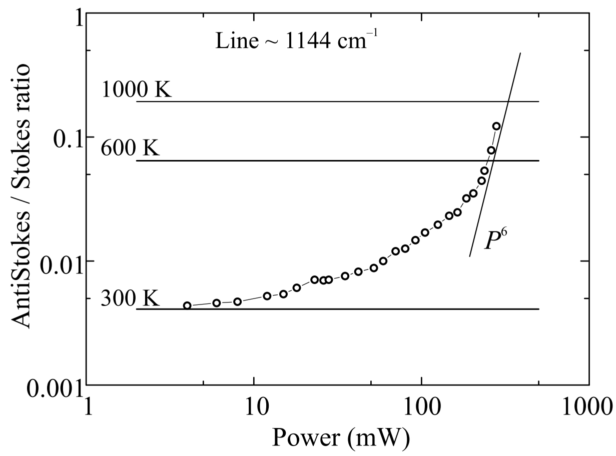


Рис. 4. Зависимость отношения I_{AS}/I_S от мощности, измеренная для “родственных” линий с рамановским сдвигом около 1140 см$^{-1}$

ная для “родственных” линий с рамановским сдвигом около 1140 см$^{-1}$. Видно, что в пределе малых накачек отношение интенсивностей I_{AS}/I_S хорошо отвечает температуре, при которой проводился эксперимент (300 K). Также на рис. 4 указаны значения отношения I_{AS}/I_S, которые должны достигаться для линии с рамановским сдвигом 1140 см$^{-1}$ при температурах 300, 600 и 1000 K. Видно, что в пределе больших мощностей эффективная температура системы, определенная из отношения интенсивностей I_{AS}/I_S, превышает 600 K и даже приближается к 1000 K. Отметим, что молекулы 4ABT разлагаются при температуре около 470 K, поэтому значение эффективной температуры не имеет особого смысла. Кроме того, температура, определенная из отношения интенсивностей I_{AS}/I_S для пар линий с другим рамановским сдвигом, оказывается разной при одной и той же мощности фотовозбуждения, что также указывает на бессмысленность параметра эффективной температуры и переход от спонтанного к вынужденному механизму рассеяния. Из рисунка 3 также следует, что в пределе сильной накачки зависимость отношения интенсивностей I_{AS}/I_S от мощности отвечает шестой степени, что указывает на гигантскую нелинейность и позволяет говорить о пороговой зависимости интенсивности антистоксовой компоненты спектра рассеяния от мощности лазерной накачки.

Рост отношения интенсивностей I_{AS}/I_S от мощности вплоть до значений 0.2–0.5 означает макроскопическое заполнение возбужденных молекулярных состояний. Из-за ангармоничности спектра колебаний молекул, которая всегда существует в реальных системах, следует ожидать неэквидистантность уровней энергий и разность в расщеплении между соответствующими энергетическими уровнями. Таким образом, при больших накачках, по мере увеличения номера колебательного уровня возбужденных состояний молекул, можно ожидать изменения рамановского сдвига линий неупругого рассеяния, особенно в антистоксовой компоненте спектра. На рисунке 5 показаны спектры антистоксового рассеяния,

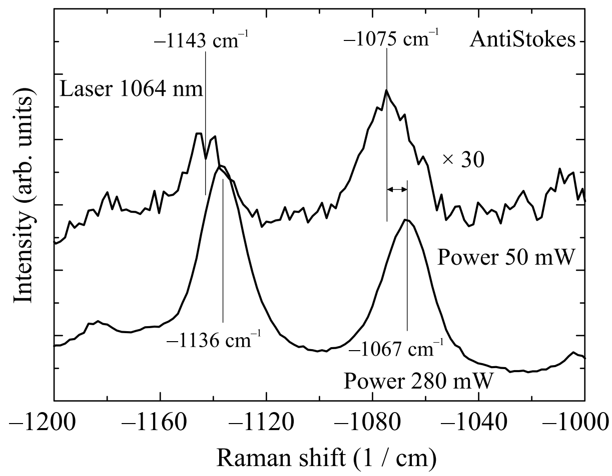


Рис. 5. Спектры антистоксового рассеяния, измеренные при разной мощности лазерной накачки. Видно, что с ростом мощности наблюдается сдвиг рамановских линий на 7–8 см$^{-1}$ в область меньших энергий

измеренные при разной мощности лазерной накачки. Действительно, как видно из этого рисунка, с ростом мощности наблюдается характерный сдвиг рамановских линий на 7–8 см$^{-1}$ в область меньших энергий. Этот факт означает, что уровни возбужденных состояний молекул 4ABT сгущаются по мере роста энергии. Зависимость энергетического сдвига антистоксовой линии рассеяния (сдвиг 1144 см$^{-1}$) от накачки показана на рис. 6. Видно, что существенный энергетический сдвиг рамановской линии происходит сверхлинейным образом при мощностях лазерной накачки более 200 мВт. Отметим, что в стоксовой компоненте спектра рамановского рассеяния никакого спектрального сдвига обнаружено не было вплоть до самых больших мощностей.

Дополнительно мы исследовали, как влияют два важных параметра эксперимента на значение критической мощности, при которой наблюдается пороговое поведение отношения интенсивностей I_{AS}/I_S от накачки. Первый параметр – это коэффициент усиления SERS-подложки, который можно было менять с помощью, например, высоты столбиков или толщины серебряного покрытия. Второй параметр – это концентрация органических молекул 4ABT. В предварительных исследованиях было установлено,

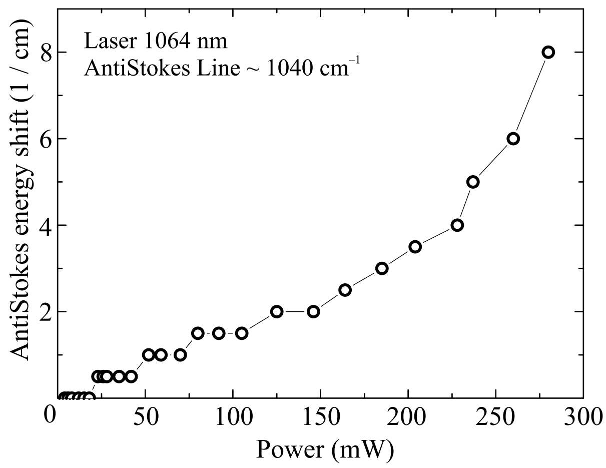


Рис. 6. Зависимость энергетического сдвига антистоксовой линии рассеяния (сдвиг 1144 см$^{-1}$) от накачки

что при уменьшении коэффициента усиления SERS-подложки величина пороговой мощности сдвигалась в область больших накачек. Этот факт представляется естественным, поскольку уменьшение коэффициента усиления означает ослабление амплитуды электрического поля и, следовательно, уменьшение вклада от нелинейных эффектов. При уменьшении концентрации органических молекул 4АВТ на SERS-подложке наблюдался сдвиг пороговой мощности в область меньших накачек. Однако этот факт можно считать лишь качественно установленным, поскольку в условиях непрерывной лазерной накачки требование неизменности (во времени) рамановского сигнала (как в стоксовой, так и в антистоксовой компонентах спектра) надежно выполнялось лишь при высоких концентрациях молекул. Подобные исследования требуют проведения измерений в условиях импульсной лазерной накачки, и подробные результаты по изучению зависимости пороговой мощности от концентрации молекул и от коэффициента усиления SERS-подложки будут опубликованы отдельно.

Обсуждая возможность когерентного рамановского рассеяния, нельзя не отметить, что SERS-структуры были изготовлены из кварца, прозрачного в ИК-области спектра, который имел толщину 0.6 мм, и обратная сторона структуры была покрыта слоем металла. В результате структуру можно рассматривать как резонатор, в котором возможно дополнительное усиление сигнала с выделенным направлением рассеяния назад.

Отметим также, что обнаруженное гигантское усиление сигнала рамановского рассеяния в антистоксовой компоненте позволяет создавать массово доступные рамановские приборы с SERS усилением, анализирующие антистоксовую часть спектра при использовании лазера с длиной волны 1064 нм (и даже 1550 нм), в то время как в стоксовом канале рассеяния отсутствуют достаточно чувствительные и недорогие матрицы детекторов.

Таким образом, в настоящей работе в плазмон-диэлектрических структурах, оптимизированных для получения гигантского усиления рамановского рассеяния света в ИК-области спектра, исследованы зависимости интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент спектра рассеяния от мощности лазера. Обнаружено, что интенсивность антистоксового канала рассеяния растет сверхлинейно с мощностью возбуждения, а после некоторого значения мощности начинает расти пороговым образом. Обнаруженное поведение интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент спектра рамановского рассеяния указывает на важность стимулированного механизма рассеяния света в SERS-структурах.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ-19-72-30003).

1. M. Fleischmann, P. J. Hendra, and A. J. McQuillan, Chem. Phys. Lett. **26**(2), 163 (1974).
2. R. B. M. Schasfoort and A. J. Tudos, *Handbook of Surface Plasmon Resonance*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK (2008).
3. J. Homola, *Surface Plasmon Resonance Based Sensors*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, N.Y. (2006).
4. J. N. Anker, W. P. Hall, O. Lyandres, N. C. Shah, J. Zhao, and R. P. van Duyne, Nat. Mater. **7**, 442 (2008).
5. K. Kneipp, Y. Wang, H. Kneipp, I. Itzkan, R. R. Dasari, and M. S. Feld, Phys. Phys. Lett. **76**, 2444 (1996).
6. K. Kneipp, H. Kneipp, R. Manoharan, I. Itzkan, R. R. Dasari, and M. S. Feld, J. Raman Spectrosc. **29**, 743 (1998).
7. K. Kneipp, H. Kneipp, R. Manoharan, E. B. Hanlon, I. Itzkan, R. R. Dasari, and M. S. Feld, Appl. Spectrosc. **52**, 1493 (1998).
8. K. Kneipp, H. Kneipp, G. Denim, I. Itzkan, R. R. Dasari, and M. S. Feld, Appl. Spectrosc. **52**, 175 (1998).
9. R. C. Maher, L. F. Cohen, P. Etchegoin, H. J. N. Hartigan, R. J. C. Brown, and M. J. T. Milton, J. Chem. Phys. **120**, 11746 (2004).
10. T. L. Haslett, L. Tay, and M. Moskovits, J. Chem. Phys. **113**, 1641 (2000).
11. W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, Nature **424**, 824 (2003).
12. P. B. Johnson and R. W. Christy, Phys. Rev. B **6**, 4370 (1972).

13. Ya. V. Fedotova, V. I. Kukushkin, V. V. Solov'ev, and I. V. Kukushkin, Opt. Express **27**, 32578 (2019).
14. В. И. Кукушкин, А. Б. Ваньков, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **98**, 72 (2013).
15. В. И. Кукушкин, Я. В. Гришина, В. В. Соловьев, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **105**, 637 (2017).
16. D. A. Gromyko, S. A. Dyakov, N. A. Gippius, T. Weiss, S. G. Tikhodeev, A. S. Astrakhantseva, Y. V. Fedotova, V. V. Solovyev, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. Appl. **17**, 024015 (2022).
17. В. И. Кукушкин, Я. В. Гришина, С. В. Егоров, В. В. Соловьев, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **103**, 508 (2016).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 217 – 224

Управление фемтосекундной филаментацией посредством выстраивания молекул газа лазерными импульсами коротковолнового ИК диапазона

В. О. Компанец[+1)], *А. А. Архипова*[+*], *А. А. Мельников*[+], *С. В. Чекалин*[+]

[+]*Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия*

[*]*Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", 101000 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 июня 2022 г.
После переработки 13 июля 2022 г.
Принята к публикации 13 июля 2022 г.

Экспериментально продемонстрирована возможность управления процессом филаментации фемтосекундного лазерного импульса в газообразном азоте с помощью неадиабатического выстраивания молекул импульсами на длине волны 1400 нм как в однофиламентном режиме, так и при множественной филаментации. Зарегистрированы сдвиги спектра и изменение длительности импульса, связанные с изменениями показателя преломления в областях возрождения вращательного волнового пакета. В режиме множественной филаментации обнаружена устойчивая и воспроизводимая локализация излучения в отдельные филаменты с субдифракционной расходимостью и уширением спектра более, чем на октаву, при выстраивании молекул в направлении, перпендикулярном поляризации импульса.

DOI: 10.31857/S1234567822160054, EDN: jhrrjg

При филаментации фемтосекундных лазерных импульсов [1] достигается высокая концентрация светового поля [2, 3], которая поддерживается на расстоянии, значительно превышающем рэлеевскую длину, в результате динамического баланса самофокусировки излучения в среде с керровской нелинейностью и его дефокусировки на свободных электронах, образованных в результате ионизации среды [1, 4]. Управление этим процессом при распространении лазерного излучения в режиме фемтосекундной филаментации в газах [5] представляет чрезвычайный интерес для приложений, связанных с передачей световой энергии на большие расстояния, в том числе лазерного зондирования атмосферы и создания удаленных источников белого света в атмосфере. Одной из таких возможностей является выстраивание молекул с анизотропной поляризуемостью лазерным импульсом, позволяющее менять условия филаментации для импульса, следующего в том же направлении с определенной задержкой [6, 7]. Короткий лазерный импульс создает квантовомеханический волновой пакет, представляющий собой когерентную суперпозицию многих вращательных состояний молекул газа. На языке классической механики, оси молекул, вдоль которых поляризуемость максимальна, получают вращательный момент и стремятся выстроиться в направлении поляризации лазерного излучения [7–11]. Если длительность лазерного импульса много короче типичного вращательного периода молекулы, то процесс выстраивания будет неадиабатическим ("*non-adiabatic (field-free) alignment*") [9, 10], и характерная временная эволюция этого вращательного волнового пакета ("фазировка" и "дефазировка"), определяемая только инерцией возбужденных молекул, происходит уже после окончания лазерного импульса [11]. В молекулярных газах с анизотропной поляризуемостью, в отличие от жидкостей [8], наблюдается повторная фазировка (или "возрождение") вращательных волновых пакетов (*revivals of rotational wave packets*) [10, 11] с периодом T_{rev} от единиц до десятков пикосекунд, определяемым вращательной постоянной молекул газа B ($T_{\text{rev}} = 1/2Bc$). Возрождение волновых пакетов, называемое иногда "квантовым следом" (*quantum wake*), может происходить также на четверти, половине и трех четвертях этого периода, приводя к изменению с соответствующими временными задержками показателя преломления в сечении пучка уже прошедшего импульса. Поскольку добавка к показателю преломления различна в случае молекул, выстраивающихся параллельно и перпендикулярно вектору поляризации лазерного излучения, изначально изотропная среда в области квантового следа становится двулучепреломляющей. Данная об-

[1)]e-mail: kompanetsvo@isan.troitsk.ru

ласть распространяется в газе вслед за первым импульсом, выстраивающим молекулы, со скоростью, которую можно считать равной его групповой скорости. Поэтому второй фемтосекундный импульс может распространяться синхронно с областью квантового следа достаточно долгое время, так что влияние индуцированной первым импульсом добавки к показателю преломления на процесс его филаментации будет существенно усилено.

Таким образом, лазерно-индуцированное неадиабатическое выстраивание молекул в газах открывает возможности для управления состоянием атмосферных трасс в задачах транспорта лазерного излучения [12], создания условий лазерной генерации на ионах азота при филаментации в воздухе [13], управления генерацией суперконтинуума и гармоник высокого порядка, увеличения электронной плотности в плазменных каналах филамента и дальнейшего сжатия импульсов [7, 14]. В экспериментах по исследованию влияния предварительного выстраивания молекул на особенности филаментации показано, что при этом может возрастать длина филамента [15–17], а также меняться длительность импульса и его спектр [7, 14, 16, 17]. Практически все эти работы проводились с использованием излучения на длине волны 800 или 400 нм (вторая гармоника). Однако условия проведения экспериментов в этих работах существенно различались (интенсивность лазерного импульса, фокусировка, длина филамента, давление и сорт газа). Кроме того, как показано ниже, в работах [17–22] использовались неадекватные методы регистрации динамики изменения показателя преломления, вызванного выстраиванием молекул, что привело к противоречивым результатам.

В настоящей работе экспериментально исследовано влияние выстраивания молекул азота фемтосекундным импульсом с центральной длиной волны 1400 нм, на изменение параметров проходящего через область квантового следа зондирующего лазерного импульса с центральной длиной волны 800 нм при росте энергии последнего вплоть до начала множественной филаментации. Использование в эксперименте импульсов на двух существенно различных длинах волн позволило четко выделить сигнал от зондирующего импульса при их одинаковой поляризации, когда эффект выстраивания максимален. Кроме того, возбуждение на 1400 нм позволило получить более длинный филамент, а также увеличить вкладываемую в филамент энергию за счет роста порога филаментации и уменьшения вероятности ионизации, происходящего при увеличении центральной длины волны импульса. Тем самым увеличивалась длина взаимодействия зондирующего импульса с областью квантового следа, а роль нелинейных эффектов, возникающих в генерируемой лазерной плазме, уменьшалась [23, 24]. Отметим, что выстраивание молекул импульсами коротковолнового ИК диапазона ранее не исследовалось экспериментально. Некоторые особенности для случая распространения в воздухе были обнаружены в работе [25] с помощью численного моделирования.

В наших экспериментах измерялись зависимости спектра, длительности и пространственного распределения зондирующего импульса, прошедшего через газ, от его задержки относительно первого импульса, выстраивающего молекулы. Использовалась титан-сапфировая фемтосекундная система с регенеративным усилителем Spitfier HP (Spectra Physics), позволяющая получать на выходе импульсы с длительностью 45 фс, энергией 4 мДж, и частотой повторения 1 кГц на длине волны 800 нм. Часть излучения, преобразованная в оптическом параметрическом усилителе TOPAS-C (Light Conversion) в импульсы на длине волны 1400 нм, использовалась для выстраивания молекул азота в газовой кювете. Излучение на длине волны 800 нм после ахроматической полуволновой пластины, согласующей поляризации обоих импульсов, зондировало область квантового следа импульса на 1400 нм. Оба импульса сводились дихроичным зеркалом и фокусировались линзой с фокусным расстоянием 30 см в газовую кювету длиной 60 см. Линза располагалась вплотную ко входному окну кюветы. Стартовая позиция возникающих в газе филаментов контролировалась через боковое окно кюветы цифровой камерой и совмещалась для импульсов на обеих длинах волн при помощи регулируемого телескопа, установленного в канале зондирования. Регулировка временных интервалов между импульсами осуществлялась при помощи оптической линии задержки, управляемой компьютером. Спектральные характеристики излучения после кюветы регистрировались при помощи волоконного спектрометра FLAME-S-XR1-ES с интегрирующей сферой FOIS-1 (Ocean Optics) при одновременном управлении линией задержки, что позволяло записывать спектрально-временные зависимости. Длительность импульсов измерялась одноимпульсным автокоррелятором ASF-20 (Авеста). Частота повторения импульсов в эксперименте была уменьшена до 50 Гц для исключения влияния эффектов накопления, вызванных, например, образованием ионов в процессе филаментации. Увеличение давления в кювете до 3 атм (оптимального для генерации суперконтинуума [26]) давало возможность превзойти порог

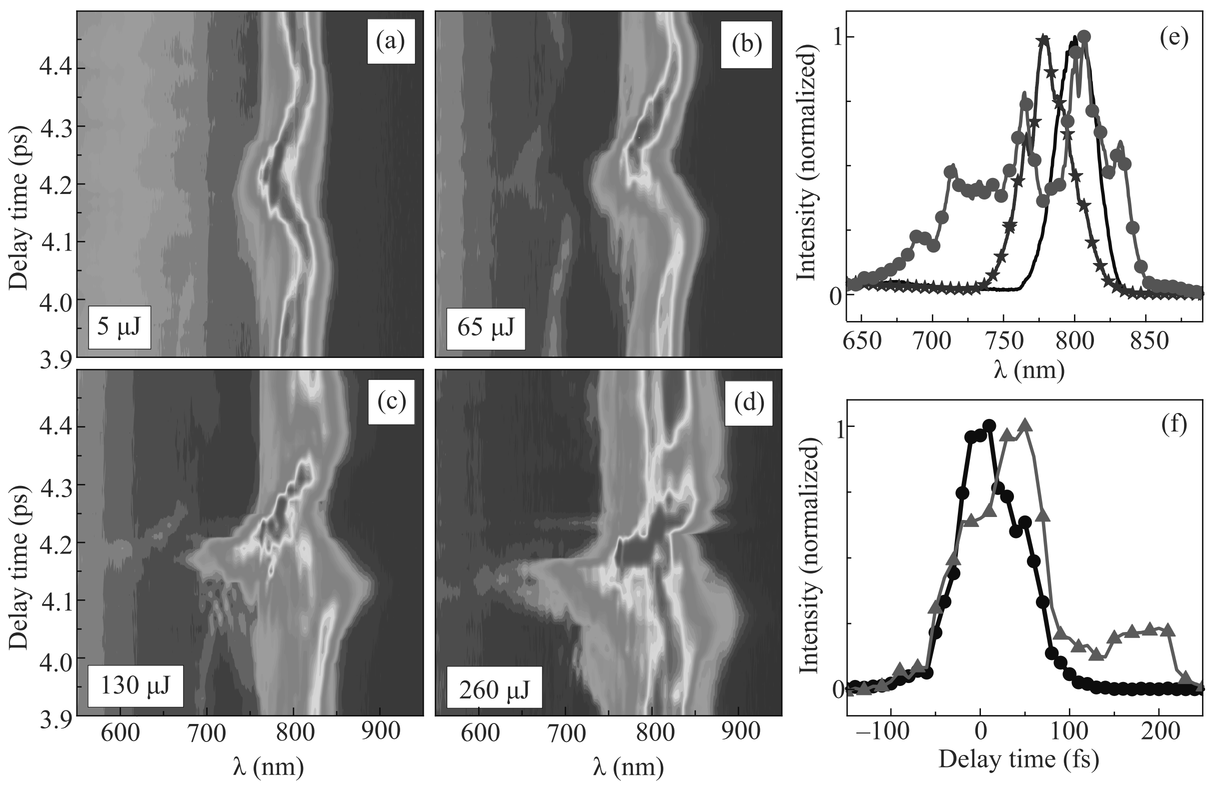


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a)–(d) – Спектры зондирующего импульса, полученные при различных его задержках относительно импульса на 1400 нм в области возрождения вращательного волнового пакета вблизи половины периода полного возрождения при разных энергиях (указаны на спектрах). (e) – Максимальная ширина спектра для входного импульса (сплошная линия), при энергиях 5 мкДж (звездочки) и 260 мкДж (кружки). (f) – Сигнал четырехволнового смешения импульсов накачки и зондирования (кружки) и отклик во всем исследуемом спектральном диапазоне (треугольники) вблизи нуля задержки

филаментации для доступной в нашем эксперименте энергии импульса на 1400 нм и тем самым увеличить его интенсивность, а также пропорциональную ей степень выстраивания молекул в области квантового следа. Давление подбиралось по устойчивой генерации видимого спектра суперконтинуума в филаменте при максимально достижимой в эксперименте энергии импульсов на 1400 нм, составляющей 220 мкДж после входного окна кюветы при длительности 45 фс (FWHM). Длина и диаметр филамента, определяемые по фотографии его светящегося плазменного канала в газе, составляли 2 см и 90 мкм для импульсов на 800 нм, и 5 см и 105 мкм для импульсов на 1400 нм, соответственно. Поэтому в условиях эксперимента филаментация пробного импульса на 800 нм проходила внутри квантового следа филамента, созданного импульсом на 1400 нм. При задержках, соответствующих попаданию зондирующего импульса в область восстановления выстраивания молекул (см. ниже), наблюдалось двукратное удлинение созданного им филамента, связанное с фокусирующим действием вращательного квантового следа [7, 15, 16].

Возрождение вращательных волновых пакетов в наших экспериментах наблюдалось в моменты времени, кратные соответствующему периоду, а также четверти, половине и трем четвертям этого периода. Известно, что процессы, наблюдаемые в этих случаях, подобны. Поэтому, следуя большинству проведенных в этой области исследований, мы проводили подробные измерения в области временных задержек вблизи 4 пс, что приблизительно соответствует половине периода восстановления вращательного волнового пакета для молекул азота. Спектры зондирующего импульса, зарегистрированные при различных его энергиях в этой временной области, представлены на рис. 1a–d. При энергии 5 мкДж, недостаточной для образования филамента, наблюдаемый сдвиг его спектра связан только со знакопеременной добавкой к показателю преломления газа, возникающей в области квантового следа. Характерное циклическое смещение спектра качественно воспроизводит тенденцию, предсказанную в работе [14] (см. рис. 1a, b). При этом в области, где скорость изменения показателя преломления максимальна, наблюдалось небольшое (~ 5 нм) в сравнении с рассчитанным в работе [14] уширение спектра, что объясняется на порядок меньшей длиной филамента в наших экспериментах. Общая же величина изменения длины волны при сдвиге в красную и синюю сторону оказывается существенно большей (более 40 нм). Отметим, что именно эта величина в работах [18, 19] интерпретирована как уширение спектра импульса, по-видимому, из-за недостаточного временного разрешения. При энергии 65 мкДж зондирующий импульс с длиной волны 800 нм образует филамент. При этом сдвиг частоты, обусловленный фазовой модуляцией, которая происходит из-за изменения показателя преломления в квантовом следе, остается преобладающим в согласии с оценками [27–31]. С дальнейшим ростом интенсивности растет влияние керровской нелинейности, приводящей к уширению (в основном в область коротких длин волн) спектра более, чем на 100 нм, с характерной сильной модуляцией (рис. 1e).

Необходимо отметить, что характерные значения экспериментально наблюдаемого времени возрождения вращательного волнового пакета, приведенные для одних и тех же условий в разных работах, довольно сильно различаются. Данное обстоятельство, по-видимому, обусловлено различным выбором нулевого времени задержки. В наших экспериментах оно определялось по сигналу четырехволнового смешения импульсов накачки и зондирования (см. рис. 1f). В сигнале, учитывающем отклик во всем исследуемом спектральном диапазоне (рис. 1f), видна задержка вращательного отклика, которая составляет около 150 фс. Это время несколько больше рассчитанного в [29, 30] и измеренного в [32, 33] для импульса на 800 нм, но хорошо согласуется с оцененным в [25] для ближнего ИК диапазона.

Из полученных экспериментальных данных найдена зависимость центра тяжести спектра [34] от времени задержки (рис. 2), по которой, в свою очередь, определена динамика изменения показателя преломления $\Delta n(t)$ при неадиабатическом выстраивании молекул в области квантового следа. Для этого использовалась формула $\Delta n(t) \approx \frac{c_0}{L\lambda_0} \int\limits_{-\infty}^{t} \Delta\lambda(t')dt'$ [33], где $\Delta\lambda$ – измеренный спектральный сдвиг, λ_0 – центральная длина волны лазерного импульса, L – длина филамента, c_0 – скорость света в вакууме. Полученные данные достаточно хорошо согласуются (см. рис. 2) с расчетами изменения показателя

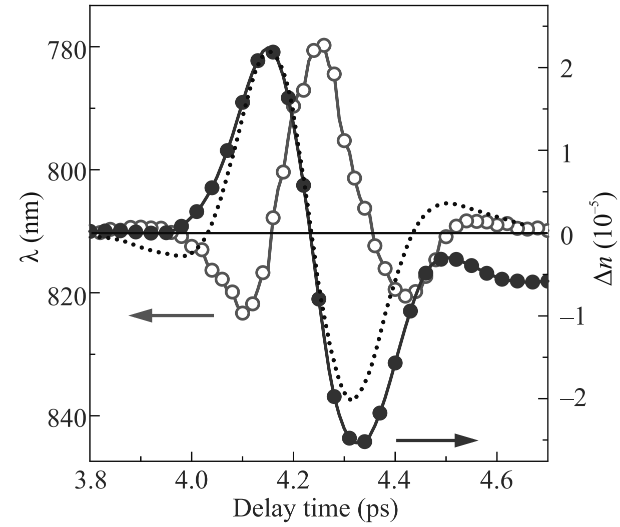


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости центра тяжести спектрального распределения (пустые кружки) и изменения показателя преломления (кружки) от времени задержки зондирующего импульса, определенные из экспериментальных данных на пороге образования филамента (рис. 1b). Пунктирная кривая – качественный ход показателя преломления в квантовом следе по данным работ [25, 27]

преломления молекулярного азота в области квантового следа в зависимости от времени задержки относительно момента возбуждения [25, 33, 35]. Такое изменение можно описать с помощью формулы $\Delta n(t) = 2\pi N n_0^{-1} \Delta\alpha(\langle\cos^2\theta\rangle(t) - 1/3)$, где N – плотность газа, n_0 – линейный показатель преломления, $\Delta\alpha$ – разность поляризуемостей молекулы для поля, параллельного и перпендикулярного ее оси, θ – угол между направлением поляризации возбуждающего импульса и осью молекулы. При этом максимум показателя преломления для зондирующего импульса, при котором оси молекул выстраиваются параллельно направлению его поляризации, достигается при задержке 4.15 пс, а минимум – при 4.32 пс, что не совпадает с измеренными экстремумами сдвига длины волны (рис. 2), пропускания газа и интенсивности третьей гармоники (не показаны).

Следует отметить, что во многих работах (см., например, [17–22]) именно зависимости пропускания образца, уширения спектра зондирующего импульса или интенсивности его третьей гармоники от времени задержки, наблюдавшиеся экспериментально, трактуются как зависимости приращения показателя преломления в квантовом следе. Качественно эти зависимости подобны, однако согласно численному моделированию, проведенному в работах [14, 16, 31, 33], максимальные сдвиги спектра должны наблюдаться в те моменты времени, когда производная показателя преломления максимальна (в хорошем согласии с результатами наших измерений). В этих точках добавка к показателю преломления близка к нулю, и причина противоречия полученных ранее результатов состоит в том, что именно эти точки, соответствующие наблюдаемым максимумам пропускания, сдвига частоты или интенсивности третьей гармоники, отождествлялись авторами с положениями, соответствующими максимальным добавкам к показателю преломления.

На рисунке 3 приведены результаты измерения длительности зондирующих импульсов с длиной волны 800 нм, проходящих через области с изменением показателя преломления. Эксперименты проведены при двух исходных длительностях импульса: 55 и 110 фс. Оба импульса удлинялись в области роста показателя преломления (время задержки 4.00–4.15 пс) и укорачивались в области его спада (4.15–4.30 пс), что можно объяснить разницей показателя преломления для переднего и заднего фронтов, которая ведет к удлинению импульса в первом случае и укорочению во втором. Укорочение или удлинение импульса максимально, когда он целиком попадает в область dn/dt одного знака [36], т.е. при длительности, близкой к времени прохождения им такой области. Из рисунка 3 видно, что эффект существенно больше для 110 фс импульса: сжатие в 3, а уширение в 1.5 раза по сравнению с 1.4 и 1.2 для импульса с исходной длительностью 55 фс. В работе [20] в аналогичных условиях наблюдалось прямо противоположное поведение для импульса с исходной длительностью 140 фс. По утверждению авторов, она уменьшалась до 130 фс и увеличивалась до 160 фс при прохождении области квантового следа с ориентацией осей молекул соответственно вдоль и поперек направления поляризации импульса, что противоречит также расчетам, сделанным в работе [14]. Причиной такого расхождения результатов могла быть некорректная методика определения авторами работы [20] положений экстремумов добавки к показателю преломления, упомянутая выше.

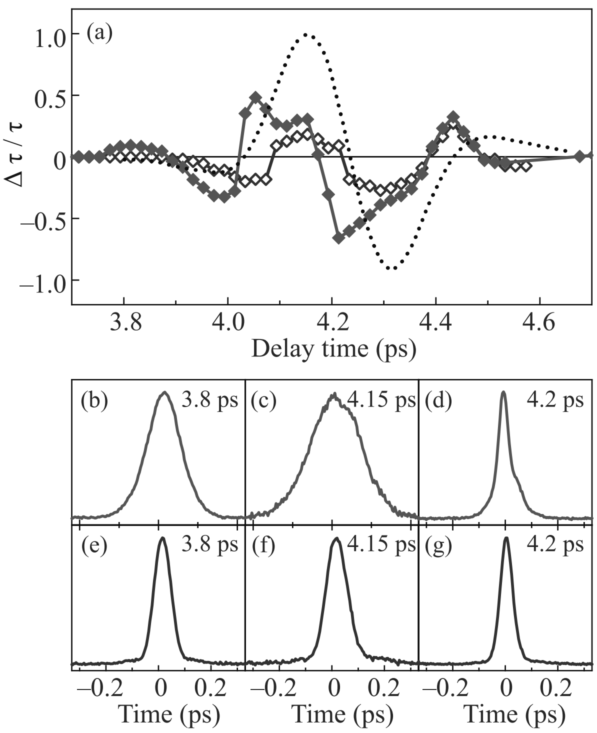


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Относительное изменение длительности зондирующего импульса, измеренное при различных временных задержках в области возрождения квантового следа вблизи половины периода, при исходной длительности 110 фс (красные ромбы) и 55 фс (синие пустые ромбы). Пунктиром изображен ход изменения показателя преломления. Корреляционные функции, измеренные для импульсов длительностью 110 фс (b)–(d) и 55 фс (e)–(g) при различных временных задержках

При увеличении интенсивности зондирующего импульса наблюдается уширение его спектра, сопровождаемое сильной модуляцией (см. рис. 1e). Данная модуляция связана с интерференцией одинаковых частот, возникающих при керровской самомодуляции в разных частях импульса [1, 36], что свидетельствует о росте вклада керровской нелинейности. Тем не менее, красный и синий сдвиги спектра зондирующего импульса при соответствующих временах задержки доказывают определяющую роль выстраивания молекул в изменении показателя преломления газа. Более того, наши эксперименты показали, что управляющая функция квантового следа сохраняется и при интенсивностях зондирующего импульса, при которых возникает множественная филаментация. Известно, что при множественной филаментации образуется пучок дочерних филаментов, расположение которых по сечению пучка и вдоль оси распространения, а также их параметры хаотично меняются от импульса к импульсу [1]. Проблема регуляризации этого процесса достаточно актуальна для приложений, и поэтому активно исследуется. Сведения о влиянии выстраивания молекул на множественную филаментацию, полученные в предыдущих работах, проведенных исключительно с импульсами на длине волны 800 нм, достаточно противоречивы. Так, в работах [21, 22] сообщается об исчезновении множественной филаментации при параллельной ориентации молекул и поляризации лазера, а в

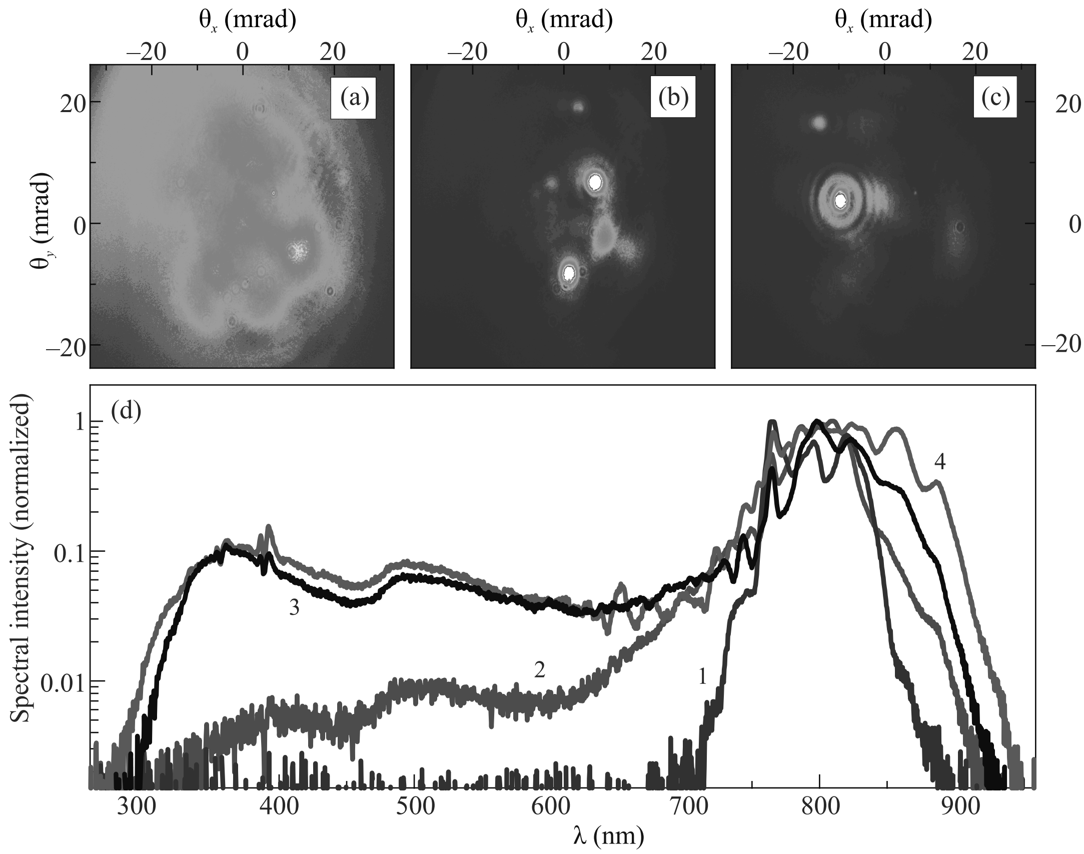


Рис. 4. (Цветной онлайн) Профиль зондирующего пучка на 800 нм в угловых координатах после кюветы с газом при временных задержках: (a) – 3.5; (b) – 4.32 и (c) – 4.4 пс. Виден захват и перекачка энергии в дочерний филамент. (d) – Спектры зондирующего импульса: кривая *1* – вне области квантового следа при временной задержке 3.5 пс, кривые *2*, *3* и *4* – спектры излучения, захваченного дочерним филаментом, при энергии импульса 175, 205 и 336 мкДж, соответственно, и временной задержке 4.4 пс

[7] – о возникновении в этом случае "*ripplelike*" профиля с уширенным спектром.

В наших экспериментах пучок становился неоднородным по сечению при увеличении энергии зондирующего импульса до 200 мкДж, что приблизительно в пять раз больше критической мощности самофокусировки (рис. 4a). При перестройке временной задержки в области квантового следа яркость отдельных неоднородностей в пучке резко возрастала (рис. 4b, c). При изменении времени задержки от 4.3 до 4.5 пс (в области роста показателя преломления при выстраивании молекул) "высвечивались" разные неоднородности в пятне (чаще одна), причем при фиксации времени задержки картины были стабильными и воспроизводились при обратном ходе линии задержки. Это дало возможность зарегистрировать наблюдавшиеся дочерние филаменты и измерить их параметры. Обнаружено, что дочерний филамент распространялся в виде направленного пучка с расходимостью 3–4 мрад со спектром в диапазоне 300–900 нм (рис. 4), причем в такой филамент захватывалось до 4 % энергии зондирующего импульса. При этом дочерние филаменты не выходили за пределы основного пучка, расходимость которого была существенно большей, возрастая в этом диапазоне времен задержки из-за возникновения отрицательной линзы при выстраивании молекул газа [7]. Типичный спектр излучения дочернего филамента, зарегистрированный для времени задержки 4.3 пс, приведен на рис. 4d. Наблюдалось уширение и рост интенсивности спектра при увеличении энергии импульса вплоть до 200 мкДж, после чего рост прекращался. По-видимому, это связано с достижением в филаменте интенсивности $\sim 5 \times 10^{13}$ Вт/см^2, при которой дальнейший ее рост ограничивается возникшей плазмой (*intensity clamping* [37]). Исходя из этого, можно оценить диаметр филамента как ~ 100 мкм, из чего следует, что расходимость наблюдаемых пучков меньше дифракционной. При отстройке временной задержки из области квантового следа, пучок снова приобретает типичный вид, показанный на рис. 4a.

Мы полагаем, что наблюдаемая селективность ухода энергии в дочерние филаменты связана с уменьшением взаимодействия между ними в расходящемся пучке, который формируется при образовании отрицательной линзы в газе с выстроенными молекулами. Такое предположение подтверждается отсутствием эффекта в моменты времени, соответствующие возникновению волноводного распространения зондирующего импульса [38] из-за положительной линзы в квантовом следе, когда реализуется более плотная упаковка дочерних филаментов, усиливающая их взаимодействие, обмен энергией и приводящая к их слиянию [39]. Дальнейшая самофокусировка и фазовая самомодуляция, приводящая к генерации широкополосного суперконтинуума и образованию плазменного канала в филаменте, происходит за счет керровской нелинейности.

Проведенные нами эксперименты показали, что с помощью неадиабатического выстраивания молекул импульсом на 1400 нм можно управлять процессом филаментации фемтосекундного лазерного импульса в газообразном азоте. В однофиламентном режиме зарегистрированы сдвиги спектра и изменение длительности импульса, связанные с изменениями показателя преломления в областях возрождения вращательного волнового пакета. При множественной филаментации фемтосекундного импульса в газе продемонстрировано избирательное стимулирование отдельных филаментов при выстраивании молекул в направлении, перпендикулярном поляризации импульса, при синхронном распространении импульса и области квантового следа. При этом обнаружена устойчивая и воспроизводимая локализация излучения в отдельные филаменты с субдифракционной расходимостью и уширением спектра более, чем на октаву, связанная с уменьшением взаимодействия между дочерними филаментами в расходящемся пучке.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 18-12-00422).

1. A. Couairon and A. Mysyrowicz, Phys. Rep. **441**, 47 (2007).
2. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, Письма в ЖЭТФ **112**, 22 (2020).
3. А. Е. Дормидонов, Е. Д. Залозная, В. П. Кандидов, В. О. Компанец, С. В. Чекалин, Письма в ЖЭТФ **115**, 15 (2022).
4. V. P. Kandidov, S. A. Shlenov, and O. G. Kosareva, Quantum Electron. **39**, 205 (2009).
5. В. О. Компанец, Д. Е. Шипило, И. А. Николаева, Н. А. Панов, О. Г. Косарева, С. В. Чекалин, Письма в ЖЭТФ **111**, 27 (2020).
6. S. Varma, Y. H. Chen, and H. M. Milchberg, Phys. Rev. Lett. **101**, 205001 (2008).
7. J. Wu, H. Cai, Y. Peng, Y. Tong, A. Couairon, and H. Zeng, Laser Physics **19**, 1759 (2009).
8. R. W. Boyd, Nonlinear Optics, 2nd ed., Academic Press, Amsterdam (2003).
9. T. Seideman, J. Chem. Phys. **103**, 7887 (1995).
10. T. Seideman, Phys. Rev. Lett. **83**, 4971 (1999).
11. I. S. Averbukh and N. F. Perelman, Phys. Lett. A **139**, 449 (1989).
12. M. C. Schroeder, I. Larkin, T. Produit, E. W. Rosenthal, H. Milchberg, and J.-P. Wolf, Opt. Express **28**, 11463 (2020).
13. H. Xie, H. Lei, G. Li, Q. Zhang, X. Wang, J. Zhao, Z. Chen, J. Yao, Y. Cheng, and Z. Zhao, Phys. Rev. Research **2**, 023329 (2020).
14. J. Wu, H. Cai, H. Zeng, and A. Couairon, Opt. Lett. **33**, 2593 (2008).
15. S. Varma, Y.-H. Chen, and H. M. Milchberg, Phys. Plasmas **16**, 056702 (2009).
16. S. Varma, Y.-H. Chen, J. P. Palastro, A. B. Fallahkair, E. W. Rosenthal, T. Antonsen, and and H. M. Milchberg, Phys. Rev. A **86**, 023850 (2012).
17. N. Kaya, G. Kaya, Y. Boran, A. Kolomenski, and H. A. Schuessler, Optik **242**, 167360 (2021).
18. F. Calegari, C. Vozzi, S. Gasilov, E. Benedetti, G. Sansone, M. Nisoli, S. De Silvestri, and S. Stagira, Phys. Rev. Lett. **100**, 123006 (2008).
19. F. Calegari, C. Vozzi, and S. Stagira, Phys. Rev. A **79**, 023827 (2009).
20. N. Kaya, G. Kaya, M. Sayrac, Y. Boran, S. Anumula, J. Strohaber, A. A. Kolomenskii, and H. A. Schuessler, Opt. Express **24**, 2562 (2016).
21. H. Cai, J. Wu, X. Bai, H. Pan, and H. Zeng, Opt. Lett. **35**, 49 (2010).
22. J. Wu, H. Cai, Y. Peng, and H. Zeng, Phys. Rev. A **79**, 041404R (2009).
23. S. Skupin and L. Berge, Opt. Commun. **280**, 173 (2007).
24. V. Yu. Fedorov and V. P. Kandidov, Laser Phys. **18**, 1530 (2008).
25. D. Langevin, J. M. Brown, M. B. Gaarde, and A. Couairon, Phys. Rev. A **99**, 063418 (2019).
26. M. Hatayama, A. Suda, M. Nurhuda, K. Nagasaka, and K. Midorikawa, J. Opt. Soc. Am. B **20**, 603 (2003).
27. J. H. Odhner, D. A. Romanov, and R. J. Levis, Phys. Rev. Lett. **103**, 075005 (2009).
28. J. H. Odhner, D. A. Romanov, and R. J. Levis, Phys. Rev. Lett. **105**, 125001 (2010).
29. P. A. Oleinikov and V. T. Platonenko, Laser Phys. **3**, 618 (1993).

30. I. V. Fedotov, A. D. Savvin, A. B. Fedotov, and A. M. Zheltikov, Opt. Lett. **32**, 1275 (2007).
31. E. T. J. Nibbering, G. Grillon, M. A. Franco, B. S. Prade, and A. Mysyrowicz, J. Opt. Soc. Am. B **14**, 650 (1997).
32. P. W. Dooley, I. V. Litvinyuk, K. F. Lee, D. M. Rayner, M. Spanner, D. M. Villeneuve, and P. B. Corkum, Phys. Rev. A **68**, 023406 (2003).
33. C. Marceau, S. Ramakrishna, S. Géniera, T.-J. Wang, Y. Chen, F. Theberge, M. Châteauneuf, J. Dubois, T. Seideman, and S. L. Chin, Opt. Commun. **283**, 2732 (2010).
34. J.-F. Ripoche, G. Grillon, B. Prade, M. Franco, E. Nibbering, R. Lange, and A. Mysyrowicz, Opt. Commun. **135**, 310 (1997).
35. Y.-H. Chen, S. Varma, A. York, and H. M. Milchberg, Opt. Express **15**, 11341 (2007).
36. R. A. Bartels, T. C. Weinacht, N. Wagner, M. Baertschy, C. H. Greene, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, Phys. Rev. Lett. **88**, 013903 (2002).
37. J. Kasparian, R. Sauerbrey, and S. L. Chin, Appl. Phys. B **71**, 877 (2000).
38. A. B. Fedotov, A. N. Naumov, D. A. Sidorov-Biryukov, and A. M. Zheltikov, Laser Phys. **9**(6), (1999).
39. H. Cai, J. Wu, P. Lu, X. Bai, L. Ding, and H. Zeng, Phys. Rev. A **80**, 051802R (2009).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 225 – 232

Исследование областей генерации жестких ионизирующих излучений в атмосферном разряде

А. А. Родионов[1)], $\boxed{\text{А. В. Агафонов}}$, *В. А. Рябов, К. В. Шпаков, И. С. Байдин, Я. К. Болотов, М. А. Медведев, Е. В. Паркевич, А. Г. Мозговой, А. В. Огинов*

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

Поступила в редакцию 30 марта 2022 г.
После переработки 27 июня 2022 г.
Принята к публикации 27 июня 2022 г.

Впервые измерены распределения временных и энергетических параметров рентгеновского излучения наносекундного мегавольтного атмосферного разряда в конфигурации “обратно-конический катод с острием – сетчатый анод” по координате вдоль оси разряда с разрешением 12 см. Длина разрядного промежутка – 60.5 см, максимальное приложенное напряжение – 1.2 МВ с временем нарастания фронта – 220 нс. Оценки энергии квантов излучения выполнены с использованием свинцовых фильтров ступенчатого ослабления с толщинами до 10 мм. Исследовано ∼1200 осевых разрядов. Установлено, что импульсы излучения обладают свойством кластеризации по временной оси и возникают одновременно с особенностями производной приложенного напряжения по времени. Наиболее интенсивное и жесткое рентгеновское и гамма-излучение наблюдается в момент достижения приложенным напряжением максимального значения. Энергия излучения из области анода превышает энергию излучения из газового промежутка в 5–8 раз. Также наблюдаются максимумы энергии излучения в области катода. Максимальная энергия кванта излучения не превышает ∼ 400 кэВ. Исследованы амплитудные спектры ионизирующего излучения. Источником наблюдаемого излучения может быть торможение релятивистских электронов в материале анода.

DOI: 10.31857/S1234567822160066, EDN: jhvswb

Импульсный пробой длинных (порядка 1 м) промежутков в атмосферном воздухе, осуществляемый при приложении к ним напряжения амплитудой на уровне 1 МВ, в настоящий момент активно исследуется [1–13], так как его сложный многообразный механизм к настоящему моменту времени до конца не известен. Таким образом, его установление представляет существенный интерес и, в частности, может быть полезным для понимания процессов в природных молниях [14–16]. В настоящий момент известно, что в начальной стадии мегавольтных атмосферных разрядов происходит генерация рентгеновского и гамма-излучения, в частности, высокой энергии [1–12]. В литературе имеется ряд гипотез, описывающих его формирование [4, 7, 11, 12]. В то же время, нет достаточно строгих оснований сделать безусловный выбор в пользу одной из них.

Ранее было обнаружено, что обсуждаемое излучение имеет острую угловую анизотропию [12], что может указывать на механизм его генерации в результате торможения релятивистских электронов. Наиболее эффективное торможение осуществляется в твердом теле. Следовательно, если считать, что природа излучения связана с торможением электронов, следует ожидать наибольшую его интенсивность из области анода. С другой стороны, в работе [2] обнаружено, что появление наблюдаемого излучения связано с особыми осцилляциями в зависимости тока от времени, что может быть трактовано как результат перемыкания токовых каналов, идущих от анода и от катода. В подтверждение этого авторы [2–4] приводят факт того, что момент возникновения излучения совпадает с процессами изменения конфигурации стримерных и лидерных каналов. В этом случае источником излучения должно быть торможение электронов в атмосферном воздухе межэлектродного промежутка с учетом значительно вынесенных в область газа потенциалами виртуальных анода и катода.

К настоящему моменту не было проведено исследований распределения энергии излучения по координате вдоль оси разряда. Именно эти измерения принципиально важны, так как они позволят отделить часть ионизирующего излучения, генерируемого в области электродов, от части излучения, возникающего в воздушном промежутке.

В настоящей работе впервые выполнены измерения временных и энергетических параметров про-

[1)]e-mail: andrei.rodionov@phystech.edu

никающего излучения наносекундного атмосферного мегавольтного разряда с пространственным разрешением. Проанализированы характеристики излучения из электродных областей и межэлектродного промежутка.

Эксперименты по пробою длинных воздушных промежутков выполнены на установке ЭРГ [8, 9, 12]. В качестве источника напряжения использован генератор импульсных напряжений (ГИН), собранный по схеме Аркадьева–Маркса, запасаемая системой энергия составляла 4.3 кДж. Аксиально-симметричная электродная система (рис. 1) описана в [12]. Диаметр внешнего заземленного токопровода был равен 2 м. Катод состоял из дюралевого конуса высотой 17 см и основанием диаметром 32 см, которое по кромке было закруглено с диаметром закругления 20 мм. За пределы конуса внутрь разрядного промежутка было вынесено острие – стальная игла, фиксированная на тонком (диаметром 2 мм) осевом штоке. Анод (осевой анодный электрод) был выполнен в виде сетчатой полусферы (период сетки 1 мм, радиус кривизны анодной поверхности – 14 см). Использованная форма катода была подобрана эмпирически и соответствует генерации рентгеновского и гамма-излучения наибольшей интенсивности по сравнению с иными конфигурациями. Вместе с этим эмпирически определено, что такая форма катода позволяет максимально стабилизировать параметры разряда и, в частности, – положение привязки катодного факела к острию иглы, что дает возможность исследовать пространственные свойства излучения разряда с наибольшей точностью. Анод в виде сетки был использован для соответствия параметров разряда с таковыми при исследовании анизотропии его рентгеновского излучения [12], в которых позади анода стоял детектор, и, следовательно, анод должен был быть частично прозрачным. Таким образом типы разряда в настоящей работе и в [12] одинаковы, что позволяет сопоставлять результаты этих экспериментов.

Ток анода измерялся коаксиальными шунтами: анодным шунтом и шунтом обратного токопровода. Постоянная времени обоих шунтов составляла менее ~ 1 нс. Анодный (осевой) шунт измеряет параметры только той части тока разряда, которая протекает через осевой анодный электрод. В то же время шунт обратного токопровода измеряет весь суммарный ток разряда, текущий по всему объему разрядного промежутка и окружающего его пространства, включая токи от катода к обечайке ГИНа, которые проходят мимо осевого анодного электрода. Диагностическая установка, состоящая из специально разработанных сцинтилляционных детекторов ионизирующего излучения [17] с дополнительными модификациями и улучшенным временным разрешением 2–3 нс, имела конфигурацию, схематично изображенную на рис. 1 (вид сверху), детекторы располагались равномерно с шагом 17.6 см по пространству ортогонально оси разряда. Использовалось 6 детекторов D1-D6 (отмечены на рис. 1 буквами в порядке их следования от анода к катоду) на основе быстрых (~ 1 нс) органических сцинтилляторов (полистирол-р-терфенил + POPOP), состыкованных с ФЭУ-30. Сцинтилляторы имели форму цилиндров с диаметром основания 91 мм и длиной 50 мм. Для всех детекторов D1-D6 использовались коллиматоры – трубы из свинца марки С1 с толщиной стенки 1 см, длиной 1 м и диаметром 12 см. Пространственное разрешение детектирующей сборки вдоль оси разряда составляло 12 см. Отметим, что измерения, выполненные этой системой, и, соответственно, выводы, относятся к излучению, распространяющемуся по нормали к оси разряда. Возможность таких измерений обусловлена тем, что, в отличие от высокоэнергичной составляющей излучения (энергия квантов 300–400 кэВ), проявляющей острую угловую анизотропию, излучение с энергиями квантов до 300 кэВ имеет практически изотропную индикатрису [12]. В настоящем эксперименте можно считать, что с достаточной точностью энергия сцинтилляции органического сцинтиллятора прямо пропорциональна энергии детектируемого им ионизирующего излучения [18].

Оценки энергии квантов излучения выполнены по методике "фильтров ступенчатого ослабления". Свинцовые фильтры были выполнены из свинца марки С1 толщиной 1, 3, 7 и 10 мм. Фильтры позволяли менять ступенчатый порог ослабления регистрируемого рентгеновского и гамма-излучения различной жесткости. Так как все детекторы в виде сочлененных ФЭУ и сцинтилляторов для подавления сильной электромагнитной наводки были помещены в цельные корпуса из дюралюминия [17], толщина стенки которых перед сцинтилляторами составляла 3 мм, этот барьер как дополнительный фильтр, пропускающий фотоны с энергией выше 20 кэВ, имелся во всех измерениях, и измерения без свинцовых фильтров, таким образом, относятся к излучению с энергией квантов более 20 кэВ. Поправочные коэффициенты для выравнивания амплитуд детекторов относительно друг друга были получены в процессе калибровки с помощью рентгеновской трубки ИМА-6-100Д в аппарате марки "РИНА" (серия "АРИНА") с максимумом генерируемого спектра в области энергий $\sim 120 \pm 10$ кэВ.

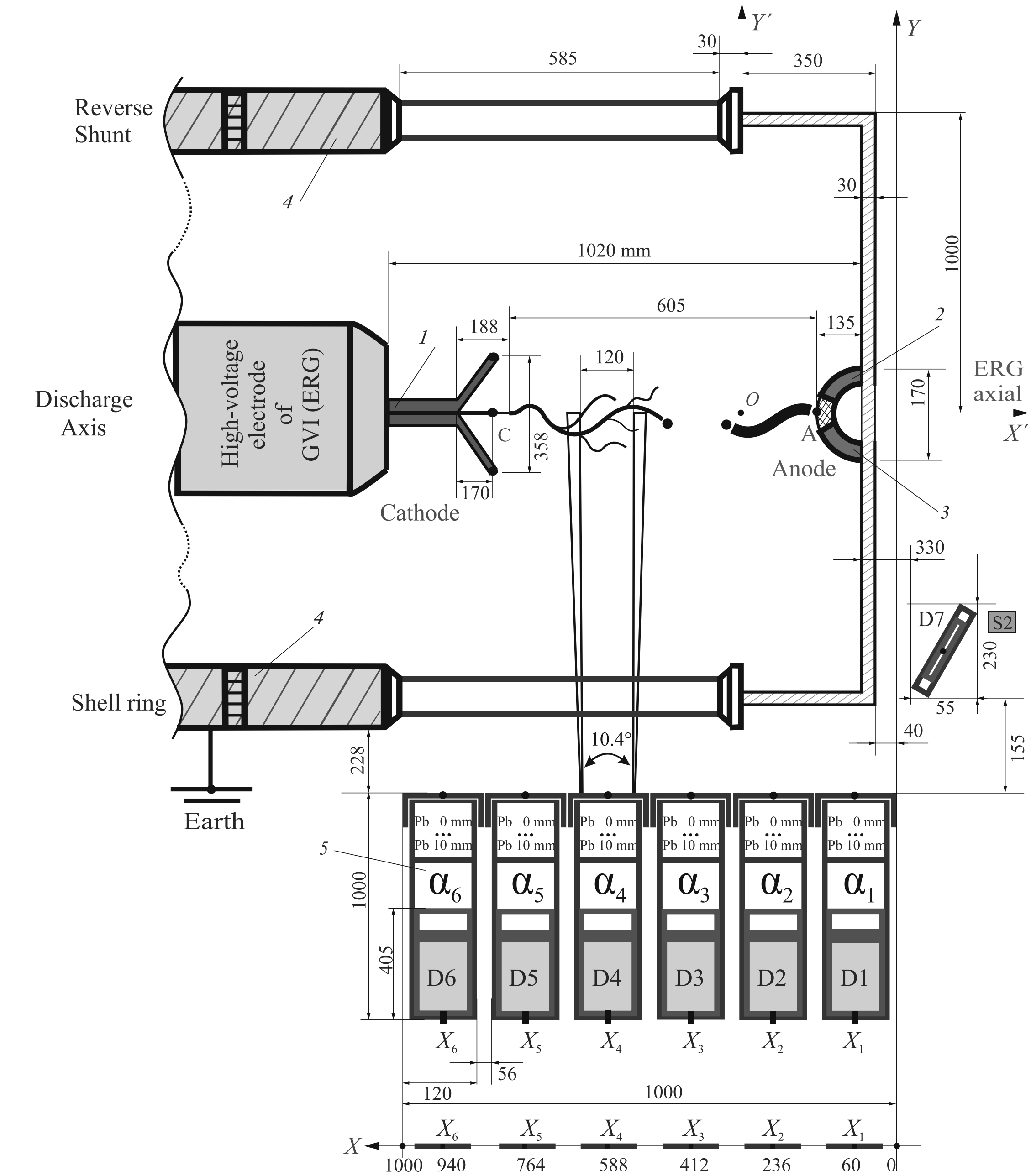


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента: *1* – катод; *2* – анод; *3* – анодный шунт; *4* – шунт обратного токопровода; *5* – коллимированный детектор

Эксперименты выполнены в следующих условиях: относительная влажность воздуха 25–40 %, атм. давление 720–737 торр, температура воздуха 18–20 °С. Длина разрядного промежутка составляла 60.5 см, максимальное приложенное напряжение – 1.2 МВ, время его нарастания с 10 % уровня амплитуды до 90 % – 220 нс. Экспериментальная статистика состояла из $\sim$1200 осевых разрядов, в которых разрядный промежуток замыкался между анодом и катодом. Разряды, в которых замыкание происходило на боковые стенки разрядного промежутка, в статистике не учитывались. Без свинцового ослабителя ("Pb_0" на рис. 2, 3, толщина свинца 0 мм) было проведено 312 измерений, со свинцовым фильтром толщиной 1 мм ("Pb_1") – 217 измерений, с фильтром толщиной 3 мм ("Pb_3") – 253, с фильтром толщиной

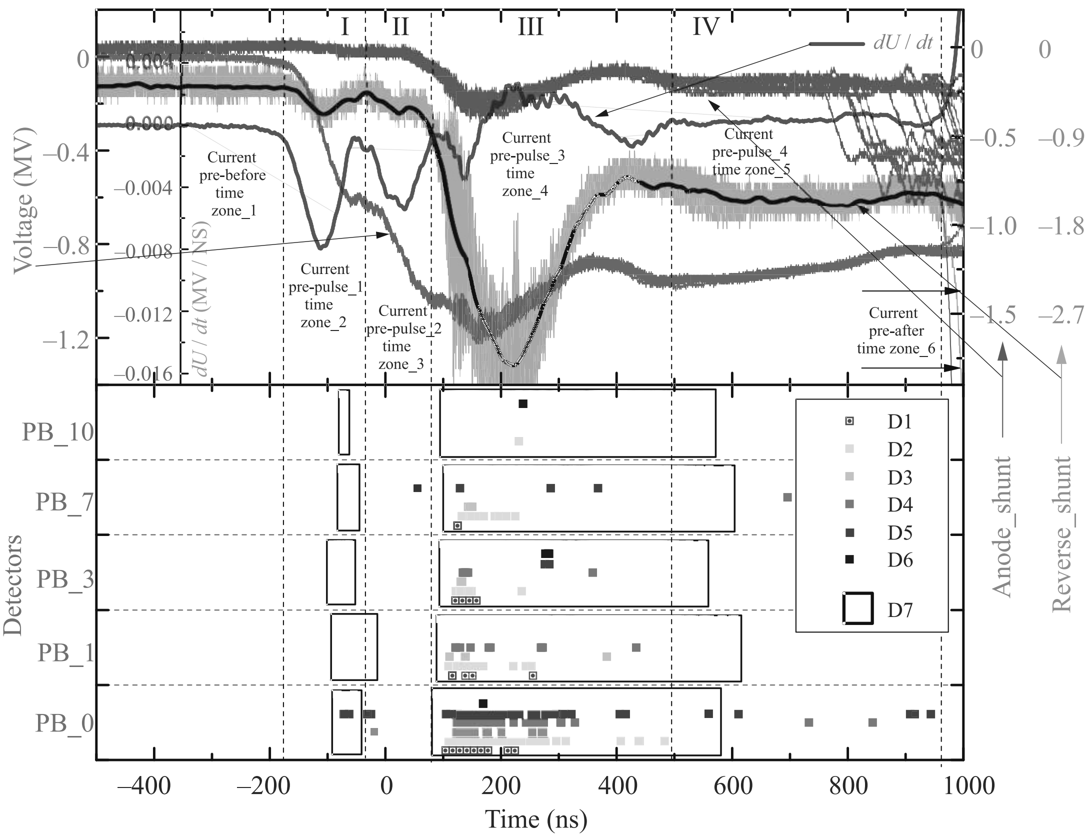


Рис. 2. (Цветной онлайн) Верх: зависимости тока разряда $I(t)$, напряжения $U(t)$ и его производной $dU(t)/dt$ от времени в первые 1.5 мкс от начала разряда; низ: положения максимумов в зависимости интенсивности ионизирующего излучения от времени, синхронизованные с электрофизическими характеристиками разряда. D1–D7 – номера детекторов, PB_0 – PB_10 – толщины свинцовых фильтров в мм

7 мм ("Pb_7") – 240, и с фильтром толщиной 10 мм ("Pb_10") – 173 измерения соответственно. Оценки числа случайных фоновых срабатываний детекторов дают значение в 1 импульс за $\sim 10^4$ выстрелов. Следовательно, ложное срабатывание детекторов в настоящей работе можно исключить.

На рисунке 2 приведены временные зависимости электрофизических параметров разряда: зависимости тока разряда $I(t)$, напряжения на разрядном промежутке $U(t)$ и его производной по времени $dU(t)/dt$ в первые 1.5 мкс. Эти же зависимости в последующие 2 мкс представлены на рис. 3. Кривые получены наложением $\sim$1200 отдельных измерений каждая. За нулевой момент времени принят момент достижения приложенным напряжением уровня в 10 % от максимального.

Также на рис. 2 и 3 показаны синхронизованные с точностью не хуже 1 нс с электрофизическими параметрами разряда положения максимумов интенсивности ионизирующего излучения, измеренной на всех детекторах (D1–D7) и при использовании данных всех экспериментальных серий для свинцовых фильтров различного ослабления – толщины: 0 (полное отсутствие свинцового фильтра), далее 1, 3, 7 и 10 мм по порядку.

Из рисунков 2 и 3 видно, что наибольшее число импульсов рентгеновского излучения наблюдается в момент 90–350 нс, который соответствует достижению приложенным напряжением своего максимального значения, достигаемого в момент времени 160–200 нс. Далее напряжение на промежутке снижается, и интенсивность ионизирующего излучения падает. При этом наблюдается излучение за всеми свинцовыми ослабителями, хотя с ростом толщины свинца интенсивность излучения падает. В момент времени 350 нс прекращается характерный импульс тока разряда и падает интенсивность проникающего излучения.

Импульсы ионизирующего излучения обладают свойством кластеризации по оси времени с образованием разграниченных временных групп. Данные импульсы могут быть сгруппированы по следующе-

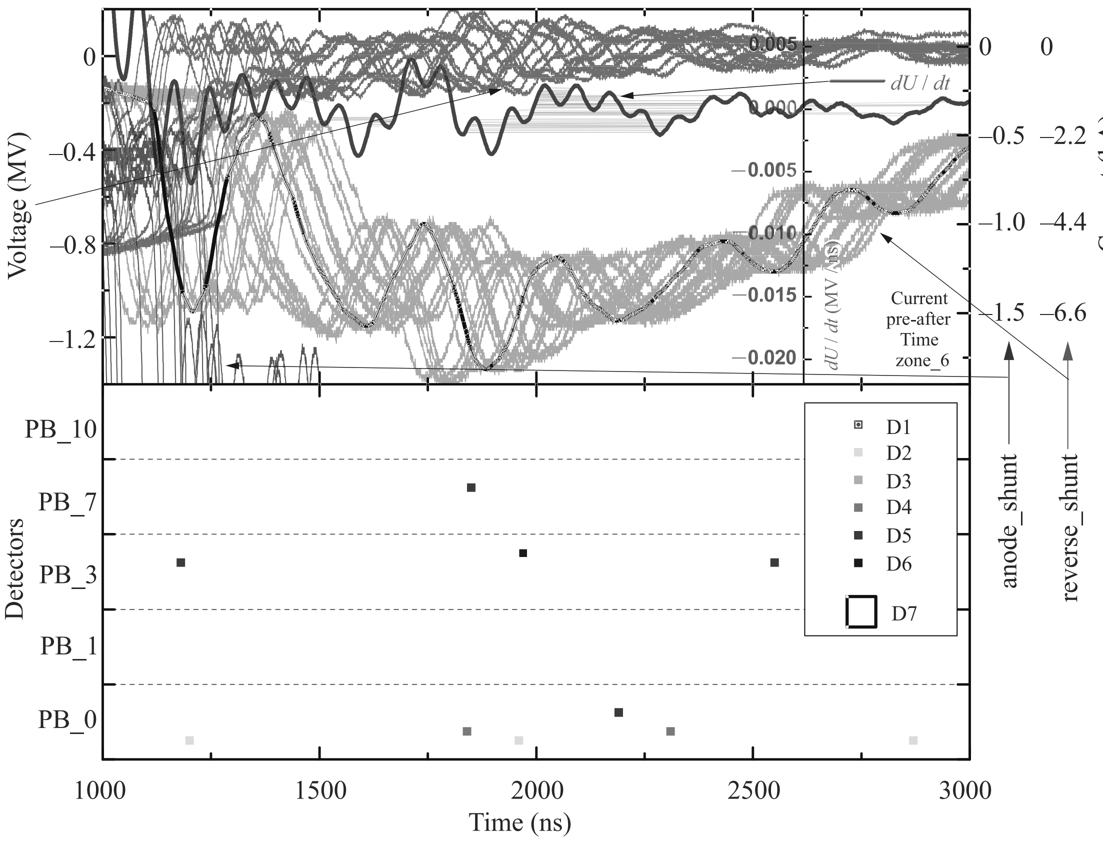


Рис. 3. (Цветной онлайн) Верх: зависимости тока разряда $I(t)$, напряжения $U(t)$ и его производной $dU(t)/dt$ от времени в следующие 2 мкс от начала разряда; низ: положения максимумов в зависимости интенсивности ионизирующего излучения от времени. D1–D7 – номера детекторов, PB_0 – PB_10 – толщины свинцовых фильтров в мм

му принципу: временные границы, в которых наблюдается излучение, могут быть выбраны по моментам времени, в которые производная приложенного напряжения по времени dU/dt достигает экстремальных значений. При этом тогда, когда dU/dt достигает экстремума, наблюдается наиболее интенсивное излучение. Действительно, такая группировка правильно разграничивает данные, изображенные на рис. 2 и 3, выделяя четыре основные области времени: от -175 до -33 нс; от -33 до $+80$ нс; от $+80$ до $+495$ нс; от $+495$ до $+964$ нс. Также имеются две области: от -500 до -175 нс и от $+964$ до $+3000$ нс, в которых также наблюдается излучение, но интенсивность существенно ниже. В настоящей работе исследованы координатные распределения и энергетические характеристики только наиболее интенсивного излучения, возникающего в момент достижения приложенным напряжением максимального значения: с 80 до 495 нс (область III на рис. 2). Особенности излучения в остальные временные промежутки будут описаны в последующих публикациях.

На рисунке 4 приведены распределения энергии ионизирующего излучения по координате, испускаемого в период с 50 до 350 нс, в момент, относящийся к максимуму приложенного напряжения. Кривые получены следующим образом. Для каждого детектора и для каждого фильтра-ослабителя было исследовано 220–300 осевых разрядов, для которых были вычислены средняя энергия ионизирующего излучения, равная интегралу по времени от зависимости интенсивности сцинтилляций от времени, и ее стандартное уклонение. Установлено, что в исследуемом временном промежутке наибольшая энергия ионизирующего излучения зарегистрирована в измерениях без свинцового ослабителя и испускается из области, находящейся на расстоянии 6 ± 6 см от поверхности анода. На это значение нормированы все кривые на рис. 4.

Из рисунка 4 следует, что для всех толщин свинцовых фильтров-ослабителей максимальная энергия излучения наблюдается в прианодной области. В области межэлектродного промежутка излучение также наблюдается, однако его энергия в 5–8 раз мень-

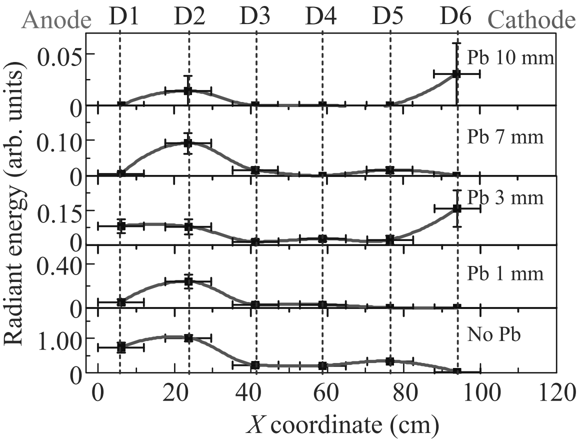


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение энергии ионизирующего излучения, испущенного в течение периода 50–350 нс по координате вдоль оси разряда для всех типов свинцовых фильтров

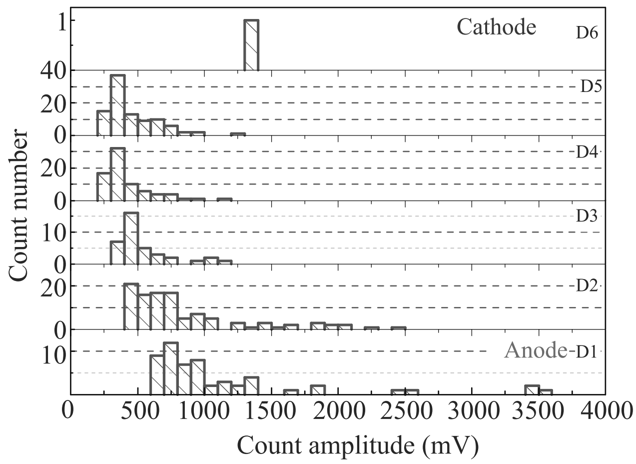


Рис. 5. (Цветной онлайн) Распределения числа сцинтилляций по их амплитуде, зарегистрированных с 50 до 350 нс без свинцового ослабителя

Таблица 1. Зависимости минимальной и максимальной амплитуды сцинтилляционных отсчетов для измерений без свинцового ослабителя (рис. 5) от координаты вдоль оси разряда

Детектор	X, см	Минимальное значение амплитуды, отн. ед.	Максимальное значение амплитуды, отн. ед.
D1	6	660	3530
D2	24	450	2500
D3	41	370	1100
D4	59	290	1190
D5	77	260	1210
D6	95	–	–

ше, чем энергия излучения из области анода. На кривой без ослабителя и кривой, измеренной с ослабителем толщиной 7 мм, наблюдается также максимум в области катода. На кривой без ослабителя энергия ионизирующего излучения в области катода в ~ 1.7 раза выше энергии излучения в газовой фазе.

Количество событий, зафиксированных в моменты времени, близкие к достижению приложенным напряжением своего максимального значения, без использования ослабителей, оказалось достаточным для того, чтобы построить для каждой пространственной координаты вдоль оси разряда распределение числа сцинтилляционных отсчетов по их амплитудам (амплитудные спектры), которые изображены на рис. 5. Из этого рисунка видно, что амплитудные спектры в областях катода, межэлектродного промежутка и анода различаются. В области, прилежащей к катоду, распределения имеют меньшие ширины и соответствуют меньшим энергиям ионизирующего излучения по сравнению с областями, прилежащими к аноду.

На рисунке 5 имеется интересная особенность: амплитудные спектры излучения из разных областей разряда обладают разными минимальными значениями: минимальная амплитуда излучения из области катода в ~ 3 раза ниже таковой для излучения из области анода. Также от координаты зависит и максимальное значение амплитуды. Значения максимальных и минимальных амплитуд для распределений на рис. 5 представлены в табл. 1.

На основе данных об энергии ионизирующего излучения, регистрируемой за свинцовыми ослабителями разных толщин, приведенных на рис. 4, выполнена качественная оценка максимальной энергии квантов ионизирующего излучения для каждого значения координаты. К сожалению, точные измерения спектрального состава излучения оказались невозможны из-за недостаточной статистики событий, измеренных при использовании свинцовых фильтров. С другой стороны, даже небольшое количество зарегистрированных событий позволило выполнить соответствующие качественные оценки по порядку величины, результаты которых изображены на рис. 6.

Согласно предыдущим исследованиям, основным типом проникающего излучения в атмосферных разрядах исследуемого типа является рентгеновское излучение [1–12]. По этой причине оценки энергии квантов выполнены на основе данных об оптическом пропускании рентгеновского излучения свинцовыми пластинами разных толщин, взятых из [19, 20].

Как видно из рис. 6, наибольшее значение кванта рентгеновского излучения наблюдается для излучения, испускаемого из области анода, и составляет

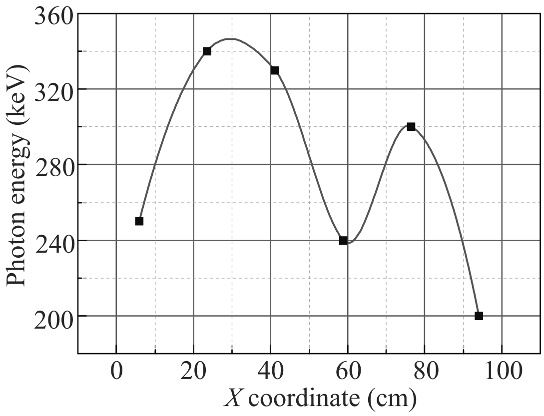


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимости максимальной энергии квантов рентгеновского излучения от координаты вдоль оси разряда

~ 350 кэВ. Излучение с наименьшим значением энергии кванта, лежащее в области ~ 250 кэВ, испускается из области межэлектродного промежутка. Из области катода испускается излучение с энергией кванта до ~ 300 кэВ. Установленная в работе максимальная энергия квантов рентгеновского излучения, не превышающая ~ 400 кэВ, соответствует результатам исследований в других экспериментальных конфигурациях [2]. Полученные значения подтверждают, что основным типом ионизирующего излучения служит именно рентгеновское излучение.

Выводы. В настоящей работе впервые проведены энергетические и временные измерения параметров проникающего излучения мегавольтного наносекундного разряда с пространственным разрешением. Выполнена пространственная локализация источника излучения и временная классификация типов излучения. Установлено, что моменты времени, в которые наблюдается излучение, определяются экстремумами производной по времени от зависимости приложенного напряжения от времени, из которой следует, что в предпробойной стадии наблюдается как минимум три таких области, каждая из которых сопровождается импульсами ионизирующего излучения.

Установлено, что наиболее интенсивное рентгеновское излучение наблюдается в момент достижения приложенным к промежутку напряжением максимального значения. Наибольшая энергия ионизирующего излучения испускается из областей, прилежащих к аноду. Излучение из областей между электродами имеет энергию в 3–8 раз меньше. Из прикатодных областей излучение несколько интенсивнее, чем из межэлектродного промежутка, но существенно менее интенсивно, чем из прианодной области. Амплитудные спектры излучения, испускаемого из областей анода и катода, различны так, что минимальная энергия, зарегистрированная из прианодной области, в ~ 3 раза выше, чем из прикатодной области.

Полученные результаты показывают, что главным источником ионизирующего излучения является прианодная область, что согласуется с механизмом его генерации, связанным с торможением быстрых (релятивистских) электронов. Действительно, с одной стороны, при приближении к аноду электроны набирают наибольшую кинетическую энергию. С другой стороны, сечение генерации тормозного излучения σ_b пропорционально nZ^2, где n – объемная плотность числа частиц среды и Z – атомный номер [7, 21]. Для воздуха $n = 10^{19}\,\text{см}^{-3}$, для атома азота, составляющего большинство в составе воздуха, $Z = 7$. Материалом катода служила нержавеющая сталь, основной компонент которой – атомы железа ($Z = 56$) с $n = 10^{22}\,\text{см}^{-3}$. Таким образом, отношение сечения тормозного излучения в материале катода σ_b^c к таковому в воздухе σ_b^{air} при атмосферном давлении составляет $\sigma_b^c/\sigma_b^{\text{air}} \sim 6{\cdot}10^4$ – почти на пять порядков выше, что согласуется с полученными результатами.

Следовательно, полученный результат вместе с обнаруженным ранее достаточно узким угловым распределением излучения [12] объясняется тем, что наблюдаемое излучение генерируется при торможении быстрых (релятивистских) электронов, которое осуществляется, главным образом, в материале анода.

Факт того, что интенсивность излучения становится наибольшей в момент максимума приложенного напряжения, объясняется тем, что именно в этот момент энергия ускоряемых электронов максимальна и, следовательно, в этот момент они генерируют тормозное излучение наибольшей интенсивности и жесткости. Максимальная энергия кванта рентгновского излучения, зарегистрированная в работе, не превышает ~ 400 кэВ.

Механизм наблюдаемой в работе генерации рентгеновского излучения из прикатодной области может быть связан с тормозным излучением электронов и ионов при бомбардировке поверхности катода, либо некоторым другим механизмом. Обнаруженное явление будет исследовано в последующих работах.

Согласно результатам работ [22, 23], режим разряда определяется соотношением критической длины лавины x_c и длины разрядного промежутка d. Оценки величин электрических полей с учетом геометрии разрядного промежутка (рис. 1) в прикатодной области дают при приложении напряжения 0.6 MB напряженности электрического поля в области катодного острия и в области скругленного края катодного конуса, равные ~ 2 МВ/м, что соответствует для воздуха при атмосферном давлении $x_c \approx 60$ см $\approx d$. Оценки выполнены в электростатическом приближении, которое в целом справедливо для момента времени $t = -100$ нс, так как в этот момент ток в промежутке мал, и в разрядном промежутке сравнительно мало зарядов (рис. 2).

В [22] показано, что при $x_c < d$ разряд реализуется в стримерном режиме, и при достижении этого напряжения происходит старт стримеров. Из рисунка 2 видно, что это условие выполняется для времени $t = -100$ нс. Максимум тока разряда наблюдается через ~ 300 нс после старта стримеров (рис. 2), что согласуется с таким описанием.

Пробой длинных промежутков может сопровождаться стримерно-лидерным переходом [24]. При этом лидер имеет скорость, меньшую скорости стримера. В то же время, характерные скорости стримеров могут составлять 10^8 см/с [25], что соответствует времени пролета разрядного промежутка ~ 600 нс. Эта величина близка по порядку к характерным временам наблюдаемых процессов (рис. 2). Таким образом, определить, имеет ли место стримерно-лидерный переход, только по полученным в работе данным нельзя, и это будет сделано в дальнейших исследованиях.

Особую благодарность авторы приносят безвременно ушедшим от нас коллегам В. А. Богаченкову, Г. В. Иваненкову и В. А. Пападичеву.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 19-79-30086.

1. M. Rahman, P. Hettiarachchi, V. Cooray, J. Dwyer, V. Rakov, and H. K. Rassoul, Atmosphere **10**(4), 169 (2019); DOI: 10.3390/atmos10040169.
2. P. O. Kochkin, C. V. Nguyen, A. P. van Deursen, and U. Ebert, Journal of Physics D: Applied Physics **45**(42), 425202 (2012); DOI: 10.1088/0022-3727/45/42/425202.
3. P. O. Kochkin, A. P. van Deursen, and U. Ebert, Journal of Physics D: Applied Physics **48**(2), 025205 (2014); DOI: 10.1088/0022-3727/48/2/025205.
4. P. Kochkin, C. Köhn, U. Ebert, and L. van Deursen, Plasma Sources Sci. Technol. **25**(4), 044002 (2016); DOI: 10.1088/0963-0252/25/4/044002.
5. P. Hettiarachchi, V. Cooray, M. Rahman, and J. Dwyer, Atmosphere **8**(12), 244 (2017); DOI: 10.3390/atmos8120244.
6. N. A. Bogatov, A. Y. Kostinskiy, V. S. Syssoev, M. G. Andreev, M. U. Bulatov, D. I. Sukharevsky, and V. A. Rakov, Journal of Geophysical Research: Atmospheres **125**(11), e2019JD031826 (2020); DOI: 10.1029/2019JD031826.
7. E. V. Oreshkin, S. A. Barengolts, S. A. Chaikovsky, A. V. Oginov, K. V. Shpakov, and V. A. Bogachenkov, Phys. Plasmas **19**(1), 013108 (2012); DOI: 10.1063/1.3677267.
8. A. V. Agafonov, V. A. Bogachenkov, A. P. Chubenko, A. V. Oginov, A. A. Rodionov, A. S. Rusetskiy, and K. V. Shpakov, Journal of Physics D: Applied Physics **50**(16), 165202 (2017); DOI: 10.1088/1361-6463/aa5dba.
9. A. V. Agafonov, A. V. Oginov, and K. V. Shpakov, Physics of Particles and Nuclei Letters **9**(4), 380 (2012); DOI: 10.1134/S1547477112040024.
10. I. M. Kutsyk, L. P. Babich, E. N. Donskoi, and E. I. Bochkov, JETP Lett. **95**, 631 (2012); DOI: 10.1134/S0021364012120090.
11. L. P. Babich, E. I. Bochkov, and I. M. Kutsyk, JETP Lett. **99**(7), 386 (2014); DOI: 10.1134/S0021364014070029.
12. A. V. Agafonov, A. V. Oginov, A. A. Rodionov, V. A. Ryabov, and K. V. Shpakov, Plasma Sources Sci. Technol. **28**, 095014 (2019); DOI: 10.1088/1361-6595/ab3c79.
13. И. Д. Костыря, Д. В. Рыбка, В. Ф. Тарасенко, Приборы и техника эксперимента **1**, 80 (2012); https://doi.org/10.1134/S0020441212010071.
14. A. V. Gurevich, G. K. Garipov, A. M. Almenova, V. P. Antonova, A. P. Chubenko, O. A. Kalikulov, and K. P. Zybin, Atmos. Res. **211**, 73 (2018); DOI: 10.1016/j.atmosres.2018.04.018.
15. A. V. Gurevich, A. M. Almenova, V. P. Antonova, A. P. Chubenko, A. N. Karashtin, O. N. Kryakunova, and K. P. Zybin, Phys. Rev. D **94**(2), 023003 (2016); DOI: 10.1103/PhysRevD.94.023003.
16. J. R. Dwyer and M. A. Uman, Phys. Rep. **534**(4), 147 (2014); DOI: 10.1016/j.physrep.2013.09.004
17. A. A. Rodionov, A. V. Oginov, and K. V. Shpakov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **82**(4), 404 (2018); DOI: 10.3103/S1062873818040160.
18. K. Wei, D. Hei, X. Weng, X. Tan, and J. Liu, Appl. Radiat. Isot. **156**, 108992 (2020); DOI: 10.1016/j.apradiso.2019.108992.
19. I. K. Kikoin, *Tables of Physical Constants, Handbook*, Atomizdat, Moscow (1976), p. 974.
20. https://www.nist.gov/pml/x-ray-and-gamma-ray-data.
21. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Теоретическая физика. Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1989), т. IV, с. 728.
22. Г. А. Месяц, И. В. Васенина, Физика плазмы **47**, 824 (2021); https://doi.org/10.1134/S1063780X2109004X.
23. Г. А. Месяц, Н. М. Зубарев, И. В. Васенина, Краткие сообщения по физике ФИАН **47**, 32 (2020); https://doi.org/10.3103/S1068335620070052.
24. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, Наука, М. (1987).
25. В. Ф. Тарасенко, Г. В. Найдис, Д. В. Белоплотов, Д. А. Сорокин, М. И. Ломаев, Н. Ю. Бабаева, Физика плазмы **46**(3), 273 (2020); DOI: 10.31857/S0367292120030117.

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 233 – 241

Оптическое детектирование циклотронного резонанса в неоднородных ферромагнитных структурах InGaAs/GaAs/$\boldsymbol{\delta}$-⟨Mn⟩

С. В. Зайцев[+1)], *В. В. Дремов*[*], *В. С. Столяров*[*]

[+]*Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

[*]*Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 2022 г.
После переработки 27 июня 2022 г.
Принята к публикации 28 июня 2022 г.

Методом оптически детектируемого циклотронного резонанса (ОДЦР) исследованы структуры, содержащие квантовую яму InGaAs/GaAs и ферромагнитный δ-⟨Mn⟩-слой, разделенные узким спейсером 3–10 нм. Несмотря на сильный беспорядок в этих структурах, по фотолюминесценции носителей в квантовой яме наблюдается ОДЦР при поглощении в дальней инфракрасной области с максимумом в магнитных полях, существенно меньше ожидаемых для типичных значений электронной или дырочной циклотронных масс. Необычное проявление ОДЦР объясняется размерным магнитоплазменным резонансом двумерных вырожденных дырок в субмикронных областях квантовой ямы высокого качества, возникших в условиях сильного флуктуационного кулоновского потенциала вследствие мезоскопического расслоения акцепторного δ-⟨Mn⟩-слоя высокой плотности. Ниже температуры Кюри δ-⟨Mn⟩-слоя магнитно-силовая микроскопия также свидетельствует о неоднородности структуры в плоскости с характерным масштабом $\sim$100–200 нм. В то же время, в светодиодной структуре на подложке n-GaAs резонансное поле ОДЦР заметно меньше, чем в структуре на изолирующей подложке i-GaAs, что связывается с резонансом на донорах в легированной подложке.

DOI: 10.31857/S1234567822160078, EDN: jhwass

Плазменные возбуждения в электронных системах активно исследуются более 50 лет [1–4]. Допированные двумерные (2D) системы, проявляющие плазменные эффекты в микроволновом и терагерцовом частотных диапазонах, представляют не только глубокий фундаментальный интерес, но также находят важные прикладные применения [5, 6]. Такой интерес обусловлен целым рядом уникальных свойств 2D-плазмонов, отличающих их от трехмерных аналогов: характеристики плазменных возбуждений в 2D-образцах контролируются электронной концентрацией или небольшим внешним магнитным полем $B < 300$ мТл [7, 8]. Плазменные резонансы в микроволновом (МВ), терагерцовом и дальнем инфракрасном (ИК) частотных диапазонах ω уверенно разрешаются только в условиях $\omega \cdot \tau > 1$, где τ – время электронной релаксации [4]. Прогресс в технологиях роста 2D гетероструктур привел к улучшению электронной и дырочной подвижности на несколько порядков, что позволило исследовать плазмоны при более низких частотах, вплоть до МВ диапазона [9, 10] и представляется чрезвычайно важным как для практических приложений, так и для фундаментальных исследований.

Открытие ферромагнитных (ФМ) полупроводников p-типа $In_{1-x}Mn_xAs$ и $Ga_{1-x}Mn_xAs$ [11] стимулировало исследования интеграции магнетизма в полупроводниковую электронику [12]. Изучение циклотронного резонанса (ЦР) в ФМ образцах $Ga_{1-x}Mn_xAs$ в высоких магнитных полях вплоть до 100 Тл показали, что очень низкая подвижность носителей ($\mu \leq 10\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$) приводит к чрезвычайно широким пикам в сигнале ЦР при возбуждении в ИК диапазоне [13]. В таких ФМ полупроводниках происходит полное гашение межзонной люминесценции дефектами, связанными с междоузельным Mn [11], что, казалось бы, закрывает возможности применения этих материалов в оптоэлектронике. Однако в работе [12] была предложена гибридная структура: ФМ слой вблизи квантовой ямы (КЯ) с двумерным дырочным газом. Обменное взаимодействие ФМ слоя с дырками в КЯ должно вызывать равновесную спиновую поляризацию дырок (эффект близости), которые, в свою очередь, могут влиять на ориентацию вектора намагниченности $\mathbf{M}(T)$. В работах [14, 15] была обнаружена циркулярная поляризация оптического перехода в гетероструктурах с

[1)]e-mail: szaitsev@issp.ac.ru

КЯ и близлежащим ФМ дельта-слоем Mn (δ-$\langle$Mn$\rangle$), что было интерпретировано поляризацией спинов дырок КЯ в обменном поле ФМ слоя. В настоящей работе такие ФМ структуры с КЯ InGaAs/GaAs и слоем δ-$\langle$Mn$\rangle$, разделенными узким спейсером GaAs толщиной $d_S = 3$–10 нм [15–17], были исследованы методом ОДЦР при поглощении ИК лазера. Обнаружено нетипично низкое для немагнитных гетероструктур InGaAs/GaAs значение резонансного магнитного поля ОДЦР, что мы интерпретируем как наблюдение смешанного магнитоплазменного циклотронного резонанса вырожденных 2D-дырок на мезоскопически малых участках КЯ. Именно специфический дизайн структуры, имеющей в своем составе ФМ акцепторный δ-$\langle$Mn$\rangle$-слой высокой концентрации, склонный к расслоению и самокомпенсации, и приводит к возникновению аномально сильного флуктуационного кулоновского потенциала для носителей в КЯ. Такое разделение КЯ на субмикронные области с характерным размером ~ 200 нм наблюдалось нами методом низкотемпературной магнитно-силовой микроскопии ниже температуры Кюри δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя $T_C \sim 35$ К.

Исследованные структуры с КЯ InGaAs/GaAs и пространственно-близким δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоем были выращены комбинированным методом металлорганической гидридной эпитаксии (МОСГЭ) и лазерного распыления [15, 16]. Схемы различных типов структур показаны на вставках к рис. 1. Структура # 1 (ростовой номер 4846), выращенная на изолирующей подложке i-GaAs 3°(001), имела δ-$\langle$C$\rangle$-слой, нижний спейсер GaAs (10 нм), КЯ $In_xGa_{1-x}As$ ($x = 0.22$) толщиной 10 нм и верхний спейсер GaAs $d_S = 3.6$ нм и покровный слой GaAs ~ 40 нм. Номинальная толщина Q_{Mn} δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя составляла $Q_{Mn} \sim 0.3$ монослоя (МС), что соответствует чрезвычайно высокой поверхностной плотности N_{Mn} ионов Mn (в GaAs $1\,МС = 6.3 \cdot 10^{14}$ см$^{-2}$). В силу δ-легирования акцепторными слоями δ-$\langle$Mn$\rangle$ и δ-$\langle$C$\rangle$ в таких структурах КЯ содержит 2D-дырочный газ с высокой концентрацией $\sim 10^{12}$ см$^{-2}$ [16, 19]. В структуре # 1 слоевая концентрация дырок $p_S \approx 7 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ и их холловская подвижность $\mu \approx 3000$ см^2/В $\cdot$ с при $T = 5$ К. Отметим, что в структурах InGaAs/GaAs без ФМ слоев δ-$\langle$Mn$\rangle$ подвижность дырок в КЯ на порядок выше [20]. Для сравнения методом ОДЦР исследовалась также структура # 2 (ростовой номер 5170) с КЯ $In_xGa_{1-x}As$/GaAs/δ-$\langle$Mn$\rangle$ ($x = 0.1$, $d_S = 10$ нм), выращенная на легированной подложке n^+-GaAs (001) ($\sim 10^{17}$ см$^{-3}$) и тонком буферном слое i-GaAs ~ 3 нм (рис. 1b). В силу легирования подложки в диодных структурах невозможны транспортные измерения в

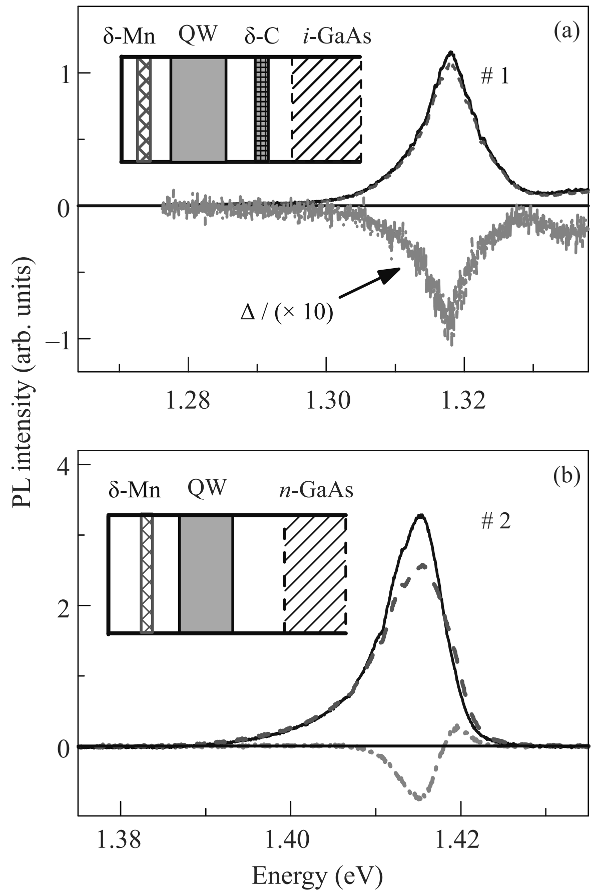


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры ФЛ для КЯ InGaAs/GaAs/δ-$\langle$Mn$\rangle$ без подсветки (сплошная черная линия) и при подсветке ИК лазером 118.8 мкм (красная пунктирная линия), и их разностный спектр $\Delta I(E)$ (зеленая штрих-пунктирная линия): (a) – в структуре # 1 при $B = 3.6$ Тл и (b) – в структуре # 2 при $B = 1.8$ Тл при $T \approx 2.4$ К. Для каждой структуры выбрано резонансное магнитное поле B_{max}

плоскости и прямое определение плотности и типа носителей (n- или p-тип) в КЯ.

Для эксперимента использовалась ИК линия $\lambda = 118.8$ мкм ($E_L = 10.43$ мэВ, $\omega = 1.60 \cdot 10^{13}$ Гц) газового лазера с CO_2 накачкой. ИК излучение подводилось к образцу в криостате с жидким гелием под откачкой ($T \approx 2.4$ К) сверху по стальной трубе и фокусировалось тефлоновой линзой, с плотностью мощности лазера $P_L \sim 10$ мВт/см^2. Для возбуждения ФЛ служил непрерывный полупроводниковый лазер с $\lambda = 785$ нм ($E_L = 1.58$ эВ, $P_L \sim 10$ мВт/см^2). Возбуждение и сбор ФЛ осуществлялось с помощью двух световодов диаметром 200 мкм и регистрировалось на монохроматоре с базой 0.55 м и охлаждаемой азотом CCD-камере. Особое внимание было уделено совпадению на образце пятен оптического и зондирующего ИК излучений, для чего перед образцом ставилась диафрагма диаметром 1 мм. Магнитное поле $B = 0{-}10$ Тл создавалось сверхпроводящим соленоидом и прикладывалось в геометрии Фарадея (вдоль оси роста структур, по нормали к поверхности образцов). Пластинка $\lambda/4$ и линейный поляризатор перед образцом обеспечивали измерение циркулярно-поляризованной (σ^+ или σ^-) ФЛ при развертке поля обоих знаков.

Магнитные и магнитооптические свойства структур со слоем δ-$\langle$Mn$\rangle$ ранее были изучены посредством магнито-оптического эффекта Керра [17] и на СКВИД-магнитометре [18], которые подтвердили ФМ характер этих структур с температурой Кюри $T_C \sim 30{-}35$ К. Исследования поверхности и структуры магнитного потока методом магнитно-силовой микроскопии (МСМ) проводились с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) AttoCube AttoDry 1000. АСМ/МСМ измерения проводили в атмосфере обменного газа (гелия) при давлении $P \sim$ ~ 0.5 мбар в диапазоне температур от 4 до 50 К с высокой точностью (~ 0.1 К). В качестве зондов применялись кремниевые магнитные кантилеверы фирмы Bruker марки MESP, покрытые слоем CoCr. Исследование топографии поверхности проходило в полуконтактном режиме, а структуры магнитного потока в режиме МСМ с выключенной обратной связью на высоте ~ 110 нм над поверхностью образца. Для получения МСМ изображений измеряли сдвиг фазы колебаний магнитного кантилевера.

Пространственное разделение КЯ и δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя позволяет не только предотвратить гашение межзонной люминесценции в КЯ дефектами, связанными с Mn, но и существенно, почти на три порядка повысить подвижность дырок в КЯ, так как $u <$ $< 10\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ в твердых растворах $Ga_{1-x}Mn_xAs$ [21]. При этом взаимодействие носителей заряда в КЯ с ФМ δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоем сохраняется, что подтверждается не только проявлением аномального эффекта Холла в этих структурах [16], но и наличием резкой магнитополевой зависимости степени циркулярной поляризации $P_C(B)$ для основного оптического перехода в КЯ: в малых полях $B < 0.3$ Тл происходит быстрый рост $P_C(B)$, сменяющийся значительно более медленным ростом в высоких полях (рис. 2a). Такой быстрый рост $P_C(B)$ характерен именно для изучаемых структур и полностью отсутствует в контрольных образцах без слоя δ-$\langle$Mn$\rangle$ [15, 19]. Более того, в структурах с δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоем в экспериментах с импульсным возбуждением был обнаружен динамический характер возникновения циркулярной поляризации $P_C(t)$ перехода в КЯ [17]: величина поляризации $P_C(t)$ в структуре #1 практически линейно нарастает со временем после возбуждения КЯ линейно-поляризованным лазером с энергией $E_L = 1.503$ эВ ниже барьера GaAs (рис. 2b). Механизмы такого поведения в настоящее время активно обсуждаются.

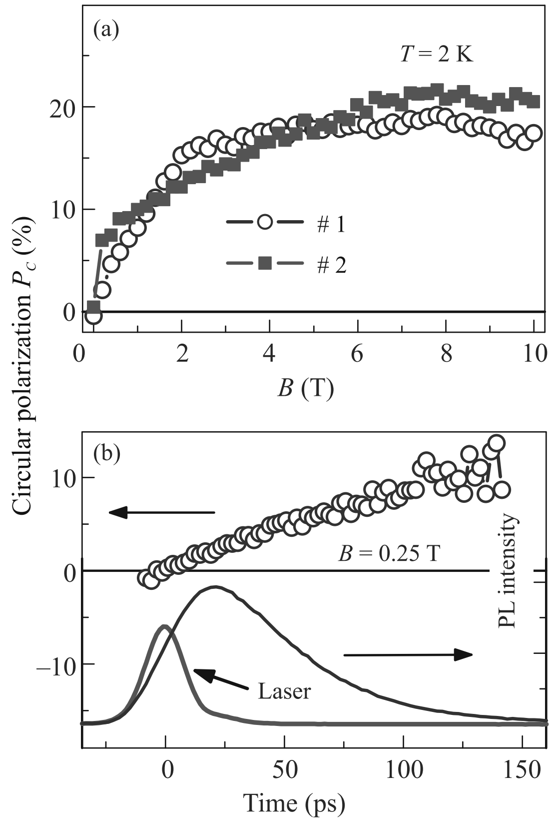


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости степени циркулярной поляризации $P_C(B)$ для основного оптического перехода в КЯ при возбуждении стационарным cw лазером $E_L = 1.580$ эВ и $T \approx 2.4$ К. (b) – Импульс ФЛ основного перехода в КЯ и ее циркулярная поляризация $P_C(t)$ в структуре #1 после возбуждения импульсным линейно-поляризованным лазером ($E_L = 1.503$ эВ, $B = 250$ мТл, $T \approx 6$ К)

Для детального изучения 2D дырочной системы методом ЦР необходимо исследование в широком диапазоне циклотронной частоты ω и магнитных полей, что налагает высокие требования к качеству структур и требует высокой подвижности дырок [22, 23]. Используя квазиклассическую оценку холловской подвижности $\mu \approx e\tau/m_h$ [4], можно оценить время релаксации импульса носителей τ в изучаемой структуре #1 с $\mu \sim 3000\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ (при $T = 5$ К) как $\tau \sim 0.3$ пс, что сравнимо с $\tau \sim 0.7$ пс в КЯ $Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP$ шириной 10 нм [24]. В оценке использовалась масса тяжелой дырки в плоскости КЯ $m_h \approx 0.22 m_0$ (здесь и далее m_0 – масса свободного электрона), полученная при исследовании электролюминесценции в магнитном поле в диодных структурах n-типа с КЯ $In_{0.16}Ga_{0.84}As/GaAs$ [25]. Для выполнения условия $\omega \cdot \tau > 1$, необходимого для достоверных исследований ОДЦР в структурах InGaAs/GaAs/δ-$\langle$Mn$\rangle$, обладающих невысокой подвижностью в 2D-дырочном канале, необходимо использовать частоты $\omega \geq 10^{13}$ Гц, отвечающие дальнему ИК диапазону. Для газового ИК лазера с линией $\lambda = 118.8$ мкм ($\omega = 1.6 \cdot 10^{13}$ Гц) получаем $\omega \cdot \tau \sim 5$, что удовлетворяет требуемому критерию.

На рисунке 1 показаны спектры ФЛ для структуры # 1, выращенной на изолирующей подложке i-GaAs (рис. 1a), и структуры # 2 на подложке n-GaAs (рис. 1b) без подсветки $I(E)$ и при ИК подсветке $I_{CR}(E)$. Также показаны разностные спектры $\Delta I(E) = I_{CR}(E) - I(E)$ (зеленая штриховая линия), записанные в резонансном для каждой структуры поле (см. рис. 3). Большая спектральная полуширина линии излучения КЯ (> 10 мэВ) связана с существенной неоднородностью состава, строения и высокой концентрацией заряженных и нейтральных примесей, характерных для изучаемых структур с δ-слоями углерода и марганца и используемой технологии роста МОСГЭ [16]. Видно, что в случае с 2D-дырочным газом (# 1) поглощение ИК излучения приводит к уменьшению интенсивности по всей полосе КЯ, аналогично КЯ p-типа GaAs/AlGaAs [9], где такое поведение связывалось с резонансным нагревом дырок в результате поглощение ИК излучения. В светодиодной структуре # 2 ИК подсветка приводит к более сложному перераспределению интенсивности ФЛ: ее уменьшению ($\Delta I(E) < 0$) возле максимума полосы излучения КЯ и усилению ($\Delta I(E) > 0$) на фиолетовом краю (см. рис. 1b). Аналогичные проявления ОДЦР с изменением знака $\Delta I(E)$ наблюдались в недопированных КЯ GaAs/AlGaAs [26], что объяснялось разогревом фотовозбужденных электронов с последующим перераспределением образующихся экситонов между локализованными и делокализованными состояниями в пределах неоднородно уширенной полосы излучения КЯ.

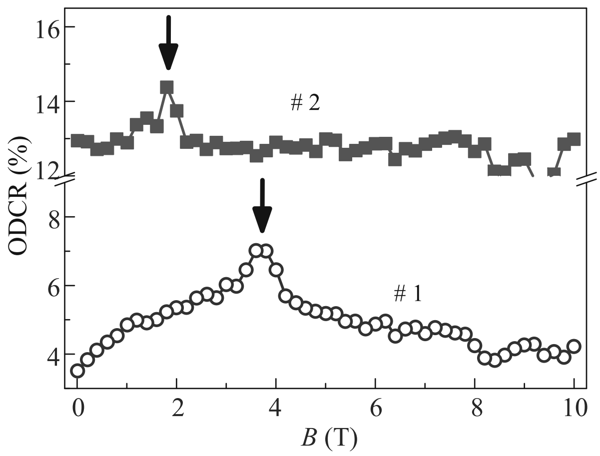


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости от магнитного поля нормированной (в %) величины ODCR(B) – интегральной интенсивности разностного спектра КЯ (см. текст) для обеих структур при $T \approx 2.4$ K. Стрелками отмечены максимумы зависимостей

Для количественной оценки эффекта ОДЦР при поглощении носителями ИК излучения в магнитном поле B брался интеграл модуля разностного спектра ФЛ, нормированный на интегральную интенсивность КЯ $\int I(E)dE$: $\mathrm{ODCR}(B) = \int |\Delta I(E)|dE / \int I(E)dE$. Интегрирование производилось в спектральном диапазоне излучения КЯ: 1.30–1.33 эВ для структуры # 1 и 1.395–1.43 эВ для # 2 (см. рис. 1). Полученные таким образом зависимости ODCR(B) представлены на рис. 3. Они демонстрирует слабо выраженные максимумы при $B_{\max} \approx 3.7$ Тл и $B_{\max} \approx 1.8$ Тл в структурах # 1 и # 2, соответственно. Из квазиклассического соотношения для циклотронной энергии $E_{\mathrm{FIR}} = \hbar e B_{\max}/m^*$ [4] можно оценить циклотронную массу m^* в плоскости КЯ для носителей, отвечающих за ОДЦР. Так, $m^* \approx 0.042 m_0$ в структуре # 1 и $m^* \approx 0.020 m_0$ в диодной структуре # 2. Кроме того, из рис. 3 видно, что в обеих структурах максимумы наблюдаются в условиях значительного, практически бесструктурного фона, который обычно связывается с нерезонансным разогревом носителей [4].

При обсуждении полученных результатов отметим, что энергетический спектр дырок в изучаемых структурах на изолирующей подложке имеет 2D характер, следовательно, масса дырок сильно анизотропна. Это подтверждается наблюдением осцилляций Шубникова–де Гааза в поле, перпендикулярном плоскости КЯ, и их отсутствием в продольной геометрии [16]. Известно, что наиболее надежным методом измерения планарной массы является циклотронный резонанс в низкочастотном, МВ диапазоне [4, 9], поскольку при исследовании в дальней ИК области эффекты непараболичности в КЯ с большой концентрацией дырок вносят существенный вклад в измеряемую величину m^*. Так, детальные исследования ОДЦР в КЯ p-типа GaAs/AlGaAs [22, 23] показали, что при переходе из МВ в ИК диапазон с ростом энергии возбуждения и, соответственно, с ростом резонансного поля $B_{\max}$, в эксперименте наблюдался рост циклотронной массы дырок $m^* = \hbar e B_{\max}/E_{\text{FIR}}$ от $m^* \approx 0.15\,m_0$ до $m^* \approx 0.4 m_0$, что хорошо воспроизводилось в расчетах уровней Ландау в КЯ. При этом рост m^* с полем $B_{\max}$ происходит как при низкой концентрации дырок $p_S = (3{-}6)\cdot 10^{10}\,\text{см}^{-2}$ [22], так и при высоких $p_S = (0.7{-}1.6)\cdot 10^{11}\,\text{см}^{-2}$ [23].

Интересно сравнить величину m^*, полученную в данном исследовании, со значениями планарной массы дырок m^*, полученными другими методами. Такое сравнение показывает, что найденные значения m^* существенно меньше значений для структур InGaAs/GaAs, известных авторам из литературы [27–30]. Кроме того, величина $m^* = 0.042\,m_0$ для $\#\,1$ также заметно меньше массы электрона $m_e \approx$ $\approx 0.055 m_0$ в тройном соединении $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As}$ слоя КЯ этой структуры, полученной из концентрационной зависимости $m_e(x)$ в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [31], что ставит под сомнение также электронную природу наблюдаемого резонанса. Аналогично, масса $m^* \approx 0.02 m_0$ в $\#\,2$ также значительно меньше массы электрона $m_e \approx 0.062 m_0$ для слоя КЯ ($\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$) в этой структуре. Для сравнения еще сделаем оценку резонансного поля $B_{\max} = m^* E_{\text{FIR}}/(\hbar e)$ при известных из литературы значений m^* в сходных структурах и $E_{\text{FIR}} = 10.4$ мэВ: (i) $B_{\max} = 19.8$ Тл для дырок с $m^* = 0.22 m_0$ в диодах $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As/GaAs}$ [25], (ii) $B_{\max} = 15.3$ Тл для дырок с $m^* = 0.17 m_0$ в КЯ $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As/GaAs}$ при близких $p_S \sim 7\cdot 10^{11}\,\text{см}^{-2}$ [30] и (iii) $B_{\max} \approx 4.9$ Тл для электронов с $m_e = 0.055 m_0$ в КЯ $\text{In}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{As/GaAs}$ [31], что во всех случаях больше значений $B_{\max} \approx 3.7$ Тл в структуре $\#\,1$ и $B_{\max} \approx 1.8$ Тл в структуре $\#\,2$.

Для понимания такого несоответствия найденных в эксперименте номинальных значений циклотронной массы m^* и оцениваемых значений поля $B_{\max}$ и литературных данных для структур InGaAs/GaAs, необходимо рассмотреть возможные факторы, приводящие к сдвигу (уменьшению) $B_{\max}$. В этой связи нам представляются важными результаты детальных исследований размерного магнитоплазменного резонанса в легированных 2D структурах (см. работы [7–10] и ссылки там). Эти исследования в высококачественных структурах GaAs/AlGaAs с высокой подвижностью носителей (выше $2\cdot 10^5\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$) как n-типа, так и p-типа, показали, что к уменьшению $B_{\max}$ при фиксированной частоте МВ возбуждения приводит ограничение (уменьшение) размеров образцов. Такое пространственное ограничение области движения носителей в 2D структуре путем вытравливания круглых мез приводит к смешиванию их плазменной и циклотронной мод и зависимости частот верхней и нижней ветвей $\omega_\pm$ возникающего магнитоплазменного резонанса от размера d (диаметра) круглой мезы [8, 9]:

$$\omega_\pm = \pm\frac{\omega_{CR}}{2} + \sqrt{\omega_P^2 + \left(\frac{\omega_{CR}}{2}\right)^2}, \qquad (1)$$

где $\omega_{CR} = eB/m^*$ – циклотронная частота в поле B, а ω_P – плазменная частота 2D-носителей (в данном случае, дырок) с концентрацией p_S:

$$\omega_P^2 = \frac{p_S e^2}{2m^*\varepsilon_0\varepsilon(q)}q. \qquad (2)$$

Здесь $q = 2.4/d$ – волновой вектор плазменного возбуждения, ε_0 – электрическая постоянная и $\varepsilon(q)$ – эффективная диэлектрическая проницаемость среды. В отсутствие экранировки затвором $\varepsilon(q) = (\varepsilon +$ $+1)/2$ есть полусумма диэлектрических проницаемостей вакуума ($\varepsilon = 1$) и GaAs ($\varepsilon = 12.8$). В пределе сильного магнитного поля или большой мезы $d \to \infty$ ветвь ω_+ стремится к $\omega_{CR} = eB/m$ – частоте ЦР для бесконечной КЯ. Вторая магнитоплазменная ветвь ω_- носит краевой характер и в пределе больших магнитных полей отвечает возбуждениям, распространяющимся вдоль края 2D-системы [8]. При уменьшении диаметра мезы плазменная частота ω_P увеличивается как $d^{-1/2}$, что в эксперименте приводит к смещению максимума $B_{\max}$ верхней ветви резонансного поглощения ω_+ в область более низких полей относительно резонансного поля $B_{CR} = m^* E_{\text{FIR}}/(\hbar e)$ для бесконечной КЯ без мезы:

$$B_{\max} = B_{CR} - \omega_p^2 m^*/(e\omega) = B_{CR} - \text{const}/d. \qquad (3)$$

Именно такая функциональная зависимость от диаметра мезы d наблюдалась в работе [9]. Таким образом, фактор пространственного ограничения приводит к смешиванию плазменной и циклотронной мод и, как следствие, к зависимости энергии и магнитного поля резонанса от размера 2D-структуры. В силу соотношения (1) также становится неприменимым вычисление циклотронной массы в таких структурах, как $m^* = \hbar e B_{\max}/E_{\text{FIR}}$.

Применительно к изучаемым магнитным структурам с ФМ δ-$\langle\text{Mn}\rangle$-слоем ограничение области циклотронного движения носителей может быть обусловлено мезоскопическим расслоением КЯ, т.е. ее разбиением на малые субмикронные участки, вызванное сильным беспорядком. Так, в этих структурах эксперимент одновременно показывает не только проявление квантовых эффектов, присущих высококачественным 2D образцам, но также и наличие активационной проводимости и гигантского отрицательного магнетосопротивления, обусловленного спин-зависящими эффектами и магнитным беспорядком (см. работу Аронзона и др. [16, 32] и ссылки там). В этом цикле работ из детального комплексного анализа транспортных и магнитных данных был сделан вывод о специфическом расслоении образцов с δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоем в плоскости – в них происходит разбиение КЯ на участки, содержащие вырожденный 2D дырочный газ. Эти участки КЯ с характерным размером ≥ 100 нм, существенно превышающем длину свободного пробега дырок $l \sim 20$ нм, разделены узкими непроводящими (квази-диэлектрическими) слоями с характерной толщиной ~ 10 нм [16]. Причиной возникновения такого беспорядка в изучаемых структурах являются особенности строения δ-слоя: вследствие сильной диффузии Mn в GaAs выращиваемый δ-$\langle$Mn$\rangle$-слой фактически представляет собой ультратонкий слой (~ 2–3 нм) твердого раствора $Ga_{1-x}Mn_xAs$ с высокой концентрацией марганца 2–6 ат.% [16]. В матрице GaAs атомы Mn, находящиеся в узлах Ga (Mn_{Ga}), выступают не только как локальные магнитные моменты, но также и в качестве акцепторной примеси. Это приводит к появлению в структуре дырок, взаимодействие которых с электронами d-оболочки Mn и является физической причиной возникновения ферромагнетизма в твердом растворе GaMnAs [11]. Кроме того, атомы Mn в матрице GaAs способны занимать не только акцепторные позиции Mn_{Ga}, но также и дефектные, междоузельные позиции Mn_I, где они выступают в качестве двойных доноров, что приводит к существенной самокомпенсации δ-слоя Mn [11]. Общая концентрация заряженных атомов Mn в δ-слое $N_{Mn} \geq 6 \cdot 10^{13}$ см$^{-2}$ при $Q_{Mn} \sim 0.3$ МС [21] существенно превышает концентрацию дырок в КЯ $p_S \leq 4 \cdot 10^{12}$ см$^{-2}$, которые в этом случае не могут полностью экранировать случайные флуктуации распределения заряженных дефектов, что приводит к дальнодействующему флуктуационному потенциалу в плоскости КЯ. Этот потенциал имеет пространственный масштаб R_C, с характерной длиной неэкранируемых флуктуаций, лежащей в диапазоне от минимальной длины $R_{\min} \sim \sim d_S$ до максимальной $R_{\max} \approx N_{Mn}^{1/2}/p_S$ [16], при этом флуктуации потенциала с масштабом больше $R_{\max}$ эффективно экранируются носителями (дырками) в 2D-канале. Подставляя характерные значения N_{Mn} и p_S, получаем оценку $R_{\max} \sim 100-200$ нм. Оценки амплитуды флуктуационного потенциала γ дают величину $\gamma \sim 10$ мэВ [16], что превышает энергию Ферми при типичных концентрациях дырок. Таким образом, присутствие близкого встроенного δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя высокой плотности, характеризующегося также высокой степенью самокомпенсации доноров и акцепторов, приводит к возникновению в плоскости КЯ сильного флуктуационного кулоновского потенциала для носителей [16]. Важной особенностью рассматриваемой модели является также предположение о наличии резких пространственных изменений концентрации Mn в δ-$\langle$Mn$\rangle$-слое, а также в окружающих его спейсере и покровном слое, и связанной с этим сильной неоднородности их кристаллической и магнитной структур. Согласно этой модели, в области расположения δ-слоя Mn формируется квази-2D магнитная фаза в форме отдельных субмикронных ФМ островков твердого раствора $Ga_{1-x}Mn_xAs$ с высоким содержанием Mn ($x \sim 0.05-0.1$) [32], характеризующаяся сильными флуктуациями распределения заряженных дефектов Mn_{Ga} и Mn_I. При этом дырки в КЯ локализованы в потенциальных ямах, образованных крупномасштабными флуктуациями кулоновского потенциала этих “островков”, т.е. флуктуационный потенциал в КЯ коррелирует с расслоившимся ФМ δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоем в силу специфики природы ферромагнетизма в полупроводнике $Ga_{1-x}Mn_xAs$, в котором носители (дырки) являются также медиатором обменной связи ионов Mn [11].

Мезоскопическое разделение КЯ на субмикронные области масштабом ≥ 100 нм и более, ранее предполагаемое из анализа магнитотранспортных данных [16], действительно наблюдалось нами методом низкотемпературной магнитно-силовой микроскопии ниже температуры Кюри δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя $T_C \sim 35$ K. На рисунке 4 отображены результаты АСМ/МСМ исследований при низкой температуре $T = 4.7$ K. Рисунок 4a демонстрирует рельеф исследуемой области структуры $\#2$ размером 1×1 мкм в режиме АСМ. Высота неоднородностей рельефа составляет $1-2$ нм. На рисунке 4b и c представлено распределение магнитного потока над поверхностью структуры, показанной на рис. 4a, в полях $B = 0$ и $B = 50$ мТл, соответственно. Из рисунка 4 видно, что контраст фазы колебаний магнитного кантилевера имеет характерный масштаб ~ 100–200 нм и при этом определенным образом коррелирует с рельефом. Такая структура магнитного потока характерна для всего исследованного образца ниже его температуры Кюри $T_C \sim 35$ K и исчезает после отогрева выше T_C. Наблюдаемый знакопеременный контраст фазы связывается со специфической доменной структурой, присущей исследуемой структуре, и отражает существенную магнитную неоднородность ФМ δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя.

На наш взгляд, именно сильное ограничение эффективной площади активных участков КЯ и приводит к смешанному магнитоплазменному резонансу вырожденных 2D-дырок во внешнем поле на таких мезоскопически малых участках КЯ размером $d \sim 100-200$ нм в условиях ее специфического фа-

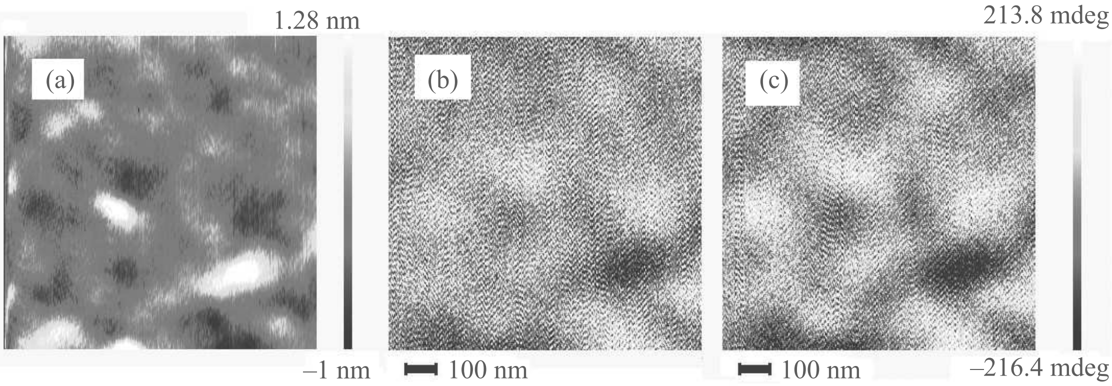


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Рельеф области структуры # 2 размером 1×1 мкм в режиме АСМ. Структура магнитного потока (режим МСМ) в поле, перпендикулярном плоскости КЯ: (b) – $B = 0$ Тл и (c) – $B = 50$ мТл. Температура $T = 4.7$ K

зового расслоения. Для определенности сделаем количественную оценку энергии смешанной магнитоплазменной моды $\hbar\omega_+$ (знак "+" в формуле (1), отвечающей классическому ЦР в пределе больших полей. Оценки плазменной энергии $\hbar\omega_P$ по формуле (2) для круглой мезы $d = 100$ нм в структуре # 1 с $p_S \sim 7 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ и циклотронной энергии $\hbar\omega_{CR} = \hbar eB/m^*$ дают $\hbar\omega_P \approx 9.2$ мэВ и $\hbar\omega_{CR} \approx 2.2$ мэВ. В оценке использовалась масса дырки $m^* = 0.22m_0$, полученная из магнитолюминесценции в светодиодах с КЯ $\mathrm{In_{0.16}Ga_{0.84}As/GaAs}$ [25]. Для магнитоплазменной моды получим $\hbar\omega_+ \approx 10.3$ мэВ, что близко к энергии ИК лазера $E_{\mathrm{FIR}} = 10.4$ мэВ и, по-видимому, является случайным совпадением, учитывая наличие значительного разброса параметров в разных структурах, и прежде всего массы m^*. Тем не менее, на наш взгляд, близость оценки энергий $\hbar\omega_+$ и E_{FIR} служит аргументом в пользу предложенной интерпретации нетипичного проявления ЦР в изученных ФМ гетероструктурах. Зависимость $B_{\max}$ от диаметра мезы (формула (3)) позволяет также объяснить сдвиг $B_{\max}$ в область меньших полей относительно данной выше оценки $B_{CR} = m^*E_{\mathrm{FIR}}/(\hbar e) = 19.8$ Тл резонансного поля для классического ЦР дырок с $m^* = 0.22m_0$: $B_{\max} = B_{CR} - \omega_P^2 m^*/(e\omega) \approx 6.1$ (Тл), что хоть и больше, но все же лучше соответствует экспериментальному значению $B_{\max} \approx 3.7$ Тл для структуры # 1. Также, возможно, требуется уточнение теории смешанного магнитоплазменного резонанса для субмикронных образцов.

При уменьшении магнитного поля вследствие увеличения циклотронного радиуса носителей r_c масштаб неэкранируемых флуктуаций потенциала $R_{\max} \sim 100{-}200$ нм может стать меньше r_c, что может привести к нарушению закона сохранения волнового вектора при излучении/поглощении фотонов в 2D структурах [33]. В этой связи будет полезно привести оценку для циклотронного радиуса уровня Ландау, ближайшего к уровню Ферми [33]:

$$r_C = \sqrt{2\pi n_{2D}}\left(\frac{\hbar c}{eB}\right). \tag{4}$$

Для структуры # 1 с $n_{\mathrm{2D}} = p_S \sim 7 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ получим $r_c(B_{\max}) \sim 32$ нм, т.е. в довольно широком диапазоне полей вблизи $B_{\max}$ выполняется соотношение $r_c < R_{\max}$, что согласуется с нашей моделью смешанного магнитоплазменного резонанса вырожденных 2D-дырок на мезоскопически малых участках КЯ.

Что касается диодной структуры # 2, в которой невозможно определить концентрацию носителей стандартными методами и оценить ω_P, для нее следует сделать важное замечание: наличие легированной подложки n^+-GaAs ($n \sim 10^{17}$ см$^{-3}$), отделенной от КЯ тонким слоем i-GaAs толщиной $a = 3$ нм ($a \ll d$), приводит к экранировке носителей в КЯ [8]. В результате изменяется эффективный волновой вектор $q \approx 3.7/d$, $\varepsilon(q)$ задается выражением $\varepsilon(q) = (1+\varepsilon\coth(qa))/2$, а спектр 2D-плазмонов $\omega_P(q)$ приобретает линейный характер [8]:

$$\omega_P = \sqrt{\frac{n_{\mathrm{2D}}e^2 a}{m^*\varepsilon_0\varepsilon(q)}}\,q, \tag{5}$$

что меньше плазменной частоты ω_P для неэкранированного случая на фактор $f \sim a/d \ll 1$. В этом случае $\omega_P \ll \omega_{CR}$ и ограничение области движения носителей не приводит к заметной перенормировке (усилению) энергии магнитоплазменного возбуждения $\hbar\omega_+$ в формуле (1), а резонанс $\hbar\omega_+ \approx \hbar\omega_{CR} = E_{\mathrm{FIR}}$ для типичных значений дырочных масс потребует больших полей $B_{\max} > 10$ Тл. В то же время наблюдаемый пик при $B_{\max} \approx 1.8$ Тл совпадает с данными по ОДЦР для линии $1s \to 2p^+$ нейтрального донора D^0 в n-допированных КЯ GaAs/AlGaAs при ИК лазере с $\lambda = 118.8$ мкм [34]. В нашем случае эти доноры D^0 находятся в легированной подложке и в силу ее близости к КЯ, по-видимому, происходит заметный перенос фотовозбужденных носителей из подложки в КЯ, что в итоге и приводит к ОДЦР в люминесценции КЯ.

Таким образом, при исследовании структур с КЯ InGaAs/GaAs/δ-$\langle$Mn$\rangle$ методом ОДЦР в ИК области (линия лазера $\lambda = 118.8$ мкм) было обнаружено, что максимум ОДЦР существенно сдвинут в область низких магнитных полей, значительно ниже оцениваемого для характерных значений электронной или дырочной циклотронных масс в системе InGaAs/GaAs. Такое нетипичное для обычных (немагнитных) гетероструктур с КЯ InGaAs/GaAs проявление ОДЦР можно объяснить как проявление смешанного магнитоплазменного циклотронного резонанса вырожденных 2D-дырок на мезоскопически малых участках КЯ высокого качества, возникающих в результате фазового расслоения близлежащего акцепторного δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя с высокой концентрацией атомов марганца. Именно особый дизайн структуры, имеющей в своем составе ФМ δ-$\langle$Mn$\rangle$-слой высокой концентрации, склонный к расслоению и самокомпенсации, и приводит к возникновению аномально сильного флуктуационного кулоновского потенциала для носителей в плоскости КЯ. Такое разделение КЯ на субмикронные области размером ~ 100–200 нм, ранее предполагаемое из анализа магнитотранспортных измерений [16], было продемонстрировано методом низкотемпературной магнитно-силовой микроскопии ниже температуры Кюри δ-$\langle$Mn$\rangle$-слоя. Также найдено, что резонансное поле сильно отличается в структуре, выращенной на изолирующей подложке i-GaAs, и в структуре на подложке n-GaAs, что связывается с экранировкой 2D-плазмонов во втором случае. В результате в светодиодной структуре в исследуемом диапазоне полей (< 10 Тл) наблюдается только линия ОДЦР, отвечающие переходу $1s \to 2p^+$ на донорах D^0 легированной подложке.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

Авторы благодарят Д. Р. Яковлева за помощь в проведении экспериментов по ОДЦР, а также М. В. Дорохина и Б. Н. Звонкова за предоставленные образцы.

---

1. F. Stern, Phys. Rev. Lett. **18**, 546 (1967).
2. S. J. Allen, Jr., D. C. Tsui, and R. A. Logan, Phys. Rev. Lett. **38**, 980 (1977).
3. С. И. Губарев, А. А. Дремин, К. фон Клитцинг, И. В. Кукушкин, А. В. Малявкин, М. Г. Тяжлов, Письма в ЖЭТФ **54**, 361 (1991).
4. N. Miura, *Physics of Semiconductors in High Magnetic Fields*, Oxford University Press Inc., N.Y. (2008).
5. M. I. Dyakonov and M. S. Shur, IEEE Trans. Electron Devices **43**, 380 (1996).
6. X.-C. Zhang and J. Xu, *Introduction to THz Wave Photonics*, Springer, London (2010).
7. I. V. Andreev, V. M. Muravev, V. N. Belyanin, and I. V. Kukushkin, Appl. Phys. Lett. **105**, 202106 (2014).
8. С. И. Губарев, В. М. Муравьев, И. В. Андреев, В. Н. Белянин, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **102**, 517 (2015).
9. М. Ю. Акимов, И. В. Кукушкин, С. И. Губарев, С. В. Товстоног, И. Смет, К. фон Клитцинг, В. Векшейдер, Письма в ЖЭТФ **72**, 662 (2000).
10. М. Н. Ханнанов, И. В. Кукушкин, С. И. Губарев, Ю. Смет, К. фон Клитцинг, В. Векшейдер, С. Герл, Письма в ЖЭТФ **85**, 294 (2007).
11. T. Dietl and H. Ohno, Rev. Mod. Phys. **86**, 187 (2014).
12. Б. П. Захарченя, В. Л. Коренев, УФН **175**, 629 (2005).
13. Y. H. Matsuda, H. Arimoto, N. Miura, A. Twardowski, H. Ohno, A. Shen, and F. Matsukura, Physica B **256–258**, 565 (1998).
14. R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, Phys. Rev. B **69**, 161305(R) (2004).
15. С. В. Зайцев, М. В. Дорохин, А. С. Бричкин, О. В. Вихрова, Ю. А. Данилов, Б. Н. Звонков, В. Д. Кулаковский, Письма в ЖЭТФ **90**, 730 (2009).
16. М. А. Панков, Б. А. Аронзон, В. В. Рыльков, А. Б. Давыдов, Е. З. Мейлихов, Р. М. Фарзетдинова, Э. М. Пашаев, М. А. Чуев, И. А. Субботин, И. А. Лихачев, Б. Н. Звонков, А. В. Лашкул, Р. Лайхо, ЖЭТФ **136**, 346 (2009).
17. V. L. Korenev, I. A. Akimov, S. V. Zaitsev, V. F. Sapega, L. Langer, D. R. Yakovlev, Yu. A. Danilov, and M. Bayer, Nat. Commun. **3**, 959 (2012).
18. А. И. Дмитриев, А. Д. Таланцев, С. В. Зайцев, Ю. А. Данилов, М. В. Дорохин, Б. Н. Звонков, О. В. Коплак, Р. Б. Моргунов, ЖЭТФ **140**, 158 (2011).
19. С. В. Зайцев, ФНТ **38**, 513 (2012).
20. I. J. Fritz, T. J. Drummond, G. C. Osbourn, J. E. Schirber, and E. D. Jones, Appl. Phys. Lett. **48**, 1678 (1986).
21. О. В. Вихрова, Ю. А. Данилов, М. В. Дорохин, Б. Н. Звонков, И. Л. Калентьева, А. В. Кудрин, Письма в ЖТФ **35**, 8 (2009).
22. B. E. Cole, J. M. Chamberlain, M. Henini, T. Cheng, W. Batty, A. Wittlin, J. A. A. J. Perenboom, A. Ardavan, A. Polisski, and J. Singleton, Phys. Rev. B **55**, 2503 (1997).

23. K. Rachor, T. E. Raab, D. Heitmann, C. Gerl, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **79**, 125417 (2009).
24. C. Wetzel, Al. L. Efros, A. Moll, B. K. Meyer, P. Omling, and P. Sobkowicz, Phys. Rev. B **45**, 14052 (1992).
25. S. V. Zaitsev, M. V. Dorokhin, P. B. Demina, N. V. Baidus, E. A. Uskova, and B. N. Zvonkov, Phys. Status Solidi B **246**, 1132 (2009).
26. B. M. Ashkinadze, E. Cohen, A. Ron, and L. Pfeiffer, Phys. Rev. B **47**, 10613 (1993).
27. G. C. Osbourn, J. E. Schirber, T. J. Drummond, L. R. Dawson, B. L. Doyle, and I. J. Fritz, Appl. Phys. Lett. **49**, 731 (1986).
28. L. V. Butov, V. D. Kulakovskii, T. G. Andersson, and Z. G. Chen, Phys. Rev. B **42**, 9472 (1990).
29. O. Drachenko, D. V. Kozlov, V. Ya. Aleshkin, V. I. Gavrilenko, K. V. Maremyanin, A. V. Ikonnikov, B. N. Zvonkov, M. Goiran, J. Leotin, G. Fasching, S. Winnerl, H. Schneider, J. Wosnitza, and M. Helm, Phys. Rev. B **79**, 073301 (2009).
30. S. Y. Lin, H. P. Wei, D. C. Tsui, and J. F. Klem, Appl. Phys. Lett. **67**, 2170 (1995).
31. S. Adachi, *Physical Properties of III-Y Semiconductor compounds*, John Wiley and Sons, N.Y., Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore (1992).
32. Б. А. Аронзон, А. С. Лагутин, В. В. Рыльков, В. В. Тугушев, В. Н. Меньшов, А. В. Лейскул, Р. Лайхо, О. В. Вихрова, Ю. А. Данилов, Б. Н. Звонков, Письма в ЖЭТФ **87**, 192 (2008).
33. С. И. Дорожкин, УФН **175**, 213 (2005).
34. J. Kono, S. T. Lee, M. S. Salib, G. S. Herold, A. Petrou, and B. D. McCombe, Phys. Rev. B **52**, R8654 (1995).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 242 – 248

Энергия активации и механизмы коллапса скирмионов в синтетических антиферромагнетиках

К. В. Воронин, И. С. Лобанов, В. М. Уздин[1)]

Университет ИТМО, физический факультет, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 24 июня 2022 г.
После переработки 3 июля 2022 г.
Принята к публикации 4 июля 2022 г.

Механизмы коллапса скирмионных структур в синтетических антиферромагнетиках (САФ) и энергия активации таких процессов изучается в рамках теории переходного состояния на основе анализа многомерной энергетической поверхности системы и построения путей с минимальным перепадом энергии между соответствующими состояниями. САФ состоит из двух тонких ферромагнитных пленок, разделенных немагнитной металлической прослойкой, электроны проводимости которой обеспечивают антиферромагнитное межслойное обменное взаимодействие. Используется дискретная модель гейзенберговского типа, включающая симметричный и антисимметричный обмен в каждом слое, взаимодействие со внешним магнитным полем и указанное выше межслойное обменное взаимодействие. Воспроизведены наблюдаемые экспериментально магнитные структуры. Показано, что наиболее вероятный механизм коллапса скирмионных пар проходит через несимметричное состояние со скирмионом в одном слое. Рассчитана энергия активации для такого процесса. Она на 16 % меньше численных оценок на основе микромагнитного анзаца, но в 1.4 раза больше, чем для аннигиляции скирмиона того же размера в одном слое.

DOI: 10.31857/S123456782216008X, EDN: jhwtgz

1. Введение. Магнитные скирмионы представляют собой локализованные магнитные состояния, устойчивость которых относительно случайных внешних воздействий связывают с существованием топологического заряда, сохраняющегося при непрерывном изменении намагниченности [1]. Эти системы могут служить битами информации для нового поколения сверхплотной и быстрой магнитной памяти [2, 3]. Нелинейный динамический отклик скирмионнов на внешние воздействия позволяет рассматривать их в качестве возможных элементов нейроморфных устройств и искусственных нейронных сетей [4]. Однако, использование ферромагнитных (ФМ) материалов в качестве носителей скирмионных состояний встречает ряд трудностей, мешающих их практическому применению. Среди них относительно большой размер скирмионов, устойчивых при комнатной температуре [5], что уменьшает плотность хранения информации, наличие холловского угла при движении под действием спин-поляризованного тока [6] и полей размагничивания, усложняющих контроль динамики скирмионных состояний, архитектуру и дизайн беговой памяти.

Эти трудности в значительной степени можно обойти, если использовать антиферро- (АФ) [7] и ферримагнитные материалы [8, 9], в которых локализуются топологические хиральные структуры. Скирмионы размером вплоть до 10 нм, стабильные при комнатной температуре, были обнаружены экспериментально в ферримагнитных пленках Pt/GdFeCo [10] и Pt/GdCo [11]. Вблизи точки компенсации эти системы ведут себя, как скирмионы в АФ среде. Устойчивость и времена жизни ФМ и АФ скирмионных структур были исследованы в рамках теории переходного состояния в работе [12]. Размер скирмиона при увеличении внешнего магнитного поля в АФ материалах увеличивается, а в ФМ – уменьшается, если поле направлено противоположно намагниченности в центре скирмиона. Тем не менее между этими состояниями можно установить соответствие, при котором их энергетические поверхности и активационные барьеры для коллапса совпадут. Это позволяет делать выводы о временах жизни АФ скирмионов без дополнительных расчетов, зная соответствующие значения для ФМ аналогов.

Определенные трудности возникают при детектировании скирмионов в АФ материалах, поскольку магнитная структура в центре скирмиона и снару-

[1)]e-mail: v_uzdin@mail.ru

жи практически не различаются. С этой точки зрения большой интерес представляет концепция синтетических антиферромагнетиков (САФ), в которых удается формировать хиральные скирмионы и доменные стенки [13–15]. В этих системах хиральные топологические конфигурации, в частности, скирмионы, возникают в ферромагнитных пленках с АФ обменом через тонкую немагнитную прослойку. Скирмионы в пленках образуют связанные состояния и поля размагничивания от каждого из них в значительной степени компенсируют друг друга, как и в случае АФ среды. Поэтому даже для магнитных пленок, имеющих толщину в несколько нанометров, магнитостатическое взаимодействие, которое приводит к увеличению размеров топологических структур [16], можно не учитывать. В результате удается получить устойчивые скирмионные пары с характерным размером вплоть до 10 нм при комнатной температуре. Однако аккуратного расчета устойчивости таких структур относительно тепловых флуктуаций до сих пор не было проведено. Наиболее последовательный метод количественной оценки устойчивости магнитных состояний, включая энергию активации процессов перехода между ними, основан на теории переходного состояния для магнитных степеней свободы [17, 18]. Таким расчетам для скирмионов в САФ и анализу наиболее вероятного механизма их распада посвящена данная работа.

2. Дискретная модель и магнитные конфигурации. Для описания свойств связанных скирмионных состояний в САФ будем исследовать структуру, в которой эти состояния наблюдались экспериментально [14]. САФ состоит из двух магнитных слоев, разделенных немагнитной металлической прослойкой. Эффективное обменное взаимодействие между магнитными слоями, описываемое механизмом Рудемана–Киттеля–Касуи–Иосиды (РККИ), осциллирует с толщиной немагнитной прослойки. Эта толщина выбирается так, чтобы межслойное взаимодействие было АФ. В качестве магнитных слоев использовались пленки Co с тяжелым металлом (Pt) на интерфейсе, индуцирующим антисимметричный обмен Дзялошинского–Мории (ДМ) в магнитной подсистеме. Вместе с тем наличие интерфейса Pt/Co приводит к анизотропии "легкая ось" ортогональной плоскости пленки. Эта анизотропия, однако, компенсируется анизотропией "легкая плоскость" за счет магнитостатического взаимодействия, зависящего от толщины d магнитных слоев, при $d = 1.47$ нм.

Такая система может быть описана в решеточной модели с помощью гамильтониана гейзенберговского типа, включающего наряду с внутрислойным обменным взаимодействием и обменом ДМ межслойное взаимодействие РККИ:

$$E = -\sum_{n=1,2}\sum_{\langle i,j\rangle}(J\mathbf{S}_i^n\cdot\mathbf{S}_j^n+\mathbf{D}_{ij}\cdot[\mathbf{S}_i^n\times\mathbf{S}_j^n])-\sum_i J_{12}\mathbf{S}_i^1\cdot\mathbf{S}_i^2. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{S}_i^n$ – трехмерный вектор единичной длины, направленный вдоль магнитного момента на узле i в n-м слое САФ. Суммирование производится по парам $\langle i,j\rangle$ ближайших соседей. Параметры внутрислойного гейзенберговского обмена J и вектора ДМ $\mathbf{D}_{ij}$ ($\|\mathbf{D}_{ij}\| = D$) отличны от нуля только для моментов на соседних узлах и одинаковы в обоих слоях. Параметр межслойного обменного взаимодействия J_{12} связан со спиновой поляризацией электронов проводимости в немагнитной прослойке, индуцированной магнитными слоями. В простейшем приближении это взаимодействие имеет такой же локальный вид, как и гейзенберговский обмен. Можно рассмотреть более общую модель, когда магнитный момент взаимодействует не с конкретным моментом на ближайшим к нему узле второго слоя, а со средним магнитным моментом в некоторой области вокруг этого узла. Это, однако, не меняет качественной картины магнитных конфигураций.

Параметры дискретной модели были выбраны таким образом, чтобы соответствовать измеренным в эксперименте значениям и данным, используемым при микромагнитном моделировании [14, 19]. Представленные ниже расчеты были выполнены для квадратной и треугольной плоских решеток, соответствующих одной и той же непрерывной модели в предположении, что магнитное состояние однородно по толщине каждого магнитного слоя. Магнитные конфигурации и их энергетические характеристики практически одинаковы для обоих решеток. Поэтому будут приведены только результаты, полученные для квадратной решетки. В отсутствие анизотропии основное состояние магнитных слоев соответствует спиральной структуре, определяемой соотношением параметров обменного взаимодействия и взаимодействия ДМ. Наличие АФ межслойного взаимодействия приводит к антипараллельной корреляции направлений магнитных моментов в спиновых спиралях разных слоев. Соответствующие магнитные конфигурации при значениях параметров $J = 183$ мэВ, $D = 6.9$ мэВ, $J_{12} = 3.24$ мэВ показаны на рис. 1a, b. Расчет выполнен на сетке с шагом $a = 1.5$ нм размера 1000×1000 с периодическими граничными условиями. Период спиральной структуры на рис. 1a соответствует теоретической оценке $L = 2\pi aJ/D$.

Для того, чтобы получить локализованные в пространстве пары связанных скирмионных состояний

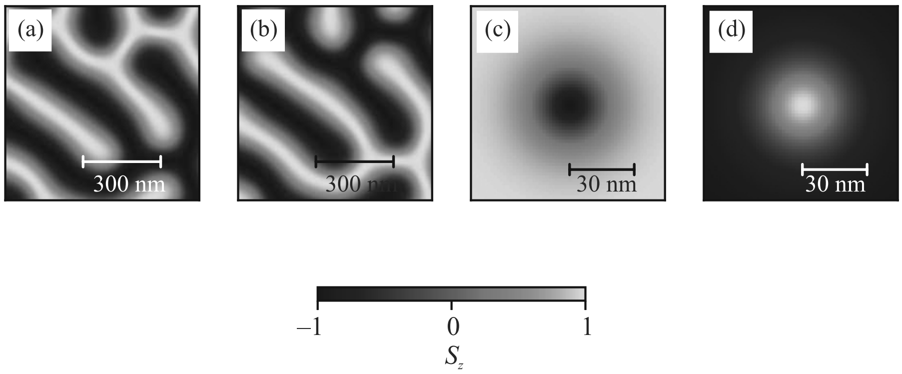


Рис. 1. (Цветной онлайн) Магнитные конфигурации в САФ. Цветом показана z-проекция вектора $\mathbf{S}$. (a) и (b) – Магнитные спирали в нижнем и верхнем слое в присутствии взаимодействия ДМ и АФ межслойного обмена. (c) и (d) – Скирмионы в нижнем и верхнем слое при АФ межслойном обмене и поле $H_b = 50$ мТл, индуцированным в нижнем слое дополнительными магнитными слоями за счет РККИ взаимодействия

в САФ, в систему дополнительно вводились магнитные слои $[\mathrm{Pt}(0.45\,\text{нм})/\mathrm{Co}(0.6\,\text{нм})]_4$ с сильной одноосной анизотропией, перпендикулярной плоскости пленки. Эти слои через прослойку Pt индуцировали эффективное магнитное поле $\mathbf{H}_b$ в ближайшем магнитном слое САФ $n = 1$. Будем называть этот слой "нижним" в соответствии с геометрией экспериментальных образцов [14]. Механизм возникновения этого поля, как и обмена J_{12}, связан с РККИ взаимодействием через электроны проводимости немагнитной прослойки. Однако толщина немагнитного слоя здесь выбрана так, чтобы сделать межслойный обмен ФМ. Таким образом, эффект близости дополнительного магнитного слоя сводится к добавке в энергию (1) слагаемого того же типа, что и внешнее магнитное поле, действующего только на нижний магнитный слой. Вместе со взаимодействием со внешним полем $\mathbf{H}_{\mathrm{ext}}$ полная энергия теперь записывается в виде

$$E_{\mathrm{SAF}} = E - \sum_i \mu\mu_0[(\mathbf{H}_b + \mathbf{H}_{\mathrm{ext}}) \cdot \mathbf{S}_i^1 + \mathbf{H}_{\mathrm{ext}} \cdot \mathbf{S}_i^2], \quad (2)$$

где μ – магнитный момент элемента.

На рисунке 1c, d показаны скирмионные состояния, возникающие в нижнем (c) и верхнем (d) слое при $\mu_0 H_b = 50$ мТл и $\mu = 430\mu_B$. Остальные параметры здесь выбраны такие же, как для системы на рис. 1a, b.

При изменении межслойного обменного взаимодействия J_{12} модифицируется структура скирмионных состояний в обоих магнитных слоях САФ, но в большей степени в верхнем. Величина и знак J_{12} зависит от толщины немагнитной прослойки. Толщину можно менять даже в пределах одного образца, сделав немагнитный слой в виде клина [20]. В этом случае можно ожидать формирования различных магнитных конфигураций при смещении в плоскости образца и трансформации магнитных структур при движении их под воздействием спин-поляризованного тока. Если начать с состояния, показанного на рис. 1c, d и уменьшать величину АФ связи, размер скирмиона в верхнем слое будет увеличиваться и при близком к нулю взаимодействии в этом слое восстановится спиральная магнитная структура, как на рис. 1b . Изменение знака J_{12} приведет к формированию в верхнем слое связанного скирмиона с моментами, сонаправленными с моментами в нижнем слое. При больших значениях $|J_{12}|$ размеры скирмионов в обоих слоях становятся практически одинаковыми.

Рассмотрим теперь эволюцию магнитной структуры при изменении внешнего поля $\mathbf{H}_{\mathrm{ext}}$. В однослойной системе увеличение поля приводит к переходу от спиральной структуры к скирмионным состояниям, далее – к уменьшению устойчивости и радиуса скирмиона вплоть до его исчезновения и перехода системы в ФМ состояние. В САФ при $J_{12} < 0$ увеличение магнитного поля способствует уменьшению размера скирмиона в нижнем слое, но его увеличению в верхнем. РККИ воздействие со стороны магнитных моментов верхнего слоя на нижний будет конкурировать с внешним полем и зависимость размера скирмиона в нижнем слое от внешнего поля заранее не очевидна. На рисунке 2 представлена зависимость радиусов скирмионов в нижнем и верхнем слоях от приложенного в направлении, перпендикулярном плоскости системы, магнитного поля при фиксированном значении $\mu_0 H_b = 50$ мТл.

С увеличением поля радиус связанных скирмионов растет и в нижнем, и в верхнем слое, но в верх-

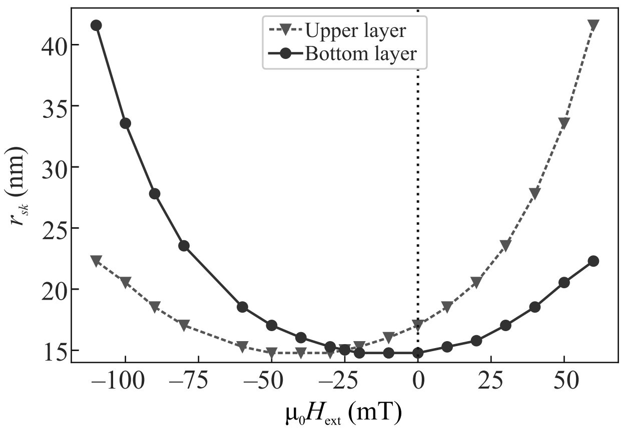


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость радиусов r_{sk} связанных скирмионов в нижнем и верхнем магнитных слоях САФ от внешнего магнитного поля. $\mu_0 H_b = 50$ мТл

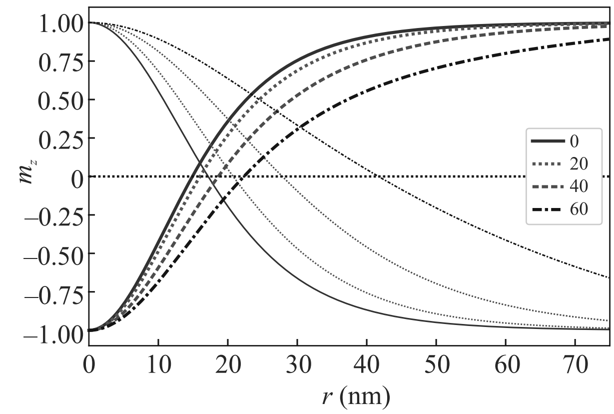


Рис. 3. (Цветной онлайн) Магнитные профили скирмионов $m_z(r)$ в нижнем (жирные линии) и верхнем (тонкие линии) слоях САФ при разных внешних полях. $\mu_0 H_b = 50$ мТл

нем этот рост быстрее. При изменении направления внешнего поля сначала происходит уменьшение размера скирмионов. Если $\mathbf{H}_b + \mathbf{H}_{\text{ext}} = -\mathbf{H}_{\text{ext}}$, радиус скирмионов в обоих слоях одинаков.

При $\mathbf{H}_b = -\mathbf{H}_{\text{ext}}$ магнитная конфигурация эквивалентна состоянию САФ без магнитного поля, в котором верхний магнитный слой заменен на нижний, и наоборот. Дальнейший рост радиусов скирмионов при $H_{\text{ext}} < -H_b$ происходит, как и в случае $H_{\text{ext}} > 0$, если поменять слои местами. Отметим, что увеличение равновесного радиуса скирмионов в АФ пленках при увеличении внешнего внешнего магнитного поля было получено в [12].

Изменение H_b эквивалентно сдвигу зависимостей, показанных на рис. 2 по горизонтальной оси так, чтобы радиусы скирмионов совпадали при $H_{\text{ext}} = -H_b/2$.

На рисунке 3 показаны профили намагниченности скирмионов в нижнем и верхнем слое при $\mu_0 H_b = 50$ и различных значениях H_{ext}. Зависимости, аналогичные представленным на рис. 3, были получены в работе [14] на основе микромагнитного моделирования. Некоторые различия, такие как совпадение радиусов скирмионов в обоих слоях при $\mu_0 H_{\text{ext}} \approx 20$ мТл могут быть связаны с учетом дипольного взаимодействия в микромагнитных программах, но не включенных в выражение для энергии (2).

3. Пути с минимальным перепадом энергии и устойчивость скирмионов в САФ. Количественной характеристикой устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций и случайных возмущений может служить их среднее время жизни. В рамках гармонического приближения теории переходного состояния для этой величины получается выражение, соответствующее закону Аррениуса [21, 18]:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_{\text{B}} T}\right), \tag{3}$$

Здесь ΔE – энергия активации процесса коллапса магнитного состояния. Для расчета этой величины исследуется энергетическая поверхность системы, как функционал от всех переменных, однозначно определяющих магнитную конфигурацию. Локальные минимумы на энергетической поверхности соответствуют основному и метастабильным состояниям, а путь с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ) между ними задает наиболее вероятный сценарий магнитного перехода [22, 23]. Максимум вдоль пути представляет собой седловую точку первого порядка, и активационный барьер рассчитывается, как разность энергий в седловой точке и начальном состоянии: $\Delta E = E_{sp} - E_{\min}$. Предэкспоненциальный множитель τ_0 в (3) зависит от энтропии системы в начальном состоянии и седловой точке, а также от динамики, определяющей скорость ухода из седловой точки в направлении конечного состояния [24, 18].

Расчеты ПМПЭ для коллапса скирмионной пары в САФ были выполнены на квадратной решетке 500×500 узлов с периодическими граничными условиями. Если задавать направления спинов двумя углами в полярной системе координат, то размерность энергетической поверхности системы составит 500 000. Однако, более удобно использовать декартовы координаты. При этом размерность поверхности увеличивается, а условие постоянства величины магнитных моментов учитывается посредством введения множителей Лагранжа [18]. Большая

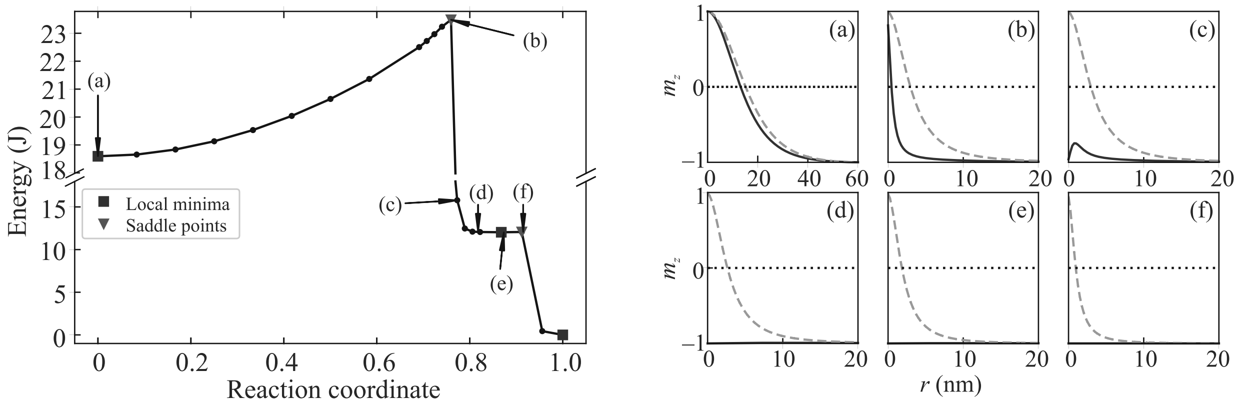


Рис. 4. (Цветной онлайн) ПМПЭ между состоянием связанных скирмионов в слоях САФ и однородным состоянием без скирмионов для $H_{\text{ext}} = 0$. Путь проходит через промежуточный минимум, соответствующий состоянию с одним скирмионом в верхнем слое. Локальные минимумы и седловые точки показаны квадратами и треугольниками соответственно. Справа показаны магнитные профили $m_z(r)$ (r в нанометрах) вдоль пути в точках, указанных на графике слева. Синяя сплошная линия соответствует скирмиону в верхнем слое

размерность энергетической поверхности делает расчет седловой точки сложной вычислительной задачей. Здесь удается провести расчет ПМПЭ вблизи седловой точки с использованием метода усеченного ПМПЭ [25].

На рисунке 4 показан ПМПЭ между состоянием с двумя связанными скирмионами в магнитных слоях САФ и однородным состоянием с ФМ упорядочением в каждом слое. Параметры соответствуют параметрам непрерывной модели и экспериментальным данным [14]: $J = 183.75$ мэВ, $D/J = 6.3 \cdot 10^{-3}$, $J_{12}/J = 5 \cdot 10^{-4}$, $\mu = 12\mu_B$, $\mu_0 H_b = 50$ мТл в отсутствие внешнего магнитного поля. Справа показаны магнитные конфигурации в отмеченных на том же рисунке слева точках вдоль пути. Переход проходит через промежуточный минимум, соответствующий равновесному состоянию с одним скирмионом в верхнем слое. Однако барьер, отделяющий его от однородного ФМ упорядочения, составляет всего $0.03\,J$, и время жизни такого скирмиона будет на много порядков меньше, чем связанной пары скирмионов в САФ.

В начальном равновесном состоянии размеры скирмионов в обоих слоях почти одинаковы. На участке ПМПЭ до первой седловой точки радиусы скирмионных состояний уменьшаются, но в нижнем слое – сильнее, чем в верхнем. Активационный барьер, который необходимо преодолеть для распада скирмионной пары $\Delta E = 4.9\,J$. Затем происходит коллапс скирмиона в нижнем слое с переворотом моментов в центре скирмиона и дальнейшим переходом в однородное состояние. В верхнем слое скирмион продолжает сжиматься и после первой седловой точки, переходя в локально устойчивое состояние. При этом энергия системы почти не меняется. На этом участке основной вклад в энергию, отсчитываемую от однородного ФМ состояния, дает обменное взаимодействие. Для топологических солитонов в двумерных изотропных ферромагнетиках масштабное преобразование, соответствующее "дыхательной" моде, не меняет энергии системы [1]. Поэтому и энергия вдоль пути практически постоянна и близка к минимальной энергии в непрерывной σ-модели $4\pi q J$, где q – топологический заряд магнитной структуры. После перехода через вторую седловую точку система переходит в однородное состояние. Барьер для нуклеации односкирмионной магнитной конфигурации оказывается немного выше, чем для образования из этого состояния связанной скирмионной пары.

В САФ с внешним магнитным полем ПМПЭ имеет аналогичный вид, но величины активационных барьеров увеличиваются, как и размеры скирмионов. Это происходит в первую очередь за счет понижения энергии в начальном равновесном состоянии, а энергия системы в седловой точке изменяется гораздо меньше. Увеличивается и энергия активации для коллапса односкирмионного состояния, которая составляет при $\mu_0 H_{ext} = 30$ мТл около $0.25\ J$. Энергия активации распада двухскирмионного состояния в этом поле составляет уже $6J$.

Представляет интерес сравнить энергию активации скирмионной пары в САФ и тонкой ФМ пленке. Для этого был выполнен расчет ПМПЭ для коллапса одиночного скирмиона. Параметры были выбраны такими же, как и для пленок САФ, за исключением внешнего магнитного поля $\mu_0 H_{\text{ext}} = 25$ мТл. Оно было выбрано таким образом, чтобы совпали размеры скирмионных состояний в ФМ пленке и в САФ без внешнего магнитного поля. Общий вид ПМПЭ и механизм коллапса аналогичены имеющимся в литературе [26, 18]. Рассчитанная энергия активации коллапса $\Delta E = 3.44\,J$ оказалась существенно ниже, чем соответствующий барьер в САФ. Это согласуется с экспериментально подтвержденной устойчивостью скирмионных состояний в САФ [14].

Сравним, наконец, полученную энергию активации распада скирмионного состояния в САФ с оценками, полученными в [14], где предполагалось, что в процессе аннигиляции размер скирмионов уменьшался в обоих слоях синхронно, и рассчитывались вклады в энергию системы в зависимости от радиуса скирмионов. Для этого в рамках непрерывной модели был использован анзац для формы магнитного профиля скирмиона [27], включающий в качестве параметра его радиус R, и вклады от разных взаимодействий в энергию рассчитывались аналитически [8]. Расчеты показали, что для относительно малых размеров скирмионов в слоях САФ зависимость всех вкладов от радиуса можно аппроксимировать линейными функциями. Хотя на масштабах нескольких постоянных решетки непрерывная модель, очевидно, не может давать хорошего описания, для оценки энергии активации использовалась экстраполяция энергии при $R \to 0$. Полученная таким образом величина, формально соответствующая скирмионам нулевого радиуса, принималась за энергию активации, необходимую для перехода в пространственно-однородное состояние. Тогда энергия активации коллапса получается вычитанием из этого значения энергии равновесного состояния пары скирмионов и для выбранных параметров составляет $5.66\,J$.

Эта величина на 16 % больше, чем значение, найденное при построении ПМПЭ, и существенно переоценивает стабильность скирмионной пары при комнатной температуре. Для аккуратной оценки времени жизни нужно рассчитать предэкспоненциальный фактор в (3), который [14] принят равным 10^9 для всех рассматриваемых структур. В отсутствие дальнодействующего дипольного взаимодействия, которое подавлено в САФ, такой расчет может быть проведен в рамках гармонической теории переходного состояния [28].

4. Заключение. Вопрос об устойчивости топологических магнитных структур относительно тепловых флуктуаций является ключевым для использования их в качестве битов магнитной памяти. Количественной мерой устойчивости может служить время жизни магнитных состояний. Исследование ПМПЭ, соответствующего аннигиляции скирмионов в САФ, позволяет описать механизм коллапса и найти энергию активации такого процесса. Эта величина, согласно (3) дает основной вклад в оценку для времен жизни.

Аккуратный расчет показывает, что при переходе вдоль настоящего ПМПЭ энергетический барьер оказывается на 16 % меньше, чем согласно оценкам [14], предполагающим одновременное уменьшение радиуса скирмионов в обоих слоях вплоть до их полного исчезновения. Учитывая, что величина энергии активации составляет примерно $35k_BT$ при комнатной температуре, это дает уменьшение времени жизни структуры примерно в 270 раз, по сравнению с [14], хотя даже в этом случае структуры могут быть устойчивы в течение достаточно продолжительного времени. Для точного определения этого времени необходимо знание всех параметров в законе Аррениуса (3). Знание морфологии энергетической поверхности вблизи локальных минимумов и седловой точки открывает путь к аккуратному расчету предэкспоненциального фактора в (3). Его величина может существенно меняться при увеличении числа степеней свободы, задающих размерность энергетической поверхности [29]. Этот вопрос, однако, будет рассмотрен в отдельной работе.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-22-00632, https://rscf.ru/project/22-22-00632/

1. А. А. Белавин, А. М. Поляков, Письма ЖЭТФ **22**, 503 (1975).
2. R. Wiesendanger, Nat. Rev. Mater. **1**, 16044 (2016).
3. A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. **2**, 17031 (2017).
4. K. M. Song, J. S. Jeong, B. Pan, X. Zhang, J. Xia, S. Cha, T. E. Park, K. Kim, S. Finizio, J. Raabe, J. Chang, Y. Zhou, W. Zhao, W. Kang, H. Ju, and S. Woo, Nat. Electron. **3**, 148 (2020).
5. K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve, and M. Kläui, J. Appl. Phys. **124**, 240901 (2018).
6. K. Litzius, I. Lemesh, B. Krüger et al. (Collaboration), Nat. Phys. **13**, 170 (2017).
7. L. Smejkal, Y. Mokrousov, B. Yan, and A. H. MacDonald, Nat. Phys. **14**, 242 (2018).
8. F. Büttner, I. Lemesh, and G. S. D. Beach, Sci. Rep. **8**, 4464 (2018).
9. S. K. Kim, G. S. D. Beach, K. J. Lee, T. Ono, T. Rasing, and H. Yang, Nature Mater. **21**, 24 (2022).
10. S. Woo, K. M. Song, X. Zhang et al. (Collaboration), Nat. Commun. **9**, 959 (2018).

11. L. Caretta, M. Mann, F. Büttner, K. Ueda, B. Pfau, C.M. Günther, P. Hessing, A. Churikova, C. Klose, M. Schneider, and D. Engel, Nat. Nanotechnol. **13**, 1154 (2018).
12. M.N. Potkina, I.S. Lobanov, H. Jónsson, and V.M. Uzdin, J. Appl. Phys. **127**, 213906 (2020).
13. R.A. Duine, K.J. Lee, S.S.P. Parkin, and V.D. Stiles, Nat. Phys. **14**, 217 (2018).
14. W. Legrand, D. Maccariello, F. Ajejas, S. Collin, A. Vecchiola, K. Bouzehouane, N. Reyren, V. Cros, and A. Fert, Nature Mater. **19**, 34 (2020).
15. R. Chen, Y. Gao, X. Zhang, R. Zhang, S. Yin, X. Chen, X. Zhou, Y. Zhou, J. Xia, Y. Zhou, S. Wang, F. Pan, Y. Zhang, and C. Song, Nano Lett. **20**, 3299 (2020).
16. T. Ma, A.K. Sharma, R. Saha, A.K. Srivastava, P. Werner, P. Vir, V. Kumar, C. Felser, and S.S.P. Parkin, Adv. Mater. **320**, 2002043 (2020).
17. W.T. Coffey, D.A. Garanin, and D.J. McCarthy, Adv. Chem. Phys. **117**, 483 (2001).
18. И.С. Лобанов, М.Н. Поткина, В.М. Уздин, Письма ЖЭТФ **113**, 833 (2021).
19. W. Legrand, N. Ronceray, N. Reyren, D. Maccariello, V. Cros, and A. Fert, Phys. Rev. Appl. **10**, 064042 (2018).
20. J. Unguris, R.J. Celotta, and D.T. Pierce, Phys. Rev. Lett. **67**, 140 (1991).
21. P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B **85**, 184409 (2012).
22. P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Comput. Phys. Commun. **196**, 335 (2015).
23. I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B **94**, 174418 (2016).
24. I.S. Lobanov and V.M. Uzdin, Comput. Phys. Commun. **269**, 108136 (2021).
25. I.S. Lobanov, M.N. Potkina, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Nanosystems: Phys., Chem., Math. **8**, 586 (2017).
26. P.F. Bessarab, G.P. Müller, I.S. Lobanov, F.N. Rybakov, N.S. Kiselev, H. Jónsson, V.M. Uzdin, S. Blügel, L. Bergqvist, and A. Delin, Sci. Rep. **8**, 3433 (2018).
27. N. Romming, A. Kubetzka, C. Hanneken, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **114**, 177203 (2015).
28. M.N. Potkina, I.S. Lobanov, O.A. Tretiakov, H. Jónsson, and V.M. Uzdin, Phys. Rev. B **102**, 134430 (2020).
29. M.N. Potkina, I.S. Lobanov, H. Jónsson, and V.M. Uzdin, J. Magn. Magn. Mater. **549**, 168974 (2022).

Pis'ma v ZhETF, vol. 116, iss. 4, pp. 249 – 250

Ferroelectric domain reversal: The role of domain wall conduction[1)]

B. Sturman[2)], E. Podivilov

Institute of Automation and Electrometry, Russian Academy of Sciences, 630090 Novosibirsk, Russia

Submitted 13 June 2022
Resubmitted 4 July 2022
Accepted 5 July 2022

DOI: 10.31857/S1234567822160091, EDN: jhxesl

Ferroelectric domain reversal is a vast research area relevant to the fundamental science and applications. Here, the general feature is that the coercive field E_c is orders of magnitude smaller than the characteristic depolarizing field $E_{\rm d}^0 = 4\pi P_s/\varepsilon_{zz}$, where P_s is the spontaneous polarization. The real reversal process is viewed as nucleation and growth of numerous microscopic counter-domains [1, 2]. While compensation of the arising bound charge $\pm 2P_s$ occurs at electrodes, it is not generally allowed at domain walls (DWs) inside the crystal. This leads to the generation of depolarizing field $E_{\rm d}$ ranging from 0 to $E_{\rm d}^0$, i.e., to an apparent inconsistency of the reversal concept. To overcome it, counter-domains are assumed to be needle-like [1–4]. This assumption is satisfactory only for an initial stage of the reversal. Moreover, there are documented cases [5–7] where $E_d \gg E_c$ and the reversal concept not including the charge compensation experiences serious difficulties. This is relevant to both capacitor and AFM experimental configurations.

We claim that the DW conduction, which is now detected in many ferroelectrics [8–10], has to be regarded as a crucial and general ingredient of the domain reversal processes. Its importance is in providing an automatic compensation of typically huge depolarizing electric fields. The presence of DW conduction modifies the basics of domain reversal processes. Concerning AFM applications, domain reversal theories have to include injection models from conductive tip electrodes. We provide some primary results relevant to the basics of DW conduction mediated domain reversal. For simplicity, we consider uniaxial ferroelectrics where the spontaneous polarization is parallel to the z axis and acquires the values $\pm P_s$.

The values of domain formation energy $\delta\mathcal{E}$ are crucial for domain reversal [1–4]. The main contributions to $\delta\mathcal{E}$ are the surface and electrostatic ones. The surface contribution is given by the integral over the DW surface, $\delta\mathcal{E}_s = \int w\, dS$, where w is a positive surface density. As DW is typically charged, w must depend on the angle θ between the DW surface normal and the z axis. We model this by the relation $w = w_0 + w_1 \cos\theta$ with $w_1/w_0 \gg 1$ leading to $\delta\mathcal{E}_s = w_0 S + w_1 S_\perp$, where S is the domain surface and $S_\perp$ its maximal cross-section.

The electrostatic contribution $\delta\mathcal{E}_{\rm el}$ crucially depends on the charge compensation assumptions. In the absence of DW charge compensation, we obtain the classical relation of [4] leading to unrealistically large values of $\delta\mathcal{E}$ and thus to practically forbidden reversal process. Admission for DW conduction means that the dielectric boundary conditions (BCs) must be replaced by the metal BCs for the electrostatic potential, $\varphi(\mathbf{r}_{\rm DW}) = U$, where U is the applied voltage. The actual values of $\delta\mathcal{E}_{\rm el}$ can be substantially smaller here facilitating the domain formation.

Figures 1a, b illustrate the dependence of $\delta\mathcal{E}$ on the applied electric field E_0 in the capacitor configuration and on the transverse and longitudinal domain sizes ($l_\perp$ and l_z) for a half-spheroidal domain shape. We have employed parameters relevant to lithium niobate (LN) crystals: $P_s = 70\,\mu{\rm C/cm}^2$, $\varepsilon_{zz} = 30$, $\varepsilon_\perp = 85$ and representative values $w_0 = 3$, $w_1 = 15\,{\rm erg/cm}^2$. One sees from Fig. 1a that for $E_0 = 4\,{\rm kV/mm}$, which is representative for E_c in LN crystals, the maximal in l_z values of $\delta\mathcal{E}$ are about 1 eV. Figure 1b shows that increase of E_0 causes a rapid decrease of the values of l_z and $\delta\mathcal{E}(l_z)$ relevant to the maximum of $\delta\mathcal{E}(l_z)$. The predictions of Figure 1 are beneficial for the domain reversal as compared to those relevant to the absence of the DW charge compensation.

Consider now the effect of DW conduction charge compensation in the case of lateral domain growth in the AFM configurations. Experiments with application of U, τ voltage pules show that the inverted domain radius $r_0(U,\tau)$ exceeds $1\,\mu$m in LN crystals for $U \approx 100$ V and $\tau \approx 10^3$s [6, 7]. This is much larger than the conductive tip radius. In the absence of charge compensation, this would lead to the existence of depolarizing fields

[1)]Supplementary materials are available for this article at DOI: and are accessible for authorized users.

[2)]e-mail: sturman@iae.nsk.su

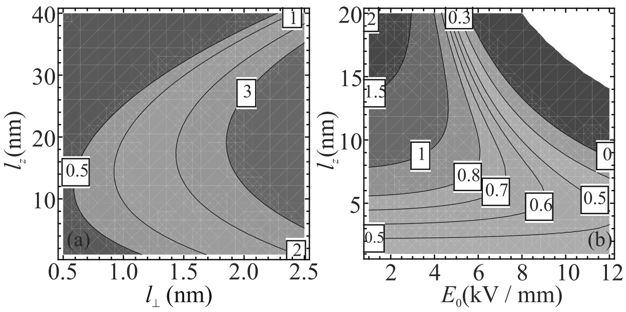


Fig. 1. (Color online) The domain formation energy $\delta\mathcal{E}$ (in eV) versus E_0, $l_\perp$, and l_z in the presence of DW conduction for the LN parameters, $w_0 = 3$ erg/cm^2 and $w_1 = 15$ erg/cm^2. (a) – Contour lines $\delta\mathcal{E}(l_\perp, l_z) = \text{const}$ for $E_0 = 4\,\text{kV/mm}$. (b) – Contour lines $\delta\mathcal{E}(E_0, l_z) = \text{const}$ for $l_\perp = 1\,\text{nm}$

$E_\text{d} \approx 3$ MV/mm in non-electroded area exceeding the coercive field E_c by about three orders of magnitude. The charge compensation can indeed be explained by the presence of free surface charges injected from the tip, such that $\varphi(r) = U$ for $r \le r_0$ and the field component $E_z(r)$ beneath the front surface acquires the sign necessary for the domain reversal.

However, such an extended electrode model is insufficient to explain the data accumulated in the AFM experiments on the lateral domain expansion [6, 7]. The point is that the the data on $r_0(U,\tau)$ can be nicely fitted using the empirical Merz law $v \propto \exp[-\text{const}/E_z(r_0)]$ for the lateral expansion velocity and, additionally, the assumption $E_z(r_0) \propto 1/r_0$. The latter has no visible physical grounds. Moreover, within the extended electrode model, i.e., for metal disk of radius r_0, the component $E_z(r) \to \infty$ for $r \to r_0$ [11].

We have realized that the presence of such an edge singularity corresponds to infinite gradients of free charge concentration at $r = r_0$. Account for diffusion of free carriers is necessary here. It is shown unambiguously that this leads just to the necessary dependence $E_z(r_0) \propto 1/r_0$. The data on the lateral domain expansion acquire thus qualitative and quantitative explanations.

In conclusion, physical models providing a strong charge compensation during the ferroelectric domain reversal, especially for AFM configurations, are crucial for development of the domain engineering. Domain wall conduction can be regarded as a general ingredient for such a compensation and for the explanation of numerous accumulated experimental data. Particular models are presented to demonstrate the positive impact of this conduction on nucleation and growth of ferroelectric counter-domains. The prospects for further development of DW conduction related models of the domain reversal are outlined.

This is an excerpt of the article "Ferroelectric domain reversal: The role of domain wall conduction". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601385.

1. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and applications of ferroelectrics and ferroelectric materials,* Clarendon Press, Oxford (1977).
2. A. K. Tagantsev, L. E. Cross, and J. Fousek, *Domains in ferroic crystals and thin films*, Springer, N.Y. (2010).
3. W. J. Merz, Phys. Rev. **95**, 690 (1954).
4. R. Landauer, J. Appl. Phys. **28**, 227 (1957).
5. C. L. Sones, A. C. Muir, Y. J. Ying, S. Mailis, R. W. Eason, T. Jungk, A. Hoffmann, and E. Soergel, Appl. Phys. Lett. **92**, 072905 (2008).
6. B. J. Rodriguez, R. J. Nemanich, A. Kingon, A. Gruverman, S. V. Kalinin, K. Terabe, X. Y. Liu, and K. Kitamura, Appl. Phys. Lett. **86**, 012906 (2005).
7. M. Lilienblum and E. Soergel, J. Appl. Phys. **110**, 052012 (2011).
8. T. Sluka, P. Bednyakov, P. Yudin, A. Crassous, and A. Tagantsev, *Charged domain walls in ferroelectrics*, in *Topological structures in ferroic materials*, ed. by J. Seidel, Springer, Switzerland (2016), p. 103.
9. P. S. Bednyakov, B. I. Sturman, T. Sluka, A. K. Tagantsev, and P. V. Yudin, npj Comput. Mater. **4**, 65 (2018).
10. Ch. S. Werner, S. J. Herr, K. Buse, B. Sturman, E. Soergel, C. Razzaghi, and I. Breunig, Sci. Rep. **7**, 9862 (2017).
11. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, London (1960).

Pis'ma v ZhETF, vol. 116, iss. 4, pp. 251 – 252

Non-Newtonian rheology in twist-bend nematic liquid crystals

E. I. Kats[1)]

Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 5 July 2022
Resubmitted 5 July 2022
Accepted 7 July 2022

DOI: 10.31857/S1234567822160108, EDN: jhxqbt

A number of exciting and relatively recent publications (about ten years ago, compared to more than 100 years of the discovery of the classical liquid crystals) report on a discovery of a new type of equilibrium liquid crystals, termed twist-bend nematics, N_{TB} (see the papers [1–6]). The discovery of N_{TB} nematics opened "Pandora box" with new kinds of modulated liquid crystals (see very influential pioneering works and a few review papers [17–19]). Naturally (as it was the case in great geographical discoveries of 15-th – 17-th centuries) after the first step devoted mainly to observations and structural identifications of new liquid crystals, the interest moves to investigations and exploring of physical properties of these new phases. Since then the N_{TB}, and other modulated nematics is becoming one of the hottest topics in physics of liquid crystals.

Our paper is motivated by two very recent works [20, 21] on rheological studies of the N_{TB} liquid crystals. The authors of these papers found nontrivial non-Newtonian behavior of sheared N_{TB} nematics. At relatively low shear rate ($\dot\gamma \le \dot\gamma_{c1}$) the stress tensor σ created by this shear strain, scales as $\sigma \propto \dot\gamma^{1/2}$. Thus the effective viscosity decreases with the shear rate ($\eta \propto \dot\gamma^{-1/2}$) manifesting so-called shear-thinning phenomenon. At intermediate shear rate $\dot\gamma_{c1} \le \dot\gamma \le \dot\gamma_{c2}$, σ is almost independent of $\dot\gamma$ (a sort of plateau), and at large shear rate ($\dot\gamma \ge \dot\gamma_{c2}$, $\sigma \propto \dot\gamma$), and it looks like Newtonian rheology. The critical values of the shear rate ($\dot\gamma_{c1}$, $\dot\gamma_{c2}$) indicating transitions between dynamical regimes depend on temperature. Above certain temperature T^* (below $N - N_{TB}$ phase transition point T_c, where N stands for conventional nematic state) the behavior becomes pure Newtonian. The aim of this paper is to present theoretical rationalization for the observed in these works [20, 21] results. In what follows we integrate the input from recent works and discussions, however my own contribution to this field will be also presented.

The main feature which distinguishes the standard nematic N and the twist-bend nematic N_{TB} liquid crystals is a short wavelength modulation of the orientation order $\boldsymbol{\phi}$ presented in the N_{TB} phase. This two component vector $\boldsymbol{\phi}$, orthogonal to the nematic director $\mathbf{n}$ ($\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n} = 0$) can be chosen as the order parameter describing $N - N_{TB}$ phase transition. With this vector order parameter in hands one can write the Landau free energy functional.

Recent progress in rheology of the N_{TB} liquid crystals has led to a number of new and exciting experimental results [20, 21]. In the paper we propose a simple heuristic approach to rationalize these new experimental data. The key starting point of our approach is based on a simple observation that the anisotropic viscous properties of the liquid crystals introduce a host of novel phenomena in rheology. We find that at relatively low shear rate ($\dot\gamma \le \dot\gamma_{c1}$) the stress tensor σ created by this shear strain, scales as $\sigma \propto \dot\gamma^{1/2}$. Thus the effective viscosity decreases with the shear rate ($\eta \propto \dot\gamma^{-1/2}$) manifesting so-called shear-thinning phenomenon. At intermediate shear rate $\dot\gamma_{c1} \le \dot\gamma \le \dot\gamma_{c2}$, σ is almost independent of $\dot\gamma$ (a sort of plateau), and at large shear rate ($\dot\gamma \ge \dot\gamma_{c2}$), $\sigma \propto \dot\gamma$, and it looks like Newtonian rheology. Within our theory the critical values of the shear rate scales as $\dot\gamma_{c1} \propto (\tilde\eta_2^0/\tilde\eta_3^0)^2$, and $\dot\gamma_{c2} \propto (\tilde\eta_2^0/\tilde\eta_3^0)^4$ respectively. Here $\tilde\eta_2^0$ and $\tilde\eta_3^0$ are bare coarse grained shear viscosity coefficients of the effective smectics equivalent to the N_{TB} phase at large scales. Our mainly qualitative theory may not have the right numbers for the dynamic shear rate thresholds. However theory predicts the right scaling laws observed in the experiments. Our consideration suggests that the described phenomena and mechanisms can bring about different rheological scenarios worthy of further studies. In this work we have only scratched the surface of this reach subject, focusing only on the most simple questions, which can be answered by calculations "on a back of the envelope".

All obtained results of this work and short discussions of the cited articles (see [1–44]) can be found in the full version of this paper.

[1)]e-mail: efim.i.kats@gmail.com

This is an excerpt of the article “Non-Newtonian rheology in twist-bend nematic liquid crystals”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal.
DOI: 10.1134/S0021364022601397

---

1. L. E. Hough, M. Spannuth, M. Nakata, D. A. Coleman, C. D. Jones, G. Dantlgraber, C. Tschierske, J. Watanabe, E. Korblova, D. M. Walba, J. E. Maclennan, M. A. Glaser, and N. A. Clark, Science **325**, 452 (2009).
2. V. P. Panov, M. Nagaraj, J. K. Vij, Yu. P. Panarin, A. Kohlmeier, M. G. Tamba, R. A. Lewis, and G. H. Mehl, Phys. Rev. Lett. **105**, 167801 (2010).
3. M. Cestari, S. Diez-Berart, D. A. Dunmur, A. Ferrarini, M. R. de la Fuente, D. J. B. Jackson, D. O. Lopez, G. R. Luckhurst, M. A. Perez-Jubidino, R. M. Richardson, J. Salud, B. A. Timimi, and H. Zimmermann, Phys. Rev. E **84**, 031704 (2011).
4. V. Borshch, Y. K. Kim, J. Xiang, M. Gao, A. Jakli, V. P. Panov, J. K. Vij, C. T. Imrie, M. G. Tamba, G. H. Mehl, and O. D. Lavrentovich, Nat. Commun. **4**, 2635 (2013).
5. R. J. Mandle, E. J. Davis, S. A. Lobato, C.-C. A. Vol, S. J. Cowling, and J. W. Goodby, Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 6907 (2014).
6. E. T. Samulski, A. G. Vanakaras, and D. J. Photinos, arXiv: 2009.11399 (2020).
7. S. Kaur, J. Addis, C. Greco, A. Ferrarini, V. Gortz, J. W. Goodby, and H. F. Gleeson, Phys. Rev. E **86**, 041703 (2012).
8. K. Adlem, M. Copic, G. R. Luckhurst, A. Mertelj, O. Parri, R. M. Richardson, B. D. Snow, B. A. Timimi, R. P. Tuffin, and D. Wilkes, Phys. Rev. E **88**, 022503 (2013).
9. C. Meyer, G. R. Lukhurst, and I. Dozov, Phys. Rev. Lett. **111**, 067801 (2013).
10. S. M. Shamid, S. Dhakal, and J. V. Selinger, Phys. Rev. E **87**, 052503 (2013).
11. N. Vanpotic, M. Cepic, M. A. Osipov, and E. Gorecka, Phys. Rev. E **89**, 030501(R) (2014).
12. E. G. Virga, Phys. Rev. E **89**, 052502 (2014).
13. A. Mertelj, L. Cmok, N. Sebastian, R. J. Mandle, R. R. Parker, A. C. Whitwood, J. W. Goodby, and M. Copic, Phys. Rev. X **8**, 041025 (2018).
14. M. Chiappini, T. Drwenski, R. van Roij, and M. Dijkstra, Phys. Rev. Lett. **123**, 068001 (2019).
15. P. L. M. Connor and R. J. Mandle, Soft Matter **16**, 324 (2020).
16. I. Dozov and G. R. Luckhurst, Liquid Cryst. **47**, 2098 (2020).
17. X. Chen, E. Korblova, D. Dong, X. Wei, R. Shao, L. Radzihovsky, M. Glaser, J. E. Maclennan, D. Bedrov, D. M. Walba, and N. A. Clark, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **117**, 14021 (2020).
18. O. D. Lavrentovich, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **117**, 14629 (2020).
19. N. Sebastian, L. Cmok, R. J. Mandle, M. R. de la Fuente, I. D. Olenik, M. Copic, and A. Mertelj, Phys. Rev. Lett. **124**, 037801 (2020).
20. M. P. Kumar, P. Kula, and S. Dhara, Phys. Rev. Materials **4**, 115601 (2020).
21. M. P. Kumar, J. Karcz, P. Kula, and S. Dhara, Phys. Rev. Materials **5**, 115605 (2021).
22. E. I. Kats and V. V. Lebedev, JETP Lett. **100**, 110 (2014).
23. E. I. Kats, Low Temp. Phys. (Fizika Nizkikh Temperatur) **43**, 7 (2017).
24. P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1993).
25. M. Kleman and O. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction*, Springer, Berlin (2003).
26. P. Oswald and P. Pieranski, *Smectics and Columnar Liquid Crystals*, Taylor and Francis, N.Y. (2006).
27. S. M. Salili, C. Kim, S. Sprunt, J. T. Gleeson, O. Parric, and A. Jakli, RSC Adv. **4**, 57419 (2014).
28. Z. Parsouzi, S. M. Shamid, V. Borshch, P. K. Challa, A. R. Baldwin, M. G. Tamba, C. Welch, G. H. Mehl, J. T. Gleeson, A. Jakli, O. D. Lavrentovich, D. W. Allender, J. V. Selinger, and S. Sprunt, Phys. Rev. X **6**, 021041 (2016).
29. C. Meyer and I. Dozov, Soft Matter **12**, 574 (2016).
30. R. Bruinsma and Y. Rabin, Phys. Rev. A **45**, 994 (1992).
31. G. H. Fredrickson, J. Rheology **38**, 1045 (1994).
32. M. Goulian and S. T. Milner, Phys. Rev. Lett. **74**, 1775 (1995).
33. A. N. Morozov and J. G. E. M. Fraaije, Phys. Rev. E **65**, 031803 (2002).
34. K. G. Wilson and J. Kogut, Phys. Rep. **12**, 75 (1974).
35. E. I. Kats and V. V. Lebedev, *Fluctuational Effects in the Dynamics of Liquid Crystals*, Springer, Berlin (1993).
36. P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
37. E. I. Kats and V. V. Lebedev, JETP **64**, 518 (1986) [ZhETF **91**, 871 (1986)].
38. D. Svensek and H. R. Brand, Advances in Polymer Science **227**, 101 (2010).
39. S. Fujii, S. Komura, and Ch.-Y. D. Lu, Materials **7**, 5146 (2014).
40. S. A. Brazovskii, JETP **41**, 85 (1975) [ZhETF **68**, 175].
41. E. I. Kats, V. V. Lebedev, and A. R. Muratov, Phys. Rep. **228**, 1 (1993).
42. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Statistical Physics*, Pergamon Press, N.Y. (1980), Part 1.
43. K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd edition, John Wiley and Sons, Montreal (1987).
44. P. G. de Gennes, Mol. Cryst. and Liquid Cryst. **34**, 91 (1976).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 253 – 259

Динамическая стабильность субмонослойных структур в системе Li/Cu(111)

Г. Г. Русина[+1)], *С. Д. Борисова*[+], *Е. В. Чулков*[*]

[+]*Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, 634021 Томск, Россия*

[*]*Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastián/Donostia, Spain*

Поступила в редакцию 17 июня 2022 г.
После переработки 13 июля 2022 г.
Принята к публикации 14 июля 2022 г.

С использованием межатомных потенциалов, полученных в рамках метода погруженного атома, проведены теоретические расчеты равновесной кристаллической структуры и колебательных свойств в системе Li/Cu(111). Были рассмотрены субмонослойные структуры $p(3 \times 3)$, $p(2 \times 2)$, $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^{\circ}$, формирующиеся при степенях адсорбции лития от 0.11 до 0.33 монослоя и бислойная структура (2×2)-3Li. В работе приводятся данные поверхностной релаксации, фононные спектры и локальная плотность распределения колебательных состояний на адатомах и атомах подложки. Расчеты показали, что при субмонослойной адсорбции лития на поверхность Cu(111) увеличение степени адсорбции приводит к нехарактерной для щелочных металлов зависимости энергии низкочастотных продольных колебаний адатомов. В интервале от 0.11 до 0.56 монослоя энергия таких колебаний снижается, вплоть до мнимых значений при достижении насыщенного монослойного покрытия. Дальнейшее увеличение степени адсорбции до 0.75 монослоя приводит к формированию динамически устойчивой структуры Cu(111)-(2×2)-3Li. Для данной структуры характерна сильная гибридизация всех типов колебаний атомов Li и подложки.

DOI: 10.31857/S123456782216011X, EDN: jhxulb

Субмонослойная адсорбция атомов различных элементов может приводить к образованию двумерного упорядоченного слоя адсорбата, поверхностного сплава и кластеров на металлических поверхностях [1–3]. При этом изменение даже малого количества адатомов может качественно менять электронную структуру и динамику электронных возбуждений в системе адатом-подложка [4]. Геометрия поверхности подложки также оказывает влияние на характер взаимодействия адсорбат-подложка и адсорбат-адсорбат и, как следствие, на электрон-электронное и электрон-фононное взаимодействие, что приводит к образованию новых электронных и фононных состояний, связанных с адатомами [5–7].

Интерес экспериментаторов и теоретиков, проявляемый к исследованию субмонослойной адсорбции щелочных металлов (ЩМ) на поверхностях металлов с различной ориентацией, обусловлен заметным влиянием на физико-химические свойства подложки и способностью формировать упорядоченные адсорбционные структуры [8–12]. Например, для плотноупакованной поверхности (111) большинства ГЦК металлов было установлено, что при низких температурах и субмонослойных степенях покрытия ЩМ формируется двумерный слой адсорбата. При этом атомы Na и K, как правило, находятся в трехцентровых ГЦК и ГПУ положениях адсорбции, а Cs и Rb располагаются над атомами поверхностного слоя подложки [8, 9, 13, 14]. С точки зрения динамики, особенностью субмонослойной адсорбции ЩМ является постоянство энергии высокочастотных дипольно-активных колебаний, поляризованных строго перпендикулярно поверхности подложки, и повышение энергии низкочастотных продольных колебаний адатомов, параллельных плоскости поверхности подложки. Это характерно для Na, K, Cs и Rb вне зависимости от положения адатомов и ориентации поверхности подложки [15, 16]. Что касается субмонослойной адсорбции Li, то для системы Li/Cu(111) экспериментально была обнаружена нетипичная зависимость энергии дипольно-активной моды от степени адсорбции. С использованием ДМЭ (дифракция медленных электронов) было обнаружено повышение энергии дипольно-активной моды с 38 до 43 мэВ в интервале степеней адсорбции от 0.15 до 0.33 монослоя (МС) [15]. Кроме того, вслед-

1)e-mail: rusina@ispms.tsc.ru

ствие высокой летучести Li, экспериментально определить структуру и места адсорбции Li на поверхности Cu(111) при субмонослойной адсорбции оказалось затруднительно. Упорядоченная структура была обнаружена лишь при степени адсорбции 0.75 МС Li на Cu(111). В данной структуре 6 атомов Li располагаются в неэквивалентных трех-центровых ГЦК и ГПУ положениях, формируя сотовую структуру вокруг одного атома Li, замещающего поверхностный атом подложки [17, 11].

Исходя из наличия экспериментальных трудностей при определении устойчивых субмонослойных структур и нетипичной для адсорбции ЩМ на металлическую поверхность зависимости колебательных мод от степени адсорбции, привлечение теоретических методов к исследованию формирования энергетически и динамически устойчивых субмонослойных структур лития на Cu(111) вполне оправдано. Во многих случаях для данных структур экспериментальные методы позволяют определить частоты колебаний только в центре двумерной зоны Бриллюэна (ЗБ). Однако особенности фононного спектра, указывающие на неустойчивость адсорбционной структуры, зачастую проявляются вдоль симметричных направлений двумерной ЗБ. Используемый в работе подход позволяет получить полную информацию о колебательном спектре двумерной поверхностной структуры.

В настоящей работе представлены результаты детального исследования возможных устойчивых кристаллических структур и колебательных свойств системы Li/Cu(111) при различных степенях адсорбции лития. Рассчитаны релаксация поверхности, фононные спектры, а также плотность распределения колебательных состояний на адатомах и в атомных слоях подложки. Поверхность Cu(111) моделировалась 31-слойной пленкой, на противоположные стороны которой упорядоченным образом наносились адатомы лития. Оптимизация структуры (релаксированная геометрия) проводилась методом молекулярной динамики при нулевой температуре одновременно для всей системы и с демпфированием атомных скоростей по схеме Верлета (временной шаг 10^{-12} с) [18]. Во всех расчетах использовались межатомные потенциалы чистых элементов, построенные в рамках метода погруженного атома (МПА), потенциал взаимодействия Li-Cu брался в форме [19, 20]:

$$\varphi_{AB}(r) = \frac{1}{2}\left[\frac{\rho_B(r)}{\rho_A(r)}\varphi_A(r) + \frac{\rho_A(r)}{\rho_B(r)}\varphi_B(r)\right], \quad (1)$$

где φ_A и φ_B – парные потенциалы лития и меди, а $\rho_A(r)$ и $\rho_B(r)$ – их атомные плотности.

Отсчет атомных слоев медной пленки ведется от поверхности: первый – Cu_s, второй – Cu_{s-1} и т.д. Собственные значения частот колебаний и векторов поляризации рассчитывались из динамической матрицы. Локальная плотность колебательных состояний (LDOS – *local density of states*) определялась проекцией этих собственных значений на интересующий атом в направлениях X, Y и Z. Количество атомов, входящих в расчетную ячейку для рассматриваемых структур, варьировалось от 128 до 514.

На рисунке 1a–d показаны двумерные адсорбционные структуры, полученные после расчета релаксации системы Li/Cu(111). Проведенные расчеты релаксации показали, что при субмонослойной адсорбции Li на поверхность Cu(111) адатомы располагаются в 3-х центровых ГЦК положениях и упорядочиваются в сверхструктурах (3×3)-Li, (2×2)-Li и $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30°$-Li, в соответствии со степенью адсорбции 0.11 МС, 0.25 МС и 0.33 МС. При 0.75 МС адатомы после релаксации формируют сложную структуру сотового типа Cu(111)-(2×2)-3Li. Особенностью данной структуры является неэквивалентность положений адсорбции адатомов и сосуществование фрагментов поверхностного сплава и адслоя. Один атом Li в положении замещения окружен 6 атомами Li в ГЦК и ГПУ положениях, соединяя одновременно адслой и поверхностный сплав (см. рис. 1d). Ближайшее расстояние между атомами Li в данной структуре составляет 2.95 Å, что на 2.3 % меньше объемного значения 3.02 (Å). В элементарную ячейку входят 3 неэквивалентных атома Li и 4 атома от подложки. Два адатома находятся в ГЦК и ГПУ положениях и один адатом в положении замещения. Кроме того, нахождение Li в неэквивалентных местах адсорбции приводит к разнонаправленному характеру релаксационных смещений атомов внутри одного слоя, приводя к появлению коробления структуры в приповерхностных слоях подложки. Значения вертикальной релаксации для субмонослойных адсорбционных структур приведены в табл. 1. Как следует из данных табл. 1, увеличение степени адсорбции приводит к снижению вертикальной релаксации и для Cu(111)-$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30°$-Li ее значение практически соответствует релаксации чистой поверхности Cu(111), которая составила $\Delta_{12} = -1.05\,\%$ и $\Delta_{23} = -0.07\,\%$. Это согласуется с DFT расчетом $\Delta_{12} = -1.0\,\%$, $\Delta_{23} = -0.2\,\%$ [21] и экспериментальным значением $\Delta_{12} = -1.0 \pm 0.4\,\%$ [22]. Имеющееся коробление структуры поверхностного слоя снижается с $\delta_s = 0.06$ Å для Cu(111)-(3×3)-Li до $\delta_s = 0.03$ Å

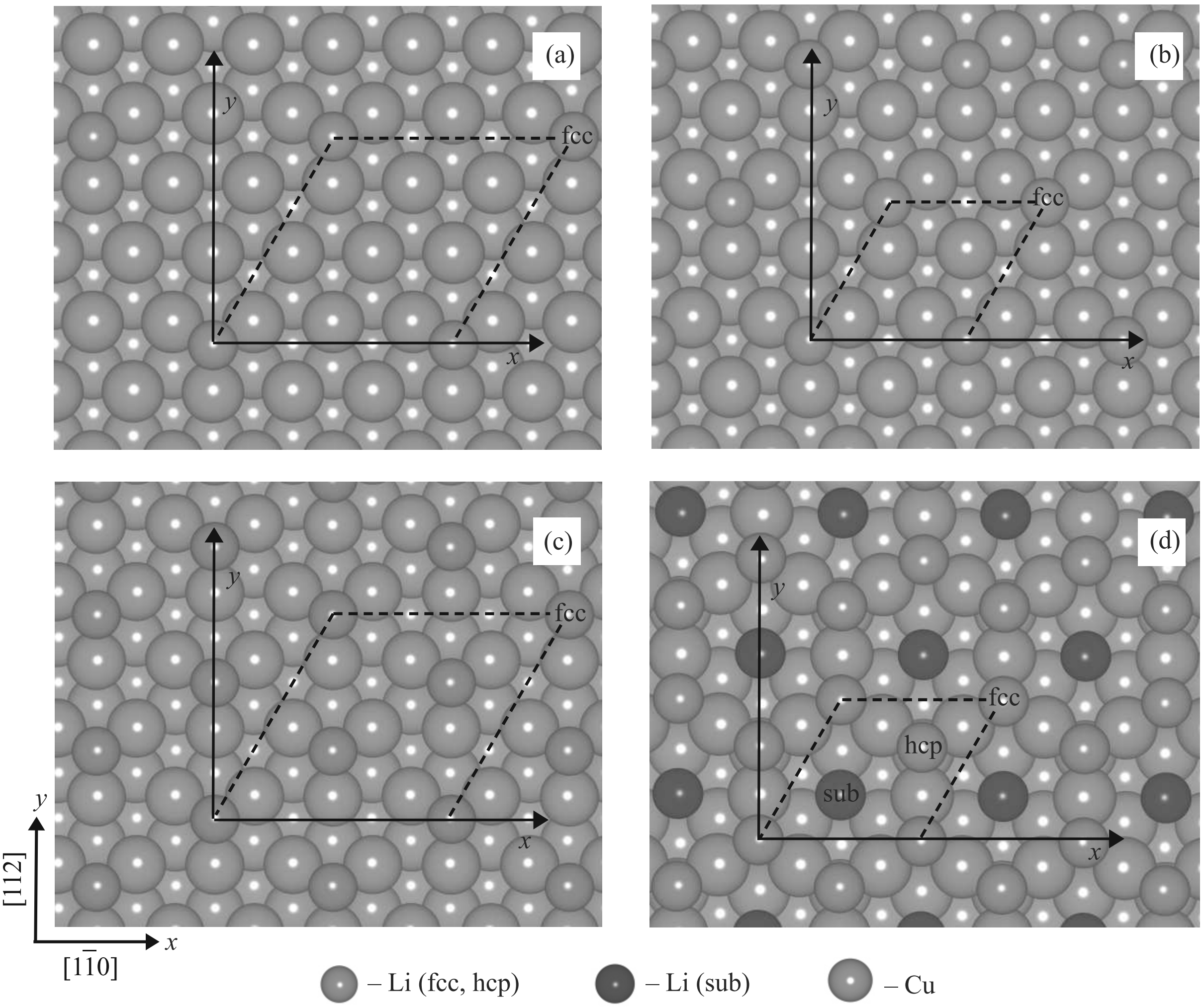


Рис. 1. (Цветной онлайн) Геометрические модели поверхностных сверхструктур и соответствующие им элементарные ячейки (3×3) и (2×2) (пунктирные линии) при степенях адсорбции лития: (a) – 0.11 МС; (b) – 0.25 МС; (c) – 0.33 МС; (d) – 0.75 МС. Места адсорбции атомов Li обозначены как fcc (ГЦК), hcp (ГПУ) и sub (замещение)

Таблица 1. Вертикальная релаксация поверхности Cu(111) при разной степени адсорбции Li. Положительные (отрицательные) значения у Δ_{ij} (%) означают расширение (сжатие) межслоевых расстояний, Δ_{ij} – для ближайших к Li атомов Cu и Δ'_{ij} – для всех остальных атомов Cu. $h_{\text{Li-Cu}}$ (Å) – вертикальное расстояние до поверхностного слоя подложки

Cu(111)-(3×3)-Li					
Положение Li	Δ_{12}	Δ'_{12}	Δ_{23}	Δ'_{23}	$h_{\text{Li-Cu}}$
ГЦК	−2.1	−0.5	−0.3	+0.2	2.19
Cu(111)-(2×2)-Li					
ГЦК	−2.0	−0.6	−0.1	+0.5	2.20
Cu(111)-$(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30°$-Li					
ГЦК	−0.7	−0.7	+0.4	−0.1	2.21

Таблица 2. Релаксационные изменения межслоевых расстояний поверхности Cu(111) при адсорбции 3 атомов Li (0.75 МС) в неэквивалентные положения. Δ_{ij} – значения релаксации для ближайших к Li атомов Cu

Структура Cu(111)-(2×2)-3Li				
	$h_{\text{Li-Cu}}$		Δ_{12}	Δ_{23}
Положение Li	МПА	Эксперимент [9]	Cu	Cu
ГЦК	2.35	2.10 ± 0.06	–	−0.3
ГПУ	2.36	2.15 ± 0.86	−0.7	−1.7
Замещение	0.71	0.61 ± 0.15	−3.3	+0.9

для Cu(111)-$(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30°$-Li. В более глубоких слоях подложки значения межслоевых расстояний соответствуют объемным. Усиление взаимодействия адатом-адатом приводит к появлению незначительных латеральных смещений ($\Delta_{x,y}\sim0.02$ Å) ближайших поверхностных атомов Cu в направлениях от адатомов лития.

Для структуры Cu(111)-(2×2)-0.75 МС Li рассчитанные значения вертикальной релаксации для ближайших к Li атомов Cu приведены в табл. 2. Как можно видеть из табл. 2, максимальные значения релаксации характерны для поверхностного слоя (Δ_{12}). Коробление структуры наблюдается в трех подповерхностных слоях $\delta_{s-1} = 0.05$ Å, $\delta_{s-2} = 0.03$ Å, $\delta_{s-3} = 0.01$ Å. Латеральные смещения вдоль направления $[11\bar{2}]$ составили dy $= \pm 0.01$ Å в Cu_s и dy $= \pm 0.02$ Å в Cu_{s-1} слоях подложки. Эти значения попадают в интервал экспериментальных данных dy $= 0.00 \pm 0.08$ Å в Cu_s и dy $= 0.00 \pm 0.11$ Å в Cu_{s-1}, полученных ДМЭ в работе [9].

На рисунке 2a, b приведены двумерные ЗБ рассматриваемых сверхструктур и правила отражения симметричных точек ЗБ исходной (1×1) структуры. Фононные спектры рассчитывались вдоль всех симметричных направлений двумерной ЗБ и представлены на левой панели рис. 3a–d. Степень локализации, поляризация и энергия колебательных мод адсорбата наглядно представлены локальной плотностью фононных состояний (LDOS) (правая панель рис. 3a–d) и табл. 3. Фононные спектры рассматриваемых субмонослойных структур имеют типичный характер для адатомов в ГЦК положениях адсорбции. В области высоких частот имеется дипольно-активная S-мода (*stretching* – растягивающая), распространяющаяся выше потолка проекции объемных колебаний подложки. Это является отличительной чертой адсорбции лития в ГЦК положениях адсорбции на металлическую поверхность. В низкочастотной области продольные колебания адатомов, гибридизуясь с вертикальными колебаниями подложки, формируют FT-моду (*frustrated translation*) несостоявшихся трансляций в плоскости адслоя.

Для структуры Cu(111)-$p(3 \times 3)$-Li в центре ЗБ (точка $\overline{\Gamma}$) имеются две моды продольных колебаний (см. рис. 3a). Низкочастотная FT-мода, имеющая XY-поляризацию, распространяется в области низкочастотных объемных YZ-колебаний подложки и вдоль всех симметричных направлений ЗБ. Энергия этой моды сохраняет постоянное значение ~ 8 мэВ и в LDOS ей соответствует сильно локализованный низкочастотный пик. В окрестности центра ЗБ эта мода определяется совместными продольными колебаниями адатомов и инициированными ею низкочастотными вертикальными колебаниями атомов с Cu_s слоя. При движении к границе ЗБ (точки $\overline{K'}$ и $\overline{M'}$) состояние становится дисперсным и появляется тенденция к его расщеплению. Это обусловлено гибридизацией FT-моды адсорбата с акустическими модами подложки: одна смешивается преимущественно с X-, а вторая с YZ-поляризованными модами подложки. В области энергий ~ 20 мэВ обнаруживается мода резонансных продольных колебаний адатомов, глубоко распространяющихся в область объемных колебаний подложки из-за усиления взаимодействия с вертикальными колебаниями с Cu_{s-1} и Cu_{s-2} слоев подложки. В LDOS ей соответствует слабо локализованный, размытый пик. S-моде в LDOS соответствует пик Z-колебаний при энергии ~ 46 мэВ, с максимальной локализацией (93 %) на атомах Li и лишь на 7 % на атомах подложки с Cu_s и Cu_{s-1} слоев.

Таблица 3. Энергия (мэВ) колебательных мод Li в симметричных точках двумерной зоны Бриллюэна для адсорбционных структур. Для структуры (2×2)-3Li приведены значения энергии колебаний для разных положений адатомов: (I) ГЦК, (II) замещения, (III) гибридизованные колебания

Структура	$\overline{\Gamma}$	$\overline{K'}$	$\overline{M'}$
(3×3)-Li	8.2	7.9	8.0
	19.8	20.6	20.9
	46.8	45.9	46.5
(2×2)-Li	8.6	5.7	4.9
	–	6.6	7.4
	21.7	20.6	20.9
	46.4	45.4	45.6
$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$-Li	5.2	4.2	1.4
	–	–	5.0
	8.6	7.8	7.1
	19.3	21.0	19.1
	45.0	45.0	44.2
(2×2)-3Li	–	8.8–9.7 (I)	8.6 (I)
	15.2–16.2 (I)	13.2 (II)	13.8 (II)
	20.3–22.8 (II)	–	–
	27.7 (I)	27.2 (III)	26.8 (III)
	–	–	31.5 (III)
	35.7 (I)	35.4 (I)	35.6 (I)
	37.9 (I)	36.9 (II)	36.6 (I)
	53.5 (II)	52.7 (I)	51.4 (II)
	–	–	53.1 (II)

Фононный спектр, LDOS и энергия локализованных мод в симметричных точках ЗБ структуры Cu(111)-$p(2 \times 2)$-Li представлены на рис. 3b и в табл. 3. Обращает на себя внимание низкочастотная FT-мода. Энергия моды в точке $\overline{\Gamma}$ остается практически неизменной, как и для структуры Cu(111)-$p(3 \times 3)$-Li. Однако при движении к границе ЗБ, имеющаяся тенденция к расщеплению усиливается, и в точках $\overline{K'}$ и $\overline{M'}$ наблюдаются две FT-моды с преимущественной Y- или X-поляризацией. При этом в точке $\overline{M'}$ эти моды распространяются уже ниже дна проекции объемных колебаний подложки, а их энергия снижается на 2.7 и 3.7 мэВ соответственно. Степень локализации этих колебаний снижается, а область размытия и низкочастотный сдвиг YZ-колебаний по-

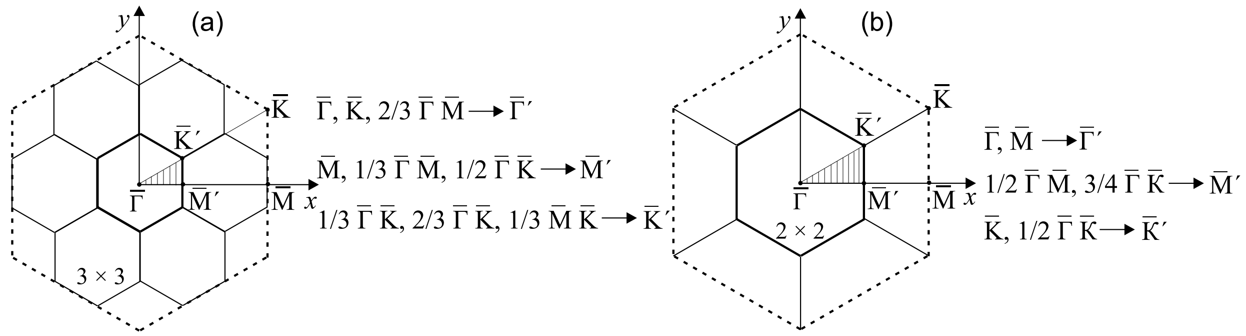


Рис. 2. Двумерные зоны Бриллюэна для сверхструктур с элементарной ячейкой: (a) – (3×3) и (b) – (2×2). Здесь же приведены правила отражения симметричных точек исходной зоны Бриллюэна (1×1)

верхностных атомов подложки увеличивается. Резонансная высокочастотная продольная мода сохраняет свою энергию при незначительном снижении степени локализации. Из таблицы 3 видно, что энергия дипольно-активной S-моды на границе ЗБ также незначительно снижается (см. LDOS на рис. 3b).

Увеличение степени адсорбции до 0.33 MC приводит к появлению в фононном спектре структуры Cu(111)-$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30°$-Li расщепления FT-моды в точке $\overline{\Gamma}$ (рис. 3c). Верхняя по энергии мода (~ 8.5 мэВ) сохраняет XY-поляризацию и соответствует характеру ее распространения в структуре Cu(111)-$p(3 \times 3)$-Li. Нижняя мода (5.2 мэВ в $\overline{\Gamma}$) в направлениях $\overline{\Gamma\text{K}'}$ и $\overline{\Gamma\text{M}'}$ расщепляется на две продольные моды с $X > Y$ и $Y > X$ поляризацией. В точке $\overline{\text{K}'}$ они вырождаются, а в точке $\overline{\text{M}'}$ происходит значительное понижение энергии моды с $X > Y$ поляризацией и энергетическая щель между состояниями возрастает. В фононном спектре в направлении $\overline{\Gamma\text{M}'}$ и в точке $\overline{\text{M}'}$ энергия X-моды снижается до 1.4 мэВ. Анализ рассчитанных векторов поляризации показал, что эта мода в $\overline{\text{M}'}$ определяется неупорядоченными смещениями адатомов, в которых компонента смещений вдоль $[1\bar{1}0]$ имеет наименьшую энергию. Для Y-поляризованного состояния в направлениях $\{110\}$ характерно связанное смещение адатомов, объединенных в тройки. Как видно из LDOS (правая панель рис. 3c) и табл. 3, весь спектр локализованных колебаний в структуре Cu(111)-$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30°$-Li испытывает низкочастотный сдвиг. Для устойчивости адсорбционной структуры такой сдвиг продольных колебаний представляется критическим. Энергия дипольно-активной S-моды составила 45 мэВ в точке $\overline{\Gamma}$ (см. табл. 3). Этот результат согласуется с экспериментальным значением S-моды, равным 43 мэВ [15].

Расчет релаксации системы Li/Cu(111) при достижении степени адсорбции насыщенного монослоя 0.56 MC показал возможность существования энергетически устойчивой структуры Cu(111)-(4×4)-Li, в элементарную ячейку которой входят 9 атомов Li и 16 атомов Cu. Однако расчет фононного спектра показал наличие моды продольных колебаний с мнимой частотой в направлении $\overline{\Gamma\text{M}'}$ двумерной ЗБ, соответствующей данной структуре, что свидетельствует о ее неустойчивости в данном направлении к любым внешним воздействиям.

Геометрия адсорбционной структуры сотового типа Cu(111)-(2×2)-3Li, формирующейся при дальнейшем увеличении степени осаждения до 0.75 MC показана на рис. 1d. Расчет релаксации показал высокую энергетическую устойчивость данной структуры, что согласуется с данными ДМЭ эксперимента [9]. Фононный спектр, LDOS и энергия колебательных состояний, локализованных на адатомах в разных положениях адсорбции приведены на рис. 3d и в табл. 3. Поскольку энергетическая разница между ГЦК и ГПУ 3-х центровыми положениями адсорбции не превышает 0.001 мэВ, то колебательные состояния, локализованные на адатомах в этих положениях, в фононном спектре не разделялись, и при дальнейшем обсуждении будем использовать только термин ГЦК. Как видно на рис. 3d, фононный спектр данной структуры имеет сложный характер. В нем присутствуют моды, характерные как для адслоя, так и для поверхностного сплава. Для атомов Li в ГЦК положениях адсорбции энергия S-моды снижается до 35 мэВ, а энергия FT-моды в точках $\overline{\text{K}'}$ и $\overline{\text{M}'}$ возрастает до ~ 8.5 мэВ, по сравнению с субмонослойными структурами. В то же время, Рэлеевские колебания подложки сильно гибридизованы с FT-колебаниями атомов Li в 6-ти центровых положениях замещения, а Z-колебания этих адатомов смешиваются с продольными колебаниями атомов с поверхностного слоя меди. В обоих случаях колебания распространяются в области объемных фоно-

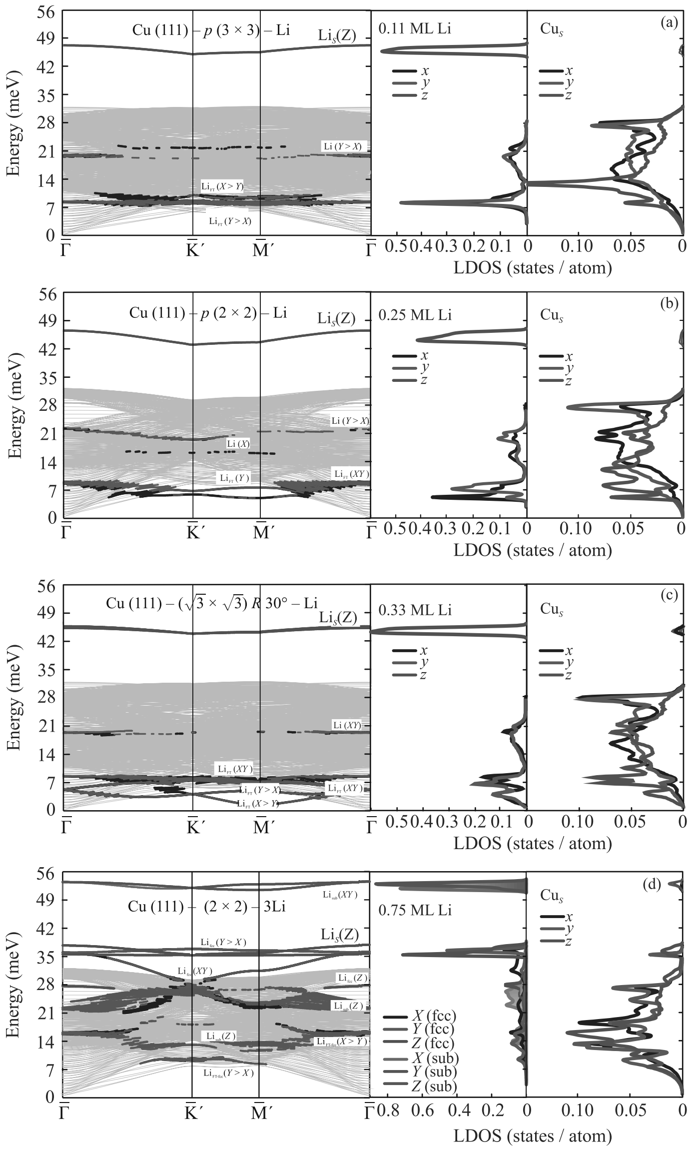


Рис. 3. (Цветной онлайн) (Левая панель) Фононные спектры сверхструктур: (a) – Cu(111)-(3 × 3)-Li; (b) – Cu(111)-p(2 × 2)-Li; (c) – Cu(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)$R30°$-Li; (d) – Cu(111)-(2 × 2)-3Li, рассчитанные вдоль симметричных направлений двумерной ЗБ. Цветными линиями показаны колебательные моды атомов Li, буквами обозначена поляризация локализованных мод. Дипольно-активная мода обозначена Li_s, мода низкочастотных продольных колебаний адатома в 3-центровых положениях адсорбции обозначена $\mathrm{Li}_{\mathrm{FT\text{-}fcc}}$, а в положениях замещения обозначена $\mathrm{Li}_{\mathrm{FT\text{-}sub}}$. (Правая панель) Локальные плотности колебательных состояний (LDOS) представлены раздельно для атомов Li и Cu_s слоя подложки

нов подложки, что обусловлено сильным взаимодействием адатома Li с окружающими атомами поверхностного слоя подложки. Фононный спектр поверхностной структуры сжимается, что отражает существование баланса взаимодействия адатом-адатом и адатом-подложка.

Анализ полученных данных по равновесной структуре и фононам субмонослойных структур лития на поверхности Cu (111) показал, что при низких температурах возможна реализация энергетически и динамически устойчивых структур только при степенях адсорбции до 0.25 МС. Дальнейшее повышение плотности адслоя, вплоть до насыщенного монослоя, которое достигается при степени адсорбции 0.56 МС, приводит к снижению энергии продольных колебаний адатомов лития вдоль направления $\overline{\Gamma}\overline{\mathrm{M}'}$ двумерной ЗБ с минимальным значением в $\overline{\mathrm{M}'}$. Такой низкочастотный сдвиг продольных колебаний, определяемых взаимодействием адатом-адатом, является причиной динамической неустойчивости субмонослойной структуры Li на поверхности Cu(111) при степенях адсорбции 0.33 и 0.56 МС Li вдоль направления $\overline{\Gamma}\overline{M'}$. Также выявлена зависимость энергии S- и FT-мод от степени субмонослойного покрытия, выраженная в снижении их энергии при увеличении плотности адслоя. Проведенные структурные и динамические расчеты для Cu(111)-(2×2)-3Li показали ее высокую устойчивость. Полученные результаты согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена в рамках Госзадания для ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0001.

1. K. Oura, V. G. Lifshits, A. A. Saranin, A. V. Zotov, and M. Katayama, *Surface Science: An Introduction*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2003), 439 p.
2. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **100**, 261 (2014) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **100**, 621 (2014)].
3. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **114**, 82 (2021) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **114**, 85 (2021)].
4. E. V. Chulkov, J. Kliewer, R. Berndt, V. M. Silkin, B. Hellsing, S. Crampin, and P. M. Echenique, Phys. Rev. B **68**, 195422 (2003).
5. C. Corriol, V. M. Silkin, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, E. V. Chulkov, P. M. Echenique, T. von Hofe, J. Kliewer, J. Kröger, and R. Berndt, Phys. Rev. Lett. **95**, 176802 (2005).
6. S. V. Eremeev, I. Yu. Sklyadneva, P. M. Echenique, S. D. Borisova, G. Benedek, G. G. Rusina, and E. V. Chulkov, Surf. Sci. **601**, 4553 (1995).
7. G. Benedek, M. Bernasconi, K.-P. Bohnen, D. Campi, E. V. Chulkov, P. M. Echenique, R. Heid, I. Yu. Sklyadneva, and J. P. Toennies, Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 7159 (2014).
8. R. D. Diehl and R. McGrath, Surface Science Reports **23**, 41, (1996).
9. H. Tochihara and S. Mizuno, Progress in Surface Science **58**, 1 (1998).
10. H. Ishida, Surf. Sci. **242**, 341 (1991).
11. J. M. Carlsson and B. Hellsing, Phys. Rev. B **61**, 13973 (2000).
12. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **109**, 621 (2019) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **109**, 600 (2019)].
13. D. L. Adler, I. R. Collins, X. Liang, S. J. Murray, G. S. Leatherman, and K.-D. Tsuei, Phys. Rev. B **48**, 17445 (1993).
14. L. Padilla-Campos, A. Toro-Labb, and J. Maruani, Surf. Sci. **385**, 24 (1997).
15. S.-A. Lindgren, C. Svensson, L. Wallden, A. Carlsson, and E. Wahlström, Phys. Rev. B **54**, 10912 (1996).
16. S. D. Borisova, G. G. Rusina, S. V. Eremeev, G. Benedek, P. M. Echenique, I. Yu. Sklyadneva, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **74**, 165412 (2006).
17. S. Mizuno, H. Tochihara, A. Barbieri, and M. A. van Hove, Phys. Rev. B **51**, 7981 (1995).
18. L. Verlet, Phys. Rev. **159**, 98 (1967).
19. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, Phys. Rev. B **33**, 7983 (1986).
20. R. A. Johnson, Phys. Rev. B **39**, 12554 (1989).
21. R. Heid and K.-P. Bohnen, Phys. Rep. **387**, 151 (2003).
22. K. H. Chae, H. C. Lu, and T. Gustafsson, Phys. Rev. B **54**, 14082 (1996).

Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 260 – 266

Асимптотика волновой функции для рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием

С. Л. Яковлев[1)]

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

Поступила в редакцию 27 мая 2022 г.
После переработки 23 июня 2022 г.
Принята к публикации 28 июня 2022 г.

Построена координатная асимптотика волновой функции для задачи рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием. Представление трехчастичных гиперсферических функций использовано для редукции уравнения Шредингера к системе парциальных одномерных уравнений. Асимптотические решения этой системы построены прямыми асимптотическими методами.

DOI: 10.31857/S1234567822160121, EDN: jhzvtr

1. Введение. Координатная асимптотика волновой функции для задачи рассеяния играет решающую роль в описании столкновений частиц, так как с ее помощью определяются амплитуды процессов при столкновениях частиц и соответствующие сечения. Для двухчастичных столкновений асимптотический вид волновой функции как суперпозиции сходящейся и расходящейся сферических волн достаточно очевиден. Однако, для трехчастичных столкновений со свободными частицами в начальном состоянии вид асимптотики волновой функции не в полной мере был установлен вплоть до настоящего времени [1]. При этом достаточно полно асимптотика исследована для случая короткодействующих взаимодействий между частицами [2, 3]. Наибольшая трудность связана с построением асимптотики волновой функции для рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием [4]. Попытки улучшить старшие члены асимптотики из [4], сделанные в работах [5, 6] (и в ряде последующих работ авторов и их последователей), вряд ли могут считаться успешными в силу недостаточной полноты подходов этих работ. Следует также упомянуть работу [7], в которой систематически применялся формализм гиперсферических координат для построения приближений для решения задачи ионизации атомов при столкновении с электронами.

В недавней работе автора [8] предложен новый строгий подход для построения асимптотических решений для трехчастичного уравнения Шредингера с короткодействующими потенциалами взаимодействия, основанный на формализме слабых асимптотик и интегральных уравнениях Фаддеева. Такой подход позволил получить корректные асимптотики парциальных компонент волновой функции в представлении гиперсферических гармоник и, как следствие, получить корректные асимптотические граничные условия для уравнения Шредингера в представлении гиперсферических функций. В то же время данный результат открывает путь построения асимптотики волновой функции с помощью асимптотик парциальный компонент, являющихся решением системы одномерных парциальных уравнений. Последнее существенно упрощает формализм, так как сводит задачу построения асимптотики решения многомерного уравнения Шредингера к хорошо контролируемой процедуре нахождения асимптотик решений системы одномерных дифференциальных уравнений для парциальных компонент. Хотя методы разложения решений задачи рассеяния для трех частиц с короткодействующими взаимодействиями по базису гиперсферических функций и разрабатывались в ряде работ, однако достаточной строгости результатов достигнуто не было и кулоновский случай остался не исследованным. Упомянем в этой связи работу [9], а также ссылки на работы других авторов из этой работы. В настоящей работе реализуется новый подход из [8] для построения асимптотики волновой функции для задачи рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием на основе строгих асимптотических методов.

2. Уравнение Шредингера в представлении гиперсферических функций. Гамильтониан системы трех частиц в приведенных (нормированных на соответствующие массовые множители [1]) координатах Якоби имеет вид

$$H = -\Delta_{\mathbf{x}_\beta} - \Delta_{\mathbf{y}_\beta} + \sum_{\gamma=1}^{3} V_\gamma(\mathbf{x}_\gamma).$$

[1)]e-mail: s.yakovlev@spbu.ru

Три пары векторов Якоби $\mathbf{x}_\beta$, $\mathbf{y}_\beta$ с $\beta = 1, 2, 3$, связанные друг с другом ортогональными преобразованиями, образуют конфигурационное пространство $\mathbb{R}^6$ векторов $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta\}$. Гиперсферические координаты состоят из гиперрадиуса $R = \sqrt{\mathbf{x}_\beta^2 + \mathbf{y}_\beta^2}$ и угловых переменных. В качестве последних можно выбрать угловые координаты векторов Якоби $\hat{x}_\beta, \hat{y}_\beta$ и гиперугол $\alpha_\beta = \tan^{-1}(y_\beta/x_\beta)$. Здесь и далее модули векторов обозначаются нежирным шрифтом, например, $x = |\mathbf{x}|$, а символом таким как $\hat{x} = \mathbf{x}/x$ обозначается единичный вектор по направлению вектора $\mathbf{x}$. Хорошо известна форма шестимерного оператора Лапласа $\Delta = \Delta_{\mathbf{x}_\beta} + \Delta_{\mathbf{y}_\beta}$ в гиперсферических координатах $R, \alpha_\beta, \hat{x}_\beta, \hat{y}_\beta$

$$\Delta = R^{-5}\partial_R R^5 \partial_R - R^{-2}\mathbf{K}^2,$$

где оператор квадрата гипермомента $\mathbf{K}^2$ действует только по переменным $\hat{X} = \{\alpha_\beta, \hat{x}_\beta, \hat{y}_\beta\}$. Для целей данной работы явный вид этого оператора не играет существенной роли, тогда как наборы его собственных функций и собственных значений, удовлетворяющих уравнению

$$\mathbf{K}^2 Y_\mathcal{K}(\hat{X}) = k(k+4) Y_\mathcal{K}(\hat{X}), \tag{1}$$

являются главными составляющими формализма разложений по гиперсферическим функциям. В формуле (1) $k = 0, 1, 2, ...$ – целые неотрицательные числа, а мультииндекс $\mathcal{K}$ обозначает полный набор квантовых чисел, специфицирующих собственные функции, например, $\mathcal{K} = \{k, \ell_x, m_x, \ell_y, m_y\}$, где ℓ_x, m_x – квантовые числа момента и его проекции для оператора орбитального момента, отвечающего вектору $\mathbf{x}$, и аналогично для вектора $\mathbf{y}$. В дальнейшем будем систематически пользоваться такими мультииндексами для спецификации парциальных компонент волновой функции и матриц, представляющих гамильтониан и другие величины. Довольно общий и достаточно инвариантный подход к построению гиперсферических функций $Y_\mathcal{K}$ можно найти в [10]. Соотношения ортогональности

$$\int \mathrm{d}\hat{X} Y_\mathcal{K}(\hat{X}) Y^*_{\mathcal{K}'}(\hat{X}) = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}$$

и полноты

$$\sum_\mathcal{K} Y^*_\mathcal{K}(\hat{X}) Y_\mathcal{K}(\hat{X}') = \delta(\hat{X}, \hat{X}')$$

позволяют получить представление гиперсферических функций для волновой функции

$$\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = (PR)^{-5/2} \sum_{\mathcal{K},\mathcal{N}} \Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P) Y_\mathcal{K}(\hat{X}) Y^*_\mathcal{N}(\hat{P}) \tag{2}$$

и уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\ell_k(\ell_k+1)}{R^2} - P^2\right)\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P) = \\ = -\sum_{\mathcal{K}'} V_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}(R)\Psi_{\mathcal{K}'\mathcal{N}}(R, P). \tag{3}$$

Здесь $\ell_k = k + 3/2$. Матричные элементы потенциалов и парциальные компоненты волновой функции даются интегралами

$$V_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}(R) = \sum_{\beta=1}^{3} \int \mathrm{d}\hat{X}\, Y^*_\mathcal{K}(\hat{X}) V_\beta(\mathbf{x}_\beta) Y_{\mathcal{K}'}(\hat{X}),$$

$$\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P) = (PR)^{5/2} \int \mathrm{d}\hat{X}\, \mathrm{d}\hat{P}\, \Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) Y^*_\mathcal{K}(\hat{X}) Y_\mathcal{N}(\hat{P}). \tag{4}$$

Вектор $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^6$ составлен из относительных импульсов $\mathbf{q}_\beta$, $\mathbf{p}_\beta$, задающих свободную динамику частиц в начальном состоянии, и сопряженных якобиевым векторам $\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta$. В данной работе под короткодействующими потенциалами мы понимаем такие функции $V(\mathbf{x})$, которые при $x \to \infty$ убывают как $V(\mathbf{x}) \sim O(x^{-3-\rho})$), $\rho > 0$.

В данной работе рассматривается задача трехчастичного рассеяния с тремя свободными частицами в начальной конфигурации, т.е. $3 \to 3, 2$ рассеяние. Известно, что соответствующая волновая функция имеет довольно сложную асимптотику в полном конфигурационном пространстве $\mathbb{R}^6$ [2, 3]. Эта асимптотика содержит вклады упругого рассеяния $3 \to 3$, включая однократное и двукратное перерассеяние частиц, а также вклады неупругого рассеяния $3 \to 2$ с образованием двухчастичных связанных состояний в конечных конфигурациях.

В работе [8] асимптотика парциальных волн, заданных интегралами (4), вычислена с помощью представления волновой функции, полученного из интегральных уравнений Фаддеева. В отличие от случая полного конфигурационного пространства было строго показано, что главные члены асимптотики при $PR \to \infty$ парциальных компонент $\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P)$ волновой функции $3 \to 3, 2$ содержат вклады только тех процессов, в которых все три частицы находятся в состояниях непрерывного спектра как до, так и после взаимодействия. Такая асимптотическая фильтрация происходит благодаря интегрированию в (4) волновой функции с гладкими базисными функциями [8]. Также в работе [8] показано, что альтернативно эту асимптотику можно построить, используя асимптотические решения парциального уравнения Шредингера (3). Последний результат мы приводим здесь как основу для дальнейшего обобщения на случай потенциалов кулоновского взаимодействия между частицами. Для этого асимптотику парциальных компонент из [8] удобно записать в виде

$$\Psi_{\mathcal{KN}}(R,P) \sim \frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{-i(RP-\ell_k\pi/2)}\delta_{\mathcal{KN}} - \right. \\ \left. -e^{+i(RP-\ell_k\pi/2)} S_{\mathcal{KN}} \right]. \quad (5)$$

Здесь $S_{\mathcal{KN}}$ - элементы S-матрицы, отвечающие переходам между состояниями в которых частицы свободны как до, так и после взаимодействия. Из (5) следует, что функциональный вид этой асимптотики определяется решениями уравнений (3) при сохранении в них только самых старших при $PR \to \infty$ членов

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 \right) e^{\pm i(RP)} = 0. \quad (6)$$

Важно отметить, что несмотря на то, что в уравнении (6) отсутствует центробежный член, дополнительные фазы волн в (5) содержат в неявном виде информацию об этом члене, так как выполняется асимптотическое равенство

$$h^{\pm}_{\ell_k}(PR) \sim e^{\pm i(RP-\ell_k\pi/2)},$$

в котором функции Риккати–Ханкеля $h^{\pm}_{\ell_k}(PR)$ [11] удовлетворяют уже уравнению с центробежным членом

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\ell_k(\ell_k+1)}{R^2} - P^2 \right) h^{\pm}_{\ell_k}(R,P) = 0.$$

Асимптотика (5) теперь может быть заменена на эквивалентную в терминах функций Риккати–Ханкеля

$$\Psi_{\mathcal{KN}}(R,P) \sim \frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}} \left[h^{-}_{\ell_k}(PR)\delta_{\mathcal{KN}} - h^{+}_{\ell_k}(PR) S_{\mathcal{KN}} \right]. \quad (7)$$

Функция в правой части (7) удовлетворяет уравнениям (3) при $PR \to \infty$ с невязкой, определяемой только матричными элементами потенциалов $O(V_{\mathcal{KN}}(R))$, ведущих себя в короткодействующем случае как $O(R^{-3})$. В результате асимптотика решения задачи рассеяния для уравнений (3) построена как суперпозиция асимптотических решений этих уравнений, заданных функциями Риккати–Ханкеля $h^{\pm}_{\ell_k}$, которая явно учитывает центробежные члены.

3. Построение асимптотических решений и асимптотики решения задачи рассеяния для уравнения Шредингера с кулоновскими потенциалами. Основной целью настоящей работы является обобщение асимптотических представлений (5) и (7), используя метод, описанный в предыдущем разделе, для случая кулоновских взаимодействий между частицами

$$V_\beta(\mathbf{x}_\beta) = \frac{c_\beta}{x_\beta}.$$

Мы допускаем как отталкивающие $c_\beta > 0$, так и притягивающие $c_\beta < 0$ кулоновские взаимодействия между частицами. Система уравнений (3) для случая кулоновских взаимодействий приобретает вид

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\ell_k(\ell_k+1)}{R^2} - P^2 \right) \Psi_{\mathcal{KN}}(R,P) + \\ + \sum_{\mathcal{K}'} \frac{C_{\mathcal{KK}'}}{R} \Psi_{\mathcal{K}'\mathcal{N}}(R,P) = 0, \quad (8)$$

где матричные элементы зарядовой матрицы $C_{\mathcal{KK}'}$ даются интегралами

$$C_{\mathcal{KK}'} = \sum_{\beta=1}^{3} c_\beta \int \mathrm{d}\hat{X}\, \frac{Y^*_{\mathcal{K}}(\hat{X}) Y_{\mathcal{K}'}(\hat{X})}{\cos\alpha_\beta}. \quad (9)$$

Поскольку $\mathrm{d}\hat{X} = (\sin\alpha_\beta)^2(\cos\alpha_\beta)^2 d\alpha_\beta d\hat{x}_\beta d\hat{y}_\beta$ при каждом β, то интегралы в (9) не сингулярны.

Для дальнейшего полезно перейти к матричным обозначениям. Введем в рассмотрение матрицы $\mathbb{L}$, $\mathbb{C}$ и матрицу-функцию $\mathbb{F}(R,P)$ с матричными элементами вида

$$[\mathbb{L}]_{\mathcal{KK}'} = \ell_k(\ell_k+1)\delta_{\mathcal{KK}'}, \quad [\mathbb{C}]_{\mathcal{KK}'} = C_{\mathcal{KK}'},$$

и

$$[\mathbb{F}]_{\mathcal{KN}}(R,P) = \Psi_{\mathcal{KN}}(R,P).$$

С помощью этих матриц перепишем систему уравнений (8) в виде

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 + \frac{1}{R}\mathbb{C} + \frac{1}{R^2}\mathbb{L} \right) \mathbb{F}(R,P) = 0. \quad (10)$$

Необходимые для задачи рассеяния $3 \to 3, 2$ асимптотические решения уравнения (10) построим в два этапа.

На первом этапе воспользуемся тем, что, как показано в предыдущем разделе, старшие члены асимптотических решений должны определяться решениями уравнений (10), в которых можно пренебречь членами порядка $O(R^{-2})$ и меньше

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 + \frac{1}{R}\mathbb{C} \right) \mathbb{F}_0(R,P) = 0. \quad (11)$$

Явные решения этого уравнения типа сходящихся и расходящихся волн строятся с помощью процедуры диагонализации зарядовой матрицы $\mathbb{C}$

$$\mathbb{V}^\dagger \mathbb{C} \mathbb{V} = \mathbb{D}_0,$$

где $\mathbb{D}_0$ – диагональная матрица с матричными элементами вида

$$[\mathbb{D}_0]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} d_{\mathcal{K}}.$$

Значек † здесь и далее означает эрмитово сопряжение матриц. В результате такой диагонализации уравнение (11) приводится к виду

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 + \frac{1}{R}\mathbb{D}_0\right)\hat{\mathbb{F}}_0(R,P) = 0 \qquad (12)$$

для $\hat{\mathbb{F}}_0(R,P) = \mathbb{V}^{\dagger}\mathbb{F}_0(R,P)\mathbb{V}$ с диагональной матрицей зарядов $\mathbb{D}_0$. Матричные элементы решений для уравнения (12) типа сходящихся и расходящихся волн выберем в виде

$$[\hat{\mathbb{U}}_0^{\mp}(PR)]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}\frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}}u_0^{\mp}(\eta_{\mathcal{K}}, PR - \ell_k\pi/2), \quad (13)$$

где $\eta_{\mathcal{K}} = d_{\mathcal{K}}/(2P)$. Функции $u_0^{\pm}(\eta,z)$ даются в терминах регулярной F_0 и нерегулярной G_0 кулоновских функций [11] формулами

$$u_0^{\pm}(\eta,z) = e^{\mp i\sigma_0(\eta)}[G_0(\eta,z) \pm iF_0(\eta,z)],$$

в которых $\sigma_0(\eta) = \arg\Gamma(1+i\eta)$, и имеют следующую асимптотику при $|z| \to \infty$

$$u_0^{\pm}(\eta,z) \sim e^{\pm i(z-\eta\ln 2z)}.$$

Используя матрицы-функции $\hat{\mathbb{U}}_0^{\pm}(R,P)$, построим соответствующие решения уравнения (12) в виде

$$\mathbb{U}_0^{\pm}(R,P) = \mathbb{V}\hat{\mathbb{U}}_0^{\pm}(R,P)\mathbb{V}^{\dagger}.$$

Следующая линейная комбинация сходящихся и расходящихся волн $\mathbb{U}_0^{\mp}(R,P)$

$$\mathbb{F}_0(R,P) = \mathbb{U}_0^{-}(R,P) - \mathbb{U}_0^{+}(R,P)\mathbb{S}_c \qquad (14)$$

теперь является искомым решением недиагонализованного уравнения (11), которое представляет собой прямой аналог правой части формулы (5) для кулоновского случая. Вместе с тем матрица-функция $\mathbb{F}_0(R,P)$ дает старший член асимптотики решения задачи рассеяния для полного уравнения (10)

$$\mathbb{F}(R,P) \sim \mathbb{F}_0(R,P). \qquad (15)$$

Как и в случае короткодействующих потенциалов, в этих формулах величина $\mathbb{S}_c$ имеет смысл S-матрицы, отвечающей переходам между состояниями, в которых все три частицы находятся в состояниях непрерывного спектра. Следует подчеркнуть, что благодаря тому, что кулоновские функции $u_0^{\pm}(\eta,z)$ обладают свойством $u_0^{\pm}(0,z) = e^{\pm iz}$ формула (15) при $\mathbb{C} = 0$ преходит в (5). Так же, как и в случае короткодействующих потенциалов, правая часть (15) удовлетворяет полному уравнению (10) с невязкой $O(R^{-2})$. Итак, мы построили старшие члены асимптотики парциальных компонент волновой функции для системы трех частиц с кулоновским взаимодействием как прямое обобщение асимптотики (5).

Перейдем ко второму этапу построения асимптотических решений уравнения (10), на котором учтем центробежный член. Поскольку матрицы $\mathbb{C}$ и $\mathbb{L}$ не коммутируют в общем случае, то построить искомые решения простой заменой в формулах типа (14) функций $u_0^{\pm}$ на функции

$$u_{\ell}^{\pm}(\eta,z) = e^{\mp i\sigma_{\ell}(\eta)}[G_{\ell}(\eta,z) \pm iF_{\ell}(\eta,z)],$$

где F_ℓ и G_ℓ – кулоновские функции, отвечающие моменту ℓ, и $\sigma_\ell(\eta) = \arg\Gamma(\ell+1+i\eta)$, подобно тому как это было сделано в предыдущем разделе для случая короткодействующих потенциалов, не получится. Для построения требуемых асимптотических решений используем метод, аналогичный методу адиабатических разложений. Диагонализуем R-зависящую матрицу $\mathbb{C} + \frac{1}{R}\mathbb{L}$

$$\mathbb{W}^{\dagger}(R)\left[\mathbb{C} + \frac{1}{R}\mathbb{L}\right]\mathbb{W}(R) = \mathbb{D}(R).$$

Здесь $\mathbb{W}(R)$ – унитарна, а $\mathbb{D}(R)$ – диагональна. Представляя решение уравнения (10) в виде

$$\mathbb{F}(R,P) = \mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{F}}(R,P)\mathbb{W}^{\dagger}(R), \qquad (16)$$

получаем для $\hat{\mathbb{F}}(R,P)$ уравнение

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R}\mathbb{D}(R) - P^2\right)\hat{\mathbb{F}}(R,P) =$$
$$2\mathbb{W}^{\dagger}(R)\frac{d\mathbb{W}(R)}{dR}\frac{d\hat{\mathbb{F}}(R,P)}{dR} + \mathbb{W}^{\dagger}(R)\frac{d^2\mathbb{W}(R)}{dR^2}\hat{\mathbb{F}}(R,P). \qquad (17)$$

Решение уравнения (17) требуется при $R \to \infty$, поэтому матрицы $\mathbb{W}(R)$ и $\mathbb{D}(R)$ достаточно построить при больших значениях R как следующие разложения по обратным степеням R

$$\mathbb{D}(R) = \mathbb{D}^{(0)} + \frac{1}{R}\mathbb{D}^{(1)} + O(R^{-2}),$$
$$\mathbb{W}(R) = \mathbb{W}^{(0)} + \frac{1}{R}\mathbb{W}^{(1)} + O(R^{-2}). \qquad (18)$$

Для независящих от R матриц $\mathbb{D}^{(j)}$, $\mathbb{W}^{(j)}$ получаются стандартные уравнения теории возмущений

$$\mathbb{C}\mathbb{W}^{(0)} = \mathbb{W}^{(0)}\mathbb{D}^{(0)}, \qquad (19)$$
$$\mathbb{C}\mathbb{W}^{(1)} - \mathbb{W}^{(1)}\mathbb{D}^{(0)} = \mathbb{W}^{(0)}\mathbb{D}^{(1)} - \mathbb{L}\mathbb{W}^{(0)}. \qquad (20)$$

Из (19) следует, что матрица $\mathbb{W}^{(0)}$ диагонализует $\mathbb{C}$ и, следовательно, $\mathbb{W}^{(0)} = \mathbb{V}$ и $\mathbb{D}^{(0)} = \mathbb{D}_0$, так что

$$[\mathbb{D}^{(0)}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} d_{\mathcal{K}}.$$

Условие разрешимости уравнения (20) стандартным образом позволяет найти матрицу $\mathbb{D}^{(1)}$

$$[\mathbb{D}^{(1)}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} d^{(1)}_{\mathcal{K}}, \quad d^{(1)}_{\mathcal{K}} = \left[\mathbb{V}^\dagger \mathbb{L} \mathbb{V}\right]_{\mathcal{K}\mathcal{K}}.$$

Заметим, что в силу неотрицательности матрицы $\mathbb{L}$ для диагональных элементов матрицы $\mathbb{D}^{(1)}$ выполняется неравенство

$$d^{(1)}_{\mathcal{K}} \geq 0.$$

Матричные элементы решения уравнения (20) даются при этом формулами

$$[\mathbb{W}^{(1)}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = -\sum_{\mathcal{N}\neq\mathcal{K}'} [\mathbb{V}]_{\mathcal{K}\mathcal{N}} \frac{[\mathbb{V}^\dagger \mathbb{L} \mathbb{V}]_{\mathcal{N}\mathcal{K}'}}{d_{\mathcal{N}} - d_{\mathcal{K}'}}.$$

Вычисляя производные от $\mathbb{W}(R)$ с помощью (18), получаем

$$\mathbb{W}^\dagger(R) \frac{d}{dR} \mathbb{W}(R) = -\frac{1}{R^2} \mathbb{V}^\dagger \mathbb{W}^{(1)} + O(R^{-3}),$$
$$\mathbb{W}^\dagger(R) \frac{d^2}{dR^2} \mathbb{W}(R) = \frac{2}{R^3} \mathbb{V}^\dagger \mathbb{W}^{(1)} + O(R^{-4}).$$

С помощью этих выражений преобразуем уравнение (17) к виду

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R}\mathbb{D}^{(0)} + \frac{1}{R^2}\mathbb{D}^{(1)} - P^2\right)\hat{\mathbb{F}}(R,P) + \\ + \frac{2}{R^2} \mathbb{V}^\dagger \mathbb{W}^{(1)} \frac{d\hat{\mathbb{F}}(R,P)}{dR} = O(R^{-3}), \quad (21)$$

где в $O(R^{-3})$ собраны члены, убывающие при $R \to \infty$ как $1/R^{-3}$ и быстрее. Подчеркнем, что единственная недиагональная в (21) матрица $\mathbb{V}^\dagger \mathbb{W}^{(1)}$ имеет по построению нулевую диагональ. Для решения уравнения (21) воспользуемся методами, разработанными в [13] для уравнений подобного типа. Решим сначала диагональную систему

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R}\mathbb{D}^{(0)} + \frac{1}{R^2}\mathbb{D}^{(1)} - P^2\right)\check{\mathbb{U}}(R,P) = 0.$$

Два набора решений этого уравнения типа сходящихся и расходящихся волн выберем согласовано с (13) в виде

$$[\check{\mathbb{U}}^{\mp}(PR)]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} \frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}} u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}}, PR).$$

Здесь $L_{\mathcal{K}} = -1/2 + \sqrt{1/4 + d^{(1)}_{\mathcal{K}}}$ – неотрицательное решение уравнения $L_{\mathcal{K}}(L_{\mathcal{K}}+1) = d^{(1)}_{\mathcal{K}}$, а $u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}}, PR)$ – кулоновские сходящиеся и расходящиеся волны [11, 12], удовлетворяющие уравнению

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{d_{L_{\mathcal{K}}}}{R} + \frac{L_{\mathcal{K}}(L_{\mathcal{K}}+1)}{R^2} - P^2\right) u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}}, PR) = 0$$

и имеющие при $R \to \infty$ асимптотику

$$u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}}, PR) \sim e^{\mp i(PR - \eta_{\mathcal{K}} \ln(2PK) - L_{\mathcal{K}}\pi/2)}.$$

Нам осталось учесть недиагональный член в уравнении (21). В работе [13] показано, что решения уравнения такого типа как (21) могут быть построены с помощью представления

$$\hat{\mathbb{U}}^{\pm}(R,P) = \mathbb{Z}^{\pm}(R,P)\check{\mathbb{U}}^{\pm}(R,P). \quad (22)$$

Для амплитуд $\mathbb{Z}^{\pm}$ после подстановки этого выражения в (21) получаются следующие уравнения

$$-\frac{1}{R}[\mathbb{D}^{(0)}, \mathbb{Z}^{\pm}] + \frac{1}{R^2}[\mathbb{D}^{(1)}, \mathbb{Z}^{\pm}] - \\ -\frac{d^2\mathbb{Z}^{\pm}}{dR^2} - 2\frac{d\mathbb{Z}^{\pm}}{dR}\frac{d\check{\mathbb{U}}^{\pm}}{dR}(\check{\mathbb{U}}^{\pm})^{-1} + \\ + \frac{2}{R^2}\mathbb{A}\frac{d\mathbb{Z}^{\pm}}{dR} + \frac{2}{R^2}\mathbb{A}\mathbb{Z}^{\pm}\frac{d\check{\mathbb{U}}^{\pm}}{dR}(\check{\mathbb{U}}^{\pm})^{-1} = O(R^{-3}),$$

где для краткости введено обозначение $\mathbb{A} = \mathbb{V}^\dagger \mathbb{W}^{(1)}$, а через $[.,.]$ обозначен коммутатор матриц. Асимптотическое решение для $\mathbb{Z}^{\pm}$ построим в виде

$$\mathbb{Z}^{\pm}(R,P) = \mathbb{Z}^{(0)\pm} + \frac{1}{R}\mathbb{Z}^{(1)\pm} + O(R^{-2}) \quad (23)$$

и, воспользовавшись асимптотикой

$$\frac{d\check{\mathbb{U}}^{\pm}}{dR}(\check{\mathbb{U}}^{\pm})^{-1} = \pm iP\mathbb{I} + O(R^{-1})$$

из [13], где $\mathbb{I}$ – единичная матрица, придем к следующему уравнению

$$\frac{1}{R}\left[\mathbb{D}^{(0)}, \left(\mathbb{Z}^{(0)\pm} + \frac{1}{R}\mathbb{Z}^{(1)\pm}\right)\right] + \frac{1}{R^2}[\mathbb{D}^{(1)}, \mathbb{Z}^{(0)\pm}] + \\ + \frac{(\pm 2iP)}{R^2}\mathbb{Z}^{(1)\pm} + \frac{(\pm 2iP)}{R^2}\mathbb{A}\mathbb{Z}^{(0)\pm} = O(R^{-3}),$$

в котором сохранены в явном виде члены до порядка $O(R^{-2})$ включительно. Приравнивая члены с одинаковыми степенями $1/R$, для $\mathbb{Z}^{(0)\pm}$ и $\mathbb{Z}^{(1)\pm}$ получаем уравнения

$$[\mathbb{D}^{(0)}, \mathbb{Z}^{(0)\pm}] = 0, \quad (24)$$

$$(\pm 2iP)\mathbb{Z}^{(1)\pm} + [\mathbb{D}^{(0)}, \mathbb{Z}^{(1)\pm}] = -[\mathbb{D}^{(1)}, \mathbb{Z}^{(0)\pm}] - \\ -(\pm 2iP)\mathbb{A}\mathbb{Z}^{(0)\pm}. \quad (25)$$

Из первого уравнения (24) следует, что $\mathbb{Z}^{(0)\pm}$ является произвольной диагональной матрицей. Из второго уравнения (25) находим матричные элементы матрицы $\mathbb{Z}^{(1)\pm}$

$$[\mathbb{Z}^{(1)\pm}]_{\mathcal{KN}} = -(1-\delta_{KN})\frac{(\pm 2iP)[\mathbb{A}]_{\mathcal{KN}}}{d_{\mathcal{K}} - d_{\mathcal{N}} \pm 2iP}[\mathbb{Z}^{(0)\pm}]_{\mathcal{NN}}. \tag{26}$$

Итак, формулы (22) по построению дают асимптотические решения уравнения (17) с невязкой $O(R^{-3})$ и тем самым решают задачу построения асимптотических решений, учитывающих центробежный член. Нетрудно видеть, что в старшем порядке при $R \to \infty$ выполняется соотношение

$$\hat{\mathbb{U}}^{\pm}(R,P) \sim \mathbb{Z}_0^{\pm}\hat{\mathbb{U}}_0^{\pm}(R,P) + O(R^{-1}). \tag{27}$$

Последнее позволяет устранить произвол в решениях в выборе $\mathbb{Z}_0^{\pm}$, положив $\mathbb{Z}_0^{\pm} = \mathbb{I}$.

Асимптотические граничные условия для задачи рассеяния для уравнения (17) вновь задаются в виде суперпозиции

$$\hat{\mathbb{F}}(R,P) \sim \hat{\mathbb{U}}^{-}(R,P) - \hat{\mathbb{U}}^{+}(R,P)\hat{\mathbb{S}}_c.$$

Для решения задачи рассеяния для исходного уравнения (10) получаем отсюда следующую асимптотику

$$\mathbb{F}(R,P) \sim \mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{U}}^{-}(R,P)\mathbb{W}^{\dagger}(R) - \\ -\mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{U}}^{+}(R,P)\mathbb{W}^{\dagger}(R)\mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{S}}_c\mathbb{W}^{\dagger}(R). \tag{28}$$

Правая часть (28) с использованием (18) для $\mathbb{W}(R)$ по построению удовлетворяет уравнению (10) с невязкой $O(R^{-3})$ и тем самым формула (28) решает задачу построения асимптотики решения задачи рассеяния для случая кулоновских потенциалов, учитывающую центробежный член. Величина $\mathbb{S}_c = \mathbb{V}\hat{\mathbb{S}}_c\mathbb{V}^{\dagger}$, как и выше, играет роль S-матрицы, отвечающей переходам между конфигурациями, в которых все три частицы находятся в состояниях непрерывного спектра. Здесь мы подчеркнем прямую наследственность этого факта результату работы [8], в которой строго доказано, что все процессы, связанные с реакциями образования связанных состояний при столкновениях в системе трех частиц с короткодействующими взаимодействиями, не дают вклада в старшие члены асимптотики парциальных компонент волновых функций.

Учитывая соотношение (27) и принимая во внимание вид старшего члена для $\mathbb{W}(R)$, легко установить следующее асимптотическое равенство

$$\mathbb{W}(R)[\hat{\mathbb{U}}^{-}(R,P) - \hat{\mathbb{U}}^{+}(R,P)\hat{\mathbb{S}}_c]\mathbb{W}^{\dagger}(R) = \\ = \mathbb{V}[\hat{\mathbb{U}}_0^{-}(R,P) - \hat{\mathbb{U}}_0^{+}(R,P)\hat{\mathbb{S}}_c]\mathbb{V}^{\dagger} + O(R^{-1}). \tag{29}$$

На основании (29) можем утверждать, что асимптотически при $R \to \infty$ формулы (28) и (15) эквивалентны в старшем порядке

$$\mathbb{F}(R,P) = \mathbb{F}_0(R,P) + O(R^{-1})$$

при условии $\mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{S}}_c\mathbb{W}^{\dagger}(R) = \mathbb{S}_c + O(R^{-1})$. Поскольку выше показано, что правая часть (15) при $\mathbb{C} = 0$ превращается в правую часть формулы (5), то и асимптотическое представление (28) обладает таким же свойством. Важно также подчеркнуть, что асимптотическое представление (28), учитывающее центробежные члены в кулоновском случае, при $\mathbb{C} = 0$ непосредственно переходит в представление (7) для задачи рассеяния без кулоновских взаимодействий, учитывающее центробежные члены в уравнении (3), соответственно.

S-матрица $\mathbb{S}_c$, входящая в полученные асимптотические представления, в рамках решения задачи построения асимптотических решений остается неопределенной величиной. Стандартно, ее вычисление должно происходить на этапе нахождения физического решения задачи рассеяния на всем интервале изменения гиперрадиуса $0 \le R < \infty$ и удовлетворяющего нулевому граничному условию $\mathbb{F}(0,P) = 0$ и полученным в данной работе асимптотическим граничным условиям (28). Асимптотическое представление (28) завершает решение задачи построения асимптотики волновой функции задачи рассеяния для системы трех частиц с кулоновским взаимодействием в представлении гиперсферических функций.

В завершение статьи уместно сделать следующий комментарий. В настоящей работе не производилось усечение парциального разложения (2), и, следовательно, матрицы, задействованные в формализме, имеют бесконечную линейную размерность. Как видно из формализма, процедура построения асимптотических решений не зависит от размерности этих матриц. Таким образом, полученная асимптотика волновой функции в этом отношении является точной. Естественно, что при практическом применении бесконечная система уравнений неизбежно должна быть усечена до системы конечного числа, скажем, N уравнений. В этом случае следует ответить на вопрос о сходимости при $N \to \infty$ построенного приближенного решения. Этот вопрос тесно связан с первичными свойствами сходимости парциального разложения волновой функции (2). Вообще говоря, поскольку волновая функция $\Psi(\mathbf{X},\mathbf{P})$ как гладкая и ограниченная функция угловых переменных $\hat{X}$ и $\hat{P}$ интегрируема с квадратом на $\mathbb{S}^5_{\mathbf{X}} \times \mathbb{S}^5_{\mathbf{P}}$ относительно меры $\mathrm{d}\hat{X}\mathrm{d}\hat{P}$, то разложение (2) *априори* сходится в смысле $L_2(\mathbb{S}^5_{\mathbf{X}} \times \mathbb{S}^5_{\mathbf{P}})$. Сходимости такого типа следует ожидать для приближенного решения, если $N \to \infty$. Более подробное рассмотрение свойств сходимости обсуждаемых аппроксимаций выходит за рамки данной статьи. Это планируется сделать в другой публикации.

Исследования выполнены в рамках проекта СПбГУ INI 2021 с использованием Ресурсного центра "Вычислительный центр СПбГУ" (http://cc.spbu.ru).

1. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, М. (1985); [L. D. Faddeev and S. P. Merkuriev, *Quantum Scattering Theory for Several Particle Systems*, Springer, Dordrecht (1993)].
2. С. П. Меркурьев, ТМФ **8**(2), 235 (1971) [S. P. Merkur'ev, Theor. Math. Phys. **8**, 798 (1971)].
3. С. Л. Яковлев, ТМФ **186**(1), 152 (2016) [S. L. Yakovlev, Theor. Math. Phys. **186**(1), 126 (2016)].
4. С. П. Меркурьев, ТМФ **32**, 187 (1977) [S. P. Merkur'ev, Theor. Math. Phys. **32**, 680 (1977)].
5. H. Klar, Z. Phys. D **16**(4), 231 (1990).
6. E. O. Alt and A. M. Mukhamedzhanov, Phys. Rev. A **47**(3), 2004 (1993).
7. R. K. Peterkop, *Theory of Ionization of Atoms* Colorado Associated Univ. Press, Louisville (1977).
8. С. Л. Яковлев, ТМФ **206**(1), 79 (2021).
9. R. Ya. Kezerashvili and S. Rosati, Phys. Lett. B **318**, 23 (1993).
10. Н. Я. Виленкин, *Специальные функции и теория представлений групп*, Наука, М. (1965) [N. Ja. Vilenkin, *Special Functions and the Theory of Group Representations, Transl. Math. Monogr.*, Amer. Math. Soc., Providence, R. I. (1968).
11. M. Abramowitz and I. A. Stegun (editors), *Handbook of Mathematical Functions, Applied Mathematics Series*, National Bureau of Standards, Washington, DC (1972).
12. A. Messiah, *Quantum mechanics*, North Holland Publishing Company, Amsterdam (1962).
13. С. Л. Яковлев, ТМФ **203**(2), 269 (2020).

Содержание
Том 116, выпуск 3
Поля, частицы, ядра

Оптика, лазерная физика

Конденсированное состояние

Методы теоретической физики

Содержание
Том 116, выпуск 4

Методы теоретической физики