

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 116

Выпуск 5

10 сентября 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

© Российская академия наук, 2022

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

Neutron polarization observables in $d(\vec{\gamma}, \vec{n})p$ at low energies of interest to astrophysics

S. P. Shilpashree¹⁾, Venkataramana Shastri

School of Engineering and Technology, CHRIST (Deemed to be University), 560074 Bangalore, India

Submitted 20 April 2022

Resubmitted 28 June 2022

Accepted 15 July 2022

DOI: 10.31857/S1234567822170013, EDN: jrmfdi

Deuteron being the simplest nuclei with a proton neutron pair, is an example for a bound two-body system that has been studied for many decades now. Precise knowledge of the reactions $d + \gamma \leftrightarrow n + p$ play very important role in Nuclear Physics, to understand Nucleon–Nucleon interactions, in Solar Physics, pp -chain reactions [1, 2] and in Astrophysics in sharpening the predictions on Big Bang Nucleosynthesis [3] along with the inputs from other reactions involving ${}^3\text{He}$, ${}^4\text{He}$, ${}^7\text{Li}$ and ${}^7\text{Be}$ [4]. Experimental measurements have been carried out by radiative capture on neutrons by protons [5, 6]. On the other hand several experimental measurements [7–12] have been carried out on $d + \gamma \rightarrow n + p$ at the Duke Free Electron Laser Laboratory using High Intensity γ -ray Source (HIGS).

Although it was known quite early that the thermal neutron capture by protons is dominated by the isovector magnetic dipole amplitude $M1_v$, Breit and Rustgi [13] were the first to propose a polarized target-beam experiment to look for an isoscalar $M1_s$ amplitude in view of the then existing 10% discrepancy between theory and experiment. The suggestion was more or less ignored in view of the surprising accuracy with which the 10% discrepancy was explained [14] as due to Meson exchange currents (MEC). However, the measured values for analyzing powers in $p(\vec{n}, \gamma)d$ as well as for neutron polarization in photodisintegration of the deuteron were both found to differ [15, 16] from theoretical calculations which included MEC effects. Rustgi, Vyas and Chopra [17] drew attention to the unambiguous disagreement between experiment and theory on $d(\gamma, n)p$ at photon energy 2.75 MeV which widens when two body effects are taken into account.

Attention was focused on photon polarization in $n-p$ fusion reaction [18]. In this paper it was shown that the photon polarization which arises due to the interference of isovector $M1$ amplitude with isoscalar $M1$ and $E2$ amplitudes can be studied using polarized beam and tar-

get experiment. On the other hand the role of isoscalar amplitudes was highlighted in the theoretical study on analyzing powers in $d + \gamma \rightarrow n + p$ [19] with unpolarized photons. Theoretical analysis of the photodisintegration of deuterons with aligned deuteron targets and linearly polarized photon beams was carried out [20] in which an analysis of the experimental data of [21] was also presented.

It is pertinent to mention that several photo-nuclear reactions on polarized deuterons are being studied at higher energies using linearly polarized photons at the VEPP-3 storage rings [22–24]. Since the advent of polarization measurements, there are new mysteries and polarization of emerging neutron (P'_y) in reaction $d(\gamma, \vec{n})p$ is a good example. There is also a mention about the unsolved puzzle of P'_y in the work of Gilman and Gross [25]. Working in the framework of pion less effective field theory with dibaryons [26] for neutron polarization showed a significant discrepancy with experiment [27], which points to “The necessity of further studies both experimental and theoretical of the spin observables in the $\gamma d \rightarrow np$ reaction” [26]. This discrepancy is observed at low energies, energies close to those of interest to Big Bang nucleosynthesis, which hinders our understanding of processes in the early universe. We propose to study the polarization of emerging neutron of the reaction $\vec{\gamma} + d \rightarrow \vec{n} + p$ using a model independent irreducible tensor formalism with initially circularly polarized photons. Following [19, 28, 29], we express the reaction matrix as,

$$M(\mu) = \sum_{s=0}^1 \sum_{\lambda=|l-s|}^{l+s} (\mathcal{S}^\lambda(s, 1) \cdot \mathcal{F}^\lambda(s, \mu))$$

in terms of irreducible tensor operators, $\mathcal{S}_\nu^\lambda(s, 1)$ of rank λ in hadron spin space connecting the initial spin 1 state of the deuteron with the final singlet and triplet states, $s = 0, 1$ of the $n-p$ system in the continuum. The irreducible tensor amplitudes, $\mathcal{F}_\nu^\lambda(s, \mu)$ of rank λ are defined following [28]. The density matrix, ρ characterizing the neutron polarization in the final state is then defined in terms of its elements,

¹⁾e-mail: shilpashreesp@gmail.com

$$\rho_{m_n m'_n} = \sum_{K,q} \frac{1}{2} (-1)^q [K] C\left(\frac{1}{2} K \frac{1}{2}; m'_n - q m_n\right) \mathcal{P}_q^K, \quad (1)$$

where

$$\mathcal{P}_q^K = \frac{1}{3\sqrt{2}} \sum_{s,s',\lambda,\lambda'} (-1)^{s+s'+1} [s]^2 [s']^2 [\lambda][\lambda'] W(s'\lambda's\lambda; 1K) W\left(s \frac{1}{2} s' \frac{1}{2}; \frac{1}{2} K\right) \left(\mathcal{F}^\lambda(s, \mu) \otimes \mathcal{F}^{\lambda'}(s', \mu)\right)_q^K. \quad (2)$$

The neutron polarization \mathcal{P} is thus obtained on comparing ρ with the standard form $\rho = \frac{1}{2} [1 + \sigma \cdot \mathcal{P}]$.

In this contribution, we have studied the neutron polarization using model independent formalism for $d(\vec{\gamma}, \vec{n})p$ reaction with unpolarized photons and with two circular polarization states of the photon. The experimental observation [21] at 14 and 16 MeV, that all the 3 $E1_v^{j=0,1,2}$ amplitudes are not equal is quite encouraging enough. Since the possible role of $M1_s$ and $E2_s$ amplitudes has been discussed by several authors using different formalism in the past, we feel it is necessary to carry out measurements on neutron polarization in addition to differential cross section. We hope that the experimental measurements on neutron polarization with circularly polarized photons will clarify the role of the isoscalar multipole amplitudes at near threshold energies.

This is an excerpt of the article “Neutron polarization observables in $d(\vec{\gamma}, \vec{n})p$ at low energies of interest to astrophysics”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601506

1. E. G. Adelberger, S. M. Austin, J. N. Bahcall, A. B. Balantekin, G. Bogaert, L. S. Brown, L. Buchmann, F. E. Cecil, A. E. Champagne, L. De Braeckelee, and C. A. Duba, *Rev. of Mod. Phys.* **70**, 1265 (1998).
2. E. G. Adelberger, A. García, R. H. Robertson, K. A. Snover, A. B. Balantekin, K. Heeger, M. J. Ramsey-Musolf, D. Bemmerer, A. Junghans, C. A. Bertulani, and J. W. Chen, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 195 (2011).
3. S. Burles, K. M. Nollett, J. W. Truran, and M. S. Turner, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4176 (1999).
4. B. D. Fields, K. A. Olive, T. H. Yeh, and C. Young, *JCAP* **03**, 010 (2020).
5. T. S. Suzuki, Y. Nagai, T. Shima, T. Kikuchi, H. Sato, T. Kii, and M. Igashira, *Astrophys. J.* **439**, L59 (1995).
6. Y. Nagai, T. S. Suzuki, T. Kikuchi, T. Shima, T. Kii, H. Sato, and M. Igashira, *Phy. Rev. C* **56**, 3173 (1997).
7. E. C. Schreiber, R. S. Canon, B. T. Crowley, C. R. Howell, J. H. Kelley, V. N. Litvinenko, S. O. Nelson, S. H. Park, I. V. Pinayev, R. M. Prior, and K. Sabourov, *Phys. Rev. C* **61**, 061604 (2000).

8. W. Tornow, N. G. Czakon, C. R. Howell, A. Hutcheson, J. H. Kelley, V. N. Litvinenko, S. Mikhailov, I. V. Pinayev, G. J. Weisel, and H. Witała, *Mod. Phys. Lett. A* **18**, 282 (2003).
9. W. Tornow, N. G. Czakon, C. R. Howell, A. Hutcheson, J. H. Kelley, V. H. Litvinenko, S. F. Mikhailov, I. V. Pinayev, G. J. Weisel, and H. Witała, *Phys. Lett. B* **574**, 8 (2003).
10. B. D. Sawatzky, *Ph. D. Thesis*, University of Virginia (2005); <http://kanga.usask.ca/nucleus/node/40>.
11. M. A. Blackston, *Ph. D. Thesis*, Duke University (2007); https://nucldata.tunl.duke.edu/nucldata/Theses/TUNL_Theses.shtm.
12. M. W. Ahmed, M. A. Blackston, B. A. Perdue, W. Tornow, H. R. Weller, B. Norum, B. Sawatzky, R. M. Prior, and M. C. Spraker, *Phys. Rev. C* **77**, 044005 (2008).
13. G. Breit and M. L. Rustgi, *Phys. Rev.* **165**, 1075 (1968).
14. D. O. Riska and G. E. Brown, *Phys. Letter. B* **38**, 193 (1972).
15. R. J. Holt, K. Stephenson, and J. R. Specht, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 577 (1983).
16. J. P. Soderstrum and L. D. Knutson, *Phys. Rev. C* **35**, 1246 (1987).
17. M. L. Rustgi, R. Vyas, and M. Chopra, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 236 (1983).
18. G. Ramachandran, P. N. Deepak, and S. Prasanna Kumar, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **29**, L45 (2003).
19. G. Ramachandran, Y. Y. Oo, and S. P. Shilpashree, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **32**, B17 (2006).
20. S. P. Shilpashree, S. Sirsi, and G. Ramachandran, *Int. Jour. of Mod. Phys. E* **22**, 1350030 (2013).
21. M. A. Blackston, M. W. Ahmed, B. A. Perdue, H. R. Weller, B. Bewer, R. E. Pywell, W. A. Wurtz, R. Igarashi, S. Kucuker, B. Norum, and K. Wang, *Phys. Rev. C* **78** 034003 (2008).
22. I. A. Rachek, H. Arenhövel, L. M. Barkov, S. L. Belostotsky, V. F. Dmitriev, V. V. Gauzshteyn, R. Gilman, A. V. Gramolin, R. J. Holt, B. A. Lazarenko, and A. Y. Loginov, *J. Phys. Conf. Ser.* **295**, 012106 (2011).
23. S. A. Zevakov, V. V. Gauzshteyn, R. A. Golovin, A. V. Gramolin, V. F. Dmitriev, R. R. Dusaev, B. A. Lazarenko, S. I. Mishnev, D. M. Nikolenko, I. A. Rachek, and R. S. Sadykov, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **78**, 611 (2014).
24. D. M. Nikolenko, L. M. Barkov, V. F. Dmitriev, S. A. Zevakov, B. A. Lazarenko, S. I. Mishnev, A. V. Osipov, I. A. Rachek, R. S. Sadykov, V. N. Stibunov, and D. K. Toporkov, *JETP Lett.* **89**, 432 (2009).
25. R. Gilman and F. Gross, <https://arxiv.org/pdf/nucl-th/0111015.pdf>.
26. S. I. Ando, Y. H. Song, C. H. Hyun, and K. Kubodera, *Phys. Rev. C* **83**, 064002 (2011).
27. R. W. Jewell, W. John, J. E. Sherwood, and D. H. White, *Phys. Rev.* **139**, B71 (1965).
28. G. Ramachandran and S. P. Shilpashree, *Phys. Rev. C* **74**(5), 052801 (2006).
29. S. P. Shilpashree, *Phys. Scr.* **97**, 075003 (2022).

Метод угловых инвариантов – эксперимент

Л. А. Федюхин⁺¹⁾, Е. А. Колосовский⁺, А. В. Горчаков*

⁺Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 27 июня 2022 г.

После переработки 4 июля 2022 г.

Принята к публикации 19 июля 2022 г.

Предложен метод прецизионного измерения и алгоритм расчета показателя преломления прозрачных оптических материалов, исключая из наблюдаемых параметров длину взаимодействия зондирующего излучения с образцом. Впервые экспериментально определены инварианты углов коэффициента отражения/пропускания. Экспериментальная реализация метода осуществлена на плоскопараллельных пластинах сапфира.

DOI: 10.31857/S1234567822170025, EDN: jsggyt

Введение. “Несмотря на наличие различных, хорошо разработанных методов определения оптических параметров кристаллов, вопрос об отыскании новых методов, дополняющих существующие и свободных от некоторых их недостатков, сохраняет свое значение и в настоящее время”. Ф. И. Федоров, “Оптика анизотропных сред”, 1958 г. [1].

Методы измерения показателей преломления (ПП) оптических материалов весьма разнообразны [2–4]. Применение того или иного метода диктуется конкретным объектом и целью измерения с учетом используемых приборов и заданной погрешности. В последнее время существенно возрос интерес к прецизионному измерению ПП [5–7]. К этому обязывает все более высокая производительность, сложность моделирования и изготовления, требуемая в настоящее время от устройств на основе волноводов [8–9]. Значения ПП используемых материалов для этого необходимо знать с точностью 10^{-4} . Прецизионные измерения ПП являются важным элементом технологии проектирования оптических приборов высокого разрешения, большой числовой апертуры, с минимальными сферическими и хроматическими аберрациями [3]. Существующие методы, обеспечивающие прецизионную точность, требуют приготовления образцов специальной формы – призм достаточно больших размеров с хорошо обработанными гранями, заданными значениями углов и размеров граней. Процесс весьма затратный, измерения трудно поддаются автоматизации и занимают часы. Главное – расчет ПП в этих методах использует модель идеальной границы раздела

сред, что не совместимо с требованием обеспечить необходимую точность.

В большинстве случаев обязательным условием при расчете ПП по измеренным значениям наблюдаемых параметров является непосредственное измерение длины взаимодействия зондирующего излучения с материалом. Исключением является расчет ПП по измерению угла Брюстера – минимума энергетического коэффициента отражения (R -коэффициента) зондирующего излучения, поляризованного в плоскости падения. Несмотря на очевидную простоту, метод практически не используется, поскольку предъявляет весьма жесткие требования к формированию границы раздела между образцом и окружающей средой. Корректное использование метода изложено в [10]. В [11] предложено использовать в качестве наблюдаемых параметров угловое положение трех последовательных интерференционных минимумов, формирующихся при отражении от границы раздела плоской монохроматической электромагнитной волны, поляризованной в плоскости падения (p -волны). Значения углов интерференционных минимумов связаны инвариантными соотношениями, что позволяет при расчете ПП исключить из наблюдаемых параметров длину взаимодействия зондирующего излучения с образцом. В настоящей работе предложена экспериментальная методика определения инвариантов коэффициентов отражения/пропускания (R/T -коэффициентов) на этой основе и алгоритм расчета ПП прозрачного оптического материала.

Модель инвариантов. Для плоскопараллельной пластины с идеальными границами раздела сред (на рис. 1 толщины буферных слоев $d_2 = 0$) в области прозрачности угловое положение минимумов

¹⁾e-mail: leogal2007@mail.ru

R -коэффициента совпадает с угловым положением максимумов T -коэффициента p -волны. Значения углов падения θ_m , при которых формируются экстремумы (только минимумы R -коэффициента или только максимумы T -коэффициента), определяются интерференционным условием на фазовую толщину ψ пластины:

$$\psi = 2\pi \frac{d_3}{\lambda} \sqrt{n_3^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_m} = \pi m.$$

Здесь: n_1, n_3 – показатели преломления сред; d_3 – толщина пластины; λ – длина волны зондирующего излучения; m – абсолютный номер экстремума; что для θ_m дает:

$$\sin^2 \theta_m = \frac{n_3^2}{n_1^2} - \frac{1}{n_1^2} \left(\frac{\lambda m}{d_3} \right)^2. \quad (1)$$

Целочисленный параметр m является абсолютным идентификатором экстремума. Максимальное значение m имеет первый от нормали экстремум. С ростом угла падения параметр m убывает.

Углы интерференционных экстремумов θ_m связаны инвариантными соотношениями [10]:

$$\text{In } v_\varepsilon = \sin^2 \theta_m - \frac{4 \sin^2 \theta_{m+1} - 3 \sin^2 \theta_m - \sin^2 \theta_{m+2}}{8(\sin^2 \theta_{m+2} - 2 \sin^2 \theta_{m+1} + \sin^2 \theta_m)};$$

$$\text{In } v_d = \sin^2 \theta_{m+2} - 2 \sin^2 \theta_m + \sin^2 \theta_m.$$

Величины $\text{In } v_\varepsilon$ и $\text{In } v_d$ содержат только угловые координаты, постоянны для выбранного материала пластины и дают простые формулы для расчета ПП n_3 и толщины d_3 пластины:

$$n_3 = n_1 \sqrt{\text{In } v_\varepsilon}; \quad d_3 = \frac{\lambda}{\sqrt{-2 \text{In } v_d}}. \quad (2)$$

Значение абсолютного идентификатора экстремума m также определяется только угловыми координатами:

$$m = \frac{4 \sin^2 \theta_{m+1} - 3 \sin^2 \theta_m - \sin^2 \theta_{m+2}}{2(\sin^2 \theta_{m+2} - 2 \sin^2 \theta_{m+1} + \sin^2 \theta_m)}.$$

Мы включаем его в набор наблюдаемых параметров эксперимента. В точках экстремума R/T -коэффициентов внутренние параметры структуры (n_3 и d_3) разделены и могут быть определены независимо. Набор экстремумов – θ_m удобно представить в виде компонент вектора-столбца наблюдаемых параметров – θ . Максимальная длина θ (далее – M) – равна числу минимумов в диапазоне углов падения $\{0 \div \frac{\pi}{2}\}$ и однозначно определяется параметрами структуры [11]:

$$M = m_{\max} - m_{\min},$$

$$m_{\max} = 2 \left\lfloor \frac{d_3}{\lambda} n_3 \right\rfloor; \quad m_{\min} = 2 \left\lfloor \frac{d_3}{\lambda} \sqrt{n_3^2 - n_1^2} \right\rfloor. \quad (3)$$

Значение M также включаем в набор наблюдаемых параметров эксперимента.

При экспериментальной реализации метода инвариантов следует учитывать, что практически при любом способе обработки поверхности образца неизбежно возникает отклонение состава/структуры приповерхностного слоя образца, далее буферного слоя, от состава и структуры его объема [12]. В силу этого обстоятельства, значения толщины и ПП, рассчитанные по (2), мы рассматриваем как нулевое приближение для более сложной математической модели, учитывающей наличие буферных слоев. Такой моделью может служить симметричная пятислойная структура (рис. 1). Считаем, что толщины и ПП буферных

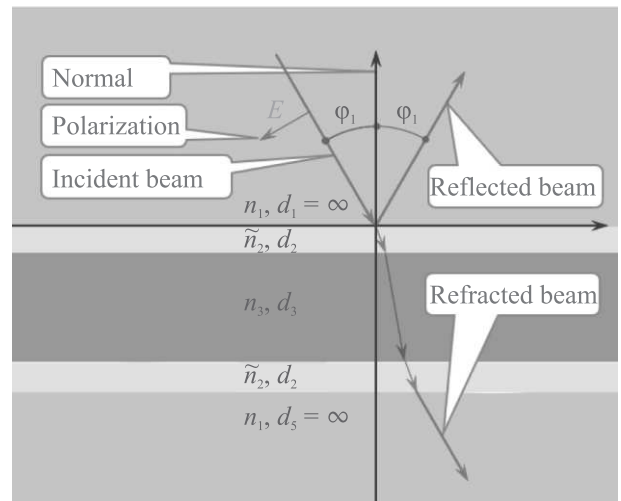


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема симметричной пятислойной структуры

слоев совпадают. Это справедливо при одинаковом способе и качестве обработки поверхностей. Толщины буферных слоев считаем много меньшими толщину пластины. Однако они являются основным источником поглощения зондирующего излучения. Это диктует необходимость включить в модель мнимую добавку к ПП буферного слоя:

$$\tilde{n}_2 = n_2 + ik_2.$$

Алгоритм расчета параметров симметричной пятислойки по известным значениям углового положения экстремумов θ проиллюстрируем численным экспериментом с тестовыми параметрами, близкими к экспериментальной ситуации:

$$\{n_1, n_2, n_3, n_2, n_1\} = \{1.0, 1.73, 1.77, 1.73, 1\};$$

$$\{d_2, d_3, d_2\} = \{20.0, 447000.0, 20.0\} \text{ нм.}$$

Алгоритм заключается в следующем.

◦ По угловому распределению T -коэффициента пятислойки [4, 13] рассчитываем положение экстремумов θ^t тестовой структуры.

◦ По формулам (1) рассчитываем значения толщины d_3 и ПП n_3 пластины, используя тренд экстремумов коэффициента пропускания от номера экстремума. На этом этапе номер экстремума отсчитываем от нормали.

◦ Строим вектор-столбец отклонений между тестовой θ^t и пробной θ^p структурами:

$$\Delta = \theta^t - \theta^p.$$

◦ Рассчитываем минимальное значение целевой функции:

$$F(d_i, n_i) = |\Delta|^2, \quad (4)$$

варьируя параметры структуры $d_2, d_3, \tilde{n}_2, n_3$, при условии, что общая толщина пластины $d = d_3 + 2d_2$ остается неизменной.

Отметим важные особенности использования целевой функции (4).

1. При расчете $F(d_i, n_i)$ принимается во внимание только угловое положение экстремумов. Амплитуды T -коэффициента, существенного источника погрешностей, в расчете не участвуют. Это обстоятельство выгодно отличает (4) от традиционно используемых целевых функций, в которых при расчете отклонения участвуют, как правило, два параметра (к примеру, угол падения φ_1 и R -коэффициент) и оба параметра определяются с некоторой погрешностью.

2. При расходимости светового пучка менее 2×10^{-3} рад смещение экстремумов весьма незначительно – менее $2 \cdot 10^{-5}$ рад и слабо влияет на результат минимизации.

Результат минимизации целевой функции тестовой задачи в координатах $\{n_3, d_3\}$ представлен на рис. 2. Аналогичная динамика прослеживается и в других координатах $F(d_i, n_i) - \{n_2, n_3\}, \{n_2, d_3\}$ и т.п. Проведенный анализ показывает, что минимум $F(d_i, n_i)$ однозначно определяет все четыре вводных параметра структуры и, таким образом, доказывает перспективность метода для его экспериментальной реализации.

Эксперимент. Измерения угловых распределений T -коэффициента проведены на стенде, основные элементы которого представлены на рис. 3. Луч источника ИК-излучения (твердотельный одночастотный лазер BLD-1550-BF-20, длина волны $\lambda = 1549.66$ нм (при $T = 25^\circ\text{C}$), ширина полосы излучения $\Delta f = 100$ кГц) после прохождения через приз-

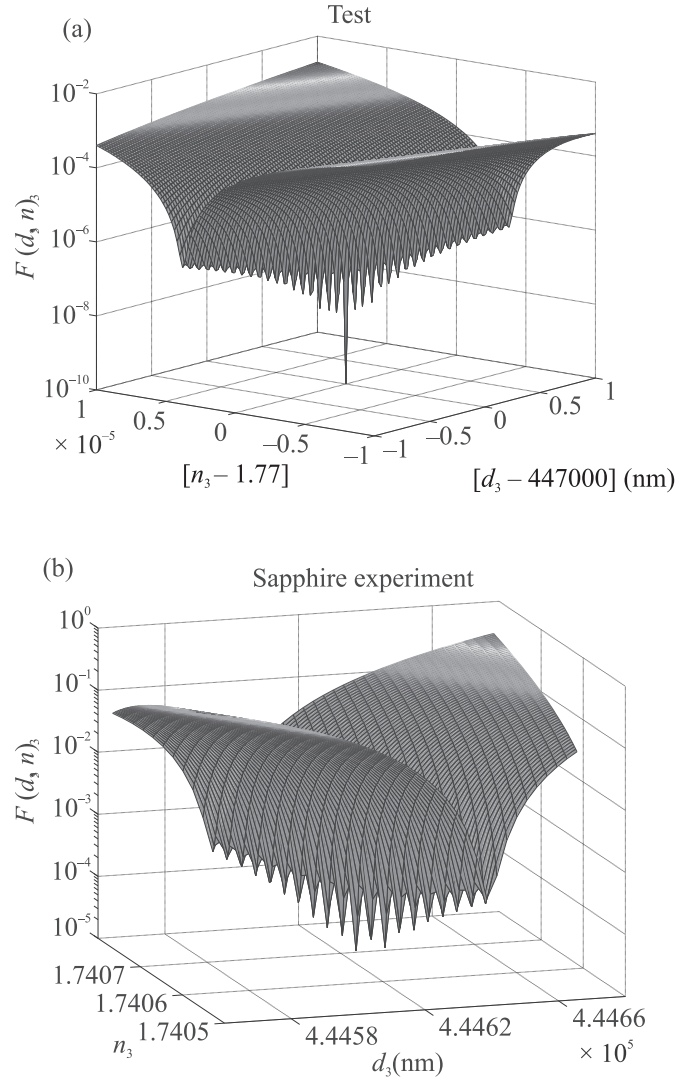


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Динамика минимизации целевой функции $F(d_3, n_3)$ при приближении пробных параметров структуры к тестовым. (б) – Динамика минимизации целевой функции $F(d_3, n_3)$ по экспериментальным значениям углового положения экстремумов T – коэффициента

му Глана и образец, установленный на юстировочном узле, фиксируется фотоприемником. Юстировочный узел с установленным на нем образцом обеспечивает:

- юстировку образца по трем координатным осям и трем осям вращения;
- вариацию углов падения зондирующего излучения на образец в диапазоне ~ 180 градусов;
- точность углового позиционирования рабочей поверхности образца по вертикальной оси вращения ~ 6 угловых с;
- точность позиционирования зондирующего излучения в плоскости образца ~ 1 мкм;

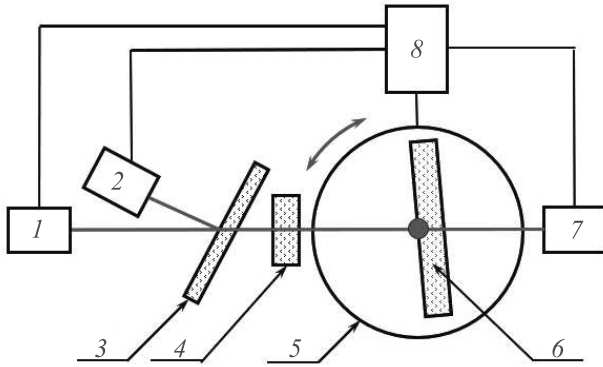


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема экспериментального стенда. 1 – твердотельный одночастотный лазер BLD-1550-BF-20; 2, 7 – ИК-фотоприемники РМ-100; 3 – клиновидный делитель пучка; 4 – призма Глана; 5 – юстировочный узел на базе программно-управляемого поворотного столика Thorlab HDR50; 6 – образец; 8 – автоматизированный блок управления юстировочным узлом и записи измеряемых параметров

- совмещение рабочей поверхности образца с вертикальной осью вращения;
- позиционирование точки падения зондирующего излучения на вертикальную ось вращения;
- время на смену образца и его юстировку ~ 10 мин;
- время автоматического сбора данных в диапазоне 180 град. ~ 12 мин.

Тестирование стенда показало, что апертура зондирующего излучения на рабочей поверхности образца по уровню $1/e$ составляет ~ 2 мм. Расходимость пучка $\sim 2.0 \cdot 10^{-3}$ рад. Стандартное отклонение интенсивности излучения от среднего по времени значения составило не более $\sim 0.5\%$. Эллиптичность излучения после пропускания через призму Глана составила $\sim 2.0 \cdot 10^{-4}$. Совмещение плоскости падения с направлением поляризации падающего излучения осуществляли вращением призмы Глана, устанавливая минимум отраженного сигнала при падении под углом, близком к углу полной поляризации к рабочей поверхности образца. Интенсивности падающего и прошедшего через образец света измеряли одновременно двумя ИК-фотоприемниками РМ-100. Стандартное отклонение отношения этих сигналов от среднего по времени составило не более $\sim 0.01\%$. Динамический диапазон измерения коэффициента отражения при тестировании стенда составил ~ 80 дБ. Температуру помещения с измерительным стендом измеряли датчиком, расположенном вблизи образца. Вариация температуры за время

проведения эксперимента не превышала 0.5 градуса и составляла $\sim 23.8^\circ\text{C}$.

Экспериментальная реализация предложенного алгоритма определения параметров оптического материала осуществлена на пластине сапфира (ориентация C -plane $\langle 0001 \rangle$), толщиной $d = 444 \pm 0.5$ мкм. В ходе проведения предварительных экспериментов измерены пространственные распределения R -коэффициента при углах падения ~ 10 градусов и определено положение оси (ребра) клина пластины. Отклонение коэффициента отражения в зоне падения пучка от среднего не превышало 0.2% . Для исключения влияния (слабой) клиновидности пластины на положение экстремумов образец располагался так, чтобы ось (ребро) клина была параллельна плоскости падения.

Измерена рабочая длина волны излучателя монохроматором МДР-204. Она составила 1549.564 нм при $T = 23.8^\circ\text{C}$.

На рисунке 4 приведена экспериментальная зависимость T -коэффициента в диапазоне углов падения ~ 100 град. В правой ветви распределения $\{0 \div 90$ град $\}$ зафиксирован $N = 181$ экстремум T -коэффициента. В дальнейших расчетах использованы первые 130 экстремумов. По результатам эксперимента рассчитываем значения квадрата синусов углового положения экстремумов $-\sin^2 \theta$ (на рис. 5 помечены красными звездами) и, в соответствии с (1), квадратичный по номеру максимума тренд $\sin^2 \theta$ (на рис. 5 помечен синими звездами). Коэффициент аппроксимации тренда близок к единице, $R = 0.999999$, что свидетельствует о хорошем качестве обработки рабочих поверхностей экспериментального образца и подтверждает правомерность использования симметричной пятислойной модели с тонкими буферными слоями для обработки результатов эксперимента.

Далее рассчитываем значения толщины и ПП пластины в рамках трехслойной модели с идеальными границами раздела сред. Полученные значения используем в качестве стартовых для пятислойной модели:

$$d_{30} = 444.151 \text{ мкм}; \quad n_{30} = 1.7365.$$

Отметим, что значение толщины пластины d_{30} согласуется со значением, полученным прямым измерением (444 ± 0.5 мкм), а значение ПП n_{30} близко к ожидаемому (1.74). В то же время целевая функция вида $F(d_3, n_3)$ имеет достаточно высокое значение ($1.13 \cdot 10^{-3}$), что не позволяет говорить о точности показателя преломления структуры на уровне $1 \cdot 10^{-4}$.

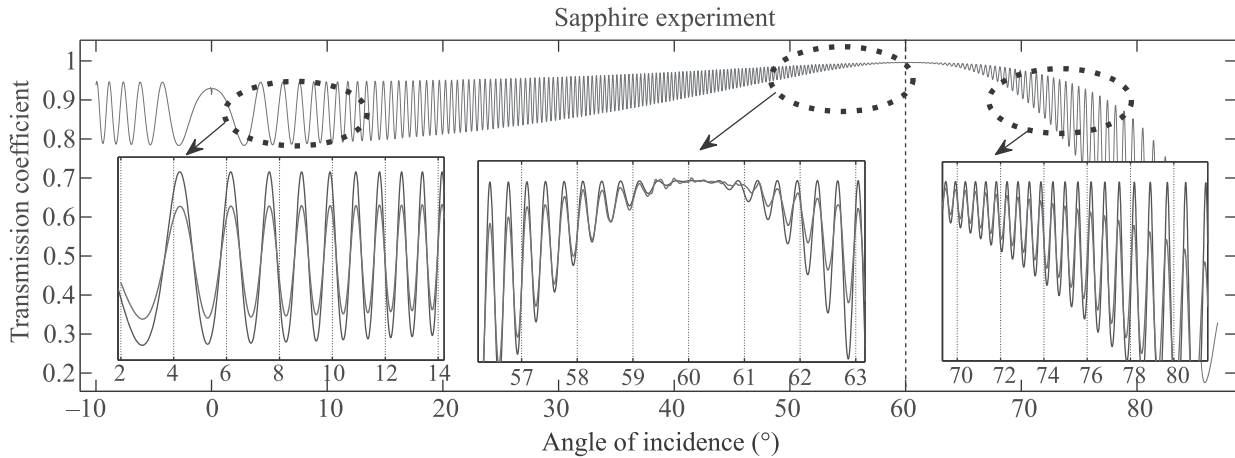


Рис. 4. (Цветной онлайн) Угловое распределение T -коэффициента. Эксперимент (помечено красным цветом). Расчет с параметрами минимизации (помечено синим цветом)

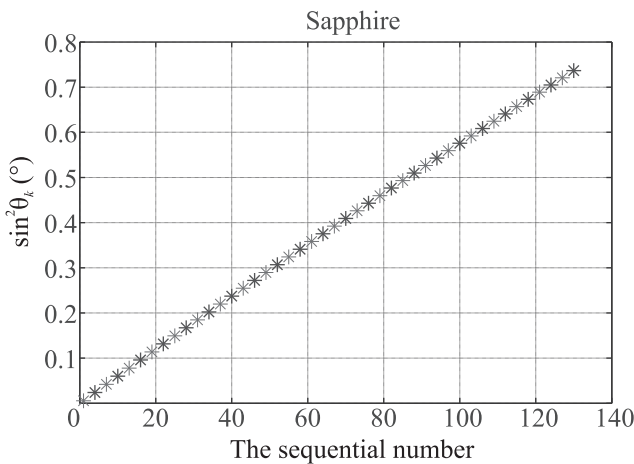


Рис. 5. (Цветной онлайн) Углы падения, при которых формируются экстремумы T -коэффициента (помечены красными звездами). Тренд зависимости, помечен синими звездами Первому номеру от нормали соответствует максимальный абсолютный номер $m = 998$

Минимизация целевой функции структуры с буферными слоями предполагает поиск минимума в фазовом пространстве четвертого порядка. Для оптимизации расчетов необходимо сузить диапазон поиска по возможно большему количеству параметров. Диапазон минимизации по толщине d_3 составляет $\Delta d_3 = 1 \mu\text{м}$, в соответствии с данными толщины используемой пластины сапфира. Диапазон минимизации по ПП пластины n_3 определяется количеством экспериментально наблюдаемых абсолютных максимумов M . В нашем случае $M = 181$. Подставляя граничные значения толщины в (3), для диапазона минимизации по ПП пластины получим $n_3 = n_{30} \pm 0.013$. Диапазон минимизации по толщине бу-

ферного слоя принят равным $0 \div 50 \text{ нм}$, в соответствии с экспериментальными значениями, полученными для ряда стекол [10]. Диапазон вариации ПП буферного слоя варьировали от 1 до 3.

Таблица 1. Значения параметров структуры, полученные алгоритмом минимизации

	Модель инвариантов	Симметричная пяти слойка
Inv_ϵ	3.0155	
Inv_d	$-6.1050 \cdot 10^{-6}$	
$d_3, \text{ нм}$	443500	444620 ± 1.0
n_3	1.737	$1.74068 \pm 4 \cdot 10^{-6}$
$d_2, \text{ нм}$		10 ± 5
n_2		1.52 ± 0.08
k_2		0.018 ± 0.003
$F(d_i, n_i)$	$1.14 \cdot 10^{-3}$	$1.38 \cdot 10^{-5}$

Динамика минимизации целевой функции по полученным экспериментальным данным для сапфира приведена на рис 2b. Детальный анализ показывает, что $F(d_i, n_i)$ уверенно определяет параметры структуры, значения которых приведены в табл. 1. Хотя подгонка функций с множественными экстремумами считается сложной задачей, в нашем случае, как можно видеть из рис. 4, алгоритм с ней справляется.

На рисунке 4 представлены фрагменты угловых распределений T -коэффициента в трех диапазонах углов падения – вблизи нормали, вблизи угла Брюстера (обозначен вертикальной штриховой линией) и за углом Брюстера. Красным цветом обозначены результаты эксперимента. Синим цветом обозначены распределения T -коэффициента, полученные прямым расчетом [4, 14] для симметричной пя-

тислойной структуры с параметрами минимизации. Во всем диапазоне углов падения положение экстремумов обоих распределений визуально совпадает. В то же время амплитуды T -коэффициентов заметно отличаются. Отметим, что каждая точка углового распределения является результатом интерференции световых волн в интерферометре Фабри-Перо, образованном рабочими поверхностями плоскопараллельной пластины. Максимальное (T_m^{\max}) и минимальное (T_m^{\min}) значение T -коэффициентов с номером m определяют контрастность интерференционной картины T_m^{\max}/T_m^{\min} . Видим, что расчетная контрастность глубже экспериментальной. Повышения контрастности можно добиться более качественной обработкой поверхностей материала, уменьшением клиновидности структуры, снижением дифракционной расходимости пучка и другими способами используемыми при конструировании классических интерферометров Фабри-Перо. Проведенный авторами учет слабой клиновидности структуры, а также учет дифракционной расходимости светового пучка показал слабую чувствительность методики к указанным факторам, что является ее сильной стороной. Основная цель эксперимента достигнута – показано, что экстремумы T -коэффициентов позволяют однозначно определить параметры структуры. Стандартное отклонение углового положения экстремумов θ^{exp} от их расчетных значений θ^{min} составляет ~ 17 угловых секунд. Функция распределений отклонений приведена на рис. 6. Как можно видеть, она имеет нормальный несмещенный вид.

Доверительный интервал по уровню 0.99 для параметров $\{n_i, d_i\}$ получен численным расчетом дифференциала T -коэффициента при параметрах минимизации для экстремума с абсолютным значением $m = 948$, при котором изменения максимальны:

$$\begin{cases} \Delta d_2 = 5 \text{ нм}, \\ \Delta d_3 = 1.0 \text{ нм}, \\ \Delta n_2 = 0.03, \\ \Delta n_3 = 4 \cdot 10^{-6}, \\ \Delta k_3 = 0.003. \end{cases}$$

Как можно видеть, уровень доверительного интервала ПП пластины n_3 соответствует лучшим методикам измерения ПП оптических материалов. Проведенные измерения и расчеты позволяют говорить о том, что предложенная интерференционная методика измерения ПП в совокупности с установленными ранее [11] инвариантами углов R/T -коэффициентов является прецизионной. Более того, привлечение инвариантов разделяет измерение ПП

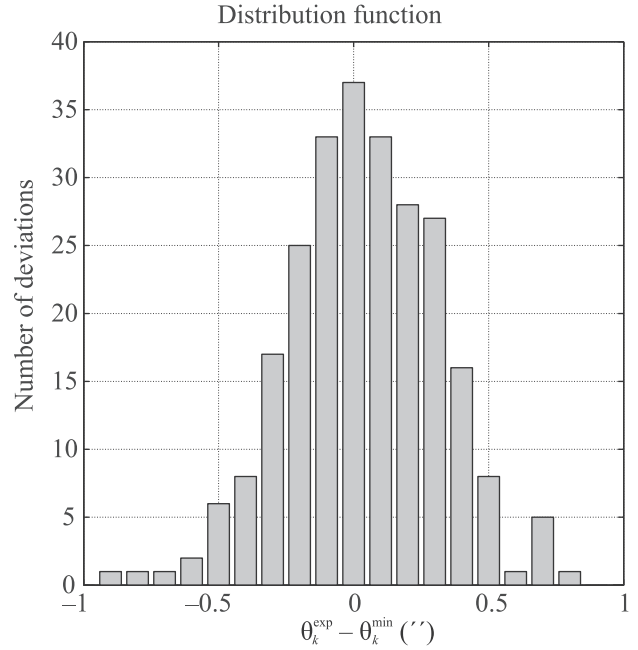


Рис. 6. (Цветной онлайн) Функция распределения отклонений экспериментальных значений положения экстремумов θ^{exp} от их расчетных значений θ^{min}

и толщины пластины, что позволяет говорить о возможности измерения абсолютного значения ПП.

Заключение. Предложен прецизионный метод измерения и алгоритм расчета оптических параметров твердых тел, основанный на модели инвариантов углов R/T -коэффициентов и исключающий необходимость измерения геометрических размеров образца. Возможность независимого измерения показателя преломления и толщины пластины позволяет определить *абсолютные* значения ПП. Метод является разновидностью интерференционного метода измерения ПП. В качестве резонатора выступает сама плоскопараллельная пластина. Это существенное преимущество метода перед классической интерференционной оптической схемой Фабри-Перо, где резонатор образован внешними зеркалами. Для реализации высокой чувствительности классической схемы метода в этом случае требуется “чрезвычайная аккуратность и тщательность в подготовке эксперимента” [14].

Преимуществом метода является учет буферных слоев в модели симметричной пятислойной структуры, что сделано впервые. Предложенный алгоритм минимизации однозначно восстанавливают параметры плоскопараллельной пластины в области прозрачности – $\{\tilde{n}_2, n_3, d_2, d_3\}$. К преимуществам следует отнести возможность измерения ПП в неограниченном диапазоне значений.

Измерение в геометрии “на пропускание” упрощает оптическую схему метода, поскольку не требует подстройки положения фотоприемника при изменении угла падения излучения на структуру. Это позволяет обеспечить возможность измерений в диапазоне углов падения $\pm 90^\circ$, что важно для предлагаемого метода. Геометрия “на пропускание” также является более предпочтительной при автоматизации процесса измерений.

Знание параметров буферных слоев, безусловно, важно при конструировании оптических приборов высокого разрешения, устройств нелинейной и интегральной оптики. Метод может быть полезен для диагностики свойств поверхности оптических материалов на стадии финишной обработки. Метод хорошо поддается автоматизации, что важно при серийном контроле. Авторы считают перспективным применение данного метода в метрологии, в том числе в области создания эталона показателя преломления.

Представленная на рис. 3 схема экспериментального стенда фактически является схемой рефрактометра нового типа. Для измерения ПП требуется плоскопараллельная пластина материала с хорошо обработанными рабочими поверхностями. Расчет ПП основан на модели симметричной пятислойной структуры, учитывающей буферные слои структуры. Процесс измерения автоматизирован. По времени не превышает одного часа.

1. Ф. И. Федоров, *Оптика анизотропных сред*, 2-е изд., испр., Едиториал УРСС, М. (2004).

2. ГОСТ 28869-90 *Межгосударственный стандарт*, ИПК Издательство стандартов, М. (2005).
3. D. V. Leviton and B. J. Frey, *Proceedings of SPIE 6273, Optomechanical Technologies for Astronomy*, 62732K (2006); v. 62734; <https://doi.org/10.1117/12.672853>.
4. С. Н. Свиташева, *Метод эллипсометрии для исследования наноразмерных пленок диэлектриков, полупроводников и металлов*, Издательство СО РАН, Новосибирск (2019).
5. K. Papatryfonos, T. Angelova, A. Brimont, B. Reid, S. Guldin, P. R. Smith, M. Tang, K. Li, A. J. Seeds, and H. Liu, *AIP Advances* **11**(2), 025327-1 (2021).
6. R. Mussina, D. R. Selviah, F. A. Fernandez, A. G. Tjihuis, and B. P. de Hon, *Prog. Electromagn. Res.* **145**, 93 (2014).
7. В. А. Швец, С. В. Рыхлицкий, И. Я. Миттова, Е. В. Томина, *Журнал технической физики* **83**(11), 92 (2013).
8. S. G. Choi, G. C. Hillier, and J. G. J. Adams, *J. Appl. Phys.* **115**, 023510 (2014).
9. S. Gehrsitz, H. Sigg, N. Herres, K. Bachem, K. Köhler, and F. K. Reinhart, *Phys. B* **60**, 11601 (1999).
10. Л. А. Федюхин, А. В. Горчаков, Н. Г. Коробейщиков, И. В. Николаев, *Письма в ЖЭТФ* **114**(5), 304 (2021).
11. Л. А. Федюхин, А. В. Горчаков, Е. А. Колосовский, *Оптика и спектроскопия* **128**(2), 266 (2020).
12. А. М. Ефимов, Е. С. Постников, *Физические основы и формализм оптики и спектроскопии оптических материалов*, Университет ИТМО, СПб. (2015).
13. М. М. Горшков, *Эллипсометрия*, Сов. радио, М. (1974).
14. Н. И. Калитиевский, *Волновая Оптика*, “Высшая Школа”, М. (1995).

Numerical simulation of GaAs/ AlO_x high index contrast sub-wavelength gratings for GaAs-based vertical cavity surface emitting lasers

Y. Luo, Y.-Q. Hao¹⁾

National Key Lab of High-Power Semiconductor Lasers, Changchun University of Science and Technology, 130022 Changchun, China

Submitted 14 June 2022

Resubmitted 1 August 2022

Accepted 2 August 2022

DOI: 10.31857/S1234567822170037, EDN: jsjvvr

Vertical cavity surface emitting lasers (VCSELs) are widely used in many applications because of their superior performances, such as low threshold current, small divergence angle, circular beam profile, two-dimensional array configuration and low power consumption [1–5]. However, VCSEL has some defects, such as multimode operation and unstable polarization, which seriously affect its actual performance. Therefore, some methods were introduced in order to improve its mode and polarization properties. Polarization in VCSELs can be controlled given polarization-dependent gain/loss regions in VCSELs, such as surface relief [6], external-cavity feedback [7], and sub-wavelength grating [8]. Also, high index contrast sub-wavelength grating (HCG) attracts researchers' attention for its ability to control both mode and polarization.

The predominant characteristic of a HCG is that the fringes of high index grating are completely surrounded by low index medium (generally air or silicon dioxide), which forms a large index difference. By adjusting the grating material, thickness, duty cycle and other parameters, its reflectivity can reach more than 99%. It can be used to replace the P -type distributed Bragg reflectors (DBRs) of a VCSEL, which can greatly reduce the series resistance and absorption loss of the device. The HCG mirror can not only decrease the thickness of VCSEL, but also fix polarization. The typical HCG for VCSEL based on GaAs is mostly composed of GaAs/air or Si/SiO₂ [9, 10]. The suspended GaAs/air HCG has some disadvantages, such as complicated fabrication process and poor mechanical stability, while for the HCG with Si/SiO₂ it is difficult to achieve a precise control of its thickness. A GaAs/ AlO_x HCG for a mid-infrared VCSEL based on GaSb has been proposed in [11, 12]. However, a metamorphic growth deteriorates the HCG performance, and the device laser operation couldn't be observed because of a lack of reflectivity of HCG [12].

In this paper, we propose and analyze numerically the GaAs/ AlO_x HCG with the same material system as the half-VCSEL. It can be integrated with VCSEL through one-time epitaxial technology, which is of great significance to obtain high quality wafers. Figure 1 shows the schematic diagram of a HCG, including grat-

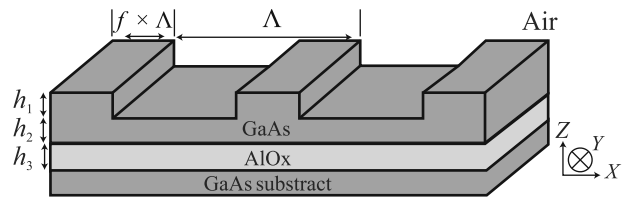


Fig. 1. (Color online) Schematic diagram of HCG: period Λ , fill factor f , grating layer h_1 , stress buffer layer h_2 , low index sub-layer h_3

ing layer, stress buffer layer and low index sub-layer. HCG is composed of GaAs and AlO_x . The AlO_x as the low index sub-layer ($n \approx 1.6$) may be obtained from AlAs by oxidation. The large index difference between the AlO_x and GaAs grating layer ($n \approx 3.538$) will be beneficial to increase the width of the reflection band. Due to a large index contrast and near-wavelength dimensions, there exists a wide wavelength range where only two modes have real propagation constants in the z -direction. The two modes carry similar energy but opposite phases at the HCG output plane, thus causing destructive interference. Finally, the transmission is canceled and all of the energy must be reflected [13]. To improve the stability of HCG, the GaAs layer is not completely etched to form the grating layer and the stress buffer layer.

Based on the RCWA method, a GaAs/ AlO_x TE-HCG mirror for GaAs-based VCSEL is simulated and investigated numerically. The results show that the fill factor and grating thickness are the most critical parameters, because they determine the reflectivity and bandwidth. Furthermore, the stress buffer layer also af-

¹⁾e-mail: hyq72081220@aliyun.com

fects the reflection properties of HCG, whose high reflection band changes periodically with the buffer thickness. However, there is only a little deterioration in the shape of high reflection band even if the fill factor difference between the upper and lower of the grating is up to 5%. Therefore, the GaAs/AlO_x HCG not only makes it easier to integrate with VCSEL, but also can effectively avoid the deterioration of its reflection performance. Moreover, it can be prepared with less difficulty due to its large period, shallow etching depth and large morphology tolerance. Meanwhile, its sensitivity to the incident angles is good for VCSEL to operate with single-mode. The HCG has a large reflection bandwidth up to 97 nm at around 940 nm ($\Delta\lambda/\lambda_0 = 10\%$) with its TE reflectivity more than 99.5% and TM reflectivity lower than 90%. VCSEL integrated with HCG will undoubtedly have the characteristics of smaller size, single mode, and polarization stability. It can match perfectly the tunable diode laser absorption spectroscopy for gas detection.

This is an excerpt of the article "Numerical simulation of GaAs/AlO_x high index contrast sub-wavelength gratings for GaAs-based vertical cavity surface emitting lasers". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601154

1. Z. Zhen-Bo, X. Chen, X. Yi-Yang, Z. Kang, L. Fa, and S. Guang-Di, *Chin. Phys. B* **21**, 3 (2012).
2. P. S. Yeh, C. C. Chang, Y. T. Chen, D. W. Lin, J. S. Liou,

- C. C. Wu, J. H. He, and H. C. Kuo, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 24 (2016).
3. Md. Jarez, K. V. Kalosha, P. Dieter, J. Pohl, and M. Weyers, *Opt. Express*. **24**, 26 (2016).
4. W. Zhen-fu, N. Yong-qiang, Z. Yan, S. Jingjing, Z. Xing, Z. Lisen, W. Wei, L. Di, H. Yongsheng, C. Haibing, L. Qin, L. Yun, and W. Lijun, *Opt. Express*. **18**, 23 (2010).
5. W. Xiao-fa, W. Zheng-mao, and X. Guang-qiong, *Acta Physica Sinica*. **65**, 2 (2016).
6. L. Shuo, G. Bao-lu, S. Guo-zhu, and G. Xia, *Acta Phys. Sin.* **61**, 18 (2012).
7. Z. Tong, J. Zhiwei, W. Anbang, H. Yanhua, W. Longsheng, G. Yuanyuan, and W. Yuncai, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **33**, 7 (2021).
8. Z. Xiang-wei, N. Yong-qiang, Q. Li, L. Yun, and W. Lijun, *Chinese Journal of Luminescence* **34**, 11 (2013).
9. M. C. Y. Huang, Y. Zhou, and C. J. Chang-Hasnain, *Nature Photon.* **1**, 119 (2007).
10. C. Chevallier, N. Fressengeas, F. Genty, and J. Jacquet, *J. Opt.* **13**, 125502 (2011).
11. W. Huang-ming, M. Wen-qin, H. Jin, G. Ding-shan, H. Ran, J. Hong, G. Rui-min, W. Wen-hua, and Z. Zhi-ping, *J. Opt.* **12**, 045703 (2010).
12. Y. Laaroussi, C. Chevallier, F. Genty, L. Cerutti, T. Taliercio, O. Gauthier-Lafaye, P. F. Calmon, B. Reig, and J. Jacquet, *Opt. Mater. Express* **3**, 10 (2013).
13. R. Yi, Y. Weijian, C. Chase, M. C. Y. Huang, D. P. Worland, S. Khaleghi, M. R. Chitgarha, M. Ziyadi, A. E. Willner, and C. J. Chang-Hasnain, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **19**, 4 (2013).

Убегающие электроны при формировании положительной волны ионизации в азоте и воздухе

Д. В. Белоплотов⁺¹⁾, В. Ф. Тарасенко^{+*}, Д. А. Сорокин⁺

⁺ Институт сильноточной электроники Сибирского отделения РАН, 634055 Томск, Россия

^{*} Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

Поступила в редакцию 18 июля 2022 г.

После переработки 25 июля 2022 г.

Принята к публикации 2 августа 2022 г.

Представлены результаты первых экспериментальных исследований генерации убегающих электронов (УЭ) при субнаносекундном пробое промежутка “плоскость–острие” вследствие развития положительной волны ионизации, стартующей от заземленного острейного электрода (анода). С помощью четырехканальной ICCD камеры, стрик-камеры Hamamatsu, а также оригинальной методики измерения тока смещения, вызванного появлением и движением волны ионизации, исследована генерация УЭ с привязкой к динамике волн ионизации в воздухе и азоте при давлении от 20 до 100 кПа. Импульсы тока УЭ длительностью меньше 100 пс наблюдались в воздухе при давлении 60 кПа и ниже, а в азоте – во всем диапазоне давлений. При этом в обоих газах при давлении ниже 50 кПа наблюдались двойные импульсы тока УЭ. Установлено, что генерация УЭ происходит не при старте волны ионизации вблизи острейного электрода, как можно было ожидать, а после ее прибытия на плоский катод. Энергия УЭ в этих условиях меньше напряжения пробоя в 4 и более раз. Полученные данные указывают на то, что генерация УЭ происходит в катодном слое.

DOI: 10.31857/S1234567822170049, EDN: jskkul

Введение. Сегодня генерация убегающих электронов (УЭ) в наносекундных разрядах атмосферного давления является ординарным и широко исследованным явлением [1–14], которое интересно само по себе, а также с точки зрения понимания механизмов предварительной ионизации газа перед фронтом ионизационной волны. Особенно хорошо генерация УЭ исследована в разрядах, формируемых в резко неоднородном электрическом поле. С одной стороны, это обусловлено воспроизводимостью явления в данных условиях, с другой – практическим интересом [15]. Как правило, разряд в резко неоднородном электрическом поле имеет диффузную форму как в чистых атомарных и молекулярных газах, так и в их смесях, а созданная плазма характеризуется высокой температурой электронов и низкой температурой тяжелых частиц [3]. Разряд формируется в диффузной форме в любых газах (даже в SF₆ [16]) при низких и высоких давлениях благодаря ионизирующему действию УЭ, генерируемых в предпробойной стадии разряда в области высокой напряженности электрического поля как вблизи острейного электрода, так и на фронте волны ионизации. Однако это справедливо только в случае развития анодонаправленных (от-

рицательных) волн ионизации. При развитии катодонаправленных (положительных) волн ионизации поток электронов направлен к аноду. Предполагается, что рентгеновское излучение, вызванное торможением УЭ, может обеспечивать предварительную ионизацию газа перед фронтом положительных волн ионизации. Однако генерация УЭ в этих условиях никем никогда не исследовалась экспериментально прямыми методами. Известно только об измерениях рентгеновского излучения различными способами без привязки к динамике субнаносекундного пробоя, а также о теоретических исследованиях [3, 14, 16–20]. В известной литературе нет достоверных данных, могут ли генерироваться УЭ в данных условиях. Какие механизмы при этом работают? Переходят ли электроны в режим убегающего в высоком электрическом поле вблизи острейного анода или на фронте положительной волны ионизации? Какова их энергия? Ответы на эти вопросы важны для понимания того, как развиваются положительные волны ионизации в чистых газах. Тем не менее, разряды в резко неоднородном электрическом поле при положительной полярности имеют диффузную форму как в чистых газах, так и в смесях в широком диапазоне давлений [3, 16]. При этом существующие моде-

¹⁾e-mail: rff.qep.bdim@gmail.com

ли хорошо описывают формирование таких разрядов в воздухе, где предварительная ионизация газа обеспечивается ионизацией молекул кислорода излучением молекул азота [21–27], а также при отрицательной полярности. Однако даже при формировании отрицательных волн ионизации в воздухе роль УЭ существенна [28].

В настоящем исследовании предпринята попытка зарегистрировать импульсы тока УЭ при развитии положительных волн ионизации, а также определить, когда и где генерируются УЭ. Для этого был применен новый метод исследования разряда посредством измерения тока смещения, вызванного перераспределением электрического поля при формировании плазмы [29, 30]. Известно, что изменяющееся во времени электрическое поле вызывает ток смещения. В газоразрядном промежутке токи смещения могут возникать как при изменении внешнего поля (например, при росте и спаде напряжения), так и за счет перераспределения электрического поля при появлении заряженных частиц в результате ионизации газа. Появление стримера (волны ионизации), головка которого имеет объемный заряд, служит причиной перераспределения электрического поля в промежутке. Соответственно, появляется ток смещения. Его величина зависит как от скорости волны ионизации, так и от ее геометрических размеров. Для того чтобы обозначить этот ток смещения особым образом, он был назван динамическим током смещения (ДТС). Ранее, по данным измерений ДТС вместе с током УЭ удалось установить, что УЭ могут генерироваться даже после пробоя промежутка [31, 32].

Экспериментальная установка и методики измерений. Исследования проводились на установке, показанной на рис. 1а. Газоразрядная камера оснащалась двумя передающими линиями ($Z = 75 \text{ Ом}$) со встроенными емкостными делителями напряжения. Длина одной линии составляет 1 м. Это сделало возможным измерять одновременно падающую и отраженную от промежутка волны напряжения и восстанавливать напряжение на промежутке средствами осциллографа непосредственно во время проведения эксперимента. Ток УЭ измерялся коллектором, изготовленным из коаксиального кабеля Radiolab 5D-FB PVC ($Z = 50 \text{ Ом}$). Диаметр центральной жилы кабеля составляет 1.8 мм. Конец кабеля без внешней оболочки устанавливался в металлическую трубку диаметром 6 мм, являющуюся частью заземленного электрода. Медная диафрагма диаметром 1.8 мм была впаяна в торец трубки. Расстояние между диафрагмой и концом центральной жилы кабеля составляло $\approx 1 \text{ мм}$. Таким образом, сиг-

нал формировался только теми УЭ, которые двигались в направлении жилы кабеля (коллектора). Заземленный электрод был выполнен в форме усеченного конуса из сетки (пропускание 40%) толщиной 100 мкм. Диаметры большего и меньшего основания усеченного конуса составляли 6 и 2 мм соответственно. Кромка меньшего основания усеченного конуса обеспечивала усиление напряженности электрического поля, как показано на рис. 1б, в. Расчет распределений потенциала и напряженности электрического поля производился с помощью программного обеспечения ELCUT 4.1 в двумерной осесимметричной постановке. Высоковольтный электрод был выполнен также в форме конуса из цельного куска алюминия. Диаметр большего основания конуса, обращенного к заземленному электроду, составлял 22 мм, а его кромка была скруглена. Расстояние d между электродами составляло 5 мм.

В экспериментах использовались генераторы наносекундных импульсов напряжения на основе FID-технологии [33]. Генератор ГИН-55-01 формировал на согласованную нагрузку импульсы напряжения отрицательной полярности амплитудой -37 кВ , длительностью на полувывоте 0.7 нс и временем нарастания 0.7 нс, а генератор ГИН-50-1 – импульсы напряжения положительной полярности амплитудой 12 кВ, длительностью на полувывоте 13 нс и временем нарастания 2.2 нс.

При исследовании генерации УЭ с привязкой к динамике формирования положительной волны ионизации необходимо было измерять отдельно и вместе ток УЭ и ток смещения.

Измерение только тока смещения I_{displ} . Для этого необходимо было исключить попадание УЭ на коллектор. Это обеспечивалось за счет помещения бумаги для принтера толщиной около 100 мкм перед диафрагмой коллектора. В эксперименте записывалось около 100 осциллограмм.

Измерение только тока УЭ I_{RES} . Необходимо исключить ток смещения. Для этого металлическая мелкоячеистая сетка устанавливалась в диафрагму. В эксперименте записывалось также около 100 осциллограмм.

Измерение тока УЭ и тока смещения одновременно $I_{\text{RES}} + I_{\text{displ}}$. Перебирая сетки с различным размером ячеек, были достигнуты условия, при которых ток УЭ и ток смещения были одного порядка величины. В эксперименте записывалось также около 100 осциллограмм.

Из всей совокупности данных выбирались осциллограммы с одинаковым временем запаздывания пробоя. Затем они сравнивались.

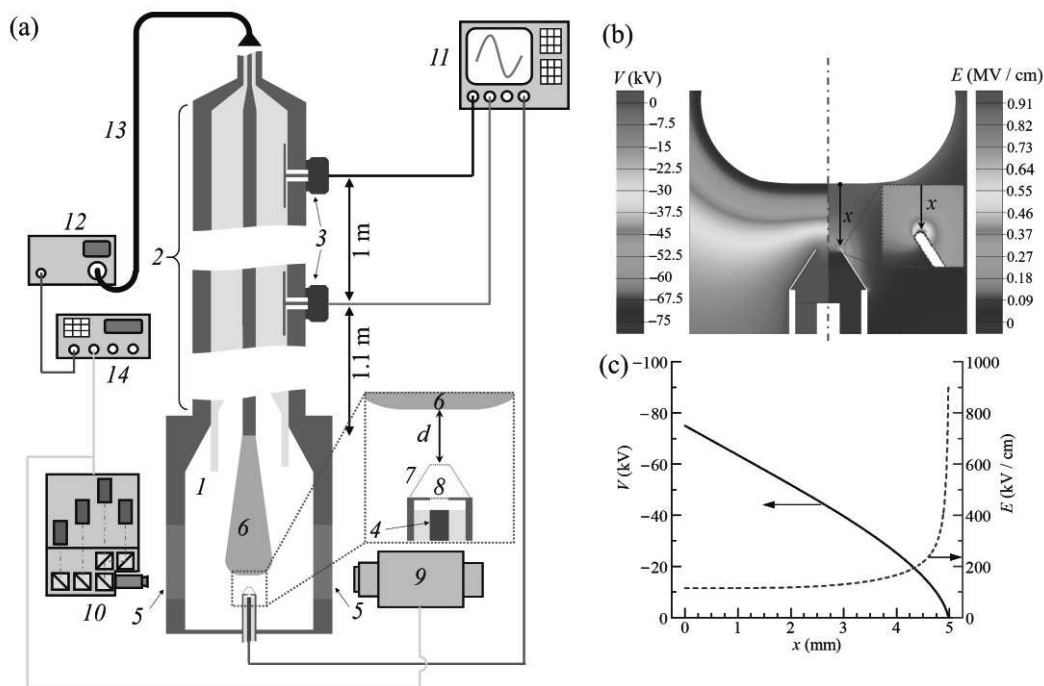


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схема экспериментальной установки. 1 – газоразрядная камера; 2 – коаксиальная передающая линия; 3 – емкостные делители напряжения; 4 – приемная часть коллектора (жила коаксиального кабеля Radiolab 5D-FB PVC); 5 – кварцевое окно; 6 – высоковольтный электрод; 7 – заземленный электрод из сетки; 8 – диафрагма с сеткой либо с кусочком листа бумаги для принтера; 9 – стрик-камера; 10 – четырехканальная ICCD камера; 11 – осциллограф; 12 – высоковольтный генератор; 13 – высоковольтный коаксиальный кабель; 14 – генератор запускающих импульсов. (б), (с) – Распределение потенциала и напряженности электрического поля в газоразрядном промежутке

Формирование разряда исследовалось оптическими методами с применением четырехканальной ICCD камеры HSFC-PRO и стрик-камеры Hamamatsu C10910-05 во время измерения тока УЭ и тока смещения. Минимальная длительность экспозиции ICCD камеры составляет 3 нс. Однако задержка между каналами может варьироваться в диапазоне 0.2–3 нс. Входная щель стрик-камеры была ориентирована вдоль линии, перпендикулярной поверхности высоковольтного электрода и проходящей через кромку заземленного электрода. Ширина щели составляла 0.02 мм, что обеспечило временное разрешение порядка 10 пс.

Сигналы с емкостного делителя напряжения и коллектора записывались осциллографом Tektronix MSO64B (8 ГГц, 20 ГС/с).

Газоразрядная камера откачивалась форвакуумным насосом и заполнялась воздухом либо азотом. Давление варьировалось в диапазоне 20–100 кПа.

Результаты и их обсуждение. При подаче импульсов напряжения отрицательной полярности амплитудой -37 кВ, длительностью на полувысоте

0.7 нс и временем нарастания 0.7 нс на промежутки, заполненный воздухом либо азотом, наблюдался диффузный разряд во всем исследуемом диапазоне давлений. При давлении 100 кПа наблюдались отдельные диффузные каналы, но при уменьшении давления они сливались.

На рисунке 2а, б представлены изображения свечения плазмы разряда в воздухе и азоте при давлении 50 кПа в различные моменты времени, полученные с помощью четырехканальной ICCD камеры за один импульс. Изображения С1–С3 на рис. 2а, б демонстрируют формирование разряда, а изображение С4 – интегральное за импульс свечение. Видно, что плазма появляется вблизи заземленного острейшего электрода (анода), где электрическое поле усилено (рис. 1а, б). Постепенно фронт плазмы перемещается в направлении плоского высоковольтного электрода. Это положительная волна ионизации. После замыкания промежутка плазмой наблюдаются диффузный разряд, катодные и анодные пятна, а также темное пространство вблизи катода.

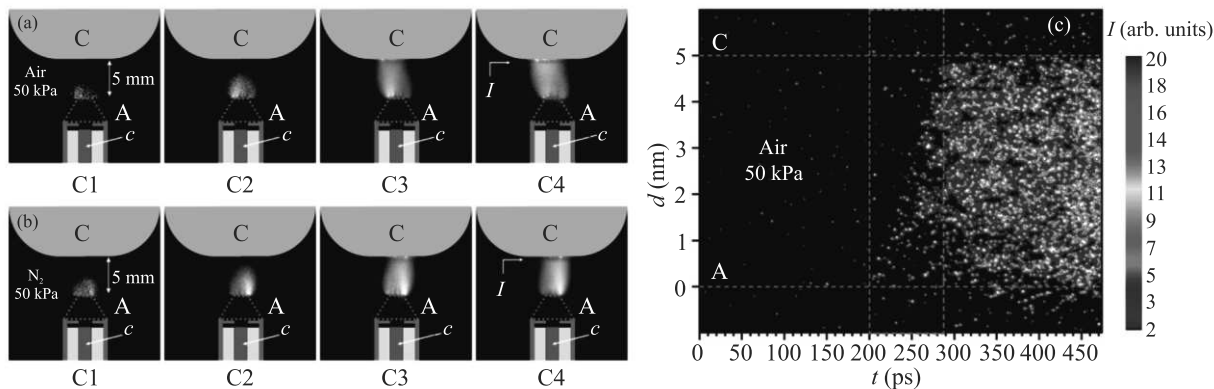


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a), (b) – Изображения свечения плазмы разряда в воздухе и азоте при давлении 50 кПа, снятые четырехканальной ICCD камерой. (c) – Временная развертка свечения плазмы разряда в воздухе при давлении 50 кПа, полученная с помощью стрик-камеры. С, А – катод и анод соответственно; c – приемная часть коллектора. I – темное пространство

Временная развертка свечения плазмы разряда вдоль промежутка в первые сотни пикосекунд, полученная с помощью стрик-камеры, показана на рис. 2с. Она также подтверждает, что формирование плазмы разряда начинается вблизи анода. Видно, как фронт свечения движется от анода к катоду и замыкает промежуток за 80–90 пс. Средняя скорость положительной волны ионизации составляет ≈ 5.5 см/нс. В данных условиях были зарегистрированы импульсы тока УЭ.

На рисунке 3 представлены осциллограммы напряжения при разряде в воздухе и в режиме холостого хода, а также осциллограммы тока УЭ. Режим холостого хода достигался при откачке газоразрядной камеры форвакуумным насосом до остаточного давления ~ 1 Па. В этих условиях импульс напряжения, отраженный от промежутка, был эквивалентен падающему импульсу.

Давление газов варьировалось в диапазоне 20–100 кПа, однако импульсы тока УЭ достоверно регистрировались при давлении воздуха 60 кПа и ниже. При разряде в азоте УЭ наблюдались в том числе при давлении 100 кПа. Для демонстрации были выбраны импульсы с близким временем запаздывания пробоя. Разница не превышала 30 пс. Также стоит отметить, что длина измерительного тракта оставалась неизменной при изменении давления. Только при давлении 20 кПа потребовалось включение в измерительный тракт аттенюатора с известной задержкой.

Видно, что амплитуда импульсов тока УЭ, как и следовало ожидать, растет с уменьшением давления газа. В диапазоне давления воздуха 30–60 кПа длительность импульсов на полувысоте составляет 68 пс, что соответствует импульсной характеристи-

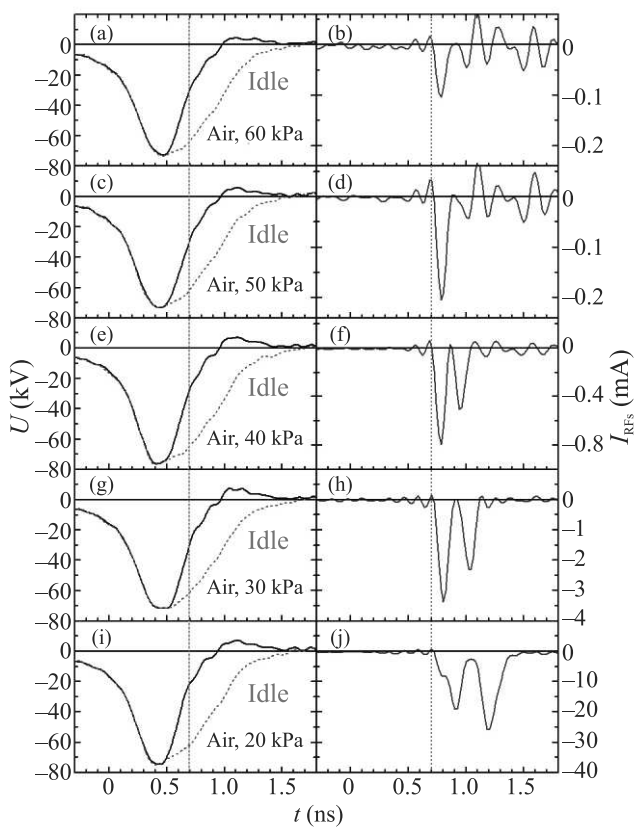


Рис. 3. (Цветной онлайн) Осциллограммы напряжения и тока УЭ при разряде в воздухе при различном давлении. Пунктирные вертикальные линии показывают момент регистрации тока УЭ коллектором, относительно напряжения на промежутке

ке осциллографа. Это означает, что реальная длительность импульсов тока УЭ может быть меньше этой величины. При давлении 30 кПа и ниже дли-

тельность импульсов превышала 68 пс. Любопытным является то, что при давлении воздуха 40 кПа и ниже наблюдается пара импульсов тока УЭ. При этом амплитуда второго импульса могла превышать амплитуду первого.

Привязка осциллограмм импульсов тока УЭ к напряжению осуществлялась способом, описанным ниже. Положение импульсов тока УЭ на временной шкале относительно импульсов напряжения, отмеченное вертикальной пунктирной линией на рис. 3, соответствует приходу УЭ на коллектор.

Посредством измерения с помощью коллектора тока смещения, вызванного волной ионизации, вместе с током УЭ можно определить момент генерации УЭ относительно волны ионизации [31, 32]. Однако измерения тока смещения в данной конфигурации газоразрядного промежутка не проводились ранее, и для начала необходимо было определить амплитудно-временные параметры ДТС, вызванного волной ионизации, в чистом виде без влияния на сигнал тока смещения, вызванного нарастанием либо спадом напряжения, а также током УЭ, которые попадают на коллектор. Для этих целей идеально подходит импульс напряжения положительной полярности прямоугольной формы с длительным плато и достаточно быстрым нарастанием и спадом. Генератор ГИН-50-1 формирует именно такие импульсы напряжения.

На рисунке 4а–с представлены изображения свечения плазмы разряда в воздухе при давлении 100 кПа, снятые четырехканальной ICCD камерой при положительной полярности за один импульс, а также соответствующие осциллограммы напряжения и тока смещения.

Как и при отрицательной полярности, формирование плазмы начинается вблизи заземленного острейного электрода, который в данном случае является катодом. Видно (рис. 4а), как несколько отрицательных стримеров движутся в направлении высоковольтного электрода (анода). Однако только один из них образует в конечном итоге сильноточный канал (рис. 4а, С4). На рисунке 4б, с приведены осциллограммы напряжения и тока смещения, соответствующие данной реализации разряда, а также режиму холостого хода. Осциллограмма тока смещения (рис. 4с) была привязана к импульсу напряжения по емкостному току $I_C = CdU/dt$, где C – емкость промежутка, U – напряжение. Видно, что при появлении плазмы вблизи острейного заземленного электрода (катода) возникает ток смещения вследствие быстрого перераспределения электрического поля. Это ДТС. Полярность сигнала ДТС указывает на

то, что напряженность электрического поля вблизи заземленного острейного электрода резко падает при появлении плазмы в его окрестности. При достижении ДТС нулевой отметки напряженность электрического поля вблизи острейного электрода достигает локального минимума. Однако затем обратная волна ионизации прибывает в эту область и напряженность электрического поля начинает расти (положительная полярность ДТС). Видно, что после этого напряжение на промежутке уменьшается – произошел пробой. Средняя скорость стримера, оцененная по длительности сигнала ДТС отрицательной полярности, составила ≈ 0.5 см/нс.

В азоте при давлении 100 кПа (рис. 4d–h) были получены аналогичные осциллограммы напряжения и тока смещения, но при отрицательной полярности “плоского” электрода. При этом удалось измерить одновременно ток смещения и ток УЭ (рис. 4f). Условия, при которых ток УЭ и ток смещения были одного порядка величины, были достигнуты при использовании сетки с размером ячеек 1 мм, изготовленной из проволочек диаметром 100 мкм. Для начала рассмотрим рис. 4d, e, на которых представлены осциллограммы напряжения и тока смещения при разряде (сплошные линии) и в режиме холостого хода (пунктирные линии). Осциллограммы тока смещения привязаны к осциллограммам напряжения по емкостному току $I_C = CdU/dt$. Как и в случае положительной полярности (рис. 4а–с), появление и распространение катодонаправленной волны ионизации сопровождается ДТС. Сигнал ДТС (рис. 4е) точно показывает, в какой момент времени появился стример и когда он пересек промежуток. Согласно длительности ДТС средняя скорость стримера составила ≈ 4 см/нс.

Рисунок 4f показывает результат измерений тока смещения и тока УЭ вместе, а на рис. 4g показана разница сигналов, представленных на рис. 4f и рис. 4е. Для сравнения на рис. 4h показана осциллограмма тока УЭ, измеренного без ДТС. Видно, что пучок УЭ (рис. 4g) попадает на коллектор на ≈ 250 пс позже, чем появляется сигнал ДТС, вызванный появлением стримера. Если предположить, что пучок электронов был сгенерирован вблизи заземленного острейного электрода (анода), кромка которого находится на расстоянии 4 мм от коллектора, при старте положительной волны ионизации, то их энергия должна составлять $\sim 0.7 \cdot 10^3$ эВ ($v \sim 1.6 \cdot 10^9$ см/с). Это выглядит крайне маловероятно. Другой вариант – генерация УЭ в катодном слое после замыкания промежутка плазмой. Такой механизм генерации УЭ реализуется после пробоя промежутка острие-плоскость при напряжениях несколько десятков ки-

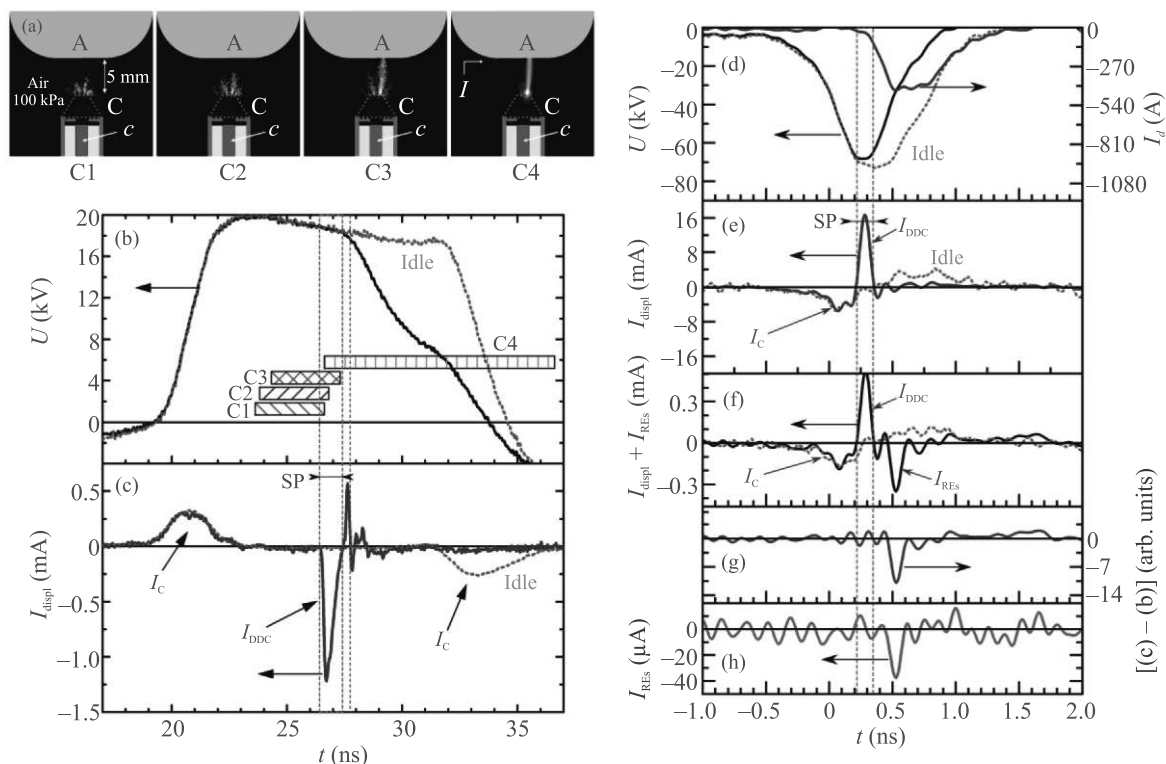


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Изображения свечения плазмы разряда в воздухе при давлении 100 кПа, снятые четырехканальной ICCD камерой при положительной полярности. А, С – анод и катод соответственно; *c* – приемная часть коллектора. С1–С4 – номера каналов ICCD камеры. (б), (с) – Соответствующие осциллограммы напряжения и тока смещения при разряде (сплошные линии) и в режиме холостого хода (пунктирные линии). Прямоугольниками С1–С4 показаны моменты включения каналов камеры. Длина прямоугольников соответствует длительности экспозиции. (д), (е) – Осциллограммы напряжения, тока разряда и тока смещения при разряде (сплошные линии) и в режиме холостого хода (пунктирные линии). (ф) – Осциллограммы тока смещения в режиме холостого хода (пунктирная линия), а также суммы тока УЭ и тока смещения (сплошная линия). (г) – Разница сигналов рис. 4ф и рис. 4е. (h) – Осциллограмма тока УЭ, измеренного в эксперименте. SP – стадия распространения стримера. Азот при давлении 100 кПа

ловольт [31, 32], о чем упоминалось во введении. В этом случае при оценках энергии электронов необходимо учитывать расстояние от катода до коллектора (9 мм), а запаздывание импульса тока УЭ отсчитывать от момента прибытия стримера на катод (≈ 110 пс). В этом случае энергия электронов составляет $\sim 2 \cdot 10^4$ эВ ($v \sim 8.3 \cdot 10^9$ см/с). Эти оценки коррелируют с результатами измерения энергии электронов методом фольг. Перед диафрагмой коллектора устанавливались либо алюминиевая фольга толщиной 10 мкм, либо диэлектрическая пленка кимфоль толщиной 2 мкм с алюминиевым покрытием толщиной 0.2 мкм. Они прозрачны для электронов с энергиями ≈ 32 и ≈ 10 кэВ соответственно. Так, в исследуемом диапазоне давлений газов пучок УЭ наблюдался только при использовании кимфоли. При этом наблюдались только одиночные импульсы тока УЭ.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что генерация УЭ происходит в области катодного падения потенциала, характеризующейся высокой напряженностью электрического поля, которая может превышать значение критической напряженности, требуемое для перехода электронов в режим убегающего, а также обеспечивать поток электронов с катода благодаря автоэлектронной, фотоэлектронной эмиссии и при бомбардировке поверхности катода ионами. В пользу этой гипотезы свидетельствует также уменьшение амплитуды импульсов тока УЭ в 2 и более раз в случае, когда плоский катод был накрыт тефлоновой пленкой толщиной 100 мкм. Если бы УЭ генерировались вблизи заземленного острейшего электрода (анода) или на фронте положительной волны ионизации, то тефлоновая пленка не оказывала бы никакого влияния на параметры тока УЭ.

Выводы. Результаты проведенных экспериментальных исследований показывают, что при пробое промежутков “плоскость–острие” вследствие развития положительной волны ионизации генерируются убегающие электроны. Однако механизм их генерации принципиально отличается от случая, когда пробой происходит вследствие развития отрицательной волны ионизации. Убегающие электроны генерируются не при старте волны ионизации или на ее фронте, а уже после того, как плазма замкнула промежуток. Вероятно, после прибытия положительной волны ионизации на плоский катод объемный положительный заряд на ее фронте приводит к формированию катодного слоя с высокой напряженностью электрического поля, который обеспечивает эмиссию электронов с катода. При этом часть эмитированных электронов способна переходить в режим убегания. Полученный результат расширяет представление о генерации убегающих электронов в наносекундных разрядах в резко неоднородном электрическом поле. Вкупе с результатами предшествующих исследований можно сделать вывод, что формирование катодного слоя и генерация убегающих электронов в нем является ординарным явлением наносекундных газовых разрядов. Это эффект может быть как полезным, так и отрицательным вследствие возникновения сопутствующего рентгеновского излучения. Особенно это касается устройств на основе разряда в гелии, для которого значение критической напряженности электрического поля в ≈ 4 раза меньше, чем для азота [2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 20-02-00733, а также в рамках Государственного задания ИСЭ СО РАН, проект # FWRM-2021-0014.

1. L. P. Babich, *High-energy phenomena in electric discharges in dense gases: theory, experiment, and natural phenomena*, Futuress, Arlington (2003).
2. Ю. Д. Королев, Г. А. Месяц, *Физика импульсного пробоя газов*, Наука, М. (1991).
3. *Runaway electrons preionized diffuse discharges*, ed. by V. F. Tarasenko, Nova Science Publishers, Inc., N.Y. (2014).
4. Y. Li, Y. Fu, Z. Liu, H. Li, P. Wang, H. Luo, X. Zou, and X. Wang, *Plasma Sources Sci. Technol.* **31**, 045027 (2022).
5. G. A. Mesyats, E. A. Osipenko, K. A. Sharypov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, M. I. Yalandin, and N. M. Zubarev, *IEEE Electron Device Lett.* **43**, 627 (2022).
6. E. I. Bochkov, L. P. Babich, and I. M. Kutsyk, *Plasma Phys. Rep.* **47**, 1027 (2021).
7. D. Levko, *J. Appl. Phys.* **126**, 083303 (2019).
8. V. V. Lisenkov, Y. I. Mamontov, and I. N. Tikhonov, *J. Phys. Conf. Ser.* **2064**, 012021 (2021).
9. E. Oreshkin, *EPL* **136**, 15001 (2021).
10. A. Kozyrev, V. Kozhevnikov, and N. Semeniuk, *Plasma Sources Sci. Technol.* **29**, 125023 (2020).
11. А. В. Козырев, Е. М. Баранова, В. Ю. Кожевников, Н. С. Семенюк, *Письма в ЖТФ* **43**, 56 (2017).
12. V. Y. Kozhevnikov, A. V. Kozyrev, N. S. Semeniuk, and A. O. Kokovin, *Russ. Phys. J.* **61**, 603 (2018).
13. Y. Rybin, N. Kalinin, and M. Timshina, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **49**, 1262 (2021).
14. A. Y. Starikovskiy, N. L. Aleksandrov, and M. N. Schneider, *J. Appl. Phys.* **129**, 063301 (2021).
15. K.-D. Weltmann, J. F. Kolb, M. Holub, D. Uhrlandt, M. Šimek, K. Ostrikov, S. Hamaguchi, U. Cvelbar, M. Černak, B. Locke, A. Fridman, P. Favia, and K. Becker, *Plasma Process Polym.* **16**, 1800118 (2018).
16. V. F. Tarasenko, D. V. Beloplotov, M. I. Lomaev, and D. A. Sorokin, *J. Chem. Chem. Eng.* **8**, 1156 (2014).
17. В. Ф. Тарасенко, Е. Х. Бакшт, А. Г. Бураченко, М. И. Ломаев, *Прикладная физика* **2016**, 49 (2016).
18. J. R. Dwyer, Z. Saleh, H. K. Rassoul, D. Concha, M. Rahman, V. Cooray, J. Jerauld, M. A. Uman, and V. A. Rakov, *J. Geophys. Res. Atmos.* **113**, D23207 (2008).
19. C. V. Nguyen, A. P. J. van Deursen, E. J. M. van Heesch, G. J. J. Winands, and A. J. M. Pemen, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 025202 (2010).
20. A. V. Kozyrev, V. Y. Kozhevnikov, I. D. Kostyrya, D. V. Rybka, V. F. Tarasenko, and D. V. Schitz, *Atmos. Ocean. Opt.* **25**, 176 (2012).
21. M. B. Zheleznyak, A. K. Mnatsakanyan, and S. V. Sizykh, *High Temp.* **20**, 357 (1982).
22. A. A. Kulikovskiy, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, 1514 (2000).
23. S. Pancheshnyi, *Plasma Sources Sci. Technol.* **24**, 015023 (2015).
24. N. Y. Babaeva, D. V. Tereshonok, and G. V. Naidis, *Plasma Sources Sci. Technol.* **25**, 044008 (2016).
25. J. Teunissen and U. Ebert, *Plasma Sources Sci. Technol.* **25**, 044005 (2016).
26. A. Bourdon, F. Péchereau, F. Tholin, and Z. Bonaventura, *Plasma Sources Sci. Technol.* **30**, 105022 (2021).
27. A. Brisset, K. Gazeli, L. Magne, S. Pasquiers, P. Jeanney, E. Marode, and P. Tardiveau, *Plasma Sources Sci. Technol.* **28**, 055016 (2019).
28. N. Y. Babaeva, G. V. Naidis, D. V. Tereshonok, and E. E. Son, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 434002 (2018).
29. Д. В. Белоplotов, М. И. Ломаев, В. Ф. Тарасенко, Д. А. Сорокин, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 636 (2018).

30. D. V. Beloplotov, M. I. Lomaev, D. A. Sorokin, and V. F. Tarasenko, *Phys. Plasmas* **25**, 083511 (2018).
31. Д. В. Белоплотов, В. Ф. Тарасенко, В. А. Шкляев, Д. А. Сорокин, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 133 (2021).
32. D. V. Beloplotov, V. F. Tarasenko, V. A. Shklyayev, and D. A. Sorokin, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **54**, 304001 (2021).
33. V. M. Efanov, M. V. Efanov, A. V. Komashko, A. V. Kirilenko, P. M. Yarin, and S. V. Zazoulin, *High-voltage and high-PRF FID pulse generators*, in *Ultra-wideband, short pulse electromagnetics 9*, ed. by F. Sabath, D. V. Giri, F. Rachidi-Haeri, A. Kaelin, Springer, N.Y. (2010), Part 5, p. 301.

Спектроскопическая диагностика периферийной плазмы токамака “Глобус-М2” с использованием инъекции нейтрального гелия

В. М. Тимохин⁺¹⁾, В. Ю. Сергеев⁺, Е. А. Ануфриев⁺, Д. Д. Коробко⁺, И. А. Шаров⁺, В. И. Варфоломеев^{*}, А. Н. Новохацкий^{*}, Н. Н. Бахарев^{*}, Е. О. Векшина⁺, К. В. Долгова⁺, Н. С. Жильцов^{*}, А. А. Кавин[×], В. Г. Капралов⁺, Е. О. Киселев^{*}, А. Н. Коваль^{*}, Г. С. Курскиев⁺, К. М. Лобанов[×], В. Б. Минаев^{*}, И. В. Мирошников^{*}, Е. Е. Мухин^{*}, Ю. В. Петров^{*}, В. А. Рожанский⁺, Н. В. Сахаров^{*}, В. Г. Скоков⁺, А. Ю. Тельнова^{*}, Е. Е. Ткаченко^{*}, В. А. Токарев^{*}, С. Ю. Толстяков^{*}, Е. А. Тюхменева^{*}, Н. А. Хромов^{*}

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

^{*} Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

[×] Акционерное общество “НИИЭФА им. Д. В. Ефремова”, 196641 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 июля 2022 г.

После переработки 28 июля 2022 г.

Принята к публикации 3 августа 2022 г.

Диагностика параметров периферийной плазмы по соотношению линий нейтрального гелия была включена в состав диагностического комплекса токамака “Глобус-М2”. Проведены первые эксперименты по измерению параметров в периферийной области плазмы вблизи нижней X-точки. Измеренные пространственные распределения электронной температуры и плотности удовлетворительно согласуются с результатами моделирования с помощью кода SOLPS-ITER.

DOI: 10.31857/S1234567822170050, EDN: jsrsmg

1. Введение. Напуск гелия (He) в высокотемпературную плазму токамаков и стеллараторов активно используется для диагностических целей на большинстве современных установок с магнитным удержанием [1–4]. Детальную информацию о профилях плотности и температуры электронов на периферии и в диверторной области плазменного разряда позволяют получить спектральные измерения излучения на линиях нейтрального гелия (HeI) [3–5]. Для определения параметров плазмы удобно использовать отношение интенсивностей двух синглетных спектральных линий атома гелия HeI (668 нм)/HeI (728 нм), $(1s3d(^1D) - 1s2p(^1P^0))/(1s3s(^1S) - 1s2p(^1P^0))$, чувствительное к электронной плотности, а также отношение интенсивностей синглетной и триплетной линий HeI (728 нм)/HeI (706 нм), $(1s3s(^1S) - 1s2p(^1P^0))/(1s3s(^3S) - 1s2p(^3P^0))$, чувствительное к электронной температуре [4]. Использование гелия в качестве активного элемента диагностики предпочтительно, поскольку для него построение столкновительно-излучательной модели (СИМ) – относительно простая задача, а также он является продуктом термоядерной D-T реакции, так что его небольшой напуск не окажет заметного влияния

на режим работы токамака-реактора. В данной работе приведены первые результаты диагностики, разработанной для токамака “Глобус-М2” и основанной на измерении соотношений интенсивности излучения линий атомарного гелия.

2. Устройство диагностики и схема эксперимента. Расположение основных элементов диагностики на токамаке “Глобус-М2” приведено на рис. 1 в виде трехмерной модели. Ключевым компонентом диагностики является четырехканальный зеркально-линзовый фильтровый полихроматор ФЛИП4, спроектированный в ФТИ им. Иоффе на основе быстрой монохромной камеры Phantom Miro M110 (матрица 1200 × 800 пикселей, динамический диапазон 12 бит) [6]. Он предназначен для регистрации изображения плазмы в спектре линий HeI 728, 706 и 668 нм. Четвертый канал полихроматора регистрирует излучение на длине волны 720 нм, в окрестности которой в плазме токамака “Глобус-М2” отсутствует линейчатое излучение и регистрируемый сигнал соответствует свечению непрерывного спектра (континуума). Изображение этого канала используется в процедуре обработки для вычитания фона континуума из сигналов первых трех каналов, что формирует полезный уровень линейчатого излучения. Матрица 2 × 2 изображений плазмы в свете четырех спектральных диапазонов регистрируются одной

¹⁾e-mail: v.timokhin@spbstu.ru

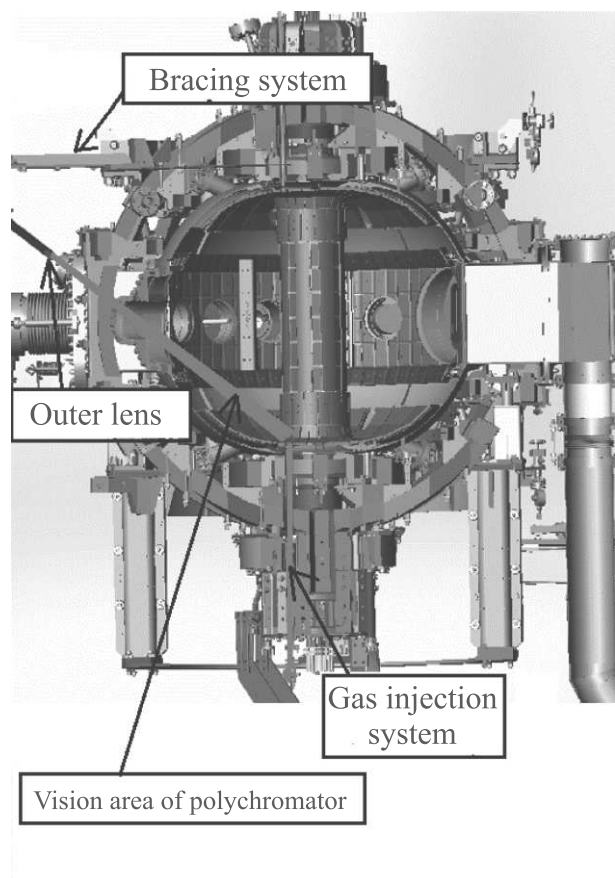


Рис. 1. (Цветной онлайн) Трехмерная модель токамака “Глобус-М2” с встроенными компонентами диагностики параметров периферийной плазмы по соотношению линий нейтрального гелия

камерой. Спектральное разрешение полихроматора определяется шириной полосы пропускания интерференционных фильтров и составляет величину около 1 нм. Оптическая система рассчитана на расстояние 1.2 м от объекта наблюдения до входной линзы объектива, размер области наблюдения составляет примерно 20 × 20 см в плоскости, перпендикулярной оптической оси полихроматора. Пространственное разрешение получаемых изображений было порядка 3 мм.

Относительная калибровка оптической системы осуществлялась с помощью калиброванного источника излучения Helios Labsphere USLR-V12F-NMNN. Целью данной процедуры было определение коэффициентов, описывающих пропускную способность оптической системы и чувствительность сенсора камеры в каналах полихроматора. Это необходимо для корректного восстановления отношений интенсивностей соответствующих спектральных линий испускания HeI. Тестовые испытания полихроматора прово-

дились в эксперименте с фиксацией изображения гелиевой струи, формируемой плазменной пушкой, которая входит в диагностический комплекс установки “Глобус-М2” [7]. Основные результаты этих экспериментов приведены в работе [8], где также более подробно описано устройство и принцип работы полихроматора.

Полихроматор крепится к элементам конструкции токамака “Глобус-М2” через соединительный узел посредством юстировочного устройства. Данное устройство обеспечивает жесткое крепление к верхнему кольцу обмотки тороидального поля токамака и возможность настройки положения полихроматора относительно вертикальной и экваториальной плоскостей установки в пределах $\pm 10^\circ$. Конструкция системы крепления полихроматора позволяет также демпфировать его вибрации амплитудой менее 1 мм, которые могут возникать во время плазменного разряда из-за деформации элементов конструкции токамака под действием электромагнитных сил.

Другим важным элементом диагностики является система инжекции гелиевой струи. Система работает следующим образом: газ из баллона с гелием через газовую магистраль с регулируемым давлением подается на пьезоэлектрический клапан, расположенный в непосредственной близости от нижнего фланца ДУ-20 установки. Конец капилляра находится в точке с координатами $R = 24$ см (большой радиус, отсчитывается от центра установки) и $Z = -51$ см (расстояние от экваториальной плоскости по вертикали). При подаче управляющего напряжения пьезоклапан обеспечивает газонапуск в камеру токамака через капилляр с внутренним диаметром 0.5 и длиной 870 мм. Основные параметры системы инжекции гелия следующие: поток гелия – до 10^{21} ат/с; натекание через закрытый клапан при давлении 1 атм – не более 2×10^{12} ат/с; время открытия клапана – не более 3 мс; максимальное давление за клапаном – не более 3.5 атм.

Полихроматор, расположенный выше экваториальной плоскости установки, под углом 45° к ней, направлен на патрубок системы инжекции гелиевой струи, размещенной в нижней части вакуумной камеры токамака (см. рис. 1). Регистрация излучения вдоль хорд наблюдения проводилась вблизи сепаратрисы плазменного шнура в области нижней X-точки. Локальность измерений вследствие интегрирования излучения вдоль луча наблюдения определяется линейными размерами струи и ухудшается с увеличением ее размеров. В эксперименте достигался высокий контраст излучения гелия вблизи капилляра по сравнению с его излучением из других областей

плазмы, что реализовывалось в данном эксперименте подбором инжектируемого потока He. Запуск камеры полихроматора, программы подачи управляющего напряжения на газовый клапан, системы сбора данных и диагностик токамака обеспечивается с помощью штатного синхронизатора установки “Глобус-М2”, включение которого осуществляется с пульта ведущего экспериментатора.

3. Результаты эксперимента. Эксперименты по напуску гелия в плазму токамака “Глобус-М2” проводились в рамках весенне-летней экспериментальной кампании 2021 г. Были получены данные в примерно 70 разрядах с инъекцией гелия для различных режимов работы установки и системы газонапуска. В большинстве случаев гелий напускался в режиме, обеспечивающем малый поток газа, с целью минимизировать возмущение измеряемых параметров плазмы. Клапан находился в открытом состоянии на протяжении всей квазистационарной стадии разряда токамака ~ 100 мс. Давление гелия за клапаном составляло величину 1.8 атм.

Для анализа была выбрана серия воспроизводимых разрядов ## 40269-40271 с наиболее полным набором экспериментальных данных и с максимально контрастным изображением струи в каналах полихроматора. Ниже представлены результаты для наиболее типичного разряда # 40269 с режимом омического нагрева плазмы при следующих значениях основных параметров на квазистационарной стадии разряда: тороидальное магнитное поле 0.8 Тл, ток по плазме 300 кА, средняя вдоль хорды с $R = 42$ см линейная электронная плотность $2.3 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$.

Временная эволюция параметров плазмы в рассматриваемом разряде приведена на рис. 2. Отсчет времени ведется от импульса старта разряда токамака (100 мс до начала подъема тока по плазме). Пробой разряда происходит примерно на 110 мс, что видно по вспышке на сигнале D_α . Квазистационарной стадии разряд достигает примерно на 170 мс, после чего основные параметры меняются незначительно. Анализируемый ниже кадр камеры полихроматора спектроскопической диагностики по времени примерно соответствует началу квазистационарной стадии разряда, момент снимка обозначен на рисунке 2 вертикальной стрелкой. Струя гелия начинает формироваться в плазме после 160-й мс, с задержкой примерно 40 мс, относительно подачи управляющего напряжения на клапан на 120-й мс. Как видно из рис. 2, напуск гелия не приводит к сколько-нибудь заметному падению периферийной температуры электронов, росту плотности или увеличению сигнала

D_α . Разряд заканчивается срывом на 210 мс, хорошо заметным по сигналу D_α .

Кадр полихроматора, полученный на 171 мс данного разряда, приведен на рис. 3. Снимок выбирался из соображений хорошей контрастности изображения струи. Время экспозиции кадров в данном разряде составляет 220 мкс, частота кадров камеры полихроматора – 1.6 кГц, что позволяет сделать ~ 100 снимков в течении разряда токамака “Глобус-М2”. Снимок содержит изображения инжектированной в плазму гелиевой струи в четырех линиях: 1) 728 нм, 2) 706 нм, 3) 668 нм, 4) 720 нм. Нумерация каналов полихроматора, направление инъекции и оси координат установки показаны на рис. 3. Из представленных изображений каналов 1)–3) по размерам светящейся области видно, что струя проникает в плазму на глубину около 10 см, причем поперечный разлет не составляет величину примерно 5 см. Поперечный размер струи определяет область пространственного усреднения регистрируемых линий гелия, а значит и область усреднения измеряемых параметров вдоль направления оси наблюдения полихроматора. Размеры и форма струи сохраняются во всех регистрируемых спектральных линиях с учетом зеркального отражения изображений в каналах 1) и 3) относительно каналов 2) и 4), что связано с особенностями формирования изображений в каналах полихроматора [8]. В канале 3) с наилучшей контрастностью изображения возможно различить положение конца капилляра. На кадрах, полученных в момент срыва разряда, можно наблюдать элементы конструкции вакуумной камеры (центральный столб, патрубок, границы графитовых плиток покрытия камеры). По известному положению данных элементов внутри камеры токамака осуществлялась пространственная привязка изображений к координатам установки R и Z .

Размеры светящегося облака, наблюдаемого в различных линиях нейтрального гелия, сопоставлялись с оценками распределения плотности возбужденных атомов, соответствующих верхним уровням регистрируемых спектральных переходов. Оценки производились следующим образом. По скейлингу газодинамического разлета газа из отверстия в вакуум, приведенному в работе [9], рассчитывалось распределение плотности атомов гелия $n_{\text{He}}(Z)$ на оси инъекции. Падение плотности за счет газодинамического разлета, показанное зеленой штрихпунктирной кривой на рис. 4, усиливается процессами ионизации и перезарядки, которые учитывались с использованием выражения [10]:

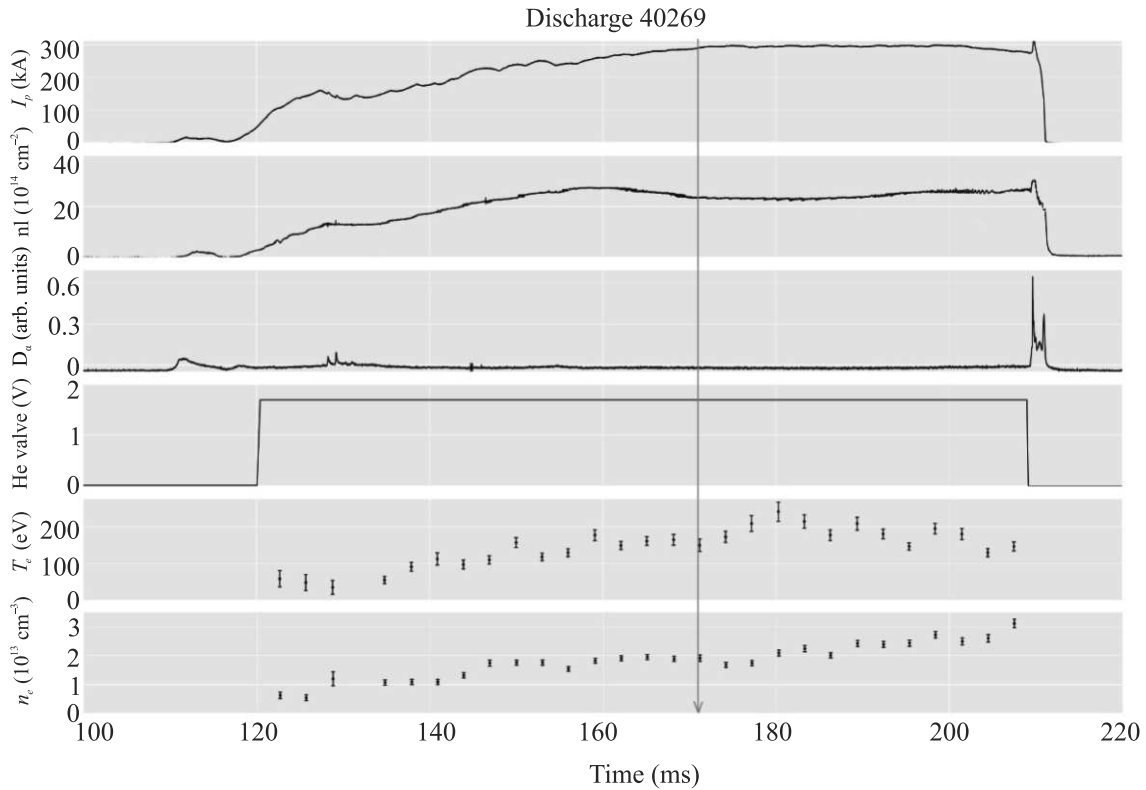


Рис. 2. (Цветной онлайн) Временная эволюция основных параметров плазмы токамака “Глобус-М2” в разряде 40269: I_p – ток плазмы; nl – линейная плотность электронов по данным интерферометра ($R = 42$ см); D_α – сигнал широкообзорного детектора Лаймановской серии дейтерия; He valve – управляющее напряжение на клапане системы газонапуска диагностики; T_e , n_e – электронные температура и плотность по данным периферийного канала диагностики томоновского рассеяния ($R = 56$ см). Вертикальной стрелкой обозначен момент снимка камеры полихроматора, приведенного на рис. 3

$$\frac{dI}{dx} = -n \left(\sigma_{ch} + \sigma_i + \frac{\langle \sigma_e v_e \rangle}{v_b} \right) I,$$

где I – интенсивность пучка атомов гелия, v_b – скорость атомов гелия вдоль капилляра, σ_{ch} , σ_i , σ_e – сечения процессов перезарядки, ионизации ионным и электронным ударом соответственно. Величины сечений процессов, приведенные в работах [11–13] показали, что в рассматриваемых условиях, доминирующую роль играют процессы ионизации электронным ударом. Профили плотности и температуры электронов брались из расчета по коду SOLPS-ITER [14]. По известному сечению возбуждения $\langle \sigma v \rangle(T_e)$ основного состояния гелия на верхний уровень перехода, соответствующего наблюдаемой спектральной линии 706 нм, взятому из работы [15], оценивалась интенсивность линии, наблюдаемой во втором канале полихроматора:

$$I_{706}(Z) \sim n_{He}(Z)n_e(Z)\langle \sigma v \rangle(T_e(Z)).$$

Результаты измерения и оценки распределения $I_{706}(Z)$ вдоль оси инжекции гелия приведены на

рис. 4. Видно разумное соответствие наблюдаемых и оцененных продольных размеров облака нейтрального He. Некоторое отличие рассчитанного профиля от измеренного можно объяснить отсутствием учета ряда элементарных процессов, влияющих на заселенность рассматриваемого уровня (рекомбинация, спонтанные переходы и т.п.).

4. Результаты измерений диагностики и их обсуждение. Профили электронной температуры и концентрации, представленные на рис. 5, рассчитывались вдоль оси инжекции гелиевой струи, расположенной на $R = 24$ см и совпадающей по направлению с вертикальной осью Z установки. Процедура обработки изображений полихроматора (см. рис. 3) включает в себя выделение полезной части сигнала, взаимную привязку каналов между собой, применение двумерного сглаживания в окне 3×3 пикселя. Для расчета значений электронных температуры и плотности по отношению линий использовались результаты расчетов столкновительно-излучательной модели (СИМ), приведенные в работе [5].

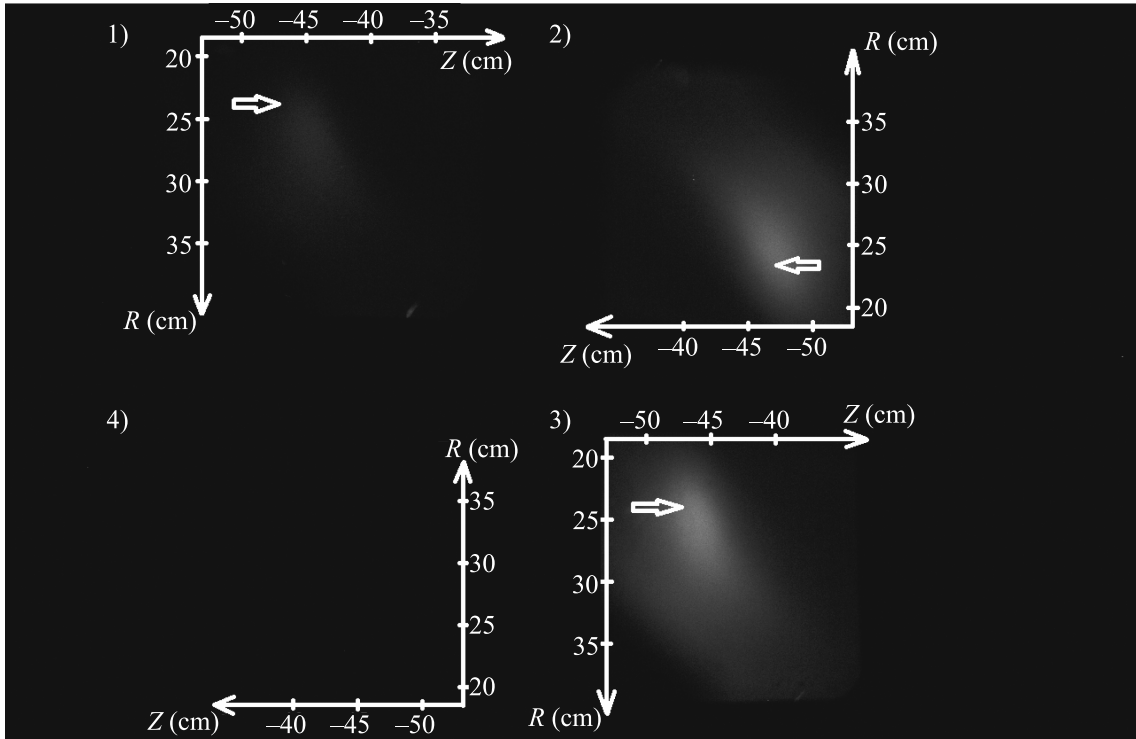


Рис. 3. Типичный снимок гелиевой струи камеры полихроматора спектроскопической диагностики периферийной плазмы токамака “Глобус-М2” в разряде 40269, 171 мс. Нумерация каналов полихроматора, направление инъекции относительно канала и оси координат установки обозначены белым. Длины волн, регистрируемые каналами полихроматора 1) 728 нм, 2) 706 нм, 3) 668 нм, 4) 720 нм

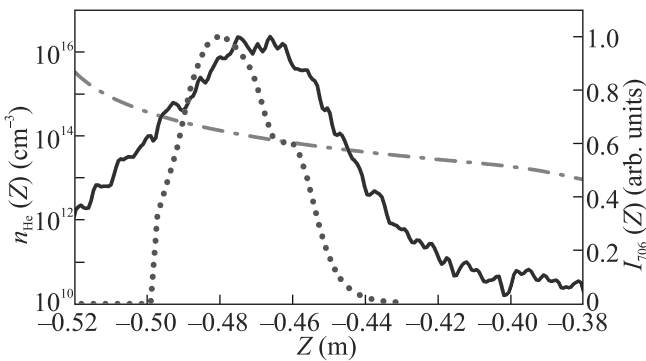


Рис. 4. (Цветной онлайн) Оценка глубины проникновения струи нейтрального гелия в плазму для 171 мс разряда 40269. Положение конца капилляра соответствует -0.52 м. Кривыми показаны: штрих-пунктир – расчетный профиль $n_{He}(Z)$; сплошная – нормализованный экспериментальный профиль $I_{706}(Z)$; точки – нормализованная оценка $I_{706}(Z)$

Результаты обработки изображений He струи в каналах полихроматора, представленных на рис. 3, приведены на рис. 5: (а) – профили интенсивностей линий в каналах полихроматора вдоль оси инъекции; (б) – профили отношений интенсивностей ли-

ний, на основании которых по СИМ рассчитывались электронные плотность (с) и температура (d). Профили электронных температуры $T_e(Z)$ и плотности $n_e(Z)$ лежат в диапазоне 20–40 эВ и $(1-2) \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Профиль температуры имеет растущий характер, а плотность спадает в области измерений вдоль Z по направлению к центральным областям плазмы. Область измерений находится вблизи сепаратрисы, обозначена вертикальной линией на рис. 5с, d и составляет величину примерно 4 см вдоль вертикальной оси установки. Такая относительно узкая область измерений определяется, с одной стороны, принципиальным ограничением СИМ, не позволяющим различать отношения линий в области температур ниже 10 эВ (Z меньше -0.47 м), с другой стороны интенсивность регистрируемых линий падает до уровня шумов в области Z больше -0.43 м вдоль оси инъекции (см. рис. 5а).

Результаты оценок возможных источников ошибок определения n_e , T_e по абсолютной величине показывают, что погрешность измерения параметров плазмы определяется, в основном, ошибками их восстановления по результатам расчетов СИМ и составляет величину $\leq 20\%$. Точность привязки измерен-

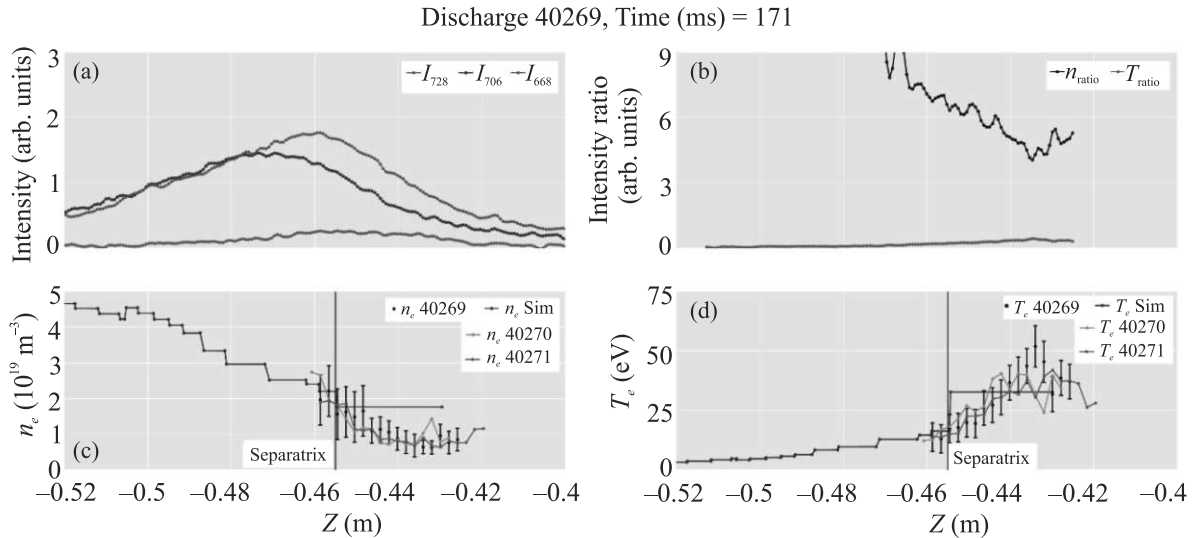


Рис. 5. (Цветной онлайн) Результаты обработки снимка полихроматора (рис. 3) в разряде 40269 на 171 мс, представленные вдоль оси капилляра системы газонапуска Z ; (а) – Распределение интенсивности линий в каналах полихроматора. (б) – Распределение отношений интенсивностей линий (синглет-триплетному переходу соответствует красная линия, синглет-синглетному – черная). (с) – Профиль электронной плотности и (д) – профиль электронной температуры (черные точки с планками погрешностей) в сравнении с параметрами, рассчитанными по коду SOLPS-ITER (синие линии), и в сравнении с другими разрядами серии (зеленые и красные линии для разрядов 40270 и 40271 соответственно). Расчетное положение сепаратрисы на нижних графиках обозначено вертикальной фиолетовой линией

ных параметров к координатам установки определяется разрешением камеры полихроматора и составляет величину в несколько миллиметров. В то же время пространственное усреднение за счет ширины гелиевой струи характеризуется шириной около 5 см, что определяет пространственное разрешение измеренных профилей вдоль оптической оси полихроматора.

Результаты измерений сравнивались с расчетами по коду SOLPS-ITER [14], представляющему собой объединение кодов B2.5 и EIRENE, в котором решается гидродинамическая система уравнений Брагинского для 0, 1, 2 моментов функции распределения плазмы в самосогласованных электрических полях с учетом токов и дрейфов. Расчет по коду был адаптирован специально для моделирования рассматриваемого разряда 40269 токамака “Глобус-М2”. Для этого были подобраны значения профилей электронных теплопроводности и плотности, а также учтены граничные условия для описания экспериментальных данных диагностики томсоновского рассеяния на периферии рассматриваемого разряда, показанных на рис. 2.

Для пространственной привязки измеренных и расчетных профилей n_e , T_e анализировалась карта магнитных поверхностей плазмы в рассматриваемом разряде. На рисунке 6 на фоне элементов конструк-

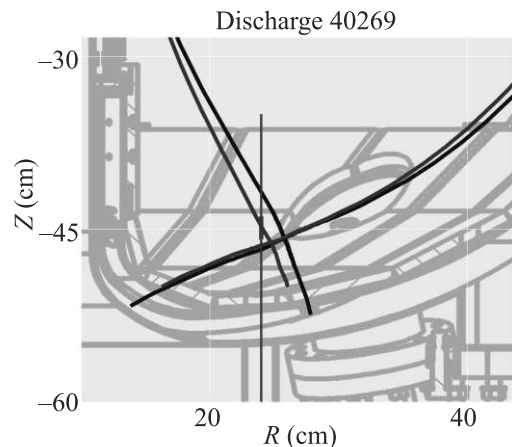


Рис. 6. (Цветной онлайн) Область измерений и положение сепаратрисы разряда 40269, рассчитанное по различным методикам

ции вакуумной камеры токамака изображены ось инжекции и сепаратрисы, рассчитанные по двум различным методикам: по коду магнитного равновесия PET [16] (обозначена синим цветом) и методом токовых колец MCC [17] (обозначена черным цветом). На данном рисунке область измерений диагностики выделена жирным отрезком на оси инжекции. Из рисунка 6 видно, что неопределенность положения сепаратрисы в радиальном направлении составляет ве-

личину в пределах 1–1.5 см. Экспериментальные измерения положения точек удара на пластинах стенки токамака в диверторной области, сделанные по данным тепловизора [18], подтверждают эту оценку. Положения точек удара соответствуют пересечению внутренней и внешней “ног” сепаратрисы со стенкой токамака и идентифицируются как тороидально симметричные кривые повышенной температуры поверхности дивертора на снимках тепловизора. Для оценки положения точки пересечения оси инжекции с сепаратрисой использовался расчет магнитных потоков по коду РЕТ. Неточности расчетов магнитной конфигурации вблизи X -точки, о которых говорилось выше, позволяют допустить смещение ее положения на величину в 1.5 см по направлению к центру установки, что соответствует смещению точки пересечения сепаратрисы с осью инжекции на 4–5 см по направлению к экваториальной плоскости установки.

Профили электронных температуры и плотности, рассчитанные по коду SOLPS-ITER (синие линии), а также измеренные в разрядах 40269 (черные точки с планками погрешностей), 40270 (зеленые линии) и 40271 (красные линии) профили представлены на рис. 5с, d с использованием описанной выше процедуры привязки измеренных параметров к результатам моделирования. Видно неплохое соответствие рассчитанных и измеренных параметров как по величине, так и по характеру их зависимостей от расстояния до сепаратрисы. Плотность падает при пересечении сепаратрисы в направлении от периферии к центру плазмы, а температура имеет в этой области заметный рост и достигает значений несколько десятков эВ. Такое поведение параметров вполне соответствует результатам моделирования периферийных областей плазмы токамака “Глобус-М2” в области нижней X -точки, подробно описанным в работе [19]. Значения плазменных параметров разрядов одной серии с близкими магнитными равновесиями и характер их поведения также не противоречат друг другу и данным моделирования.

5. Заключение. Методом гелиевой спектроскопии впервые измерены профили электронной температуры и концентрации в области нижней X -точки токамака “Глобус-М2”. Сравнение измеренных профилей параметров плазмы вдоль оси инжекции с данными, полученными путем моделирования по коду SOLPS-ITER, дает близкие величины при схожем характере поведения профилей с учетом погрешностей их измерений и пространственной привязки. Экспериментально измерено снижение электронной плотности и рост электронной температу-

ры при приближении к сепаратрисе в обдирочном слое со стороны сильного магнитного поля. Оценки глубины проникновения струи нейтрального гелия в плазму неплохо соответствуют наблюдаемым размерам облака.

Настоящая работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания в сфере науки по проекту # 0784-2020-0020 с использованием Федерального центра коллективного пользования “Материаловедение и диагностика в передовых технологиях” ФТИ им. А. Ф. Иоффе, включающего Уникальную научную установку “Сферический токамак Глобус-М”.

1. С. И. Лашкул, А. Б. Алтухов, В. В. Дьяченко, Л. А. Есипов, М. Ю. Кантор, Д. В. Куприенко, А. Д. Лебедев, Я. А. Никерман, А. Ю. Попов, *Физика плазмы* **38**, 923 (2012).
2. S. J. Zweben, J. L. Terry, D. P. Stotler, and R. J. Maqueda, *Rev. Sci. Instrum.* **88**, 041101 (2017).
3. M. Griener, E. Wolfrum, M. Cavedon, R. Dux, V. Rohde, M. Sochor, J. M. Muñoz Burgos, O. Schmitz, U. Stroth, and ASDEX Upgrade Team, *Rev. Sci. Instrum.* **89**, 10D102 (2018).
4. J. M. Muñoz Burgos, M. Agostini, P. Scarin, D. P. Stotler, E. A. Unterberg, S. D. Loch, O. Schmitz, K. Tritz and D. Stutman, *Phys. Plasmas* **23**, 053302 (2016).
5. W. Zholobenko, M. Rack, D. Reiter, M. Goto, Y. Feng, B. Küppers, and P. Börner, *Nucl. Fusion* **58**, 126006 (2018).
6. Spectral Tech. Plasma spectroscopy tools, https://spectraltech.ru/plasma_spectroscopy.
7. А. В. Воронин, В. К. Гусев, Я. А. Герасименко, Ю. В. Судьенков, *ЖТФ* **83**(8), 36 (2013).
8. V. M. Timokhin, A. I. Rykachevskii, I. V. Miroshnikov, V. Yu. Sergeev, M. M. Kochergin, A. N. Koval', E. E. Mukhin, S. Yu. Tolstyakov, and A. V. Voronin, *Technical Physics Letters* **42**, 775 (2016).
9. В. Г. Дулов, Г. А. Лукьянов, *Газодинамика процессов истечения*, Наука, Новосибирск (1984), формула (4.18), с. 81.
10. J. Wesson, *Токмакс*, 4-th ed., Oxford University Press, Oxford (2011).
11. K. L. Bell, H. B. Gilbody, J. G. Hughes, A. E. Kingston, and F. J. Smith, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12**(4), 891 (1983).
12. R. Hoekstra, H. P. Summers, and F. J. de Heer, *Nucl. Fusion: Atom. Plasma-Mater. Interact. Data Fusion* **3**, 63 (1992).
13. I. D. Kaganovich, E. Startsev, and R. C. Davidson, *New J. Phys.* **8**, 278 (2006).

14. V. A. Rozhansky, S. P. Voskoboynikov, E. G. Kaveeva, D. P. Coster, and R. Schneider, *Nucl. Fusion* **41**, 387 (2001).
15. R. K. Janev, W. D. Langer, D. E. Post, and K. Evans, *Elementary Processes in Hydrogen-Helium Plasmas*, Springer Series on Atoms + Plasmas, N.Y. (1987), v. 4.
16. S. A. Galkin, A. A. Ivanov, S. Yu. Medvedev, and Yu. Yu. Poshekhonov, *Nucl. Fusion* **37**(10), 1455 (1997).
17. N. V. Sakharov, A. V. Voronin, V. K. Gusev, A. A. Kavin, S. N. Kamenshchikov, K. M. Lobanov, V. B. Minaev, A. N. Novokhatsky, M. I. Patrov, Yu. V. Petrov, and P. B. Shchegolev, *Plasma Physics Reports* **41**(12), 997 (2015).
18. Yu. V. Petrov, V. K. Gusev, N. V. Sakharov et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **62**, 042009 (2022).
19. D. S. Sorokina, I. Yu. Senichenkov, V. A. Rozhansky, and E. O. Vekshina, *Phys. Plas.* **25**, 122514 (2018).

Пайерлсовская неустойчивость решетки Либа

М. И. Рыжкин, А. А. Левченко, И. А. Рыжкин¹⁾

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 6 июля 2022 г.

После переработки 6 июля 2022 г.

Принята к публикации 25 июля 2022 г.

В работе показано, что энергия электронной системы двумерной решетки Либа понижается в результате смещений реберных атомов от центров вдоль ребер. Понижение электронной энергии приводит к появлению мягких фононных мод, ангармонических фононов, и к неустойчивости решетки. При определенных условиях понижение электронной энергии может превысить увеличение упругой энергии ионной решетки, и в этих условиях зависимость полной энергии как функции смещений реберных атомов приобретает вид двухямного потенциала. В результате, при сильной неустойчивости, возникает частично упорядоченная подрешетка реберных атомов с числом равновесных положений, вдвое превышающем их число, а квантовое туннелирование реберных атомов между равновесными положениями приводит к появлению квантовых туннельных мод. В работе обсуждаются возможные экспериментальные проявления исследуемой неустойчивости и обобщения рассмотренной модели на трехмерные решетки.

DOI: 10.31857/S1234567822170062, EDN: jstshf

1. Введение. Решеткой Либа называется двумерная, квадратная решетка атомов типа A , в серединах связей которой находятся атомы типа B (см. рис. 1). Решетка Либа является одной из самых про-

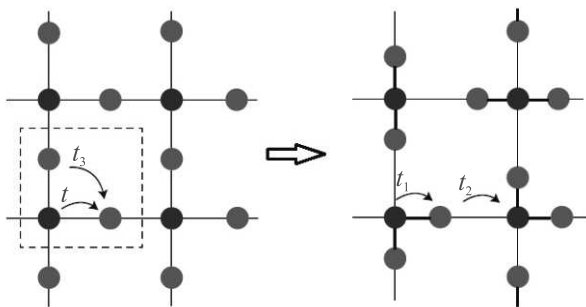


Рис. 1. (Цветной онлайн) Исходная решетка Либа и решетка Либа в результате развития неустойчивости с указанием интегралов перескока. Синие кружки – узловые атомы типа A , красные кружки – реберные атомы типа B

стых бипартитных решеток, т.е. решеток, узлы которых могут быть разделены на два подмножества A и B , причем ближайшими соседями узлов A являются узлы B и наоборот. Свое имя она получила благодаря знаменитой работе Либа, в которой были доказаны строгие утверждения о модели Хаббарда на бипартитных решетках [1]. Широкую популярность решетка Либа получила благодаря наличию

в ее электронном спектре плоских или бездисперсионных зон [2–5]. Отсутствие кинетической энергии электронов в таких зонах приводит к определяющей роли сколь угодно малого взаимодействия между ними и к реализации необычных коррелированных состояний электронной системы. Смысл этого утверждения становится более понятным, если сравнить физику плоских электронных зон с физикой плоских зон двумерных электронов в сильном магнитном поле. Экспериментальной реализацией решетки Либа является подрешетка CuO_2 в высокотемпературных купратных сверхпроводниках, исследованию которых также посвящено огромное число работ, смотри, например, [6–9]. Близкие структуры, которые можно назвать искаженными решетками Либа, реализуются в нано ограниченной воде [10, 11]. Реберно-центрированные кубические решетки, которые являются трехмерными обобщениями решетки Либа, реализуются в высокотемпературных сверхпроводниках на основе сероводорода [12, 13] и в качестве трехмерных подрешеток в различных перовскитах [14–16].

Из перечисленного следует, что физика соединений с решеткой Либа является интересной и важной темой исследований. Целью данной работы является исследование еще одной особенности решетки Либа, а именно, ее электронной неустойчивости. Анализируя поведение электронной и решеточной энергии, мы покажем, что электронная энергия уменьшается в результате смещений реберных атомов от центров связей, и при определенных условиях воз-

¹⁾e-mail: ryzhkin@issp.ac.ru

растание упругой энергии не компенсирует уменьшение электронной энергии, т.е. в этих условиях решетка Либа становится неустойчивой. Вблизи неустойчивости для решеток такого типа характерны мягкие моды и ангармонические фононы, а в результате развития неустойчивости потенциал реберных атомов, как функция смещений, приобретает двухмный вид, удваивается число равновесных положений реберных атомов на связях и становится возможным квантовое туннелирование реберных атомов между равновесными положениями. При этом возникают новые возбуждения, квантовые туннельные моды, которые могут сильно взаимодействовать с электронной системой.

Далее, в разделе 2, с использованием метода сильной связи мы рассмотрим структуру электронного спектра решетки Либа, ее зависимость от смещений реберных атомов вдоль связей, и наличие плоской зоны. В разделе 3 мы рассмотрим изменения электронной энергии и энергии ионной решетки в результате смещений реберных атомов, и найдем условия возникновения неустойчивости решетки Либа. В разделе 4 мы обсудим экспериментальные проявления исследуемой неустойчивости и ее зависимость от параметров решетки. В этом же разделе мы обсудим связь исследуемой неустойчивости с неустойчивостью Пайерлса [17] и связь рассмотренной модели с одномерной моделью полиэтилена или моделью SSH (Su–Schrieffer–Heeger) [18, 19].

2. Структура электронного спектра. Электронный спектр любого соединения определяется не только структурой решетки, но валентными состояниями атомов, которые образуют решетку. Рассмотрим сначала простой случай, в котором атомы типа A и атомы типа B имеют по одному валентному состоянию φ_i^A , φ_j^B соответственно. Решение уравнения Шредингера ищем методом сильной связи, т.е. в следующем виде:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i \in A} a_i \varphi_i^A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \sum_{j \in B} b_j \varphi_j^B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (1)$$

где a_i , b_i – коэффициенты разложения, в первой сумме суммирование идет по узлам квадратной решетки, а во второй по ее ребрам. Учитывая интегралы перескока только между ближайшими соседями, для коэффициентов разложения получаем следующую систему уравнений:

$$(\varepsilon_A - \varepsilon)a_i + \sum_{j=1}^4 t_{ij}b_j = 0, \quad (2)$$

$$(\varepsilon_B - \varepsilon)b_j + \sum_{i=1}^2 t_{ij}a_i = 0. \quad (3)$$

В этих уравнениях суммы берутся по ближайшим соседям, ε_A , ε_B – узельные энергии, а интегралы перескока отличны от нуля только для ближайших соседей $t_{ij} = t_{ji} = t$. Равенство всех интегралов перескока имеет место только для неискаженной решетки Либа с реберными атомами точно в серединах связей. Так как наша задача заключается в исследовании неустойчивости относительно смещений декорирующих атомов вдоль связей, то мы допускаем одинаковые по абсолютной величине для всех атомов смещения декорирующих атомов и введем два значения интегралов перескока $t_{ij} = t_1, t_2$ для укороченной и удлиненной связи, соответственно $t_1 > t_2$.

Решение уравнений (2), (3) начнем со значения энергии $\varepsilon = \varepsilon_B$. В этом случае все уравнения (3) выполняются, если положить $a_i = 0$. При этом уравнения (2) дают N условий на $2N$ переменных b_j , т.е. дадут N линейно независимых решений для b_j . Таким образом, значение энергии $\varepsilon = \varepsilon_B$ является N -кратно вырожденной зоной, т.е. плоской зоной. Ее происхождение легко понять, если заметить, что при условии $a_i = 0$ в приближении сильной связи атомы типа B являются эффективно изолированными.

Далее, если $\varepsilon \neq \varepsilon_B$, то с помощью уравнений (3) можно исключить переменные b_j и получить уравнения только для переменных a_i

$$\left(\varepsilon_A + \frac{\gamma_i}{\varepsilon - \varepsilon_B} - \varepsilon \right) a_i + \frac{t_1 t_2}{\varepsilon - \varepsilon_B} \sum_{j \in i} a_j = 0. \quad (4)$$

Здесь суммирование во втором слагаемом идет по ближайшим соседям i , величины γ_i определяются суммами по связям, примыкающим к узлу i :

$$\gamma_i = \sum_{j \in i} t_{ij}^2 = \alpha_i t_1^2 + \beta_i t_2^2, \quad (5)$$

где α_i , β_i – неотрицательные целые, удовлетворяющие условию $\alpha_i + \beta_i = 4$, т.е. в общем случае γ_i может принимать различные значения случайным образом, в зависимости от смещений декорирующих атомов. Последнее означает, что мы имеем дело со сложной задачей определения спектра неупорядоченной системы. Однако, кажется логичным предположить, что из атомов четырех связей два смещаются к рассматриваемому узлу, а два других от узла. В качестве обоснования такого предположения служит аналогия с физикой льда, в частности, первое правило льда: два протона вблизи иона кислорода, и два других в удалении [4, 20, 21]. Физически это правило обусловлено уменьшением энергии кулоновского

взаимодействия между ионами. При таком предположении все величины γ_i принимают одинаковое значение $2t_1^2 + 2t_2^2$, в результате мы приходим к более простой задаче без неупорядоченности. По этой причине далее мы примем это предположение о смещениях декорированных атомов согласно правилу льда, т.е. будем использовать условие $\gamma_i = 2t_1^2 + 2t_2^2$, и определим электронный спектр. Отклонения от этого условия можно рассматривать как локальные возмущения узельной энергии, приводящие к образованию локальных уровней в запрещенной зоне, которые будут рассмотрены в последующих работах.

При использовании приближения, основанного на правилах льда, из уравнений (4) получаем следующие выражения для двух дисперсионных зон энергии

$$\varepsilon_{c,v} = \frac{\varepsilon_B + \varepsilon_A}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_B - \varepsilon_A}{2}\right)^2 + 2t_1^2 + 2t_2^2 + 2t_1t_2(\cos k_x + \cos k_y)}. \quad (6)$$

В формуле (6) мы предположили $\varepsilon_A < \varepsilon_B$, тогда нижней или валентной зоне соответствует знак минус, а верхней зоне или зоне проводимости знак плюс. Края зон определяются следующими выражениями

$$\varepsilon_{c,v} = \frac{\varepsilon_B + \varepsilon_A}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_B - \varepsilon_A}{2}\right)^2 + 2(t_1 - t_2)^2}, \quad (7)$$

а ширина запрещенной зоны равна

$$\varepsilon_g = 2\sqrt{\left(\frac{\varepsilon_B - \varepsilon_A}{2}\right)^2 + 2(t_1 - t_2)^2}. \quad (8)$$

При выбранном условии $\varepsilon_A < \varepsilon_B$ плоская зона $\varepsilon = \varepsilon_B$, как нетрудно увидеть, находится в запрещенной зоне, ближе ко дну зоны проводимости. Энергии электронов как функции волнового вектора, и схематично соответствующие плотности состояний изображены на рис. 2, 3. Отметим, что при условии $t_1 = t_2$, т.е. в случае неискаженной решетки Либба, плоская зона касается дна зоны проводимости. При дополнительном условии $\varepsilon_A \rightarrow \varepsilon_B$ ширина запрещенной зоны стремится к нулю, и мы получаем полуметалл с плоской зоной при энергии касания валентной зоны и зоны проводимости. Также можно показать, что плоская зона в случае неискаженной решетки Либба ($t_1 = t_2$) сохраняется, даже если учесть перескоки между ближайшими соседями по подрешетке B (см. интегралы t_3 на рис. 1). В противном случае, т.е. при условии $t_1 \neq t_2$, в этой зоне появляется конечная дисперсия.

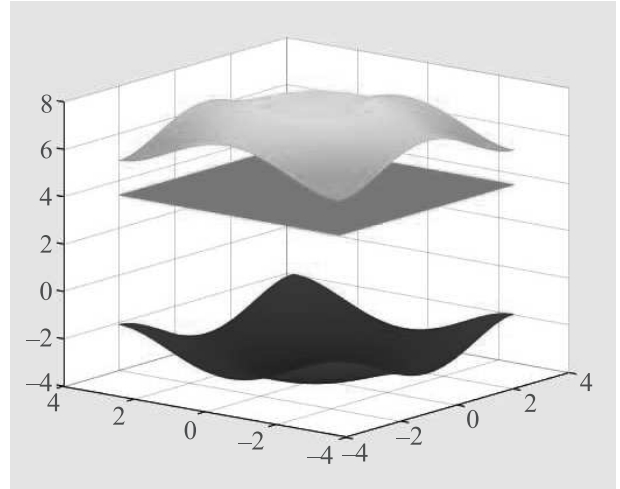


Рис. 2. (Цветной онлайн) Пример электронного спектра решетки Либба. Щели уменьшаются с уменьшением разности энергий $\varepsilon_B - \varepsilon_A$ и с уменьшением разности прыжковых интегралов $t_1 - t_2$, дисперсия возрастает с ростом прыжковых интегралов

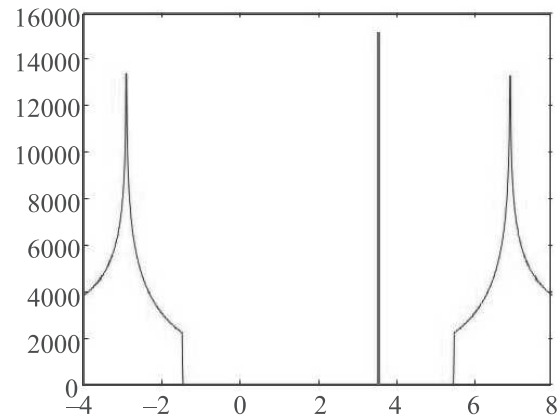


Рис. 3. (Цветной онлайн) Плотность состояний, соответствующая спектру на рис. 2. Линия в запрещенной зоне схематично изображает δ -функцию

3. Энергия электронной и ионной системы: условия неустойчивости

Из формул (6), (7) видно, что уровни энергии валентной зоны понижаются при смещении реберных атомов, т.е. при возникновении неравенства $t_1 \neq t_2$. Рассчитаем выигрыш в энергии электронной системы в зависимости от смещения реберных атомов. Предполагая, что все атомы смещаются на одинаковые расстояния, и считая смещения x малыми, используем для интегралов перескока выражения $t_{1,2} = t \mp \alpha x$, где $t, \alpha > 0$, $x < 0$. Далее, в системе имеется $3N$ валентных электронов, из них $2N$ полностью заполняют валентную зону и N электронов наполовину заполняют плоскую зону. Выигрыш в электронной энергии на одну ячейку

из-за ненулевого смещения реберных атомов можно представить в виде удвоенного интеграла по занятой зоне Бриллюэна от энергии валентной зоны $\varepsilon_v(\mathbf{k})$. Без разложения по x^2 достаточно громоздких выражений результат можно представить в следующем виде

$$\delta E(x) = -\frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} dq_x \int_0^{\pi/2} dq_y [(q_x, q_y, x) - f(q_x, q_y, 0)], \quad (9)$$

$$f(q_x, q_y, x) = \sqrt{\Delta^2 + 16t^2(\cos^2 q_x + \cos^2 q_y) + 16\alpha^2 x^2(\sin^2 q_x + \sin^2 q_y)}, \quad (10)$$

где $\Delta = \varepsilon_B - \varepsilon_A$. Разлагая выражение (10) по x^2 , мы получаем для первого члена разложения следующие формулы

$$\delta E_1 = -Cx^2, \quad (11)$$

$$C(\alpha, \Delta, t) = \frac{32\alpha^2}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \frac{(\sin^2 q_x + \sin^2 q_y) dq_x dq_y}{\sqrt{\Delta^2 + 16t^2(\cos^2 q_x + \cos^2 q_y)}}.$$

Функция $C(\alpha, \Delta, t)$ может быть вычислена аналитически в различных предельных случаях, а ее численное значение при произвольных значениях аргументов показано на рис. 4. Из формул (11) также видно,

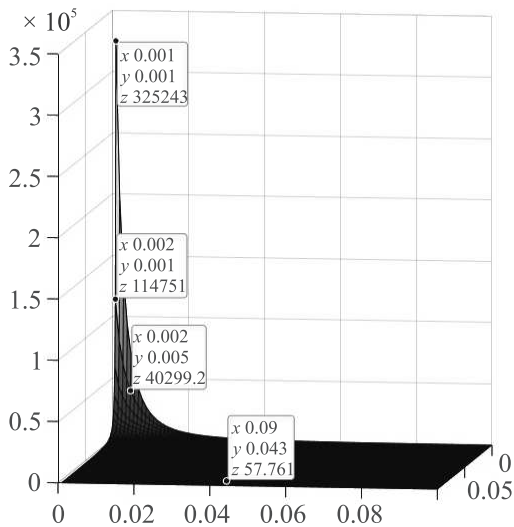


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость интеграла в формуле (11) от параметров $\Delta = \varepsilon_B - \varepsilon_A$ и t . Выделена область максимальных значений интеграла

что изменение электронной энергии при смещении реберных атомов всегда отрицательно, что соответствует электронной неустойчивости решетки Либа. Выигрыш в электронной энергии растет с уменьшением разности атомных энергий Δ и с уменьшением

прыжкового интеграла t . Он также растет с ростом величины α , которая характеризует зависимость интеграла перекрытия от расстояния между атомами.

При расчетах выигрыша в электронной энергии (11) были учтены кинетическая энергия электронов и энергия взаимодействия электронов с ионным остовом. Рассмотрим теперь изменение энергии ионной системы, которая также изменяется при смещениях реберных атомов. При этом мы ограничимся феноменологическим подходом, и запишем эту энергию в виде следующего разложения по степеням смещений:

$$\delta E_2(x) = Dx^2 + Fx^4. \quad (12)$$

Здесь константа F положительна, что соответствует отталкиванию ионов типа A и B на предельно малых расстояниях между ними. Вопрос о знаке константы D более сложен, и мы детально обсудим его ниже. Но сначала мы предположим, что и $D > 0$. Эти предположения означают устойчивость решетки Либа при учете только энергии ионной системы. Тогда из формул (11), (12) мы получаем

$$\delta E = (D - C)x^2 + Fx^4, \quad x_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{C - D}{2F}}. \quad (13)$$

Первая из этих формул показывает, что решетка будет неустойчива при условии $C > D$, а вторая формула дает равновесные смещения реберных атомов при возникновении неустойчивости, вызываемой электронной подсистемой.

Выше мы сделали предположение, что константа $D > 0$. Это предположение основано на учете кулоновского взаимодействия реберного иона B только с ближайшими соседями типа A . Однако кулоновское взаимодействие медленно убывает с ростом расстояния, и по этой причине следует учитывать и кулоновское взаимодействие реберного иона B с более удаленными соседями, что может изменить знак константы D . Действительно, в работе [22] было показано, что учет дальнегодействующего взаимодействия между реберными ионами сам по себе, без учета электронной энергии, может привести к неустойчивости решетки Либа, или решетки квадратного льда по терминологии этой работы. Результаты работы [22] можно интерпретировать и так, что учет дальнегодействующего взаимодействия между ионами типа B вносит отрицательный вклад в коэффициент перед x^2 в формуле (12). На наш взгляд, соотношение между положительным вкладом взаимодействия между ближайшими соседями и отрицательным вкладом между удаленными соседями близок вопросу о вырождении протонных конфигураций, удовлетворяющих правилам льда [23–25].

Суммируя сказанное, можно сделать вывод, что учет дальнедействующего характера кулоновского взаимодействия существенно уменьшает положительное значение константы D , полученное из оценок взаимодействия между ближайшими соседями. При этом вклад в неустойчивость электронной энергии может стать определяющим, особенно при росте константы α и уменьшении констант t , Δ . Таким образом, учет дальнедействующего характера кулоновского взаимодействия между ионами только повышает вероятность возникновения неустойчивости решетки Либа.

4. Обсуждение результатов. В предыдущих разделах мы описали неустойчивость решетки Либа, вызванную понижением электронной энергии относительно смещений реберных атомов вдоль связей. В этом разделе мы рассмотрим влияние этой неустойчивости на физические свойства реальных соединений, в которых в той или иной степени реализуется решетка Либа, а также обсудим соотношение нашей модели с другими моделями и исследованиями, в которых существенную роль играет электронная неустойчивость.

Наиболее известной реализацией решетки Либа является двумерная подрешетка CuO_2 купратных сверхпроводников, а наиболее распространенным объяснением высокой температуры сверхпроводящего перехода в этих соединениях является наличие мягких фононных мод и ангармонических фононов, обусловленных колебаниями атомов этой подрешетки, см. работы [9, 26, 27]. В этих работах приведены многочисленные ссылки на экспериментальное исследование мягких фононных мод, ангармонических фононов, а также различные теоретические интерпретации причин появления фононных особенностей. Однако все теоретические интерпретации отличаются от нашей модели, которая фактически основана только на топологии решетки Либа.

Заметим, что практически все полученные нами результаты могут быть применены и к трехмерному обобщению решетки Либа, а именно к кубической решетке ионов серы S в серединах ребер которой находятся протоны H, формула соединения H_3S . Такое соединение реализуется при высоком давлении и переходит в сверхпроводящее состояние при температурах выше 200 K [12, 28]. Вероятно, и в этом случае высокая температура сверхпроводящего перехода обусловлена ангармоническими фононами. Более того, в этом случае наблюдается и переход в состояние с несимметричной водородной связью, т.е. к состоянию со смещением протонов от середин связей [12]. Наличие несимметричной водородной связи

означает сильную неустойчивость решетки. В этом случае возможна реализация квантовых туннельных мод, обусловленных туннелированием протонов вдоль связей, возникает интересная и важная задача о взаимодействии туннельных мод с электронами и их влияние на сверхпроводимость.

Сверхпроводимость не единственное явление, в котором проявляется исследуемая неустойчивость. Действительно, неустойчивость может проявляться не только в ангармонических фононах, она может проявляться также в статических искажениях. В этом отношении стоит обсудить связь исследуемой неустойчивости с таким явлением, как ферроэлектричество. Ферроэлектрики принято делить на два типа: ферроэлектрики типа смещения и типа порядок-беспорядок. К первому типу относится ряд соединений со структурой перовскита, например, титанат бария BaTiO_3 , цирконат свинца PbZrO_3 и так далее. Эти соединения в качестве подрешеток содержат трехмерные решетки TiO_3 , ZrO_3 , которые можно рассматривать как трехмерные обобщения решетки Либа, к которым наши результаты легко модифицировать. В них также реализуется понижение энергии при смещении ионов кислорода вдоль ребер, что может интерпретироваться как движущая сила их ферроэлектрических свойств. При сильной неустойчивости каждый реберный ион имеет два устойчивых положения равновесия. Распределение ионов по этим положениям можно описать псевдоспиновыми переменными в рамках модели Изинга, в которой существует переход порядок-беспорядок, или ферроэлектрический переход [29, 30].

Исследуемая электронная неустойчивость может быть причиной несимметричности водородной связи и существования неупорядоченности протонной подсистемы во многих трехмерных модификациях льда [21]. Более того, в работах [10, 11] было показано, что в нано ограниченном льде может реализоваться квадратная модификация льда, которая близка к решетке Либа. Отличие заключается в довольно сильном отклонении протонов, т.е. реберных ионов, от центров связей. Эти отклонения могут рассматриваться как экспериментальное подтверждение исследуемой неустойчивости.

Зададим теперь важный вопрос, при каких условиях неустойчивость проявляется наиболее сильно? Другими словами, при каких условиях связи являются несимметричными, а при каких условиях симметричными? Как было указано в предыдущем разделе, условие сильной неустойчивости или условие двухявного потенциала имеет вид $C > D$, где D определяется упругой энергией ионной решетки (в

нашей работе феноменологическая константа), а величина C формулой (11). Из этой формулы следует, что величина C растет с уменьшением Δ , t . Это означает, что роль электронной неустойчивости будет выше в соединениях с близкими значениями энергии валентных электронов (максимум при равенстве энергий $\Delta = 0$). Величина t характеризует интегралы перескока между ближайшими соседями для неискаженной решетки. Соответственно она тем меньше, чем больше расстояние между атомами, т.е. постоянная решетки. Этот параметр может варьироваться двумя способами: конкретным выбором атомов или внешним давлением. Во втором случае, если при нулевом давлении неустойчивость настолько сильна, что связи являются несимметричными, то с ростом давления постоянная решетки уменьшается, соответственно растет t и уменьшается величина C . При достаточно высоком давлении можно ожидать малого влияния неустойчивости и переход в симметричную фазу с одним потенциальным минимумом. Вблизи перехода двухямный/одноямный потенциал высота потенциального барьера будет низкой и можно ожидать квантового туннелирования реберных атомов и образования туннельных мод. На другом языке можно сказать, что соответствующие колебания реберных атомов становятся ангармоническими. Таким образом, давление является одним из способов управлять величиной неустойчивости.

Следует также отметить следующий результат. С уменьшением величины Δ и с уменьшением расстояния между двумя минимумами потенциальной энергии, т.е. с уменьшением $t_1 - t_2$ уменьшаются щели между зонами на рис. 2. В предельном случае $\Delta = 0$, $t_1 = t_2$ две зоны с сильной дисперсией будут касаться плоской зоны. Если уровень Ферми системы лежит при этой энергии, то вблизи уровня Ферми имеются два типа электронов: одни электроны с высокой плотностью состояний, но с нулевой групповой скоростью, и другие электроны с низкой плотностью состояний, но с высокой групповой скоростью. Такая ситуация представляет интерес как с точки зрения обычной проводимости, так и с точки зрения образования сверхпроводящего состояния.

Далее, из рассмотрения в разделах 2, 3 становится очевидным, что рассматриваемая неустойчивость очень напоминает неустойчивость Пайерлса [17], в том смысле, что последнюю можно было бы изложить в рамках рассмотренной модели. Фактически, нашу модель можно рассматривать как обобщение модели Пайерлса на двумерный случай. Также интересно отметить связь нашей модели с одномерной моделью полиэтилена. В последней существуют две

фазы со смещением атомов влево и вправо, а на границе таких фаз существуют связанные электронные состояния, переносящие ток при наложении электрического поля. В нашем случае при выполнении правил льда выполняется равенство $\gamma_i = 2t_1^2 + 2t_2^2$ (см. раздел 2). При нарушении правила льда это равенство нарушается, что можно рассматривать как локальное возмущение, приводящее к образованию связанных состояний электронов в запрещенной зоне. При перескоках реберных атомов вдоль связей (при несимметричных связях) такой дефект вместе с электроном будет перемещаться по образцу, т.е. может быть носителем тока, аналогичным носителям тока в физике льда [21]. С этой точки зрения такие носители можно рассматривать как двумерные обобщения носителей тока в модели SSH [18].

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда # 22-22-00005.

1. E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1201 (1989).
2. A. Mielke, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24**, 3311 (1991).
3. H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1608 (1992).
4. I. A. Ryzhkin, *Physics and Chemistry of Ice*, ed. by N. Maeno and T. Hondoh, Sapporo University, Sapporo (1992), p. 141.
5. D. Leykam, A. Andreanov, and S. Flach, *Advances in Physics: X* **3**, 1473052 (2018).
6. J. B. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
7. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
8. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
9. D. M. Newns and C. C. Tsuei, *Nature Physics* **3**, 184 (2007).
10. G. Algara-Siller, O. Lehtinen, F. C. Wang, R. R. Nair, U. Kaiser, H. A. Wu, A. K. Geim, I. V. Grigorieva, *Nature* **519**, 443 (2015).
11. J. Chen, A. Zen, J. G. Brandenburg, D. Alfe, and A. Michaelides, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 92220102 (2016).
12. I. Errea, M. Calandra, C. J. Pickard, J. R. Nelson, R. J. Needs, Y. Li, H. Liu, Y. Zhang, Y. Ma, and F. Mauri, *Nature* **532**, 81 (2016).
13. L. P. Gor'kov and V. Z. Kresin, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 011001 (2018).
14. A. S. Bhalla, R. Guo, and R. Roy, *Mater. Res. Innov.* **4**, 3 (2000).
15. M. Johansson and P. Lemmens, *Crystallography and Chemistry of Perovskites*, in *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, John Wiley & Sons, N.Y. (2007); doi: 10.1002/9780470022184.hmm411.
16. J. S. Manser, J. A. Christians, and P. V. Kamat, *Chem. Rev.* **116**, 12956 (2016).
17. R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, N.Y. (1955).

18. W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979).
19. A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer, and W. P. Su, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 805 (1988).
20. I. A. Ryzhkin, *Solid State Commun.* **52**, 49 (1984).
21. V. F. Petrenko and R. W. Whitworth, *Physics of Ice*, Oxford University Press, N.Y. (1999).
22. F. H. Stillinger and K. S. Schweizer, *J. Phys. Chem.* **87**, 4281 (1983).
23. M. J. P. Gingras and B. C. den Hertog, *Can. J. Phys.* **79**, 1339 (2001).
24. S. V. Isakov, R. Moessner, and S. L. Sondhi, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 217201 (2005).
25. I. A. Ryzhkin, *Solid State Commun.* **52**, 49 (1984).
26. V. H. Crespi, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **48**, 398 (1993).
27. J. H. Chung, T. Egami, R. J. McQueeney, M. Yethiraj, M. Arai, T. Yokoo, Y. Petrov, H. A. Mook, Y. Endoh, S. Tajima, C. Frost, and F. Dogan, *Phys. Rev. B* **67**, 014517 (2003).
28. A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, *Nature* **525**, 73 (2015).
29. R. Blinc and B. Zeks, *Adv. Phys.* **21**, 693 (1972).
30. Б. А. Струков, А. П. Леванюк, *Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах*, Наука, М. (1983).

Расчет дискретных и резонансных уровней акцепторов в узкозонных твердых растворах CdHgTe

М. С. Жолудев^{+*1)}, В. В. Румянцев⁺⁺, С. В. Морозов⁺⁺

⁺Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

^{*}Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 12 июля 2022 г.

После переработки 12 июля 2022 г.

Принята к публикации 24 июля 2022 г.

Проведены расчеты волновых функций электрона в поле однозарядного акцептора в узкозонных твердых растворах CdHgTe с учетом потенциала центральной ячейки. Путем аппроксимации результатов расчетов получено аналитическое выражение для значений энергии наиболее глубоких локализованных и резонансных состояний при различных значениях параметров потенциала центральной ячейки и доли кадмия в твердом растворе. Полученные зависимости могут быть использованы при идентификации акцепторных примесей в CdHgTe, в частности, мышьяка, как наиболее перспективного допанта для структур *p*-типа.

DOI: 10.31857/S1234567822170074, EDN: jsxket

Введение. Гетероструктуры на основе твердых растворов Cd_{*x*}Hg_{1-*x*}Te (кадмий-ртуть-теллур, КРТ) в которых ширину запрещенной зоны (E_g) можно менять в широких пределах, варьируя толщину и состав слоев, представляют интерес для создания приемников (см., например, [1]) и источников [2] излучения среднего ИК диапазона. В последнее время было обнаружено множество свидетельств того, что примесно-дефектные центры оказывают существенное влияние на оптические свойства объемных пленок и квантовых ям на основе Cd_{*x*}Hg_{1-*x*}Te [3, 4]. Они проявляют себя как источник дискретных и резонансных уровней, участвующих в поглощении и излучении света, а также обеспечивающих канал безызлучательной рекомбинации по механизму Шокли–Рида–Холла [5].

Наибольший интерес для изучения на данный момент представляют именно акцепторы. Во-первых, вследствие малой величины эффективной массы электронов энергия связи мелких доноров составляет доли мэВ, в то время как для акцепторов она варьируется от единиц до десятков мэВ (см., например, [6, 7]). Во-вторых, для реализации лазерных диодов и быстродействующих фотовольтаических приемников на основе КРТ требуется решить хорошо известную проблему создания слоев *p*-типа [8]. Естественным акцептором в данном материале является вакансия ртути, однако задача управления распреде-

лением данного вида дефектов в гетероструктурах представляется весьма сложной. Перспективной альтернативой является мышьяк, однако данные по его энергетическому спектру противоречивы и ограничены относительно широкозонными твердыми растворами с $x > 0.2$ (см. ниже). В то же время узкозонные твердые растворы (в том числе бесщелевые материалы с инвертированной зонной структурой) также представляют большой практический интерес для продвижения фотоприемников в длинноволновую область (длина волны более 25 мкм) и как наиболее подходящий материал для квантовых ям длинноволновых лазеров [8].

В большинстве работ для определения энергии ионизации примеси мышьяка использовались косвенные методы, основанные на интерпретации результатов измерений эффекта Холла при различных температурах с использованием подгоночных параметров [9–11]. В данных работах, как правило, приводятся малые энергии ионизации в диапазоне 4–6 мэВ (исключение составляет работа [12], где энергия ионизации принимается за 15 мэВ) для доли кадмия 0.2–0.3. Учитывая, что в структурах на основе HgCdTe всегда присутствуют остаточные двухвалентные акцепторы – вакансии ртути, данные транспортных измерений сложны для однозначной интерпретации, и в ряде работ указывают несколько энергий ионизации для различных типов акцепторов [13]. Оптическими методами, в основном при исследованиях фотолюминесценции, в недавних работах были

¹⁾e-mail: zholudev@ipmras.ru

получены более высокие значения для энергии ионизации мышьяка ~ 20 мэВ [14]. Таким образом, вопрос об исследованиях энергетического спектра акцепторов в HgCdTe остается актуальным.

Недавние успехи в теоретическом описании дискретных и резонансных состояний кулоновских акцепторов в КРТ [15] позволяют перейти к исследованию реальных примесей, для которых необходим учет потенциала центральной ячейки (ПЦЯ). Данная работа посвящена расчету зависимости энергий уровней примеси от параметров модельного ПЦЯ. Мы рассматриваем твердые растворы $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с содержанием кадмия $x \leq 0.3$, ширина запрещенной зоны в которых составляет до 240 мэВ. Данный диапазон параметров покрывает все бесщелевые материалы, а также область, где могут наблюдаться резонансные состояния акцепторов.

Метод расчета. В данной работе мы используем тот же подход для вычисления локализованных и резонансных состояний, что и в работе [15]. Волновая функция вычисляется как решение стационарного уравнения Шредингера в рамках метода огибающих функций с гамильтонианом Кейна 6×6 , который учитывает зону с симметрией Γ_6 и две зоны с симметрией Γ_8 . Расчеты проводятся в приближении сферической симметрии, где квантовыми числами, однозначно определяющими состояние электрона являются: J – полный угловой момент, $L = J + 1/2$ – орбитальный момент компоненты Γ_6 и M – проекция полного углового момента на ось z .

В приближении сферической симметрии стационарное уравнение Шредингера сводится [15–17] к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных функций (зависящих только от координаты r):

$$(\hat{\mathbf{H}}_0^{(J,L)} + U(r))\mathbf{f}^{(J,L)}(r) = E\mathbf{f}^{(J,L)}(r), \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{H}}_0^{(J,L)}$ – гамильтониан однородного полупроводника, а $U(r)$ – потенциал примеси. В данной работе мы используем потенциал примеси из работ [4, 18], включающий кулоновский потенциал и ПЦЯ в виде экранированного кулоновского поля:

$$U(r) = \frac{e}{\epsilon_0 r} \left[1 - Z_1 \exp\left(-\frac{r}{\lambda_1}\right) \right],$$

где e – элементарный заряд, ϵ_0 – низкочастотная диэлектрическая проницаемость полупроводника, Z_1 – зарядовое число, характеризующее величину ПЦЯ, а λ_1 – радиус ПЦЯ. Величины Z_1 и λ_1 являются подгоночными параметрами.

В отсутствие дефекта решениями системы уравнений (1) являются сферические волны, и в трехзон-

ной модели Кейна минимум 2 из 6 линейно независимых решений имеют мнимые волновые числа [15, 19]. Это приводит к тому, что при численном интегрировании уравнения (1) развивается неустойчивость. Поэтому для решения данной системы уравнений применяется метод матрицы рассеяния [20, 21]. В рамках данного метода радиальные функции вблизи примесного центра и вдали от него вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(r < r_1) &= \mathbf{F}_0^{(a)}(r)\mathbf{a}_0, \\ \mathbf{f}(r > r_N) &= \left(\mathbf{F}_N^{(a)}(r)\mathbf{F}_N^{(b)}(r) \right) \begin{pmatrix} \mathbf{a}_N \\ \mathbf{b}_N \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $\mathbf{F}_0^{(a)}(r)$ – матрица, столбцы которой являются решениями, полученными с помощью обобщенного метода Фробениуса, $\mathbf{F}_N^{(a)}(r)$ и $\mathbf{F}_N^{(b)}(r)$ – матрицы, столбцы которых являются решениями в виде сферических волн, полученными в приближении нулевого потенциала примеси, а \mathbf{a}_0 , \mathbf{a}_N и \mathbf{b}_N – векторы неизвестных коэффициентов. Величина r_N выбирается достаточно большой, чтобы полем примеси можно было пренебречь по сравнению с влиянием соседних центров (подробнее см. [15]).

Матрица рассеяния связывает коэффициенты вблизи центра и вдали от него следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_N \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{0,N}^{(aa)} & \mathbf{S}_{0,N}^{(ab)} \\ \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)} & \mathbf{S}_{0,N}^{(bb)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_N \end{pmatrix},$$

откуда имеем

$$\mathbf{S}_{0,N}^{(ba)}\mathbf{a}_0 = -\mathbf{S}_{0,N}^{(bb)}\mathbf{b}_N.$$

В случае локализованных состояний амплитуда вдали от примеси равна нулю (т.е. $\mathbf{b}_N = 0$). Поэтому условием для определения энергии таких уровней будет следующее уравнение:

$$\det \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)}(E) = 0.$$

В случае резонансных состояний амплитуда вблизи центра будет заметно больше, чем амплитуда вдали от него, поэтому для них будет выполняться аналогичное условие:

$$\left| \det \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)}(E) \right| \ll 1.$$

Таким образом, для определения энергии локализованных и резонансных состояний в работе [15] была введена степень локализации волновой функции (СЛВФ), равная:

$$R(E) = \left| \det \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)}(E) \right|^{-1}.$$

Максимумы этой величины соответствуют локализованным и резонансным состояниям примеси.

Для вычисления положения примесных уровней необходимо провести расчеты СЛВФ в некотором диапазоне энергий с небольшим шагом, который определяется требуемой точностью. Поскольку такой подход требует большого времени, он не эффективен при определении значений подгоночных параметров для реальных примесей. В данной работе мы предлагаем аналитическое выражение для зависимости энергий наиболее глубоких акцепторных состояний от параметров x , Z_1 и λ_1 , полученное путем аппроксимации результатов расчетов СЛВФ.

В качестве функции, аппроксимирующей значения энергии уровней, используется аналог поверхности Безье [22] с тремя переменными:

$$E^{(J,L,i)}(x, Z_1, \lambda_1) = \sum_{m_x=0}^{n_x} \sum_{m_z=0}^{n_z} \sum_{m_\lambda=0}^{n_\lambda} W_{m_x, m_z, m_\lambda}^{(J,L,i)} \times \\ \times B_{n_x, m_x}^{(0, x_{\max})}(x) B_{n_z, m_z}^{(Z_{\min}, Z_{\max})}(Z_1) B_{n_\lambda, m_\lambda}^{(0, \lambda_{\max})}(\lambda_1), \quad (2)$$

составленный на основе многочленов Бернштейна [22]:

$$B_{n,m}^{(a,b)}(t) = \frac{n!}{m!(n-m)!} \frac{(t-a)^m (b-t)^{n-m}}{(b-a)^n}.$$

Преимуществом выражения (2) по сравнению с более простыми многочленами нескольких переменных является то, что коэффициенты $W_{m_x, m_z, m_\lambda}^{(J,L,i)}$ обладают большей устойчивостью к незначительным флуктуациям входных данных, используемых при аппроксимации. Это позволяет использовать расчеты СЛВФ, проведенные с меньшим разрешением по энергии.

Количество коэффициентов в выражении (2) может составлять несколько десятков, однако вычисление энергий примесных уровней на основе данной функции на несколько порядков эффективнее прямого расчета и анализа СЛВФ по скорости и используемому объему данных.

Результаты. В данной работе мы рассматриваем узкозонные твердые растворы $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с долей кадмия не более $x_{\max} = 0.3$. Для параметров ПЦЯ был выбран следующий диапазон: $-1 \leq Z_1 \leq 1$, $\lambda_1 \leq 4$ нм. Расчет СЛВФ проводился с разрешением по энергии $\Delta E = 0.05$ мэВ. Значения шага изменения параметров были следующими: $\Delta x = 0.005$, $\Delta Z_1 = 0.1$ и $\Delta \lambda_1 = 0.1$ нм.

Результаты расчетов СЛВФ для некоторых значений параметров ПЦЯ представлены на рис. 1. Положение резонансных и локализованных состояний

хорошо видно по темным линиям на графиках. Прерывистый вид этих линий для более мелких состояний связан с низким разрешением по энергии и составу твердого раствора. Хорошо видно, что наиболее глубокое состояние ($J = 3/2$, $L = 1$, $i = 1$) является также наиболее чувствительным к ПЦЯ в силу большей локализации носителей заряда вблизи примесного центра.

В таблице 1 приведены значения коэффициентов $W_{m_x, m_z, m_\lambda}^{(J,L,i)}$ в формуле (2), полученные путем аппроксимации результатов расчетов СЛВФ с помощью метода наименьших квадратов. Максимальное отклонение исходных значений от аппроксимирующей функции для наиболее глубоких состояний составило от 0.03 до 0.09 мэВ, что сопоставимо с разрешением по энергии, используемом при расчетах. Количество коэффициентов для каждого уровня составило $n_x \times n_z \times n_\lambda = 72$. Дальнейшее увеличение их числа не приводит к существенному увеличению точности аппроксимации.

Из рисунка 1 видно, что варьирование параметра Z_1 в диапазоне от -1 до 1 позволяет получить энергии ионизации акцептора от 5 до 25 мэВ, что соответствует интервалу значений, приводимых в литературе для примеси мышьяка в твердых растворах $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с $x \sim 0.3$. Значение параметра λ_1 на рис. 1 было выбрано на основе результатов, полученных в работе [23] при подгонке энергий ионизации вакансий ртути с использованием того же модельного ПЦЯ, где наилучшее согласие достигалось для λ_1 в диапазоне 2.5–3.5 нм. При уменьшении параметра λ_1 энергии ионизации в целом уменьшаются и зависимость от состава твердого раствора становится более резкой, т.е. спектр акцептора стремится к случаю $Z_1 = 0$, что объясняется уменьшением влияния ПЦЯ даже на основное состояние при большей локализации “добавочного” потенциала. Увеличение параметра λ_1 значительно выше 3 нм представляется необоснованным, так как качественные соображения о причинах химического сдвига (деформация кристаллической решетки около примеси и отличие диэлектрической проницаемости вблизи иона примеси от ее среднего значения в кристалле) предполагают локализацию соответствующих возмущений на масштабе нескольких постоянных решетки.

Отметим, что для вакансий ртути подобранные в работе параметры ПЦЯ соответствуют сильному экранированию кулоновского потенциала, т.е. “химический сдвиг” приводит к значительному уменьшению энергии ионизации относительно случая $Z_1 = 0$. Энергии ионизации примеси мышьяка ~ 20 мэВ, полученные в последних работах оптическими метода-

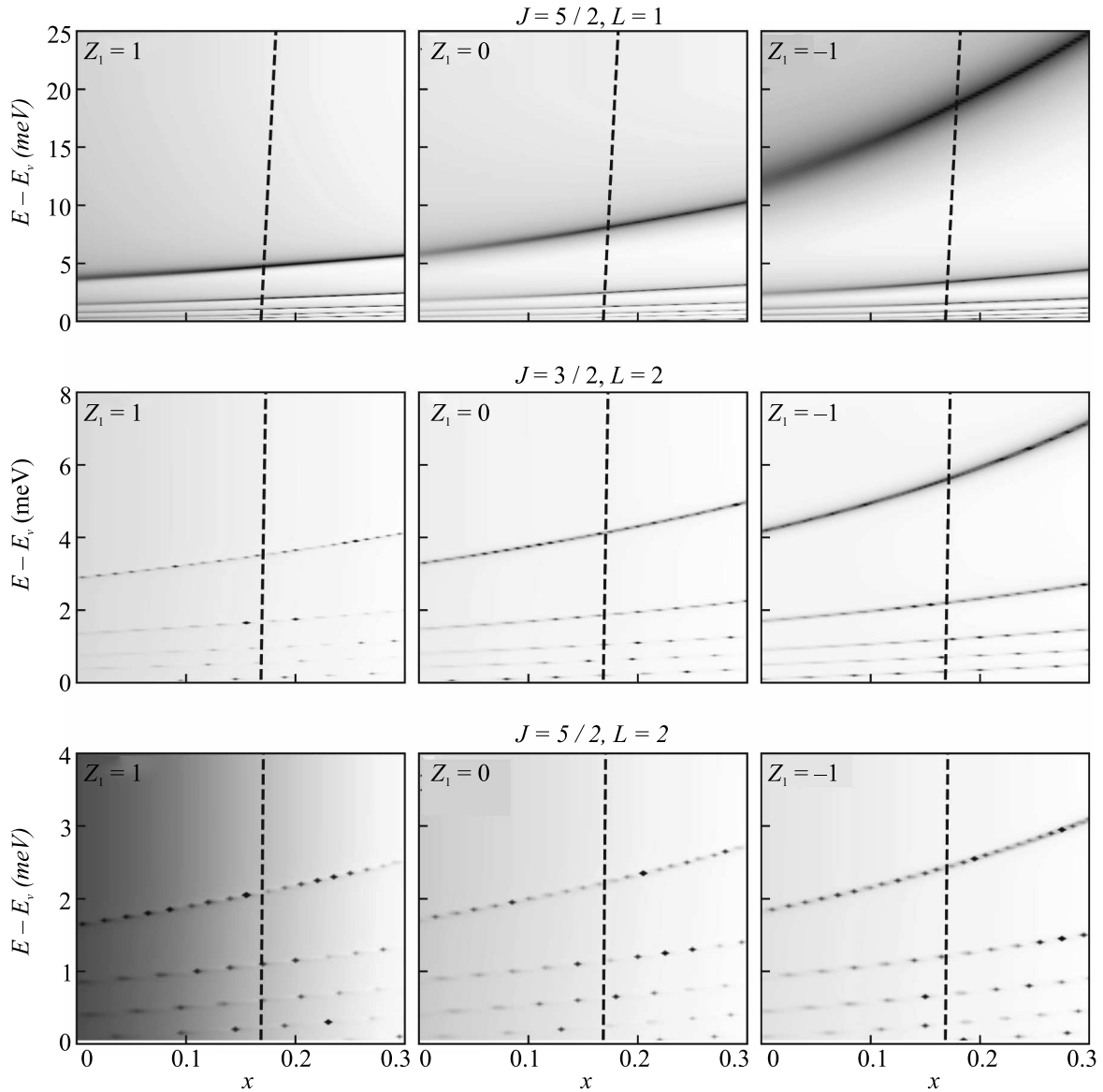


Рис. 1. Результаты расчета СЛВФ для различных составов твердого раствора $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$. Темный цвет соответствует более сильной локализации волновой функции вблизи примесного центра. Энергия отсчитывается от потолка валентной зоны. Положение зоны проводимости отмечено штриховой линией. Значение параметра λ_1 на всех графиках равно 3 нм

ми, практически совпадают с энергией отрыва второй дырки от вакансии ртути [23], однако одновалентному акцептору для достижения такой энергии, требуется, наоборот, “притягивающий” ПЦЯ (более типичный для большинства полупроводников), т.е. $Z_1 < 0$. В этом случае, как это следует из рис. 1, для энергий ионизации ожидается более выраженная зависимость энергии ионизации от состава твердого раствора (в предположении, что параметры ПЦЯ слабо зависят от состава твердого раствора x). Положение спектральных особенностей, формируемых

примесью мышьяка, должно сильнее зависеть от доли кадмия x по сравнению с особенностями, связанными с вакансиями ртути, практически не меняющих положения в диапазоне x от 0.152 до 0.23 [4, 24]. Таким образом, разная зависимость энергии ионизации от состава твердого раствора для вакансий ртути и примеси мышьяка может быть использована для идентификации соответствующих центров при экспериментальных исследованиях, несмотря на близость спектрального положения особенностей, отвечающих разным центрам.

Таблица 1. Коэффициенты $W_{m_x, m_z, m_\lambda}^{(J, L, i)}$ для вычисления энергии локализованных и резонансных примесных состояний. Для каждого состояния указано значение δE – максимального отклонения расчетных значений энергии от аппроксимирующей функции

m_λ	(m_x, m_z)											
	(0, 0)	(0, 1)	(0, 2)	(0, 3)	(1, 0)	(1, 1)	(1, 2)	(1, 3)	(2, 0)	(2, 1)	(2, 2)	(2, 3)
$J = 3/2, L = 1, i = 1, \delta E = 0.09 \text{ мэВ}$												
0	5.80	5.77	5.80	5.82	7.47	7.43	7.49	7.50	10.28	10.24	10.33	10.37
1	5.77	6.10	5.65	5.47	7.41	7.84	7.27	6.94	10.43	11.13	9.85	9.18
2	9.80	5.83	5.03	3.92	13.15	7.72	6.14	4.80	21.97	9.73	8.26	5.95
3	10.92	5.66	4.76	4.20	14.95	6.76	6.35	5.12	22.08	9.79	8.10	6.72
4	12.61	5.67	4.44	3.48	17.11	7.25	5.50	4.16	26.15	9.93	7.06	5.26
5	13.71	5.62	4.19	3.31	18.54	7.10	5.27	3.94	27.75	9.99	6.58	5.02
$J = 3/2, L = 2, i = 1, \delta E = 0.05 \text{ мэВ}$												
0	3.28	3.28	3.28	3.28	3.90	3.90	3.90	3.89	4.97	4.97	4.96	4.96
1	3.29	3.28	3.29	3.29	3.91	3.92	3.85	3.94	4.98	4.91	5.00	5.03
2	3.24	3.31	3.26	3.25	3.86	3.85	4.02	3.81	4.87	5.19	4.87	4.75
3	3.73	3.38	3.17	2.95	4.48	4.21	3.53	3.48	6.38	4.99	4.68	4.26
4	4.30	3.29	3.07	2.84	5.34	3.77	3.74	3.29	7.44	4.88	4.53	4.03
5	4.87	3.23	3.00	2.66	6.06	3.82	3.52	3.08	8.52	4.76	4.38	3.74
$J = 3/2, L = 1, i = 2, \delta E = 0.05 \text{ мэВ}$												
0	1.81	1.81	1.81	1.81	2.29	2.30	2.30	2.29	3.14	3.15	3.16	3.17
1	1.86	1.82	1.80	1.76	2.31	2.29	2.23	2.20	3.34	3.19	3.13	3.00
2	2.26	1.89	1.67	1.54	2.97	2.37	2.17	1.94	4.20	3.33	2.81	2.59]
3	2.21	1.89	1.69	1.56	2.71	2.44	2.04	1.94	3.91	3.38	2.90	2.62
4	2.45	1.92	1.61	1.44	3.14	2.42	2.05	1.80	4.64	3.33	2.74	2.38
5	2.60	1.92	1.58	1.39	3.31	2.40	2.00	1.73	4.95	3.31	2.70	2.29
$J = 5/2, L = 2, i = 1, \delta E = 0.03 \text{ мэВ}$												
0	1.70	1.71	1.70	1.70	2.07	2.08	2.07	2.07	2.73	2.73	2.73	2.73
1	1.70	1.70	1.71	1.70	2.08	2.06	2.09	2.08	2.72	2.74	2.73	2.71
2	1.71	1.70	1.71	1.71	2.07	2.09	2.06	2.05	2.73	2.71	2.70	2.73
3	1.74	1.73	1.69	1.66	2.14	2.10	2.04	2.03	2.88	2.79	2.70	2.56
4	1.83	1.73	1.67	1.62	2.26	2.12	2.02	1.93	3.11	2.78	2.60	2.50
5	1.94	1.73	1.64	1.57	2.42	2.11	1.98	1.88	3.42	2.76	2.57	2.38

Заключение. В данной работе путем аппроксимации большого объема результатов теоретических расчетов было получено аналитическое выражение для значений энергии локализованных и резонансных состояний однозарядного акцептора в твердых растворах $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с учетом ПЦЯ. Данное выражение применимо для вычисления энергии примесных уровней в широком диапазоне параметров. Полученные результаты могут быть использованы для определения параметров ПЦЯ для однозарядных акцепторов в КРТ на основе экспериментальных данных.

Работа поддержана НЦМУ “Центр фотоники”, при финансировании Министерством науки и высшего образования РФ, соглашение # 075-15-2022-316.

1. Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, Д. Г. Икусов,

В. В. Карпов, В. Г. Ремесник, Е. В. Сусов, И. Н. Ужаков, А. В. Филатов, В. А. Швец, В. Я. Алешкин, в *Материалы XXIII Международного Симпозиума “Нанофизика и Нанoeлектроника”*, Издательство Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород (2019), p.760.

2. S. V. Morozov, V. V. Romyantsev, M. S. Zholudev, A. A. Dubinov, V. Ya. Aleshkin, V. V. Utochkin, M. A. Fadeev, K. E. Kudryavtsev, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretiskii, V. I. Gavrilenko, and F. Teppe, *ACS Photonics* **8**, 3526 (2021).
3. I. I. Izhnin, A. I. Izhnin, H. V. Savytskyy, O. I. Fitsych, N. N. Mikhailov, V. S. Varavin, S. A. Dvoretzky, Yu. G. Sidorov, and K. D. Mynbaev, *Opto-Electron. Rev.* **20**, 375 (2012).
4. V. V. Romyantsev, D. V. Kozlov, S. V. Morozov, M. A. Fadeev, A. M. Kadykov, F. Teppe, V. S. Varavin, M. V. Yakushev, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzskii, and

- V. I. Gavrilenko, *Semicond. Sci. Technol.* **32**, 095007 (2017).
5. D. Donetsky, G. Belenky, S. Svensson, and S. Suchalkin, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 052108 (2010).
6. C. L. Littler, D. G. Seiler, and M. R. Loloee, *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 1133 (1990).
7. C. L. Littler, in *Growth and Characterization of Materials for Infrared Detectors*, SPIE, San Diego (1993), v. 2021, p. 184.
8. W. Lei, J. Antoszewski, and L. Faraone, *Appl. Phys. Rev.* **2**, 041303 (2015).
9. D. D. Edwall, L. O. Bubulac, and E. R. Gertner, *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct. Process. Meas. Phenom.* **10**, 1423 (1992).
10. M. H. Kalisher, *J. Cryst. Growth* **70**, 365 (1984).
11. G. A. Umana-Membreno, H. Kala, S. Bains, N. D. Akhavan, J. Antoszewski, C. D. Maxey, and L. Faraone, *J. Electron. Mater.* **45**, 4686 (2016).
12. A. C. Chen, M. Zandian, D. D. Edwall, R. E. De Wames, P. S. Wijewarnasuriya, J. M. Arias, S. Sivananthan, M. Berding, and A. Sher, *J. Electron. Mater.* **27**, 595 (1998).
13. X. H. Shi, S. Rujirawat, R. Ashokan, C. H. Grein, and S. Sivananthan, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 638 (1998).
14. J. Shao, W. Lu, L. Chen, X. Lu, S. Guo, J. Chu, and L. He, in *Seventh International Conference on Thin Film Physics and Applications*, SPIE, Shanghai (2011), v. 7995, p. 23.
15. M. S. Zholudev, V. V. Rumyantsev, and S. V. Morozov, *Semicond. Sci. Technol.* **37**, 025003 (2022).
16. A. Baldereschi and N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
17. E. P. Pokatilov, V. A. Fonoberov, V. M. Fomin, and J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **64**, 245328 (2001).
18. Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, А. М. Кадыков, М. А. Фадеев, В. С. Варавин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, В. И. Гавриленко, Ф. Терре, *Физика и техника Полупроводников* **50**, 1690 (2016).
19. М. С. Жолудев, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, *Физика и техника полупроводников* **55**, 861 (2021).
20. D. Y. K. Ko and J. C. Inkson, *Phys. Rev. B* **38**, 9945 (1988).
21. C. Ramirez, F. H. González, and C. G. Galván, *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 094002 (2019).
22. M. Hazewinkel, *Encyclopaedia of Mathematics: Supplement*, Springer Science & Business Media, Dordrecht (1997).
23. Д. В. Козлов, Т. А. Уаман Светикова, А. В. Иконников, В. В. Румянцев, А. А. Разова, М. С. Жолудев, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, В. И. Гавриленко, С. В. Морозов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 399 (2021).
24. V. V. Rumyantsev, S. V. Morozov, A. V. Antonov, M. S. Zholudev, K. E. Kudryavtsev, V. I. Gavrilenko, S. A. Dvoretiskii, and N. N. Mikhailov, *Semicond. Sci. Technol.* **28**, 125007 (2013).

Модифицированная молекулярная модель для описания конденсированных фаз тяжелой воды

В. Р. Белослудов, К. В. Гец¹⁾, Р. К. Жданов, Ю. Ю. Божко, О. С. Субботин

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 15 июля 2022 г.

После переработки 27 июля 2022 г.

Принята к публикации 27 июля 2022 г.

В рамках метода решеточной динамики предложена простая трехточечная модель тяжелой воды, полученная путем оптимизации теплового расширения и температуры плавления дейтерированого льда гексагональной структуры I_h к экспериментальным значениям через параметры леннард-джонсовского и кулоновского потенциалов между узлами с фиксированными зарядами, описывающих межмолекулярные взаимодействия молекул воды. Метод решеточной динамики учитывает энергию нулевых колебаний, что позволяет более точно производить построение термодинамических функций. В работе приведены результаты расчета плотности колебательных состояний, температурной зависимости линейных размеров элементарной ячейки и температуры плавления льда I_h при различной концентрации молекул D_2O .

DOI: 10.31857/S1234567822170086, EDN: jtaopa

Введение. Тяжелая вода – это вода, в которой атомы водорода (протий, 1H) замещены изотопами водорода 2H или, другими словами, дейтерием (D) с ядром, состоящим из одного протона и одного нейтрона. В результате молекулярная масса тяжелой воды выше, чем у обычной воды примерно на 11%. Несмотря на почти идентичные структуры, образуемые молекулами H_2O и D_2O , тяжелая и обычная вода имеют различие в некоторых физических свойствах. При этом различия свойств тяжелой воды по сравнению с обычной водой более значительные, чем просто изменение массы молекулы, в рамках классической концепции механической теории жидкой воды [1]. Дейтерий, из-за своей массы имеет более низкую энергию нулевых колебаний, что делает “дейтериевую связь” более сильной, чем “водородная связь” [2]. Эта разница может быть причиной более прочной структуры тяжелой воды [3, 4]. При относительно высоких температурах вязкость и теплоемкость D_2O более значительны, чем аналогичные параметры в H_2O [5]. Кроме этого, D_2O имеет повышенную температуру плавления по сравнению с H_2O , а максимальная плотность D_2O достигается при температуре 11.2 °C вместо 4 °C [5]. Изотопический эффект проявляется не только в изменении макроскопических свойств, но может быть обнаружен и на квантовом уровне [6, 7].

Начиная с открытия дейтерия [8] в 1932 г. и его выделения в чистом виде в 1933 г. с помощью элект-

тролиза, вплоть до настоящего времени тяжелая вода находится в центре внимания большого количества физико-химических исследований [9], так как тяжелая вода играет значительную роль во многих природных и технологических процессах. Одним из важных свойств тяжелой воды является то, что она практически не поглощает нейтроны, поэтому может использоваться в качестве замедлителя нейтронов и одновременно теплоносителем в ядерных реакторах.

Для проведения численных экспериментов требуется иметь точную модель молекулы воды, которая воспроизводит требуемые физико-химические свойства, например, плотность, электрическую восприимчивость, энергетические параметры, коэффициент диффузии и пр. За последние несколько десятилетий было разработано множество различных моделей H_2O [10]. Например, трехточечная модель воды SPC (*Single Point Charge*), предложенная Берендсеном и соавторами в 1981 г., была одной из первых моделей, но до сих пор широко используется [11]. Позднее данная модель была доработана, что вылилось в создание модели SPC/E [12].

Создание моделей тяжелой воды, необходимое для воспроизведения экспериментальных свойств D_2O , проходило не так интенсивно и стратегия исследований заключалась не в создании новых моделей с нуля, а в перепараметризации уже существующих моделей H_2O , сохраняя их специфические характеристики. Так, модель для тяжелой воды на основе модели SPC/E, обозначенная как SPC/HW [3], была создана путем изменения заряда

¹⁾e-mail: gets@niic.nsc.ru

Таблица 1. Сравнительные значения зарядов на атомах кислорода q_O и водорода q_H , пространственной σ и энергетической ϵ констант потенциала Леннард–Джонса, а также внутримолекулярных угла водород–кислород–водород α_{HON} и расстояния кислород–водород d_{OH} для потенциалов SPC/E_{mod}-HW, SPC/E_{mod}, SPC/HW и SPC/E

	SPC/E _{mod} -HW	SPC/E _{mod}	SPC/HW	SPC/E
$q_H, e $	+0.435	+0.4238	+0.435	+0.4238
$q_O, e $	-0.87	-0.8476	-0.87	-0.8476
$\sigma, \text{Å}$	3.1781	3.1556	3.166	3.166
$\epsilon, \text{кДж/моль}$	0.65063	0.65063	0.650	0.650
$\alpha_{\text{HON}}, ^\circ$	109.47	109.47	109.47	109.47
$d_{\text{OH}}, \text{Å}$	1	1	1	1

на атоме кислорода q_O с $-0.8476 |e|$, принятом в модели SPC/E, до $-0.87 |e|$, оставляя все остальные параметры за исключением массы водорода без изменений. Моделирование при помощи молекулярной динамики, выполненное с потенциалом SPC/HW показывает хорошее согласие с экспериментальными значениями по основным свойствам тяжелой воды. Кроме этого, имеются адаптации под тяжелую воду других известных потенциалов обычной воды [3].

Несмотря на то, что методы рентгеноструктурного анализа [13] значительно продвинулись, классические рентгеноструктурные методы до сих пор активно используются. При изучении водных кристаллических структур, образование исследуемого вещества может производиться с использованием D₂O вместо H₂O, так как такая замена позволяет определить положение не только атомов кислорода, но и дейтерия, что связано с большей площадью сечения рассеяния дейтерия [14], а также она позволяет исследовать изотопический эффект. Так, например, представлены результаты исследования при помощи рентгеновских и нейтронных методов структур льдов [15] и гидратов [16], полученных из тяжелой воды.

В данной работе ставится задача построения потенциала дейтерированной воды для описания структурных и термодинамических свойств льдов, а также исследовать изотопический эффект, основываясь на экспериментальных данных (температура плавления и тепловое расширение).

Детали вычислений. Для описания межмолекулярного взаимодействия молекул тяжелой воды в рамках метода решеточной динамики в квазигармоническом приближении был разработан трехточечный потенциал SPC/E_{mod}-HW на основе модифицированного потенциала SPC/E, который здесь называется SPC/E_{mod}. Потенциал SPC/E_{mod} [17] показал наибольшую точность при описании термодинамических свойств льда и газовых гидратов [18] по сравнению с немодифицированным потенциалом

SPC/E [12] и другими часто используемыми потенциалами. Величины заряда предлагаемого потенциала SPC/E_{mod}-HW были взяты из потенциала SPC/HW, разработанного для описания тяжелой воды [3], в то время как остальные силовые константы остались равными константам из потенциала SPC/E_{mod}. Для описания молекул H₂O в данной работе используется потенциал SPC/E_{mod}. Параметры разработанного и исходных потенциалов приведены в табл. 1. Молекулы воды считались жесткими. Параметры потенциала Леннард–Джонса между разными типами атомов определялись при помощи комбинаторных правил Лоренца–Берселота [19, 20].

Модель льда I_h состояла из 128 молекул H₂O. Протоны были расставлены случайным образом, но в соответствии с правилом Бернала–Фаулера [21] с минимальным значением суммарного дипольного момента решетки. Составы с различным содержанием молекул тяжелой воды получались случайной заменой определенного числа молекул H₂O на молекулы D₂O.

Восстановление термодинамических потенциалов льдов производилось с использованием методов решеточной динамики в квазигармоническом приближении [22], которые позволяют учитывать квантовые эффекты, например, нулевые колебания. Для этого был получен оптимизированный по потенциальной энергии набор структур с различным набором объемов элементарной ячейки для получения уравнения состояния. Использование метода решеточной динамики позволяет непосредственно вычислять вектора собственных колебаний частиц, для применения критерия Линдемманна [23, 24] при нахождении температуры плавления льдов, а также вычислять энергию Гельмгольца на основе колебательных данных.

Результаты и обсуждение. Собственные частоты колебаний, как и собственные вектора колебаний, являются критически важными для восстановления термодинамических параметров системы и расчета температуры плавления кристаллической

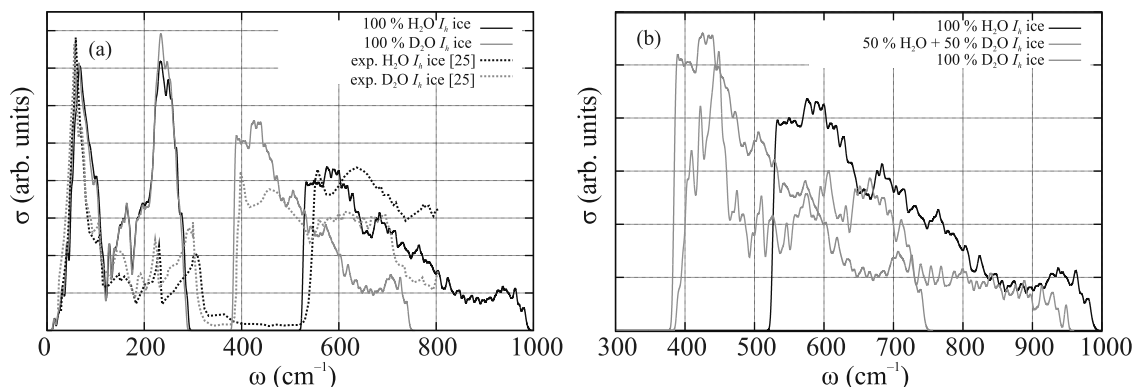


Рис. 1. (Цветной онлайн) Расчетная плотность колебательных состояний σ (сплошные линии) льда I_h , состоящего только из молекул H_2O (черные линии), только из молекул D_2O (синие линии), и смеси 50 % H_2O + 50 % D_2O (оранжевые линии). Пунктирными линиями показаны результаты экспериментальных исследований (а) для обычного и “тяжелого” льда I_h [25]. Изменение спектра вращательных колебаний (б) при повышении концентрации D_2O . Данные приведены для температуры 270 К и давления 1 бар

решетки, используя критерий Линдемманна. На рисунке 1 приведено сравнение плотности колебательных состояний обычного льда и льда, образованного тяжелой водой в сравнении с экспериментальными данными по аналогичным системам (рис. 1а). Можно видеть, что расчетные данные достаточно точно [25] описывают положение и ширину щели между трансляционными и вращательными колебаниями. Более того, положение основных расчетных пиков в области до 300 см^{-1} совпадает с экспериментальными данными. Таким образом, можно говорить о точности разработанного теоретического описания. Можно видеть, что рассчитанная трансляционная область спектра от 0 до $\sim 300\text{ см}^{-1}$ не претерпевает значительных изменений при замене H_2O на D_2O . Основное различие заключается в изменении области вращательных колебаний (рис. 1б): при повышении концентрации D_2O появляются низкочастотные вращательные колебания в области от ~ 380 до $\sim 520\text{ см}^{-1}$ из-за значительно возросшего момента инерции молекул. В чистом D_2O льду, где отсутствуют молекулы H_2O , верхняя граница области высокочастотных вращательных колебаний снижается с ~ 1000 до $\sim 750\text{ см}^{-1}$. Таким образом, спектр вращательных колебаний льда в общих чертах является суперпозицией спектров предельных вариантов концентрации.

Расчет свободной энергии позволяет получить уравнение состояния системы, из которого можно определить зависимость объема элементарной ячейки от температуры при заданном давлении. В данной работе фокус исследования был направлен на модификацию потенциала SPC/E таким образом, чтобы он хорошо описывал как температурное расши-

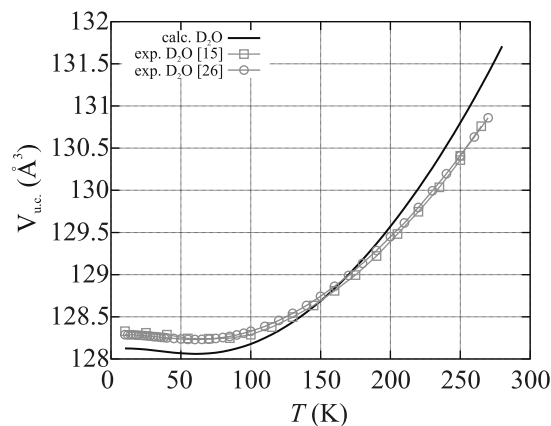


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурная зависимость объема элементарной ячейки $V_{u.c.}$ D_2O льда I_h при атмосферном давлении. Черная линия соответствует расчетным данным. Оранжевой линией с квадратными маркерами и синей линией с круглыми маркерами показаны результаты экспериментальных исследований [15] и [26] соответственно

рение системы, так и температуру плавления D_2O льда I_h . На рисунке 2 представлены расчетные объемы элементарных ячеек тяжелого льда в сравнении с данными эксперимента при атмосферном давлении. Видно, что отличие расчетного значения объема элементарной ячейки от экспериментальных данных не превосходит -0.2 \AA^3 при низкой температуре и $+0.8\text{ \AA}^3$ при высокой температуре, что является достаточно точным для описания термодинамических свойств льда на основе тяжелой воды, так как для SPC/E_{mod} расхождение с экспериментальными данными больше [18]. При этом потенциал SPC/HW

недооценивает объем элементарной ячейки более чем на 2 \AA^3 .

Рассчитанный максимум плотности льда I_h достигается при температуре $\sim 60 \text{ K}$, что показано на рис. 2 и совпадает с экспериментальными значениями $59\text{--}60 \text{ K}$ [26], что так же указывает на высокую точность новой модели.

На рисунке 1 было показано, что в H_2O и D_2O льдах VDOS трансляционных колебаний совпадают. Мы предполагаем, что в рассматриваемой области температуры именно эти колебания имеют наибольшие вектора смещения, увеличение которых приводит к разрушению структуры. Несмотря на то, что молекулы H_2O и D_2O описываются разными потенциалами, величины межмолекулярных расстояний остаются близкими, поэтому можно предположить, что критерий Линдемманна H_2O и D_2O льдов должен совпадать в точке плавления. Взяв за реперное значение критерия для льда H_2O при температуре 273.15 K , были найдены значения температуры, при которых величины критерия Линдемманна льдов различного состава равны реперному значению. На рисунке 3 представлена температура плавления льда I_h с ее линейной аппроксимацией в зависимости от концентрации D_2O . Можно видеть, что эта зависимость имеет схожий с линейным характер, учитывая, что экспериментальные образцы льда D_2O содержат небольшую долю H_2O ($\sim 0.1 \%$).

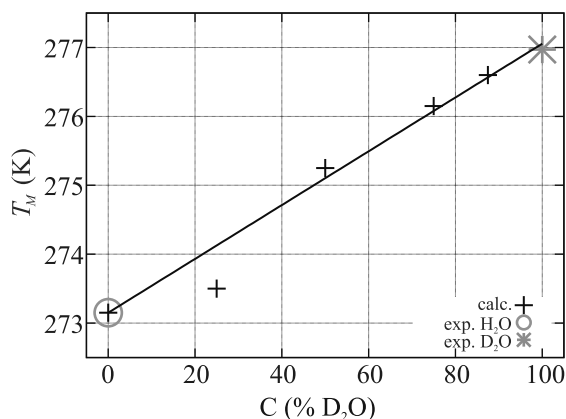


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость температуры плавления T_M льда I_h от процентной доли молекул D_2O в его структуре при атмосферном давлении. Черная линия аппроксимирует результаты расчета (плюсы). Круг показывает температуру плавления H_2O льда I_h , звезда показывает температуру плавления D_2O льда I_h .

Выводы. В работе предложена трехточечная модель, основанная на модели SPC/E, для описания молекулы D_2O , которая позволяет в рамках метода решеточной динамики описывать динамические и

термодинамические свойства конденсированных фаз воды с высокой точностью. Показано соответствие объема элементарной ячейки в зависимости от температуры с экспериментальными данными. Помимо этого, разработанный потенциал позволяет находить температуру плавления льда в зависимости от концентрации тяжелой воды в нем.

Предложенный подход использует описание динамических и термодинамических свойств твердого тела в отличие от других подходов, в которых используется описание свойств жидкой фазы. Поэтому представленный потенциал в большей степени предназначен для описания твердых фаз тяжелой воды.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, проект # 121031700321-3.

1. W. E. Thiessen and A. H. Narten, *J. Chem. Phys.* **77**(5), 2656 (1982).
2. S. Herrig, M. Thol, A. H. Harvey, and E. W. Lemmon, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **47**(4), 043102 (2018).
3. J. R. Grigera, *J. Chem. Phys.* **114**(18), 8064 (2001).
4. J. L. Abascal and C. Vega, *J. Chem. Phys.* **123**(23), 234505 (2005).
5. D. R. Lide, *CRC Handbook of Chemistry and Physics: A Ready-Reference Book of Chemical and Physical Data*, CRC, Boca Raton FL, London (2003), v. 84.
6. P. V. Enkovich, V. V. Brazhkin, and S. G. Lyapin, *JETP Lett.* **110**(10), 687 (2019).
7. P. V. Enkovich, V. V. Brazhkin, S. G. Lyapin, and S. M. Stishov, *JETP* **128**(2), 207 (2019).
8. H. C. Urey, F. G. Brickwedde, and G. M. Murphy, *Phys. Rev.* **39**(1), 164 (1932).
9. V. C. Chamorro, C. Tempra, and P. Jungwirth, *J. Phys. Chem. B* **125**(17), 4514 (2021).
10. J. B. Linse and J. S. Hub, *J. Chem. Phys.* **154**(19), 194501 (2021).
11. H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, and J. Hermans, *Interaction Models for Water in Relation to Protein Hydration, in Intermolecular forces*, Springer, Dordrecht (1981), p. 331.
12. H. J. C. Berendsen, J. R. Grigera, and T. P. Straatsma, *J. Phys. Chem.* **91**(24), 6269 (1987).
13. M. K. Eseev, V. I. Matveev, and D. N. Makarov, *JETP Lett.* **114**(7), 387 (2021).
14. E. O. Wollan, W. L. Davidson, and C. G. Shull, *Phys. Rev.* **75**(9), 1348 (1949).
15. K. Röttger, A. Endriss, J. Ihringer, S. Doyle, and W. F. Kuhs, *Acta Crystallogr. B: Struct. Sci.* **50**(6), 644 (1994).
16. M. Kida, M. Watanabe, Y. Jin, and J. Nagao, *J. Chem. Eng. Data* **60**(6), 1939 (2015).

17. R. V. Belosludov, R. K. Zhdanov, K. V. Gets, Y. Y. Bozhko, V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe, *J. Phys. Chem. C* **124**(34), 18474 (2020).
18. R. V. Belosludov, R. K. Zhdanov, Y. Y. Bozhko, K. V. Gets, O. S. Subbotin, Y. Kawazoe, and V. R. Belosludov, *Energy Fuels* **34**(10), 12771 (2020).
19. H. A. Lorentz, *Ann. Phys.* **248**(1), 127 (1881).
20. D. Berthelot, *Comptes rendus hebdomadaires des seances de l'Academie des Sciences* **126**, 1703 (1898).
21. J. D. Bernal and R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.* **1**(8), 515 (1933).
22. R. K. Zhdanov, V. R. Belosludov, Y. Y. Bozhko, O. S. Subbotin, K. V. Gets, and R. V. Belosludov, *JETP Lett.* **108**(12), 806 (2018).
23. H. Böttger, *Principles of the theory of lattice dynamics*, Academie-Verlag, Berlin (1983).
24. A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss, and I. P. Ipatova, *Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation*, Academic press, N.Y. (1963), v. 3.
25. J. Li, *J. Chem. Phys.* **105**(16), 6733 (1996).
26. A. D. Fortes, *Acta Crystallogr. B: Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **74**(2), 196 (2018).

О возможных магнитных свойствах ультратонких пленок Mn_2GaC на подложках Al_2O_3

М. А. Высотин^{+*1)}, И. А. Тарасов⁺, А. С. Федоров^{+*}, С. Н. Варнаков⁺, С. Г. Овчинников^{+*}

⁺Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

^{*}Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 22 июня 2022 г.

После переработки 18 июля 2022 г.

Принята к публикации 18 июля 2022 г.

Рассматривается вопрос о возможности роста и магнитных свойствах тонких пленок МАХ-фазы Mn_2GaC на подложках Al_2O_3 различной ориентации. В рамках геометрического подхода спрогнозированы наиболее предпочтительные ориентационные соотношения и интерфейсные плоскости в системе $Mn_2GaC//Al_2O_3$, указывающие на возможность роста на подложках сапфира С-срез (0001), S-срез (01 $\bar{1}\bar{1}$), N-срез (11 $\bar{2}\bar{3}$), и R-срез (0 $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$). С помощью метода функционала электронной плотности рассчитаны возможные магнитные свойства сплошных ультратонких пленок Mn_2GaC при условии сохранения однородных растяжений/сжатий решетки МАХ-фазы, вызванных ростом на предсказанных подложках: определено влияние деформации решетки Mn_2GaC на магнитное упорядочение и величины магнитных моментов, оценена возможность перехода из антиферромагнитного состояния в ферромагнитное под действием внешних магнитных полей. Показано, что рост ферромагнитной пленки МАХ-фазы Mn_2GaC наиболее вероятен на подложках $Al_2O_3(0001)$, $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ и $Al_2O_3(0\bar{1}\bar{1}\bar{2})$.

DOI: 10.31857/S1234567822170098, EDN: jtzcql

Введение. Известные с 1960-х гг. соединения бескислородной керамики, так называемые МАХ-фазы, в последнее десятилетие переживают настоящее второе рождение. Это семейство фаз, с общей формулой $M_{n+1}AX_n$, где М – переходный металл, А – элементы подгруппы А групп III и IV (в основном, Al, Ga, Ge или Si), X – углерод или азот, сочетает в себе свойства керамики и металла, способность к самовосстановлению, а также стойкость к высокотемпературному окислению и растрескиванию при резком нагреве/охлаждении [1]. Благодаря слоистой высокоанизотропной структуре МАХ-фаз возможен синтез ультратонких функциональных пленок вплоть до толщины в несколько нанометров, что делает их новым перспективным классом для применения в различных областях техники.

Долгое время считалось, что эти соединения не проявляют магнитных свойств, однако в 2013 г. была найдена первая МАХ-фаза с дальним магнитным порядком: была синтезирована $(Cr_{0.75}Mn_{0.25})_2GeC$ в виде эпитаксиальной тонкой пленки на $MgO(111)$ [2]. Последующие исследования обнаружили несколько тройных и четвертных МАХ-фаз на основе Mn с конкурирующими ферро- и антиферромагнитными (внутри- и межплоскостными) взаимодействиями,

приводящими к общему сложному магнитному отклику, зависящему от поля и температуры. Недавно детальное изучение магнитных свойств Mn_2GaC привело к открытию первой магнитокалорической МАХ-фазы с высокой температурой упорядочения и инверсией знака магнитострикции и магнитосопротивления при фазовом переходе [3]. Эти новые свойства материалов предлагают новые функциональные возможности для интеллектуальных датчиков и актуаторов, которые востребованы для интернета вещей.

Тем не менее, синтез качественных пленок МАХ-фаз на данный момент оказывается весьма сложным [4] и, тем самым, отражает общую проблему поиска подходящих технологических подложек для роста заданных кристаллических пленок. Ранее нами был предложен двухступенчатый кристаллогеометрический метод [5], который позволяет определить набор предпочтительных ориентационных соотношений между подложкой и эпитаксиально растущей на ней пленки. Однако свойства тонких пленок, образование которых может происходить на этих подложках, остаются за рамками такого метода и требуют отдельного изучения. В случае, если речь идет о новых малоизученных материалах, крайне выгодным представляется предварительное исследование ожидаемых свойств тео-

¹⁾e-mail: mav@iph.krasn.ru

ретическими методами, например высокоточными квантово-химическими расчетами.

Таким образом, актуальной представляется задача нахождения наиболее предпочтительных ориентационных соотношений магнитных МАХ-фаз, например, Mn_2GaC , с кристаллической структурой сапфира Al_2O_3 – технологически важного материала, из которого производятся качественные подложки произвольной ориентации. При этом особый интерес может представлять возможная деформация решетки растущей пленки при образовании интерфейса с подложкой, которая может существенно повлиять на магнитные свойства [6, 7]. Соответственно, в данной работе мы сначала проводим предсказание наиболее предпочтительных плоскостей подложек Al_2O_3 , а затем исследуем методами квантово-химических расчетов магнитные свойства напряженных пленок Mn_2GaC .

Прогнозирование ориентационных соотношений. Учитывая большой размер и число неэквивалентных атомных позиций в ячейках Mn_2GaC и Al_2O_3 , в данной работе оправдано использование чисто геометрического подхода к поиску возможных границ раздела между этими двумя фазами. Предложенный нами кристаллогеометрический подход, который достаточно прост для поиска по многочисленным вариантам, уже показал свою эффективность для задач эпитаксиального роста [5].

Предлагаемая методика использует систематическую комбинацию метода наложения ячеек ряд-к-ряду (*edge-to-edge matching*) [8], чтобы найти возможные ориентационные соотношения и потенциальные интерфейсы, и последующую максимизацию доли близко-совпадающих узлов (*Near-Coincidence Sites, NCS*) [9] для прогнозирования относительного положения фаз на границе раздела и для сравнения различных интерфейсов между собой. При этом концепция плотности атомных рядов переформулируется для учета небольших атомных смещений, которые лежат в основе метода NCS, и, таким образом, оба метода используются унифицированным образом. Полученная информация об узлах совпадений решеток позволяет построить простую атомистическую модель структуры интерфейса, которая может использоваться в качестве входных данных для более совершенных методов построения атомной структуры (методы Монте-Карло, эволюционные или другие эвристические алгоритмы) или непосредственно в молекулярной динамике или квантово-химических расчетах.

В первую очередь для заявленной пары кристаллических фаз были выбраны ключевые парамет-

ры метода поиска интерфейсов. В качестве критерия совпадения близкорасположенных узлов решеток было выбрано расстояние 0.46 \AA , которое эквивалентно смещениям атомов до 0.23 \AA , что соответствует примерно 12 % от длин связей Mn-C и Al-O. Для толщины интерфейсного слоя было взято значение 2.8 \AA , что полностью исключает взаимодействие атомов, находящихся по разную сторону от интерфейсного региона, так как наибольший атомный радиус не превышает 1.4 \AA (марганец). В качестве критерия плотной упаковки кристаллографических направлений, как и в прошлых работах, было выбрано относительно невысокое значение $(6 \text{ \AA})^{-1}$. Максимальное рассогласование векторов трансляций на рассматриваемых интерфейсах было ограничено по величине деформации интерфейса $\tilde{\epsilon} = (\epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{yy}^2 + \epsilon_{xx}\epsilon_{yy} + \epsilon_{xy}^2)^{0.5}$, где $\epsilon_{\alpha\beta}$ – компоненты тензора деформации. Все интерфейсы-кандидаты с деформацией $\tilde{\epsilon}$ более 5 % отбрасывались. Поскольку величина $\tilde{\epsilon}$ неотрицательна, она не отражает знак преимущественной деформации, т.е. будет ли растущая на подложке пленка сжиматься или растягиваться. Для отслеживания этого использовалась разность площадей примитивных ячеек трансляции в плоскости интерфейса, δS , приведенная к площади ячейки подложки Al_2O_3 , далее обозначенной S_0 .

Учитывая схожесть химических связей, которые могут образовывать входящие в обе фазы атомы, было выбрано, что совпадающими узлами считались пары Mn-Al, Ga-Al и C-O. Отдельно стоит отметить, что исключение пары Ga-Al приводит к незначительному изменению порядка интерфейсов по степени предпочтительности.

На первых этапах поиска было обнаружено, что выбранные критерии согласования решеток допускают огромное количество предварительных вариантов интерфейсов, включающих в основном высокоиндексные плоскости сапфира. Поскольку конечной целью поиска является выбор подложки для синтеза МАХ-фазы, было решено отбросить интерфейсы с плоскостями Al_2O_3 , которые не используются для изготовления подложек. В результате поиск был ограничен плоскостями Al_2O_3 R-срез ($0\bar{1}1\bar{2}$), A-срез ($11\bar{2}0$), S-срез ($01\bar{1}1$), M-срез ($10\bar{1}0$), C-срез (0001), V-срез ($22\bar{4}3$), N-срез ($11\bar{2}\bar{3}$) и срезы ($11\bar{2}9$), ($11\bar{2}6$) и ($10\bar{1}4$). Это позволило снизить число анализируемых ориентационных соотношений до 12197 вариантов. Для каждого из них была рассчитана доля совпадающих узлов в интерфейсном регионе. В таблице 1 представлены варианты с долей NCS более 0.4.

Экспериментальные подтверждения роста фазы Mn_2GaC ограничены случаем роста на подлож-

Таблица 1. Наиболее вероятные ориентационные соотношения и интерфейсы $\text{Mn}_2\text{GaC}/\text{Al}_2\text{O}_3$

#	NCS	(hkil) MAX	(hkil) Al_2O_3	Срез Al_2O_3	[uvw] MAX	[uvw] Al_2O_3	$\bar{\epsilon}$,	$\delta S/S_0$, %
1	0.92	(0001)	(0001)	C	[11 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 00]	4.551	-11.40
2	0.46	(11 $\bar{2}$ $\bar{3}$)	(01 $\bar{1}$ $\bar{1}$)	S	[1 $\bar{1}$ 00]	[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	2.275	-2.86
3	0.44	(1 $\bar{1}$ 03)	(11 $\bar{2}$ $\bar{3}$)	N	[11 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 00]	2.375	-4.22
4	0.43	(1 $\bar{1}$ 02)	(0001)	C	[11 $\bar{2}$ 0]	[10 $\bar{1}$ 0]	2.722	+0.07
5	0.43	(11 $\bar{2}$ 6)	(0 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2)	R	[1 $\bar{1}$ 00]	[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	2.461	-4.76
6	0.42	($\bar{1}$ 014)	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 29)	-	[11 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 00]	4.852	-1.61
7	0.42	(1 $\bar{1}$ 00)	(11 $\bar{2}$ 0)	A	[11 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 00]	2.318	-1.96
8	0.41	(11 $\bar{2}$ 0)	(1 $\bar{1}$ 00)	M	[1 $\bar{1}$ 00]	[11 $\bar{2}$ 0]	2.318	-1.96

ках $\text{MgO}(111)$. В свою очередь формирование тонких пленок МАХ-фаз, содержащих атомы хрома ($\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x$) $_2\text{GaC}$, наблюдалось на различных подложках, в том числе на $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ [10]. Преимущественная ориентация таких пленок наблюдается на плоскость ($\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x$) $_2\text{GaC}(0001)$. Однако текстурирование МАХ-фазы обнаруживается и на плоскости (01 $\bar{1}$ 3) и (10 $\bar{1}$ 0). При этом кристаллиты данных ориентаций не имеют интерфейса с поверхностью $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$. Их рост происходит на боковых гранях кристаллитов ориентации (0001) на этапе коалесценции [11].

Как видно из полученных результатов, предсказанный как наиболее вероятный интерфейс действительно соответствует экспериментально наблюдаемой ориентации пленки МАХ-фазы (0001) на подложке $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$. Однако нельзя не отметить большую величину сжатия, которому подвергается фаза Mn_2GaC при таком варианте синтеза. Даже при высокой степени пластичности, присущей МАХ-фазам [1, 12], это препятствует росту сплошной монокристаллической пленки и способствует формированию кристаллитов других ориентаций на боковых гранях МАХ-фазы (0001) для понижения полной энергии. Стоит отметить, что для этой подложки имеется другое ориентационное соотношение, # 4 $\text{Mn}_2\text{GaC}(1\bar{1}02)/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$, причем это единственный вариант из числа лидеров, для которого пленка оказывается растянутой, $\delta S/S_0 = +0.07\%$. Однако величина деформации интерфейса (2.722 %) указывает на значительную анизотропию растяжения. Вместе с этим, такой интерфейс имеет вдвое меньшую долю NCS по сравнению с наилучшим вариантом, и поэтому рост таких пленок не наблюдается.

Отдельного внимания требуют варианты # 7 и # 8. Помимо того, что они соответствуют распространенным типам сапфировых подложек, $\text{Al}_2\text{O}_3(10\bar{1}0)$ М-срез и $\text{Al}_2\text{O}_3(11\bar{2}0)$ А-срез, они также

обладают достаточно низкими показателями деформации. Вследствие того, что пленка МАХ-фазы оказывается менее сжатой по сравнению с # 1, могут измениться ее электронные и магнитные свойства, а также степень их анизотропии. Данное обстоятельство может помочь получению новых материалов с заданными свойствами. Здесь же стоит отметить, что вариант # 2, $\text{Mn}_2\text{GaC}(11\bar{2}\bar{3})/\text{Al}_2\text{O}_3(01\bar{1}\bar{1})$ также показывает относительно небольшие показатели сжатия пленки, что также может представлять интерес для дальнейших исследований.

Методика расчета электронной структуры и магнитных свойств. Все расчеты проводились в спин-поляризованной версии теории функционала плотности в рамках пакета VASP 5.4 [13, 14] с использованием псевдопотенциалов по методу PAW [15, 16]. В качестве обменно-корреляционного потенциала было выбрано приближение GGA-PBE [17], поскольку ранее было показано, что в рамках данного приближения корректно описывается электронное состояние атомов переходного металла в МАХ-фазе Mn_2GaC [18] даже без применения дополнительных коррекций типа GGA + U, и то, что данное приближение в целом хорошо применимо к семейству МАХ-фаз [12, 19] и Al_2O_3 [20, 21]. Использовался базис плоских волн, размер которого определялся параметром обрезания по энергии, который был равен 520 эВ для всех расчетов. Первая зона Бриллюэна согласно процедуре Монхорста-Пака [22] разбивалась на сетку k -точек с размерами $12 \times 12 \times 4$ для удвоенной суперячейки. Критерий сходимости при минимизации электронных степеней свободы был установлен на уровне 10^{-7} эВ. Расчет полной энергии структуры при оптимизации геометрии проводился до тех пор, пока остаточные силы, действующие на атомы, не становились менее 0.01 эВ/Å.

Сначала были рассчитаны равновесные объемные антиферромагнитная (АФМ) и ферромагнит-

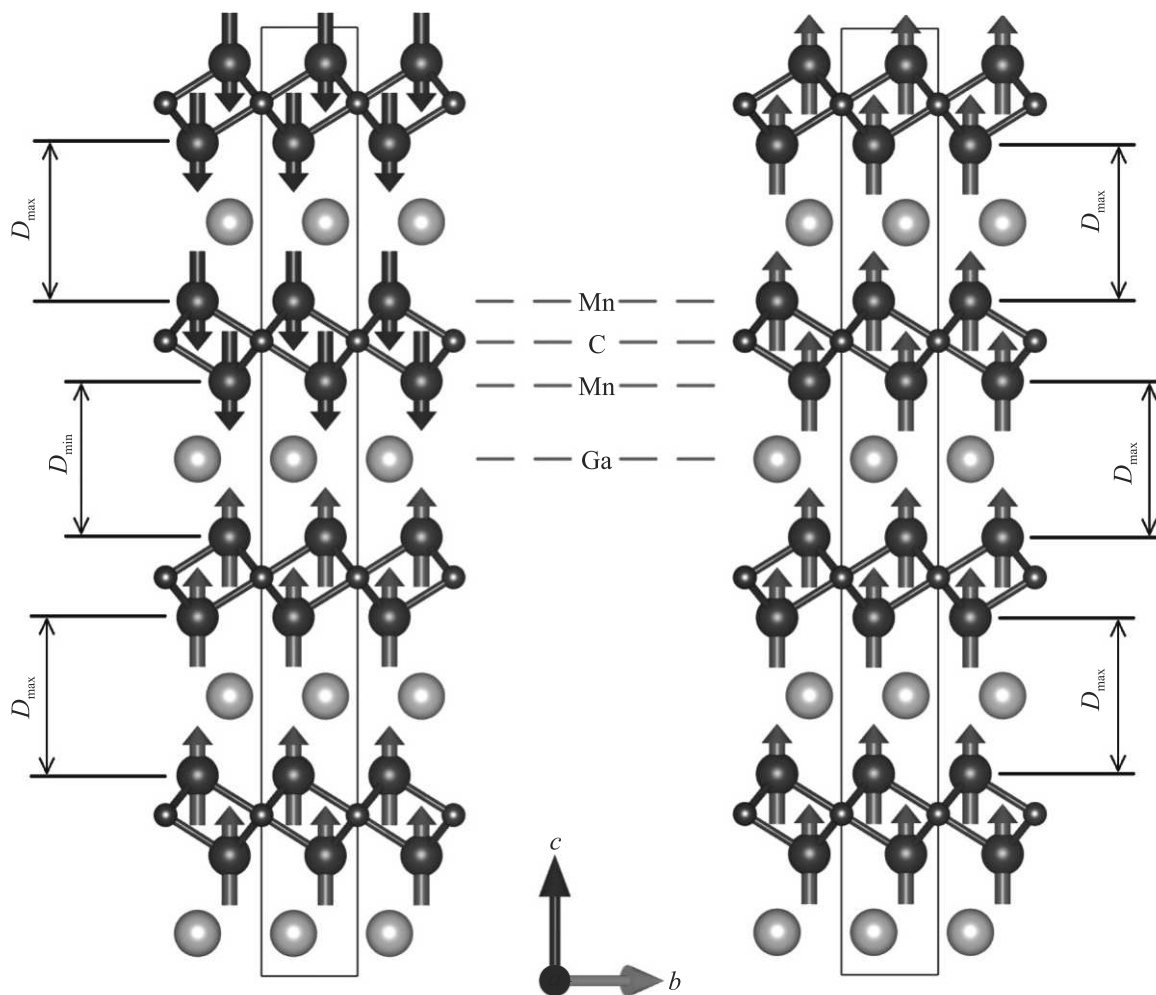


Рис. 1. (Цветной онлайн) Расчетные ячейки АФМ и ФМ фаз Mn_2GaC

ная (ФМ) фазы Mn_2GaC . Магнитное упорядочение и межатомные расстояния в этих двух случаях отличаются, это схематически отображено на рис. 1.

В соответствие с экспериментом, минимуму по энергии соответствует объемная АФМ-фаза. При этом параметры решетки также совпадают с экспериментальными данными, что подтверждает применимость выбранных методов и параметров для расчета электронных и магнитных свойств МАХ-фазы Mn_2GaC .

После определения равновесного состояния Mn_2GaC исследовалась зависимость магнитных свойств от сжатия/растяжения решетки МАХ-фазы согласно ориентационному соотношению в предположении, что вызванное подложкой механическое напряжение не релаксируется и сохраняется во всей толщине пленки. Для этого ячейки были подвергнуты соответствующей деформации в плоскости предполагаемого интерфейса, и затем проведена

минимизация энергии ячейки с варьированием атомных позиций и компонентов векторов ячейки, перпендикулярными заданной плоскости, при этом компоненты векторов ячейки в заданной плоскости оставались фиксированными. Оптимизация геометрии проводилась отдельно для АФМ и для ФМ упорядочения магнитных моментов, что позволило определить, чему соответствует минимум энергии для каждой из рассмотренных деформаций.

Магнитные свойства напряженного Mn_2GaC на Al_2O_3 . Для теоретического исследования магнитных свойств МАХ-фаз в тонких пленках, которые при росте на кристаллических подложках подвергаются деформации, были выбраны спрогнозированные ранее варианты ориентационных соотношений $Mn_2GaC//Al_2O_3$. Вследствие разного характера деформации ячеек в случаях разных ориентационных соотношений, по-разному меняются магнитные свойства МАХ-фазы: основное состояние

Таблица 2. Магнитные свойства напряженного Mn_2GaC на различных подложках Al_2O_3 : ΔE – разница энтальпии с равновесной фазой; $\Delta E(\text{ФМ-АФМ})$ – энергия АФМ \rightarrow ФМ переход $\min(\mu)$ и $\max(\mu)$ – минимум и максимум величины магнитного момента μ на ионах Mn; P – спиновая поляризация; D_{\min} , D_{\max} – расстояния между слоями Mn_2C (см. рис. 1)

#	$Mn_2GaC//Al_2O_3$	ΔE , мэВ/ф.у.	$\Delta E(\text{ФМ-АФМ})$, мэВ/ион Mn	$\min(\mu)$, μ_B	$\max(\mu)$, μ_B	P , %	D_{\min} , Å	D_{\max} , Å
1	(0001)/(0001) АФМ	237.04		1.967	2.117	0	4.174	4.211
	ФМ	221.34	-7.85		1.948	-20.9	4.175	4.179
2	(112 $\bar{3}$)/(011 $\bar{1}$) АФМ	103.31		2.054	2.211	0	4.202	4.264
	ФМ	110.71	3.70		2.051	-3.7	4.217	4.218
3	(1 $\bar{1}$ 03)/(112 $\bar{3}$) АФМ	92.05		2.016	2.181	0	4.142	4.202
	ФМ	94.37	1.16		1.987	-10.7	4.159	4.160
4	(1 $\bar{1}$ 02)/(0001) АФМ	168.22		2.148	2.264	0	4.324	4.376
	ФМ	179.61	5.69		2.150	-31.9	4.332	4.337
5	(112 $\bar{6}$)/(011 $\bar{2}$) АФМ	87.09		2.010	2.180	0	4.127	4.188
	ФМ	90.18	1.54		1.950	-27.8	4.143	4.144
6	(1 $\bar{1}$ 014)/(1 $\bar{1}$ 29) АФМ	303.90		1.909	2.170	0	4.124	4.235
	ФМ	323.69	9.89	1.920	1.990	-50.8	4.133	4.202
7	(1 $\bar{1}$ 00)/(112 $\bar{0}$) АФМ	121.77		2.117	2.237	0	4.256	4.309
	ФМ	131.03	4.13		2.103	-34.2	4.267	4.269
8	(112 $\bar{0}$)/(1 $\bar{1}$ 00) АФМ	121.70		2.096	2.234	0	4.256	4.314
	ФМ	129.77	4.03		2.091	-24.4	4.266	4.272
	Mn_2GaC АФМ	0.00		1.992	2.185	0	4.069	4.137
	Mn_2GaC ФМ	5.27	2.63		1.951	-17.9	4.058	4.058

(АФМ или ФМ), разность энергии при магнитном переходе, величины магнитных моментов. Значения данных величин представлены в табл. 2. Поскольку магнитный обмен между слоями Mn_2C , а значит и магнитное упорядочение между ними, существенно зависит от расстояния между магнитными ионами марганца, находящимися в разных слоях, эти данные также приведены в табл. 2. Для сравнения, аналогичные значения для равновесных АФМ и ФМ фаз Mn_2GaC добавлены в нижние строки табл. 2. Также, для оценки перспективности применения данных тонких пленок в спинтронике, для соответствующих ФМ-фаз была рассчитана величина спиновой поляризации:

$$P = \frac{\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}}{\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}} \cdot 100 \%,$$

где ρ_{\uparrow} и ρ_{\downarrow} – плотности состояний на уровне Ферми.

В первую очередь стоит отметить, что только три из семи рассмотренных варианта уменьшают стабильность АФМ фазы по отношению к ФМ, причем вариант # 1 – единственный, который приводит к образованию ФМ пленки. При этом разница в энергиях между АФМ и ФМ фазами для вариантов # 3 и # 5 оказывается достаточно мала и можно оценить величины магнитных полей, при которых возможен

переход в ферромагнитную фазу, как 10 и 14 Тл, соответственно.

Отдельно стоит отметить, что величины межслоевых расстояний D_{\min} , D_{\max} слабо коррелируют с относительной стабильностью АФМ и ФМ фаз, что указывает на нетривиальный характер обмена между магнитными моментами в слоях Mn_2C . В связи с этим замещение атомов А-элемента на элементы с другим атомным радиусом вряд ли позволит управлять магнитным состоянием МАХ-фазы, однако может привести к увеличению магнитного момента, как, например, в случае $Mn_2GaC(1\bar{1}02)//Al_2O_3(0001)$.

В заключение стоит отметить, что в данной работе было проделано теоретическое предсказание возможных интерфейсов Mn_2GaC с различными подложками из сапфира, которые ранее не использовались для синтеза МАХ-фаз (за исключением $Al_2O_3(0001)$), а также рассчитаны магнитные свойства таких пленок и показана возможность управления магнитным упорядочением в системе $Mn_2GaC//Al_2O_3$, что крайне актуально для применения данных гетероструктур в спинтронике.

Обнаружено, что предсказанный как наиболее вероятный интерфейс действительно соответствует экспериментально наблюдаемой ориентации пленки МАХ-фазы (0001) на подложке $Al_2O_3(0001)$. Дру-

гие варианты взаимных ориентационных соотношений оказываются значительно ниже по доле NCS, что может означать наличие проблем для синтеза пленок Mn_2GaC другой ориентации. Однако найденные альтернативные интерфейсы могут оказаться более выгодными благодаря меньшей степени деформации растущей пленки, что также может оказать влияние на электронные и магнитные свойства, а также степень их анизотропии.

В рамках квантово-химических расчетов было определено, что деформация элементарных ячеек, возникающая вследствие действия подложки, может существенно повлиять на дальний магнитный порядок, причем пленки ориентации $Mn_2GaC(0001)//Al_2O_3(0001)$ соответствуют деформации, которая приводит к образованию ФМ-фазы. Подложки $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ и $Al_2O_3(0\bar{1}1\bar{2})$ уменьшают стабильность АФМ фазы по отношению к ФМ настолько, что можно ожидать магнитный переход под действием внешних магнитных полей величиной 10 и 14 Тл, соответственно. При этом величина спиновой поляризации в ФМ-фазе пленки $Mn_2GaC(11\bar{2}\bar{6})//Al_2O_3(0\bar{1}1\bar{2})$ превышает спиновую поляризацию ФМ-фазы объемного Mn_2GaC и достигает 28 %.

В целом, результаты предсказания интерфейсов МАХ-фазы с сапфиром указывают на то, что большой интерес могут представлять подробные исследования по синтезу на новых типах подложек, $Al_2O_3(1\bar{1}00)$ М-срез и $Al_2O_3(01\bar{1}\bar{1})$ S-срез, а также $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ N-срез.

Исследования выполняются при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта # 20-42-240012, Правительства РФ в рамках гранта по созданию лабораторий мирового уровня (соглашение # 075-15-2019-1886).

1. A. S. Ingason, A. Petruhins, and J. Rosen, *Mater. Res. Lett.* **4**, 152 (2016).
2. A. S. Ingason, A. Mockute, M. Dahlqvist, F. Magnus, S. Olafsson, U. B. Arnalds, B. Alling, I. A. Abrikosov,

- B. Hjörvarsson, P. O. Å. Persson, and J. Rosen, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 195502 (2013).
3. R. Salikhov, A. S. Semisalova, A. Petruhins, A. S. Ingason, J. Rosen, U. Wiedwald, and M. Farle, *Mater. Res. Lett.* **3**, 156 (2015).
4. M. Stevens, H. Pazniak, A. Jemiola, M. Felek, M. Farle, and U. Wiedwald, *Mater. Res. Lett.* **9**, 343 (2021).
5. M. A. Visotin, I. A. Tarasov, A. S. Fedorov, S. N. Varnakov, and S. G. Ovchinnikov, *Acta Crystallogr. Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **76**, 469 (2020).
6. A. S. Botana, F. Bernardini, and A. Cano, *JETP* **132**, 618 (2021).
7. С. Г. Овчинников, О. А. Максимова, С. А. Лященко, И. А. Яковлев, С. Н. Варнаков, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 192 (2021).
8. M.-X. Zhang, P. M. Kelly, M. Qian, and J. A. Taylor, *Acta Mater.* **53**, 3261 (2005).
9. Q. Liang and W. T. Reynolds, *Metall. Mater. Trans. A* **29**, 2059 (1998).
10. A. Petruhins, A. S. Ingason, J. Lu, F. Magnus, S. Olafsson, and J. Rosen, *J. Mater. Sci.* **50**, 4495 (2015).
11. P. Eklund, M. Bugnet, V. Mauchamp, S. Dubois, C. Tromas, J. Jensen, L. Piraux, L. Gence, M. Jaouen, and T. Cabioc'h, *Phys. Rev. B* **84**, 1 (2011).
12. I. R. Shein and A. L. Ivanovskii, *Письма в ЖЭТФ* **91**, 446 (2010).
13. G. Kresse and J. Furthmüller, *Computational Materials Science* **6**, 15 (1996).
14. G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
15. P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
16. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
17. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
18. M. Dahlqvist and J. Rosen, *Sci. Rep.* **10**, 11384 (2020).
19. Н. И. Медведева, *Физика твердого тела* **55**, 500 (2013).
20. Т. В. Перевалов, А. В. Шапошников, В. А. Гриценко, Х. Вонг, Ж. Х. Хан, Ч. В. Ким, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 197 (2007).
21. А. В. Бакулин, S. Hocker, С. Е. Кулькова, *Физическая мезомеханика* **24**, 26 (2021).
22. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).

Системы вихрей в бинарном бозе-конденсате типа “ядро-оболочка”

В. П. Рубан¹⁾

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

Поступила в редакцию 29 июля 2022 г.

После переработки 29 июля 2022 г.

Принята к публикации 30 июля 2022 г.

Численно в рамках связанных уравнений Гросса–Питаевского моделируется захваченная ловушкой бозе-конденсированная смесь из двух типов холодных атомов, существенно различающихся по массе. В режиме разделения фаз возможна конфигурация, состоящая из безвихревого ядра и пронизанной квантованными вихрями оболочки. Динамические свойства вихрей в оболочке зависят от нескольких параметров системы. Исследование направлено на поиск физически реализуемых параметрических областей, соответствующих долгоживущим, сильно нестационарным системам нескольких вихрей, присоединенных к ядру. Представлен ряд реалистических численных примеров, в которых конфигурации из трех пар вихрей существовали на протяжении многих сотен характерных времен.

DOI: 10.31857/S1234567822170104, EDN: jtevnI

Введение. В физике ультрахолодных бозе-конденсированных газов большой интерес вызывают многокомпонентные смеси, состоящие либо из различных химических (щелочных) элементов, либо из различных изотопов одного и того же элемента, либо из одинаковых изотопов в разных (сверхтонких) квантовых состояниях. Такие системы по своим статическим и динамическим свойствам намного богаче в сравнении с однокомпонентными бозе-конденсатами [1–5]. Среди экспериментально реализованных бинарных бозе-конденсатов мы здесь упомянем ^{87}Rb - ^{87}Rb [6], ^{85}Rb - ^{87}Rb [7, 8], ^{39}K - ^{87}Rb [9], ^{41}K - ^{87}Rb [10, 11], ^{23}Na - ^{39}K [12] и ^{23}Na - ^{87}Rb [13].

Теоретические исследования достаточно разреженных смесей бозе-газов (с атомными массами m_j) в пределе нулевой температуры можно проводить с помощью связанных уравнений Гросса–Питаевского, которые задают эволюцию соответствующих волновых функций,

$$i\hbar\partial_t\Psi_j = -\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla^2\Psi_j + \left[V_j(\mathbf{r}) + \sum_k G_{jk}|\Psi_k|^2\right]\Psi_j, \quad (1)$$

где $V_j(\mathbf{r})$ – внешний потенциал, действующий на j -ую компоненту смеси, G_{jk} – симметричная матрица нелинейных взаимодействий, определяемая длинами рассеяния a_{jk} [2]:

$$G_{jk} = 2\pi\hbar^2 a_{jk}(m_j^{-1} + m_k^{-1}). \quad (2)$$

Уравнения Гросса–Питаевского являются наиболее простой, но весьма содержательной моделью связанных сверхтекучих систем (см. для сравнения обзор

по гелию [14]). В частности, поскольку в (1) нет перекрестных членов в кинетической энергии, здесь полностью отсутствует эффект Андреева–Башкина, при котором сверхтекучая скорость одной компоненты дает вклад в ток другой компоненты [15, 16].

Как правило, некоторые коэффициенты G_{jk} зависят от фонового однородного магнитного поля и могут настраиваться в широких пределах по желанию экспериментатора с использованием резонансов Фешбаха [17]. Достаточно сильное перекрестное отталкивание между двумя видами волн материи включает режим пространственного разделения фаз, условием чего служит неравенство [18, 19]

$$G_{12}^2 - G_{11}G_{22} > 0. \quad (3)$$

Относительно узкая доменная стенка между фазами характеризуется эффективным поверхностным натяжением [4, 20]. Пространственное разделение является основным фактором во многих интересных явлениях, таких как динамика пузырей [21], квантовые аналоги классических гидродинамических неустойчивостей (Кельвина–Гельмгольца [22, 23], Рэлея–Тейлора [24–26], Плато–Рэлея [27]), параметрическая неустойчивость капиллярных волн на границе раздела фаз [28, 29], сложные текстуры во вращающихся бинарных конденсатах [30–32], трехмерные топологические структуры [33–37], капиллярная плаучесть плотных капель в захваченных несмешивающихся бозе-конденсатах [38], и т. д.

Важно еще, что потенциалы ловушки, вообще говоря, не одинаковы для разных типов атомов. Напри-

¹⁾e-mail: ruban@itp.ac.ru

мер, в случае оптической ловушки, сформированной лазерным излучением, справедлива формула

$$V_j(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha_j}{2}I(\mathbf{r}) + m_jgz, \quad (4)$$

где α_j – поляризуемость атома j -го типа, $I(\mathbf{r})$ – усредненный по времени квадрат электрического поля лазерного излучения, g – ускорение силы тяжести. Поскольку поляризуемости компонент по-разному зависят от частоты электромагнитной волны, имеется теоретическая возможность путем выбора частоты оптического поля распоряжаться относительной силой ловушки и расположением в пространстве минимумов потенциала для каждой компоненты [39–41]. Мы далее будем подразумевать, что либо подобрано специальное отношение поляризуемостей $\alpha_2/\alpha_1 = m_2/m_1$ (при котором гравитация “не раздвигает” в пространстве минимумы потенциалов), либо дело происходит в невесомости, и тогда остается свобода в выборе важного параметра

$$\alpha = \alpha_2 m_1 / (\alpha_1 m_2).$$

В данной работе отмеченные возможности настройки параметров системы имеются в виду при численном поиске оптимальных режимов для долговременной динамики вихревых возмущений в специфических структурах типа “ядро-оболочка”. Подобные конфигурации в ряде случаев являются основным состоянием бинарных бозе-конденсатов [42–45]. Вблизи достаточно глубокого и/или широкого минимума внешнего потенциала формируется “ядро”, состоящее из одной компоненты, а вокруг ядра располагается “оболочка” из другой компоненты.

Предметом нашего исследования далее будет динамика нескольких квантованных вихревых нитей, каждая из которых пронизывает оболочку внутрь к ядру (отрицательный вихрь) либо обратно (положительный вихрь) [46]. Пример нетривиальной динамики таких присоединенных вихрей представлен на рис. 1 и на видео [47]. Надо сказать, что в работе [48] рассматривались качественно аналогичные топологические структуры в смеси ^3He - ^4He (капелька ^4He , погруженная в жидкость ^3He). Суммарный заряд вихрей всегда равен нулю. Ядро при этом будет оставаться безвихревым. В зависимости от малости отношения толщины оболочки к размеру ядра возможны два режима. В случае тонких оболочек имеет место более простой (квази)двумерный режим, чем-то напоминающий движение концентрированных вихрей в атмосферах некоторых планет. Динамика в этом случае приблизительно подчиняется классической модели точечных вихрей на искривлен-

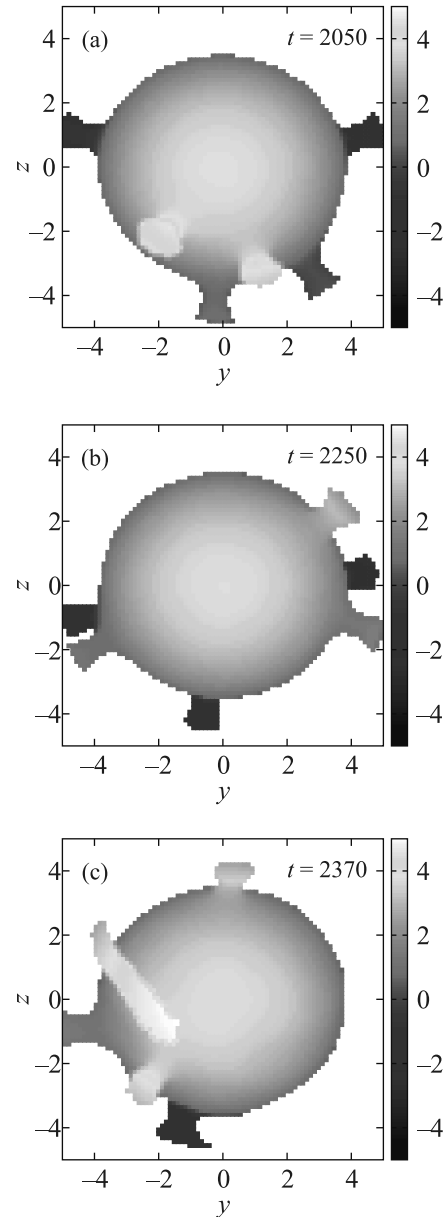


Рис. 1. (Цветной онлайн) Пример долгоживущей стационарной системы трех пар присоединенных вихрей в квазидвумерном режиме при скомпенсированной силе тяжести (т.е. при $\alpha = 1$). Цветная шкала соответствует x -координате тех точек численной решетки, которые являются ближайшими к поверхности, определяемой уравнением $|A(\mathbf{r}, t)|^2 = 0.5|A_0(\mathbf{r})|^2$. Показаны только точки внутри области $|A_0(\mathbf{r})|^2 > 0.2\mu_1$, и поэтому внешние концы вихревых нитей “отсечены”

ной поверхности [49–51]. Роль ядра в этом случае сводится к предоставлению практически неподвижной потенциальной ступеньки, поддерживающей оболочку изнутри. Другой режим, трехмерный, оказывается гораздо более сложным [46]. Когда толщина обо-

лочки сравнима с радиусом ядра, последнее существенно участвует в динамике системы. В зависимости от параметров, это участие может быть как благоприятным с точки зрения длительного сохранения числа вихрей, несмотря на их интенсивное взаимодействие, так и неблагоприятным.

Как было показано в недавней работе [46] на примере равных атомных масс, существует область параметров, где нежелательный процесс формирования близкой пары вихрь-антивихрь с последующим отрывом вихревой нити от границы с ядром оказывается подавлен за счет оптимального выбора коэффициентов нелинейного взаимодействия. В данной работе путем многих численных экспериментов подобные благоприятные условия впервые найдены и для некоторых смесей с существенно разными атомными массами. Интересно, что для трехмерного динамического режима оптимальными оказываются конфигурации, в которых ядро состоит из более легких атомов, а оболочка — из более тяжелых. При этом введенный выше параметр α , равный отношению квадратов собственных частот гармонической ловушки, отнюдь не равен единице.

Основные параметры модели. Ограничимся квадратичным приближением для внешних потенциалов. Пусть гармоническая ловушка характеризуется поперечной частотой $\omega_1 = \omega$ для первого типа атомов (формирующих оболочку), и $\omega_2 = \sqrt{\alpha}\omega$ для второго типа атомов, образующих ядро. Введем обозначение $m = m_2/m_1$ для отношения атомных масс. Выбираем масштаб $\tau = 1/\omega$ для времени, $l_{tr} = \sqrt{\hbar/\omega m_1}$ для длины, и $\epsilon = \hbar\omega$ для энергии. Заметим, что в реальных экспериментах частота $\omega/2\pi \sim 100$ Гц, что дает характерную длину ловушки l_{tr} порядка нескольких микрометров. Поскольку типичные длины рассеяния порядка сотни боровских радиусов, т.е. $a_{jk} \sim a \sim 100a_0$, что составляет несколько нанометров, мы с большим запасом имеем неравенство $(l_{tr}/a) \sim 10^3 \gg 1$, необходимое для применимости уравнений Гросса–Питаевского.

Запишем уравнения движения для комплексных волновых функций $A(\mathbf{r}, t)$ (оболочка) и $B(\mathbf{r}, t)$ (ядро) в безразмерном виде,

$$i\dot{A} = -\frac{1}{2}\nabla^2 A + [V + |A|^2 + g_{12}|B|^2] A, \quad (5)$$

$$i\dot{B} = -\frac{1}{2m}\nabla^2 B + [m\alpha V + g_{21}|A|^2 + g_{22}|B|^2] B, \quad (6)$$

где $g_{jk} = G_{jk}/G_{11}$ — отнормированные нелинейные коэффициенты, $V = (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2)/2$ — безразмерный потенциал, включающий в себя параметр анизотропии λ . Мы далее зафиксируем значение $\lambda = 1.1$, чтобы подчеркнуть необязательность строгой сферической симметрии.

При такой нормировке сохраняющиеся числа захваченных атомов даются формулами

$$N_1 = \frac{l_{tr}}{4\pi a_{11}} \int |A|^2 d^3\mathbf{r} = (l_{tr}/a_{11})n_1, \quad (7)$$

$$N_2 = \frac{l_{tr}}{4\pi a_{11}} \int |B|^2 d^3\mathbf{r} = (l_{tr}/a_{11})n_2. \quad (8)$$

Отсюда ясно, что реалистическим числам $N_1, N_2 \sim 10^6$ соответствуют значения $n_1, n_2 \sim 10^3$.

Равновесные состояния, как известно, характеризуются двумя химическими потенциалами μ_1 и μ_2 . В рассматриваемых нами условиях $\mu_1 \gg 1$ и $\mu_2 \gg 1$, так что фоновые профили плотности числа частиц даются приближением Томаса–Ферми

$$|A_0|^2 \approx [\mu_1 - V(x, y, z)], \quad (9)$$

$$|B_0|^2 \approx [\mu_2 - m\alpha V(x, y, z)]/g_{22}, \quad (10)$$

причем первая формула верна внутри оболочки, а вторая — внутри ядра. Эффективный поперечный размер конденсата таким образом есть $R_{\perp} = \sqrt{2\mu_1}$, тогда как для характерной толщины вихревых линий в оболочке (в трехмерном режиме) справедлива оценка $\xi \sim 1/\sqrt{\mu_1}$. Поскольку мы будем далее иметь дело с величинами химических потенциалов порядка нескольких десятков (конкретно в численных экспериментах бралось значение $\mu_1 = 18$), физическая толщина вихрей ξl_{tr} все еще на порядки превышает длины рассеяния, как и должно быть.

В данном приближении равновесная форма поверхности ядра определяется требованием примерного равенства “гидродинамических давлений” $P_1 = |A_0|^4/2$ и $P_2 = g_{22}|B_0|^4/2$ (без учета поверхностного натяжения $\sigma \sim |A_0|^3$), т.е.

$$[\mu_1 - V(x, y, z)] = [\mu_2 - m\alpha V(x, y, z)]/\sqrt{g_{22}}. \quad (11)$$

Для конвективной устойчивости “параметр стратификации” должен превышать единицу,

$$S = m\alpha/\sqrt{g_{22}} > 1. \quad (12)$$

При конечных μ_1 и μ_2 это неравенство должно выполняться с некоторым запасом, поскольку поверхностное натяжение на неоднородном фоне оказывает дестабилизирующий эффект. Сразу же скажем, что для трехмерной динамики присоединенных вихрей оптимальные значения S оказались в диапазоне 1.2–1.5, тогда как в квазидвумерном режиме лучше работает жесткая стратификация с большими S .

Численные результаты. Уравнения движения (5)–(6) решались численно методом, подробно описанным в работе [46]. Значения нелинейных коэффициентов брались из реальных данных по длинам

рассеяния для смесей ^{39}K - ^{87}Rb [9], ^{41}K - ^{87}Rb [10, 11], ^{23}Na - ^{39}K [12] и ^{23}Na - ^{87}Rb [13].

В начальный момент времени имелось три пары вихревых нитей, ориентированных примерно вдоль трех декартовых осей. Такое количество вихрей выбрано по той причине, что последующее движение в этом случае оказывается, как правило, сильно неупорядоченным и провоцирующим вихревые пары на отрыв. И если даже несмотря на такие условия, поверхностное натяжение удерживает вихри в течение долгого времени, значит, действительно данный феномен заслуживает внимания.

В большинстве симуляций после достаточно бурной динамики вихрей через какое-то время все же происходил описанный выше отрыв вихревой нити от поверхности ядра. Непосредственно перед отрывом пара вихрь-антивихрь имела вид буквы V, основание которой затем отсоединялось от внутренней границы оболочки. Время этого события T фиксировалось как главный результат и служило грубой оценкой “качества” выбранной комбинации параметров. Хорошим результатом можно считать значения $T \gtrsim 1000$, что на два порядка превышает характерный период ловушки. За такое время вихри, как правило, успевают много раз поменять свое взаимное расположение, так что можно говорить о долгоживущих вихревых структурах. Надо также иметь в виду, что в реальных экспериментах бозе-конденсаты обычно существуют в относительно сохранном виде не более нескольких секунд. Поэтому при частоте ловушки около 100 Гц безразмерному времени $T \approx 630$ как раз соответствует одна секунда реального времени.

Пример продолжительной динамики в квазидвумерном режиме представлен на рис. 1 при значениях параметров, свойственных смеси ^{23}Na - ^{87}Rb [13]: $a_{11} = 52a_0$, $a_{22} = 99a_0$, $a_{12} = 83a_0$, что дает $m = 3.78$, $g_{22} = 0.5$, $g_{12} = 1.0$. Числа атомов в этой симуляции равны $N_1 \approx (l_{\text{tr}}/a_{11}) \times 204$ и $N_2 \approx (l_{\text{tr}}/a_{11}) \times 594$. Соответствующее видео [47] демонстрирует сложный характер поведения вихрей, в том числе образование временных пар вихрь-антивихрь, которые быстро двигаются и сталкиваются с остальными вихрями. В результате подобных столкновений партнеры иногда меняются. В конце концов одна из таких пар отрывается от ядра, что видно на панели рис. 1с. Если взять более толстую оболочку, то отрыв вихревой нити происходит, как правило, существенно раньше, чему примером служит видео [52]. Следует также обратить внимание, что иногда образуются временные пары близких вихрей одного знака, но такие пары, разумеется, не способны аннигилировать.

Поскольку, кроме количества атомов ^{23}Na в оболочке, в системе ^{23}Na - ^{87}Rb можно менять перекрестную длину рассеяния, представляется интересным сравнить соответствующие времена жизни. Такое сравнение приведено на рис. 2. Очевидно, что значение $g_{12} = 1.0$ в данном случае наиболее благоприятное. При этом необходимо иметь в виду, что, в силу хаотического характера движения вихрей, время жизни практически является случайной величиной. Поэтому не следует воспринимать ломаные линии на рис. 2 слишком буквально. Они там проведены только для того, чтобы “было за что зацепиться глазу”. Главное, о чем свидетельствует данный рисунок – это существенная вероятность большого времени жизни сложной вихревой системы.

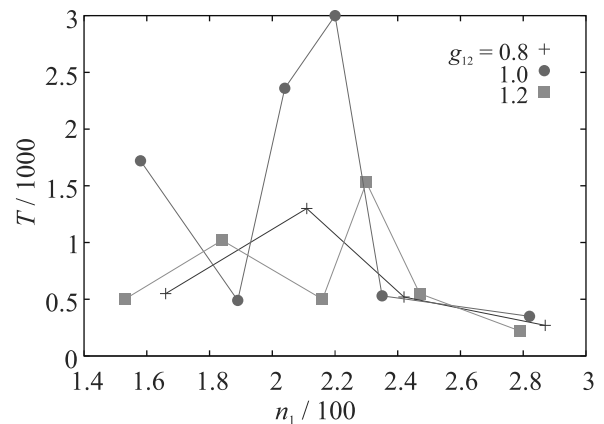


Рис. 2. (Цветной онлайн) Характерные времена жизни системы из трех пар вихрей в зависимости от количества атомов оболочки в смеси ^{23}Na - ^{87}Rb для трех значений g_{12} . Зависимости имеют не вполне регулярный характер, поскольку никакого усреднения по начальным конфигурациям вихрей здесь не проводилось

Качественно аналогичные результаты были получены и для тонких оболочек в смеси ^{41}K - ^{87}Rb .

Что касается существенно трехмерных структур, большие времена жизни удалось пронаблюдать, например, для смесей ^{23}Na - ^{39}K [12], причем в том варианте, когда более легкий ^{23}Na составляет ядро, а более тяжелый ^{39}K – оболочку. Отметим, что в этом случае от магнитного поля сильно зависят две длины рассеяния: $a_{\text{K-K}}$ и $a_{\text{Na-K}}$ (см. рис. 6 в работе [12]). Конвективная устойчивость обеспечивается достаточно большим значением параметра α в диапазоне 2.1–2.4. Соответствующий пример приведен на рис. 3 и на видео [53].

Последний видеопример [54] относится к смеси ^{23}Na - ^{87}Rb , когда оболочка состоит из ^{87}Rb . Взяв $a_{12} = 99a_0$, мы получаем $g_{22} \approx 2.0$, $g_{12} \approx 2.4$.

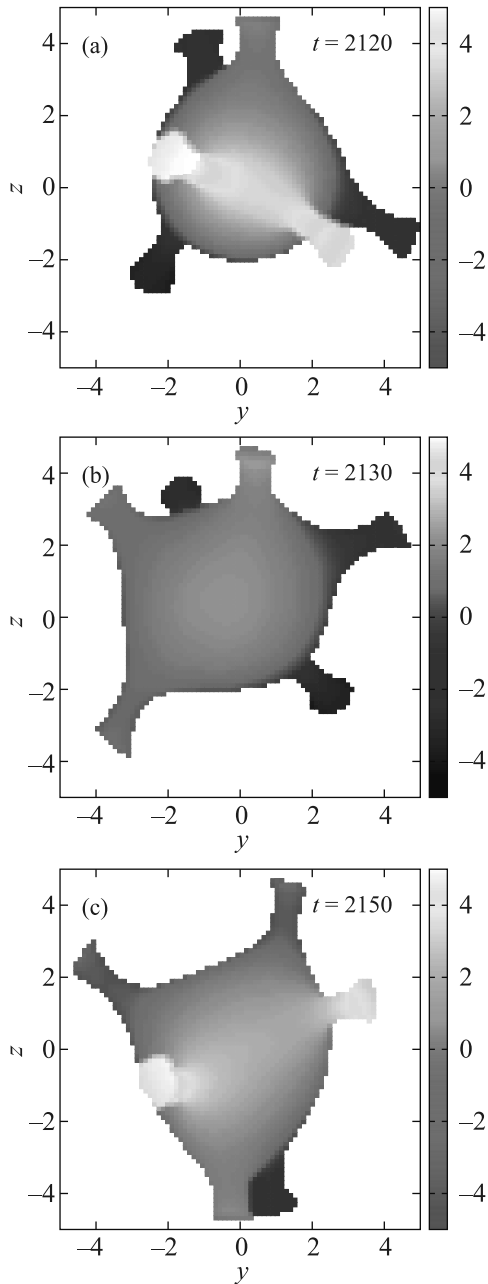


Рис. 3. (Цветной онлайн) Пример длительной трехмерной динамики трех пар присоединенных вихрей. В этом численном эксперименте использованы параметры, характерные для смеси ^{39}K - ^{23}Na : $a_{11} = 88a_0$, $a_{22} = 52a_0$, $a_{12} = 88a_0$. Это дает $m = 0.6$, $g_{22} = 1.0$, $g_{12} = 1.345$. Числа атомов равны $N_1 \approx (l_{\text{tr}}/a_{11}) \times 326$ и $N_2 \approx (l_{\text{tr}}/a_{11}) \times 107$. В отличие от рис. 1, здесь использовано значение $\alpha = 2.2$

Поскольку теперь $m \approx 0.26$, для устойчивости необходимы достаточно большие α . Взяв $\alpha = 7.0$, $n_1 = 333$, $n_2 = 69$, получаем относительно ре-

гулярное движение вихревой конфигурации, что продемонстрировано на видео [54].

Бросается в глаза общее свойство трехмерной динамики – как и в случае равных атомных масс, имеют место сильные отклонения формы ядра от равновесной.

С другими типами смесей пока не удалось получить столь же выразительных результатов.

Если при теоретическом рассмотрении не ограничиваться реально существующими зависимостями длин рассеяния от магнитного поля, а позволить себе их произвольные значения, как и произвольные отношения атомных масс, то можно указать на некоторую приближенную симметрию: трехмерная динамика двух систем с одинаковыми α , но с разными m качественно похожа (и в одинаковой мере благоприятна для сохранения вихрей), если, во-первых, одинаковы параметры стратификации,

$$\alpha m^{(1)}/\sqrt{g_{22}^{(1)}} = \alpha m^{(2)}/\sqrt{g_{22}^{(2)}} \approx 1.2 - 1.5,$$

а во-вторых, коэффициенты поверхностного натяжения равны между собой, что достигается юстировкой перекрестных нелинейных коэффициентов $g_{12}^{(1,2)}$. Действительно, гидродинамические части лагранжианов обеих систем можно привести к одинаковому виду, а вся разница будет в зависящих от масс “квантовых давлениях” и в зависящих от $g_{12}^{(1,2)}$ перекрестных нелинейных взаимодействиях. Но роль этих членов с точки зрения крупномасштабной динамики сводится к производству одного лишь коэффициента поверхностного натяжения.

Данная приближенная симметрия подтвердилась на частном примере $\alpha = 1$, $m^{(1)} = 1$, $g_{22}^{(1)} = 0.6$, $g_{12}^{(1)} = 1.2$ (эти значения были определены как оптимальные в работе [46]), поскольку долгоживущие присоединенные вихри были наблюдаемы также и в системе с параметрами $m^{(2)} = 2$, $g_{22}^{(2)} = 2.4$, $g_{12}^{(2)} = 2.4-2.6$.

Заключение. Таким образом, в этой работе впервые представлены численные примеры, указывающие на реальную перспективу наблюдения долговременной динамики пузырей с присоединенными квантовыми вихрями в захваченных ловушкой бинарных бозе-конденсатах с разными атомными массами. В некоторых численных экспериментах времена жизни систем трех пар вихрей оказались даже длиннее, чем в ранее промоделированной смеси ^{85}Rb - ^{87}Rb с примерно равными массами [46].

Интересно отметить, что требования к свойствам ядра оказываются противоположными для квазидвумерного и для полностью трехмерного режимов. Для двумерной динамики вихрей хорошо тяжелое и

жестко захваченное малоподвижное ядро, по которому легко скользит менее плотная оболочка. Для трехмерной динамики хорошо легкое ядро с эластичной границей, которая деформируется в ответ на тянущую силу со стороны вихревой пары. По этой же причине и стратификация в трехмерном случае не должна быть слишком жесткой.

1. T.-L. Ho and V.B. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3276 (1996).
2. H. Pu and N.P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1130 (1998).
3. B.P. Anderson, P.C. Haljan, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2857 (2000).
4. S. Coen and M. Haelterman, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 140401 (2001).
5. G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 190404 (2002).
6. S. Tojo, Y. Taguchi, Y. Masuyama, T. Hayashi, H. Saito, and T. Hirano, *Phys. Rev. A* **82**, 033609 (2010).
7. J.P. Burke, Jr., J.L. Bohn, B.D. Esry, and C.H. Greene, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2097 (1998).
8. S.B. Papp, J.M. Pino, and C.E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 040402 (2008).
9. L. Wacker, N.B. Jørgensen, D. Birkmose, R. Horchani, W. Ertmer, C. Klempt, N. Winter, J. Sherson, and J.J. Arlt, *Phys. Rev. A* **92**, 053602 (2015).
10. G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 210402 (2008).
11. A. Burchianti, C. D’Errico, S. Rosi, A. Simoni, M. Modugno, C. Fort, and F. Minardi, *Phys. Rev. A* **98**, 063616 (2018).
12. T.A. Schulze, T. Hartmann, K.K. Voges, M.W. Gempel, E. Tiemann, A. Zenesini, and S. Ospelkaus, *Phys. Rev. A* **97**, 023623 (2018).
13. F. Wang, X. Li, D. Xiong, and D. Wang, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 015302 (2016).
14. M.M. Salomaa and G.E. Volovik, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 533 (1987).
15. A.F. Andreev and E.P. Bashkin, *ZhETF* **69**, 319 (1975) [*JETP* **42**, 164 (1976)].
16. G.E. Volovik, *Pis’ma v ZhETF* **115**, 306 (2022).
17. C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
18. E. Timmermans, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5718 (1998).
19. P. Ao and S.T. Chui, *Phys. Rev. A* **58**, 4836 (1998).
20. B. Van Schaeybroeck, *Phys. Rev. A* **78**, 023624 (2008).
21. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **83**, 033602 (2011).
22. H. Takeuchi, N. Suzuki, K. Kasamatsu, H. Saito, and M. Tsubota, *Phys. Rev. B* **81**, 094517 (2010).
23. N. Suzuki, H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **82**, 063604 (2010).
24. K. Sasaki, N. Suzuki, D. Akamatsu, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **80**, 063611 (2009).
25. S. Gautam and D. Angom, *Phys. Rev. A* **81**, 053616 (2010).
26. T. Kadokura, T. Aioi, K. Sasaki, T. Kishimoto, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **85**, 013602 (2012).
27. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, *Phys. Rev. A* **83**, 053606 (2011).
28. D. Kobayakov, V. Bychkov, E. Lundh, A. Bezett, and M. Marklund, *Phys. Rev. A* **86**, 023614 (2012).
29. D.K. Maity, K. Mukherjee, S.I. Mistakidis, S. Das, P.G. Kevrekidis, S. Majumder, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **102**, 033320 (2020).
30. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 150406 (2003).
31. K. Kasamatsu and M. Tsubota, *Phys. Rev. A* **79**, 023606 (2009).
32. P. Mason and A. Aftalion, *Phys. Rev. A* **84**, 033611 (2011).
33. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250406 (2004).
34. H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Nitta, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 245301 (2012).
35. M. Nitta, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Takeuchi, *Phys. Rev. A* **85**, 053639 (2012).
36. K. Kasamatsu, H. Takeuchi, M. Tsubota, and M. Nitta, *Phys. Rev. A* **88**, 013620 (2013).
37. S.B. Gudnason and M. Nitta, *Phys. Rev. D* **98**, 125002 (2018).
38. В.П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 848 (2021).
39. M.S. Safronova, B. Arora, and C.W. Clark, *Phys. Rev. A* **73**, 022505 (2006).
40. L.J. LeBlanc and J.H. Thywissen, *Phys. Rev. A* **75**, 053612 (2007).
41. B. Arora, M.S. Safronova, and C.W. Clark, *Phys. Rev. A* **84**, 043401 (2011).
42. A.A. Svidzinsky and S.T. Chui, *Phys. Rev. A* **68**, 013612 (2003).
43. S. Gautam and D. Angom, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 095302 (2010).
44. R.W. Pattinson, T.P. Billam, S.A. Gardiner, D.J. McCarron, H.W. Cho, S.L. Cornish, N.G. Parker, and N.P. Proukakis, *Phys. Rev. A* **87**, 013625 (2013).
45. A. Wolf, P. Boegel, M. Meister, A. Balaž, N. Gaaloul, and M.A. Efremov, *Phys. Rev. A* **106**, 013309 (2022).
46. В.П. Рубан, *ЖЭТФ* **160**, 912 (2021).
47. <http://home.itp.ac.ru/ruban/28JUL2022/e1.avi>.
48. G.E. Volovik, *Proc. Natl. Ac. Sci. USA* **97**, 2431 (2000).
49. В.П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 449 (2017).
50. K. Padavić, K. Sun, C. Lannert, and S. Vishveshwara, *Phys. Rev. A* **102**, 043305 (2020).
51. S.J. Bereta, M.A. Caracanhas, and A.L. Fetter, *Phys. Rev. A* **103**, 053306 (2021).
52. <http://home.itp.ac.ru/ruban/28JUL2022/e2.avi>.
53. <http://home.itp.ac.ru/ruban/28JUL2022/e3.avi>.
54. <http://home.itp.ac.ru/ruban/28JUL2022/e4.avi>.

Низкочастотное комбинационное рассеяние транспортной и рибосомной РНК

А. Ю. Сосорев^{+*1)}, О. Д. Паращук*, О. Г. Харланов*, И. В. Чичерин*, А. А. Трубицын*, П. А. Каменский*,
Д. Ю. Паращук*

⁺Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, 117997 Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 28 июня 2022 г.

После переработки 16 июля 2022 г.

Принята к публикации 16 июля 2022 г.

ДНК и РНК играют важнейшую роль в жизнедеятельности всех организмов, обеспечивая хранение и передачу наследственной информации и использование ее для построения белков. Кроме того, некоторые некодирующие РНК являются частью различных молекулярных машин, например, рибосомы. Для нормального протекания процессов с участием ДНК и РНК, в том числе репликации, транскрипции и трансляции, крайне важна третичная структура этих макромолекул, информацию о которой можно получить из спектров комбинационного рассеяния (КР) в низкочастотном (НЧ) диапазоне (до 200 см^{-1}). В настоящей работе впервые получены спектры КР двух некодирующих РНК – транспортной и рибосомной (последней – в составе рибосомы), – а также проведено их сравнение со спектром ДНК. Обнаружено, что в области до 100 см^{-1} спектры двух РНК весьма похожи, а в области $100\text{--}200\text{ см}^{-1}$ значительно различаются после вычитания характерного широкополосного НЧ сигнала. Кроме того, выявлено значительное различие между спектрами РНК и ДНК: для первых интенсивность НЧ КР заметно меньше, чем для вторых. Это различие, подтвержденное также численным моделированием транспортной РНК и ДНК методом молекулярной динамики, объяснено большей упорядоченностью образцов РНК по сравнению с ДНК за счет более сильного взаимодействия между отдельными участками биомолекул. Таким образом, исследование НЧ спектров КР нуклеиновых кислот может предоставить необходимую для молекулярной и клеточной биологии информацию о состоянии этих биомолекул, определяющем протекание важнейших внутриклеточных процессов с их участием.

DOI: 10.31857/S1234567822170116, EDN: jtgsaa

1. Введение. Нуклеиновые кислоты – ДНК и РНК – играют важнейшую роль в хранении и реализации наследственной информации, а также участвуют в различных клеточных процессах. Все они состоят из сахаро-фосфатного остова и азотистых оснований, которые могут образовывать пары за счет водородных связей, однако третичная структура этих биомолекул может существенно различаться. ДНК обычно имеет вид длинной двухцепочечной спирали (см. рис. 1a), кодирующая белок матричная РНК (мРНК) – одиночной цепочки. Некодирующие РНК (нРНК) сворачиваются в разнообразные структуры: в частности, транспортная (тРНК) имеет характерную L-образную форму, а рибосомная (рРНК) упаковывается в компактные квазисферические субъединицы, состоящие из нескольких сложно организованных доменов [1] (см. рис. 1b, c). В последних двух структурах час-

то присутствуют двойные спирали разной длины; в них пары нуклеотидов, связанных водородными связями, образуют π -стеки. В частности, РНК в рибосоме можно представить как набор спиралей, соединенных между собой короткими гибкими участками [1]. Связь различных участков рРНК друг с другом поддерживается широким спектром разнообразных взаимодействий, таких как комплементарные взаимодействия, коаксиальный стекинг спиралей, боковые спираль-спиральные взаимодействия, ортогональные спираль-петлевые взаимодействия, A-минорные взаимодействия, водородные связи и взаимодействия с участием магниевых кластеров [2].

Слаженная работа молекулярных машин, состоящих из нуклеиновых кислот и белков, совершенно необходима для жизнедеятельности клетки. Для правильной работы этих машин крайне важна третичная структура макромолекул – трехмерная укладка биополимерной цепи, во многом

¹⁾e-mail: sosorev@physics.msu.ru

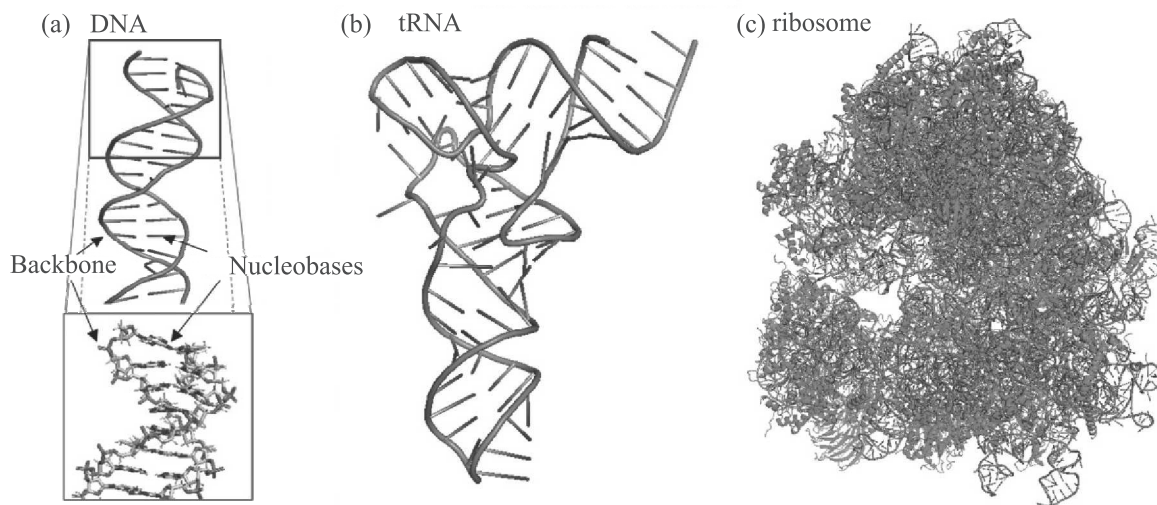


Рис. 1. (Цветной онлайн) Структура ДНК (а), тРНК (б) и рибосомы (с). Оранжевым цветом показан сахаро-фосфатный остов (backbone), бело-синим – азотистые основания (nucleobases). На панели (с) зеленым обозначены рибосомные белки

определяемая взаимодействием между звеньями (аминокислотами, нуклеотидами). Соответственно, знание этой структуры и ее изменения под действием различных факторов может помочь в понимании внутриклеточных процессов и в разработке новых методов лечения различных заболеваний, в том числе наследственных и онкологических. Информацию об этих взаимодействиях и о конформации биополимера позволяет получить низкочастотная (НЧ) колебательная спектроскопия, регистрирующая колебания с частотами $\omega < 200 \text{ см}^{-1}$, соответствующими коллективным движениям участков макромолекулы и колебаниям слабых межцепных связей. Различные вариации колебательной спектроскопии – инфракрасная, терагерцовая, комбинационного рассеяния (КР), неупругого нейтронного рассеяния – позволяют регистрировать различные колебания и дополняют друг друга. Однако, несмотря на более чем 50-летнюю историю использования, НЧ колебательная спектроскопия остается относительно редким инструментом исследования биомолекул. Причина состоит в том, что полосы НЧ колебательного спектра биомолекул часто накладываются друг на друга и оказываются трудно разрешимыми, вследствие чего анализ такого спектра оказывается трудоемким и малонадежным. Также, регистрация НЧ колебаний более сложна с экспериментальной точки зрения; наиболее перспективной в этом плане представляется НЧ спектроскопия КР [3].

НЧ спектры КР ДНК изучаются на протяжении более 50 лет. В большинстве работ в спектре КР сухой ДНК наблюдался широкополосный НЧ сигнал (примерно до 150 см^{-1}), а поверх него – достаточно широкая полоса с центром в районе $20\text{--}30 \text{ см}^{-1}$, интенсивность которой на порядок превышала интенсивность КР в высокочастотной (ВЧ, $\omega > 200 \text{ см}^{-1}$) области [4–6]. Более детальный анализ позволил выделить слабые полосы на $\sim 60 \text{ см}^{-1}$ и $\sim 100 \text{ см}^{-1}$, которые были подтверждены более поздними экспериментами [7]. Интересно, что НЧ колебания ДНК (а, возможно, и РНК) не только отражают информацию о структуре, но и могут иметь важную биологическую роль [8]: поскольку их частоты близки к таковым для белков, резонанс между колебаниями двух структур может влиять на взаимодействие между ними [9, 10]. Наконец, по ДНК [11–13] и РНК [14–16] возможен транспорт заряда, и НЧ колебания могут иметь на него существенное влияние [14, 16, 17].

В отличие от ДНК, для РНК НЧ спектры КР практически не были исследованы; нам известно лишь о двух работах [18, 19]. В них показано, что спектр двойных спиралей комплементарных мРНК напоминает спектр ДНК, но наиболее НЧ полоса сдвинута в область более высоких частот, что объяснено более жесткой структурой спирали РНК по сравнению с ДНК за счет меньшего расстояния между основаниями. Зависимость спектров НЧ КР РНК от последовательности нуклеотидов, а также от внешних условий (температуры, влажности и т. д.) не

была исследована; более того, НЧ спектры КР нРНК (например, тРНК и рРНК) измерены не были. В то же время, поскольку нРНК имеют достаточно стабильную третичную структуру, естественно предполагать, что их спектр будет отличаться от спектров ДНК и мРНК. Поэтому, а также в силу упомянутой выше важности этой структуры для функционирования нРНК, исследование НЧ спектров КР биомолекул представляется интересным и перспективным.

В настоящей работе впервые измерены спектры КР тРНК и рибосомы (основную долю которой составляет рРНК, см. рис. 1с), играющих чрезвычайно важную роль в синтезе белка – трансляции; в качестве контрольного образца выбрана ДНК. Спектры измерены в широком диапазоне, включающем НЧ и ВЧ области. ВЧ спектры всех трех объектов изучения крайне схожи между собой. Напротив, НЧ спектры различаются положением отдельных полос, однако имеют сходную структуру – наиболее интенсивная полоса с наименьшей частотой и две менее интенсивные полосы с более высокими частотами. Обнаружено, что интенсивность КР тРНК и рибосомы в НЧ области заметно ниже, чем для ДНК. К такому же выводу о спектрах и суммарной интенсивности НЧ КР приводит проведенное нами моделирование тРНК и ДНК методом классической молекулярной динамики (МД): как интенсивность НЧ КР, так и величина динамического беспорядка в ДНК оказываются выше, чем в тРНК. На основании данных результатов предложено объяснение слабого НЧ КР от тРНК и рРНК более жесткой структурой этих биомолекул и межмолекулярными взаимодействиями, уменьшающими динамический беспорядок. Таким образом, НЧ спектроскопия КР может быть использована для оценки жесткости структуры биомолекул, что должно существенно способствовать развитию молекулярной биологии.

2. Результаты и обсуждение. На рисунке 2 представлены полученные спектры КР тРНК и рибосомы, включающие НЧ и ВЧ области, а также, для сравнения, – спектр КР ДНК. В исходных спектрах всех трех биомолекул (вставка на рис. 2) присутствует широкополосный НЧ сигнал (примерно до 150 см^{-1}), связанный с большим числом степеней свободы, их мягкостью, а также низкой степенью симметрии, что находится в согласии с предшествующими работами [4, 6, 18–20]. Этот сигнал связан с модуляцией поляризуемости НЧ колебаниями [20] и, следовательно, может говорить о беспорядке в образце (что подтверждается моделированием методом МД, см. ниже), однако на рис. 2 этот сигнал вычтен для удобства анализа характерных полос (см.

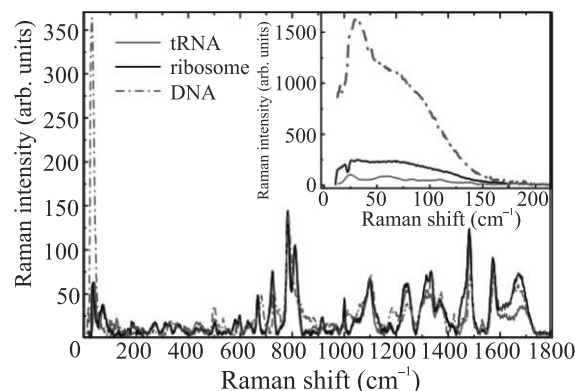


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры КР тРНК, рибосомы и ДНК с вычтенным широкополосным НЧ сигналом, нормированные на максимум интенсивности полосы с центром на отстройке в диапазоне $783\text{--}785\text{ см}^{-1}$. Вставка: те же спектры без вычитания указанного сигнала

раздел 4). Как видно из этого рисунка, ВЧ спектры всех трех исследуемых биомолекул очень близки, несмотря на некоторые отличия в нуклеотидном составе и сахаро-фосфатном остове (между ДНК и РНК). В этих спектрах хорошо видны наиболее интенсивные характеристические полосы нуклеиновых кислот [21, 22], в том числе пик с центром в диапазоне $783\text{--}785\text{ см}^{-1}$, соответствующий колебанию O–P–O составляющей сахаро-фосфатного остова и сжатие и растяжение кольца цитозина; пики на 500 и 1100 см^{-1} (колебания PO_2^- составляющей сахаро-фосфатного остова), пики на 1314 , 1482 и 1592 см^{-1} , соответствующие внутренним колебаниям аденина и гуанина, а также широкая полоса на 1241 см^{-1} , соответствующая внутренним колебаниям цитозина и тимина/урацила.

В то же время, ВЧ спектры трех биомолекул имеют и ряд отличий. В частности, для РНК ножничное колебание PO_2^- группы на $\sim 500\text{ см}^{-1}$ имеет более высокую частоту, чем для ДНК, а симметричное сжатие/растяжение связей этой группы на $\sim 1100\text{ см}^{-1}$ – более низкую частоту. Растяжение кольца аденина в РНК отмечается на 725 см^{-1} , а в ДНК – на 731 см^{-1} . Аналогично смещаются частоты для внутренних колебаний азотистых оснований в районе 1180 , 1481 и 1572 см^{-1} пики в спектре ДНК сдвигаются на $5\text{--}7\text{ см}^{-1}$ в сторону больших частот. Стоит также отметить, что в целом интенсивность колебаний сахаро-фосфатного остова (относительно интенсивности внутренних колебаний азотистых оснований) больше в ДНК, чем в РНК. Наконец, в рибосоме также проявляются линии аминокислот рибосомных белков (например, фенилаланина на 1000 см^{-1}). Однако эти линии значительно сла-

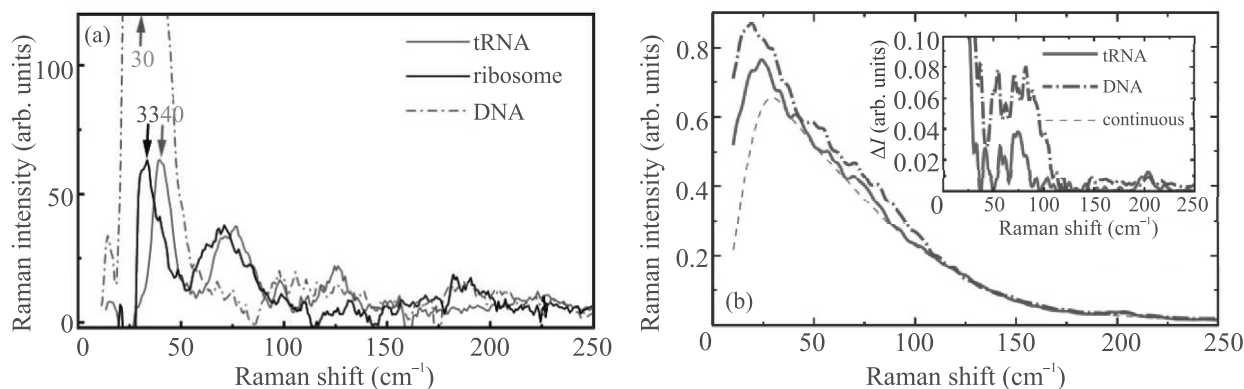


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – НЧ часть экспериментального спектра КР исследуемых биомолекул (нормировка на максимум наиболее интенсивной полосы в ВЧ области – с центром на отстройке в диапазоне $783\text{--}785\text{ см}^{-1}$, см. рис. 2). Стрелками отмечено положение максимума наиболее интенсивной НЧ полосы. (б) – Предсказанные с помощью МД КР спектры тРНК и ДНК (нормировка на число нуклеотидов); пунктир обозначает непрерывную компоненту спектра, а врезка демонстрирует спектры после ее вычитания

бее по интенсивности, чем линии РНК, что связано с небольшой массовой долей белков (менее $1/3$) в рибосоме и, следовательно, малым числом ароматических аминокислот, которые могли бы вносить значительный вклад в КР. Таким образом, можно утверждать, что подавляющая часть сигнала КР рибосомы обусловлена рРНК.

На рисунке 3а крупным планом представлены НЧ области указанных спектров КР после вычитания широкополосного НЧ сигнала. Спектры тРНК и рибосомы в области до 100 см^{-1} очень похожи и имеют две отдельные полосы с центрами на $33\text{--}40\text{ см}^{-1}$ и $70\text{--}80\text{ см}^{-1}$, несмотря на отличие в нуклеотидном составе биомолекул. В диапазоне $100\text{--}150\text{ см}^{-1}$ для тРНК наблюдается полоса на $\sim 125\text{ см}^{-1}$; для рибосомы наблюдается некоторая особенность в той же области ($\sim 130\text{ см}^{-1}$), которая из-за недостаточного соотношения сигнал-шум не позволяет однозначно отнести ее полосе КР. В диапазоне $150\text{--}250\text{ см}^{-1}$ спектры двух биомолекул различаются: тРНК имеет полосу на 225 см^{-1} , а рибосома – на 185 см^{-1} . Полученные спектры в целом согласуются с данными более ранних работ по НЧ КР РНК [18, 19], однако позволяют различить отдельные моды в отличие от предыдущих данных. Спектр ДНК крайне близок к представленному в работах [4, 6, 7]; его отличительной особенностью является крайне интенсивная полоса на $\sim 30\text{ см}^{-1}$ (с плечом около $60\text{--}70\text{ см}^{-1}$), а также две значительно более слабые полосы на ~ 100 и 185 см^{-1} .

Для понимания природы описанных полос полезно сравнить полученные спектры РНК и ДНК, поскольку для последней отнесение НЧ полос КР к тем или иным колебаниям было выполнено ранее [23, 24].

Наиболее низкочастотную полосу в ДНК приписывают колебанию π -стека нуклеозидов относительно сахара-фосфатного остова (*pendulum-nucleoside vibrations*) [23, 24]. Вторую из описанных полос, а также плечо первой моды можно отнести к колебаниям водородных связей между комплементарными основаниями [23]. Полосу около 200 см^{-1} можно отнести к колебаниям связанных с фосфатами противоионов [23] и молекул воды [24]. Из спектров, представленных на рис. 3а, видно, что наиболее НЧ полоса спектров РНК близка по частоте к таковой для ДНК, но немного сдвинута в область более высоких частот, что находится в согласии с данными предыдущих работ [18]; увеличение частоты этой полосы в РНК можно объяснить меньшим расстоянием и, следовательно, более сильным взаимодействием между нуклеозидами по сравнению с ДНК. НЧ полосы РНК на $\sim 70\text{ см}^{-1}$ и 120 см^{-1} , по-видимому, соответствуют колебаниям водородных связей в ДНК на 60 см^{-1} (плечо первой моды) и 100 см^{-1} , таким образом, они также сдвинуты в область более высоких частот по сравнению с ДНК, в согласии с предположениями предыдущих работ [19]. Увеличение частоты этих мод по сравнению с ДНК также можно объяснить увеличением жесткости структуры, как за счет изменения характера самой спирали, так и за счет взаимодействия между соседними спиралями (в пределах одной рибосомы или соседних молекул тРНК). Отличие положения моды около 200 см^{-1} в исследованных биомолекулах можно объяснить различием буферного раствора и конформации биомолекул, и, следовательно, локальной концентрации противоионов вблизи фосфатных групп.

Важной особенностью спектров КР исследованных образцов тРНК и рибосомы является то, что после вычитания широкополосного НЧ сигнала их интенсивность в НЧ области значительно меньше, чем интенсивность в ВЧ области (см. рис. 2). Это заметно отличается от данных для ДНК (как полученных в данной работе, так и опубликованных ранее [4, 6]), где интенсивность НЧ КР была существенно выше, чем в ВЧ области. Более того, даже без вычитания широкополосного НЧ сигнала, НЧ сигнал КР ДНК примерно в 6 раз выше, чем РНК. Согласно работам по НЧ КР органических полупроводников [25–28], интенсивное НЧ КР свидетельствует о сильном динамическом беспорядке в системе – флуктуациях положений атомов и ориентаций молекулярных фрагментов. Мы предполагаем, что сделанные в вышеупомянутых работах выводы применимы и к нуклеиновым кислотам, поскольку основной вклад в интенсивность КР в них, как и в органических полупроводниках, дают изменения ориентации π -сопряженных фрагментов молекул (азотистых оснований), одновременно приводящие к модуляции интегралов переноса между ними. В рамках такого подхода, для ДНК интенсивный сигнал НЧ КР можно объяснить относительной мягкостью ее структуры и большой длиной цепей: даже при высыхании в образце остается некоторая часть растворителя (например, связанной воды), вследствие чего должны быть “свободные” участки ДНК, не контактирующие с соседними цепями, а имеющие возможность совершать колебания большой амплитуды. Менее интенсивный НЧ спектр КР для РНК, наблюдаемый в настоящей работе, таким образом, свидетельствует о меньшем динамическом беспорядке в образцах этих биомолекул. Для рибосомы это можно объяснить сильным взаимодействием между ее плотно упакованными спиралями рРНК (с участием ионов магния и калия [2]), которое делает последнюю достаточно жесткой структурой (см. рис. 1с и, например, [1]). Для тРНК малый динамический беспорядок можно объяснить взаимодействием соседних молекул при высыхании пленки: в отличие от ДНК, эти молекулы достаточно коротки, что способствует их более плотной упаковке, поскольку олигомеры кристаллизуются обычно в более упорядоченную фазу, чем полимеры [29]. Изменения интенсивности НЧ КР коррелируют с вышеописанными различиями в частотах ВЧ колебаний сжатия-растяжения (например, на 1100 см^{-1}) между более компактно упакованными тРНК и рРНК и менее компактной ДНК. Также более интенсивный НЧ спектр КР ДНК по сравнению с РНК коррелирует с большими интен-

сивностями тех ВЧ линий КР, которые соответствуют колебаниям сахаро-фосфатного остова ($500, 784, 1100\text{ см}^{-1}$), по сравнению с внутренними колебаниями азотистых оснований. Это может свидетельствовать о большей подвижности остова в ДНК.

Выводы о меньшем динамическом беспорядке в РНК по сравнению с ДНК также независимо подтверждаются моделированием методом МД молекул тРНК и ДНК в воде (подробности – в разделе 4). А именно, после нормировки на число нуклеотидов (соответствующей нормировки на интенсивность КР от более локализованных ВЧ колебательных мод) НЧ КР спектры двух биомолекул (рис. 3b) представлены непрерывными компонентами, совпадающими выше примерно 120 см^{-1} , и набором полос поверх них. Прежде всего, выделяются интенсивная полоса на $20\text{--}30\text{ см}^{-1}$, пик которой действительно сдвинут в РНК в область более высоких частот, группа полос в районе $50\text{--}100\text{ см}^{-1}$ и менее интенсивная полоса в районе 200 см^{-1} (см. также вставку на рис. 3b), что вполне согласуется с экспериментальными результатами. Важно, что независимо от наличия или отсутствия вычитания широкополосного НЧ сигнала из полученного спектра, ДНК демонстрирует более мощный сигнал НЧ КР; в то же время, на интенсивность НЧ КР практически не влияют другие параметры МД-расчета, такие как размеры пространственной области моделирования. Наконец, динамический беспорядок в РНК действительно оказывается более низким, чем в ДНК: например, нормированная дисперсия тензора поляризуемости молекулы (характеризующая интенсивность теплового движения азотистых оснований и пропорциональная нормированной интегральной интенсивности НЧ КР, см. раздел 4), для РНК меньше, чем для ДНК.

Полученные результаты указывают на возможность оценки динамического беспорядка/компактности упаковки биомолекул с помощью НЧ спектроскопии КР. В этом смысле, данная работа является развитием предложенного нами ранее в работах [25–28] подхода для оценки динамического беспорядка в кристаллических органических полупроводниках. Подчеркнем, что для биомолекул такая оценка очень важна, поскольку компактность структуры часто связана с функциями биомолекул [30]. Например, в большом количестве исследований продемонстрирована корреляция между плотностью упаковки хроматина и его транскрипционной активностью: наиболее компактно упакованные участки генома содержат меньше генов, обладают слабо выраженной экспрессией генов и находятся ближе к

периферии ядра. Напротив, транскрипционно активными являются открытые участки ДНК, которые упакованы менее плотно и обладают некоторой свободой флуктуаций (а следовательно, динамическим беспорядком), что делает их доступными для факторов транскрипции [31]. Таким образом, указанный подход к оценке беспорядка с помощью НЧ КР может быть использован для мониторинга жесткости/транскрипционной активности различных областей клеточного ядра, что крайне важно для понимания функционирования клетки. Возможность оценки динамического беспорядка в биомолекулах также важна для нанобиоэлектроники – направления органической электроники, ориентированного на создание электронных устройств на основе биологических или подобных им молекул [13].

3. Заключение. Таким образом, в настоящей работе впервые представлены спектры КР транспортной и рибосомной РНК в широком диапазоне, включающем НЧ и ВЧ области, которые сопоставлены с экспериментальными КР спектрами ДНК и расчетными КР спектрами РНК и ДНК. В НЧ спектрах ниже 100 см^{-1} выявлены две отдельные полосы, практически совпадающие для обеих биомолекул. Одна из этих полос, по-видимому, соответствует колебанию π -стека нуклеотидов, а другая – сжатию/растяжению водородных связей между комплементарными нуклеотидами. Важно, что интенсивность НЧ спектра КР тРНК и рибосомы (по отношению к ВЧ области) существенно ниже, чем для ДНК. Это отличие объяснено меньшим динамическим беспорядком в образцах рибосомы и тРНК по сравнению с ДНК за счет более сильного межцепного взаимодействия внутри рибосомы и между соседними молекулами тРНК. Полученные результаты указывают на то, что исследование НЧ спектров КР нуклеиновых кислот, в том числе интенсивностей полос, может предоставить информацию о компактности упаковки и межцепных взаимодействиях этих биомолекул – факторах, определяющих многие биологические процессы на микроуровне, в том числе транскрипцию, репликацию и трансляцию, – а значит, существенно способствовать развитию молекулярной и клеточной биологии.

4. Методы. Для экспериментов использовались векторные конструкции pEGFP-N1 (Clontech, <https://www.addgene.org/vector-database/2491/>) и pTag-RFP-N (Евроген, cat. # FP142). Выделение плазмидной ДНК проводилось с помощью набора реактивов Plasmid Midiprep kit 2.0 (Евроген, cat. # BC124) по протоколу производителя. Полученный раствор плазмиды высушивался на вакуумном

испарителе Concentrator Plus (Eppendorf) в течение 2 ч при 60°C .

Рибосомы были выделены из штамма *E. Coli* MRE600 по протоколу, описанному в статье [32]. Клетки бактерий из 1 л культуры с оптической плотностью 0.6 (600 нм) собирали центрифугированием, суспендировали в буферном растворе, содержащем 50 мМ Трис-НСl pH 7.4, 100 мМ хлорида калия и 5 мМ ацетата магния. Клетки лизировали ультразвуком, лизаты осветляли центрифугированием при 20000 g в течение 15 минут. Супернатанты наносили поверх 10 % раствора сахарозы в аналогичном буфере и центрифугировали 18 часов при 80000 g на центрифуге Optima XPN (Beckman) в роторе SW40Ti (Beckman). Осадки растворяли в минимальном объеме (500–700 мкл) буферного раствора (10 мМ Tris-НСl pH 7.0; 60 мМ хлорида калия, 60 мМ хлорида аммония, 7 мМ ацетата магния, 7 мМ β -меркаптоэтанола и 0.25 мМ ЭДТА). Растворы наносили на линейные сахарозные градиенты (15–40 %) и центрифугировали 18 часов при 80000 g на центрифуге Optima XPN (Beckman) в роторе SW40Ti (Beckman). Градиент разделяли на фракции по 300 мкл, измеряли поглощение при 260 нм, и фракции, содержащие пик рибосом, смешивали. Рибосомы собирали центрифугированием в течение 18 ч при 80000 g.

Образец тРНК (*E. Coli* MRE600, фенилаланиновая) был получен испарением раствора порошка, приобретенного в компании Merck.

Для исследования спектров КР образцов использовался КР-микроскоп inVia (Renishaw). В качестве источника возбуждения использовался He-Ne лазер (633 нм, максимальная мощность 20 Вт). Деграция образцов при использовании 100 % мощности лазера не наблюдалась, поэтому все эксперименты проводились с использованием максимальной мощности. Количество накоплений выбиралось в зависимости от интенсивности сигнала КР. НЧ спектры были получены из измерений КР в диапазоне $10\text{--}450\text{ см}^{-1}$ (далее – “первая серия измерений”), ВЧ спектры – из измерений КР в диапазоне $100\text{--}1800\text{ см}^{-1}$ (далее – “вторая серия измерений”). Для регистрации ВЧ спектров использовались краевые фильтры рэлеевского излучения, для измерения НЧ спектров – двойной монохроматор NExT. Поскольку с помощью NExT фильтра необходимо пространственно отфильтровать лазерную линию, при каждом его использовании проверялась юстировка зеркал, щелей и линз, входящих в NExT фильтр, и контролировалась форма лазерного пучка, поступающего с образца. Провалы в НЧ спектрах на 18, 25 и 160 см^{-1} являются ар-

тефактами измерений, связанными с наличием пылинок на зеркалах NExT фильтра. Обработка спектров, в частности вычитание фона, осуществлялась в программе WiRE 3.4 с помощью встроенного метода интерполяции кубическими полиномами. Из всех спектров в диапазоне $10\text{--}1800\text{ см}^{-1}$ вычитался непрерывный широкополосный фон. Все спектры, помимо широкополосного непрерывного фона содержали в диапазоне $10\text{--}200\text{ см}^{-1}$ широкополосный НЧ сигнал, вследствие чего процедура вычитания фона в ВЧ и НЧ области несколько различалась: в диапазоне $200\text{--}1800\text{ см}^{-1}$ производилась интерполяция непрерывного широкополосного фона набором кубических полиномов; полученная таким образом интерполяционная функция далее экстраполировалась в диапазон $10\text{--}200\text{ см}^{-1}$. Спектры в диапазоне $10\text{--}200\text{ см}^{-1}$ были проанализированы как при наличии НЧ широкополосного сигнала, так и после его вычитания (также методом интерполяции кубическими полиномами) с целью анализа отдельных КР полос в НЧ области, см. раздел 2. Для сшивания НЧ и ВЧ спектров в области перекрытия диапазонов двух серий измерений, $100\text{--}450\text{ см}^{-1}$, выбирались наиболее интенсивные полосы (для тРНК и рибосомы выбрана полоса на отстройке 270 см^{-1} , а для ДНК – на отстройке 335 см^{-1}). Спектры, измеренные в диапазоне $10\text{--}450\text{ см}^{-1}$, умножались на такой коэффициент, чтобы интенсивности полос стали равны интенсивностям в максимуме этих же полос, измеренных в диапазоне $100\text{--}1800\text{ см}^{-1}$; при этом, вся область перекрытия хорошо согласовалась между двумя сериями измерений спектров КР. Спектр КР, сшитый таким образом из двух серий измерений и содержащий НЧ и ВЧ области, далее нормировался на интенсивность в максимуме наиболее яркой ВЧ полосы ($783\text{--}785\text{ см}^{-1}$), а также на время и число накоплений. Интенсивности полос (270 , 335 и $783\text{--}785\text{ см}^{-1}$) определялись с помощью аппроксимации последних гауссовыми профилями: для тРНК и рибосомы для полосы $783\text{--}785\text{ см}^{-1}$ были взяты два гауссовых профиля вследствие перекрытия с полосой на 810 см^{-1} , для остальных полос – один гауссов профиль.

Для предсказания спектров КР в тРНК и ДНК использовалось многомасштабное моделирование, сочетающее квантовохимические расчеты методом теории функционала плотности (DFT) с классической МД. А именно, к исходным структурам тРНК и ДНК из E. Coli (структуры 3L0U и 6LXN в базе данных RCSB PDB) добавлялись недостающие атомы водорода, а также противоионы Na^+ и растворитель – вода, – после чего проводились расчеты МД с использованием силового поля AMBER в пакете

AmberTools [33]. После прогрева до 300 К и дальнейшего уравнивания системы в течение 4 нс проводился финальный расчет МД в NpT-ансамбле в течение 10 нс , из которого каждые 50 фс брались координаты $\mathbf{x}_{b,i}(t)$ всех атомов i всех азотистых оснований b . Для обработки сформированной таким образом МД-траектории для метилзамещенных аденина, гуанина, тимина/урацила и цитозина были вычислены равновесные геометрии $\mathbf{x}_{b,i}^{(0)}$, тензоры поляризуемости $\alpha_b^{(0)}$ и их производные по координатам атомов $d\alpha_b^{(0)}/d\mathbf{x}_{b,i}$; данные вычисления были проведены на уровне B3LYP/6-31G(d,p) в пакете GAMESS US [34, 35] только единожды, не требуя пересчета для каждого запуска МД. Поляризуемости азотистых оснований в момент времени t вычислялись по формуле $\alpha_b(t) = R_b(t)(\alpha_b^{(0)} + d\alpha_b^{(0)}/d\mathbf{x}_{b,i} \cdot \mathbf{r}_{b,i}(t))R_b^T(t)$, где R_b – ортогональное преобразование, вместе со сдвигом Δ_b приближенно переводящее геометрию DFT-расчета основания в мгновенную его геометрию из МД, а $\mathbf{r}_{b,i}$ – остаточные смещения (деформации): $\mathbf{x}_{b,i}(t) = R_b(t)(\mathbf{x}_{b,i}^{(0)} + \mathbf{r}_{b,i}(t)) + \Delta_b(t)$. Расчетный НЧ КР спектр был получен из выражения $I(\omega) \propto C(\omega) \cdot (\hbar\omega/k_B T)(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T})^{-1}$, содержащего фурье-образ $C(\omega)$ автокоррелятора $\langle \text{tr}(\Delta\alpha(t)\Delta\alpha(t+\tau)) \rangle$ суммарной поляризуемости всех азотистых оснований, умноженный на классическо-квантовую поправку для частот в районе 200 см^{-1} (\hbar – постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана) [36].

Авторы выражают благодарность А. Ю. Чикишеву за ценные обсуждения и С. А. Гончаруку за предоставленные образцы тРНК. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 19-32-60081 Перспектива).

Экспериментальная часть работы выполнена с использованием оборудования, приобретенного за счет средств Программы развития Московского университета.

1. B. S. Schuwirth, M. A. Borovinskaya, C. W. Hau, W. Zhang, A. Vila-Sanjurjo, J. M. Holton, and J. H. Cate, *Science* **310**, 827 (2005).
2. А. С. Спирин, *Молекулярная биология: рибосомы и биосинтез белка*, Издательский центр “Академия”, М. (2011).
3. А. Ю. Sosorev, D. R. Maslennikov, O. G. Kharlanov, I. Yu. Chernyshov, V. V. Bruevich, and D. Yu. Paraschuk, *Phys. Status Solidi Rapid Research Letters* **13**, 1800485 (2019).
4. H. Urabe and Y. Tominaga, *Biopolymers* **21**, 2477 (1982).

5. H. Urabe, Y. Sugawara, M. Ataka, and A. Rupprecht, *Biophys. J.* **74**, 1533 (1998).
6. V. S. Gorelik and A. Yu. Pyatyshev, *Phys. Wave Phenom.* **22**, 252 (2014).
7. B. S. Kalanoor, M. Ronen, Z. Oren, D. Gerber, and Y. R. Tischler, *ACS Omega* **2**, 1232 (2017).
8. B. S. Alexandrov, V. Gelev, S. W. Yoo, L. B. Alexandrov, Y. Fukuyo, A. R. Bishop, K. Rasmussen, and A. Usheva, *Nucleic Acids Res.* **38**(6), 1790 (2010).
9. V. S. Gorelik, L. I. Zlobina, A. S. Krylov, V. P. Sverbil, and P. P. Sverbil, *Phys. Wave Phenom.* **24**, 272 (2016).
10. K.-C. Chou, *Biophys. J.* **45**, 881 (1984).
11. E. O'Brien, M. E. Holt, M. K. Thompson, L. E. Salay, A. C. Ehlinger, W. J. Chazin, and J. K. Barton, *Science* **355**, eaag1789 (2017).
12. K. J. McDonnell, J. A. Chemler, P. L. Bartels, E. O'Brien, M. L. Marvin, J. Ortega, R. H. Stern, L. Raskin, G. M. Li, D. H. Sherman, J. K. Barton, and S. B. Gruber, *Nat. Chem.* **10**, 873 (2018).
13. V. D. Lakhno, *Int. J. Quant. Chem.* **108**, 1970 (2008).
14. A. Yu. Sosorev and O. G. Kharlanov, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 7037 (2021).
15. A. Yu. Sosorev, *Molecules* **26**, 5479 (2021).
16. A. Сосорев, *Биорг. химия* **48**, 223 (2022).
17. J. C. Genereux and J. K. Barton, *Chem. Rev.* **110**, 1642 (2010).
18. G. Edwards and C. Liu, *Phys. Rev. A* **44**, 2709 (1991).
19. T. Weidlich and S. Lindsday, *J. Phys. Chem.* **92**, 6479 (1988).
20. M. González-Jiménez, G. Ramakrishnan, N. V. Tukachev, H. M. Senn, and K. Wynne, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 13250 (2021).
21. J. M. Benevides, S. A. Overman, and G. J. Thomas Jr., *J. Raman Spectrosc.* **36**, 279 (2005).
22. G. J. Thomas Jr., J. M. Benevides, S. A. Overman, T. Ueda, K. Ushizawa, M. Saitoh, and M. Tsuboi, *Biophys. J.* **68**, 1073 (1995).
23. S. M. Perepelytsya and S. N. Volkov, *Eur. Phys. J. E* **31**, 201 (2010).
24. T. L. Bubon and S. M. Perepelytsya, *Eur. Phys. J. E* **44**, 84 (2021).
25. M. V. Vener, O. D. Parashchuk, O. G. Kharlanov, D. R. Maslennikov, D. I. Dominskiy, I. Yu. Chernyshov, D. Yu. Paraschuk, and A. Yu. Sosorev, *Adv. Electron. Mater.* **7**, 2001281 (2021).
26. O. G. Kharlanov, D. R. Maslennikov, E. V. Feldman, G. G. Abashev, O. V. Borshchev, S. A. Ponomarenko, M. V. Vener, D. Yu. Paraschuk, and A. Yu. Sosorev, *Adv. Electron. Mater.* **7**, 2100579 (2021).
27. A. Yu. Sosorev, O. D. Parashchuk, N. V. Tukachev, D. R. Maslennikov, D. I. Dominskiy, O. V. Borshchev, M. S. Polinskaya, M. S. Skorotetcky, O. G. Kharlanov, and D. Yu. Paraschuk, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 15485 (2021).
28. V. A. Trukhanov, D. I. Dominskiy, O. D. Parashchuk, E. V. Feldman, N. M. Surin, E. A. Svidchenko, M. S. Skorotetcky, O. V. Borshchev, D. Yu. Paraschuk, and A. Yu. Sosorev, *RSC Adv.* **10**, 28128 (2020).
29. B. Chitturi, S. Shi, L. N. Kinch, and N. V. Grishin, *J. Mol. Biol.* **428**, 4392 (2016).
30. C. Liu, K. Huang, W.-T. Park, M. Li, T. Yang, X. Liu, L. Liang, T. Minaric, and Y.-Y. Noh, *Mater. Horiz.* **4**, 608 (2017).
31. N. Gilbert and B. Ramsahoye, *Brief. Funct. Genomics Proteomics* **4**, 129 (2005).
32. S. Levitskii, K. Derbikova, M. V. Baleva, A. Kuzmenko, A. V. Golovin, I. Chicherin, I. A. Krashennnikov, and P. Kamenski, *PeerJ* **6**, e5620 (2018).
33. A. Pérez, I. Marchán, D. Svozil, J. Sponer, T. E. Cheatham 3rd, C. A. Loughton, and M. Orozco, *Biophys. J.* **92**, 3817 (2007).
34. M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, and J. A. Montgomery Jr., *J. Comput. Chem.* **14**, 1347 (1993).
35. M. S. Gordon and M. W. Schmidt, *Theory and applications of computational chemistry: the first forty years*, ed. by C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, and G. E. Scuseria, Elsevier, Amsterdam (2005).
36. S. Lubner, M. Iannuzzi, and J. Hutter, *J. Chem. Phys.* **141**, 094503 (2014).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 116

Выпуск 6

25 сентября 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

© Российская академия наук, 2022

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

Medium effects for hadron-tagged jets in proton-proton collisions

B. G. Zakharov¹⁾

L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, 117334 Moscow, Russia

Submitted 17 August 2022

Resubmitted 17 August 2022

Accepted 22 August 2022

DOI: 10.31857/S123456782218001X, EDN: kexfxz

The observations at RHIC and the LHC in AA collisions of the transverse flow effects and the strong suppression of high- p_T hadron spectra (jet quenching) give evidence of the quark-gluon plasma (QGP) formation in AA collisions (for reviews see, e.g., [1–3]). The results of hydrodynamic analyses of the flow effects support that the QGP is formed at the proper time $\tau_0 \sim 0.5 - 1$ fm [1, 2]. The observation of the ridge effect [4, 5] in pp collisions at the LHC energies, suggests that a mini QGP (mQGP) can be created in pp collisions as well. This is also supported by the steep growth of the midrapidity strange particle production at charged multiplicity $dN_{ch}/d\eta \sim 5$ [6]. This agrees with the onset of the QGP regime at $dN_{ch}/d\eta \sim 6$, found in [7] from behavior of $\langle p_T \rangle$ as a function of multiplicity, employing van Hove's arguments that the phase transition should lead to an anomalous multiplicity dependence of $\langle p_T \rangle$. These estimates of the critical multiplicity density for the onset of the mQGP formation regime are smaller than the typical midrapidity charged multiplicity of the soft (underlying-event (UE)) hadrons for jet events in pp collisions at the LHC energies – $dN_{ch}/d\eta \sim 10-15$ (it is bigger than the ordinary minimum bias multiplicity by a factor of $\sim 2-2.5$ [8]).

The mQGP formation in pp collisions should lead to some jet modification. However, one can expect that the quenching effects in pp collisions should be significantly smaller than in heavy ion collisions due to lower temperature of the mQGP and due to strong reduction of the induced gluon emission for a small size fireball. The latter is closely related to the anomalously strong L -dependence of the radiative parton energy loss, ΔE_r , in a finite-size QCD matter [9] (as compared to predictions of the Bethe–Heitler formula). Fixed coupling calculations without the Coulomb effects within the BDMPS approach [9] give $\Delta E_r \propto L^2$ for a static QGP, and $\Delta E_r \propto L$ [10] for an expanding QGP with entropy density $s \propto 1/\tau$ (as in the Bjorken model with purely longitudinal expansion of the QGP). The lin-

ear L -dependence of ΔE_r for an expanding QGP remains approximately valid also for calculations with accurate treatment of the Coulomb effects with running α_s [11]. Calculations of the medium modification factor R_{pp} (which is not directly observable quantity) within the light-cone path integral (LCPI) approach [12] with accurate treatment of the Coulomb effects and running α_s give a small deviation of R_{pp} from unity at the LHC energies [13] ($R_{pp} \sim 0.8$ at $p_T \sim 10$ GeV). For this reason observation of jet quenching in pp collisions via a weak modification of the p_T -dependence of hadron spectra is practically impossible. A promising observable for quenching effects in pp collisions is the variation with the UE activity of the medium modification factor I_{pp} for the photon-tagged jet fragmentation functions (FFs) [14]. However, this measurement requires high statistics due to a very small cross section. This problem is absent for the modification factor I_{pp} for the hadron-tagged jets. The medium modification factor I_{pp} for the di-hadron production in pp collisions can be written similarly to AA collisions [15]

$$I_{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t) = \frac{Y_m^{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t)}{Y_v^{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t)}, \quad (1)$$

where $p_T^{a,t}$ and $y^{a,t}$ are the transverse momenta and rapidities of the trigger (h^t) and the associated (h^a) hadrons, Y_m^{pp} is the per-trigger yield accounting the medium effects, and Y_v^{pp} is the per-trigger yield calculated ignoring the medium effects. The per-trigger yields (similarly to AA collisions [15]) can be written in terms of the di-hadron (back-to-back) and one-hadron inclusive cross sections as

$$Y_{m,v}^{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t) = \frac{d^4\sigma_{m,v}}{dp_T^a dp_T^t dy^a dy^t} / \frac{d^2\sigma_{m,v}}{dp_T^t dy^t}. \quad (2)$$

Of course, the denominator in (1) is unobservable. But one can study the UE multiplicity dependence of I_{pp} , say, by using the ratio of the per-trigger yield to its minimum bias value. Because we can reasonably expect that the UE multiplicity dependence of the numerator

¹⁾e-mail: bgz@itp.ac.ru

and the denominator of (2) for Y_v^{pp} is very similar, and consequently $Y_v^{pp}/\langle Y_v^{pp} \rangle \approx 1$. Then we have

$$\frac{I_{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t)}{\langle I_{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t) \rangle} \approx \frac{Y_m^{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t)}{\langle Y_m^{pp}(p_T^a, p_T^t, y^a, y^t) \rangle}. \quad (3)$$

This relation allows one to study the multiplicity dependence of I_{pp} by measuring the per-trigger yield (which corresponds to the theoretical Y_m^{pp}). Recently, this method has been used by ALICE [16] in the first measurement of the variation of I_{pp} with the UE multiplicity for the hadron-tagged jets for 5.02 TeV pp collisions (for the trigger hadron momentum $8 < p_T^t < 15$ GeV, and the associated away side hadron momentum $4 < p_T^a < 6$ GeV). It was found that I_{pp} decreases monotonically by about 15 % with increase of the UE activity in the range $5 \lesssim dN_{ch}/d\eta \lesssim 20$ (we use $dN_{ch}/d\eta$ for the whole range of the azimuthal angle ϕ and the transverse momentum which is bigger by a factor of ~ 4.4 than the transverse side charged multiplicity N_{ch}^{TS} of [16] for the kinematic region $\pi/3 \leq |\phi| \leq 2\pi/3$, $|\eta| < 0.8$, and $p_T > 0.5$ GeV). Such a decrease of I_{pp} agrees qualitatively with the quenching effect obtained in [14] for the jet energy $E = 25$ GeV (which is of the order of the jet energy for the ALICE trigger particle momentum region [16]). For drawing a more definitive conclusion on whether the ALICE data [16] on I_{pp} may be consistent with jet quenching in the mQGP, it is of course highly desirable to perform calculations of I_{pp} for hadron-tagged jets accounting for the jet energy fluctuations and the quenching effects for both the back-to-back jets. In the present paper, we carry out such calculations of I_{pp} for hadron-tagged jets for conditions of the ALICE experiment [16] within the LCPI approach [12] to the induced gluon emission. We use the parametrization of the running QCD coupling $\alpha_s(Q, T)$ which has a plateau around $Q \sim \kappa T$ (motivated by the lattice calculations of the effective QCD coupling in the QGP [17]). We use the value of κ fitted in [13] to the LHC heavy ion data on the nuclear modification factor R_{AA} . We find that the theoretical predictions with no free parameters for the multiplicity dependence of the ratio $I_{pp}/\langle I_{pp} \rangle$ for 5.02 TeV pp collisions are in reasonable agreement with the recent preliminary data from ALICE [16]. The description of the data becomes better for the scenario with an incomplete thermalization

of the matter at $dN_{ch}/d\eta \lesssim 10$. Our results show that the drop of the ratio $I_{pp}/\langle I_{pp} \rangle$ with the UE multiplicity, if confirmed by further measurements, may be viewed as the first direct evidence for the jet quenching in pp collisions.

This work was supported by the Russian Science Foundation under grant #20-12-00200.

This is an excerpt of the article ‘‘Medium effects for hadron-tagged jets in proton-proton collisions’’. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601713

1. Prog. Part. Nucl. Phys. **86**, 35 (2016); arXiv:1506.03863.
2. P. Romatschke and U. Romatschke, arXiv:1712.05815.
3. M. Connors, C. Nattrass, R. Reed, and S. Salur, Rev. Mod. Phys. **90**, 025005 (2018); ArXiv:1705.01974.
4. V. Khachatryan et al. (CMS Collaboration), JHEP **1009**, 091 (2010); arXiv:1009.4122.
5. G. Aad et al. (ATLAS Collaboration), Phys. Rev. Lett. **116**, 172301 (2016); arXiv:1509.04776.
6. J. Adam et al. (ALICE Collaboration), Nature Phys. **13**, 535 (2017); arXiv:1606.07424.
7. R. Campanini, G. Ferri, and G. Ferri, Phys. Lett. B **703**, 237 (2011).
8. R. Field, Acta Phys. Pol. B **42**, 2631 (2011); arXiv:1110.5530.
9. R. Baier, Y. L. Dokshitzer, A. H. Mueller, S. Peigné, and D. Schiff, Nucl. Phys. B **483**, 291 (1997); arXiv:hep-ph/9607355.
10. R. Baier, Y. L. Dokshitzer, A. H. Mueller, and D. Schiff, Phys. Rev. C **58**, 1706 (1998); hep-ph/9803473.
11. B. G. Zakharov, J. Phys. G **41**, 075008 (2014); arXiv:1311.1159.
12. B. G. Zakharov, JETP Lett. **63**, 952 (1996); arXiv:hep-ph/9607440.
13. B. G. Zakharov, JHEP **09**, 087 (2021); arXiv:2105.09350.
14. B. G. Zakharov, Phys. Rev. Lett. **112**, 032301 (2014); arXiv:1307.3674.
15. A. Adare et al. (PHENIX Collaboration), Phys. Rev. C **78**, 014901 (2008); arXiv:0801.4545.
16. S. Tripathy (for ALICE Collaboration), in *24th DAE-BRNS High Energy Physics Symposium, 14–18 December 2020, Jatni, India*; arXiv:2103.07218.
17. A. Bazavov et al., Phys. Rev. D **98**, 054511 (2018); arXiv:1804.10600.

Измерение квантовой эффективности аналоговых детекторов в поле параметрического рассеяния света

Т. И. Новикова¹⁾, А. А. Леонтьев, Г. Х. Китаева

Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 августа 2022 г.

После переработки 22 августа 2022 г.

Принята к публикации 23 августа 2022 г.

Проведен теоретический анализ подходов к безэталонной калибровке квантовой эффективности широкого класса аналоговых детекторов на основе измерения статистических характеристик полей, генерируемых при параметрическом рассеянии света. Получены общие выражения для фактора подавления шума разностного фототока и ковариации фототоков в сигнальном и холостом каналах рассеяния, учитывающие возможность сильных флуктуаций амплитуд однофотонных откликов применяемых детекторов. Показано, что измерение фактора подавления шума разностного фототока с использованием детекторов, не способных работать в режиме счета фотонов, не позволяет напрямую характеризовать степень двухфотонного сжатия в поле параметрического рассеяния и определять квантовую эффективность фоточувствительных элементов без дополнительных калибровочных процедур. Для определения квантовой эффективности таких детекторов предложен метод, основанный на измерении зависимости нормированной ковариации фототоков от коэффициента параметрического усиления.

DOI: 10.31857/S1234567822180021, EDN: kfkqpw

Введение. В последние годы наблюдается растущий интерес к изучению статистических параметров излучения терагерцовых (ТГц) частот на фотонном уровне и генерации ТГц полей с квантовыми свойствами [1–10]. Одними из первых в этом направлении стали работы по исследованию и применению квантово-коррелированных пар фотонов оптического и терагерцового диапазонов, так называемых оптико-терагерцовых бифотонов. Бифотоны такого типа рождаются при параметрическом рассеянии (ПР) света в сильно невырожденном по частоте режиме [5, 11, 12]. К настоящему времени исследованы спектры оптической (“сигнальной”) части генерируемого излучения и показана принципиальная возможность определения дисперсионных свойств сред в ТГц диапазоне без прямого детектирования ТГц волн [4, 7, 13–15]. Проведены первые измерения “холостого” ТГц излучения [16, 17]. Однако напрямую возможность регистрации квантовых характеристик оптико-терагерцовых бифотонных полей пока была продемонстрирована только на примере измерения нормированной корреляционной функции $g^{(2)}$ в режиме ПР, близком к спонтанному [10]. Поскольку наблюдение слабых потоков ТГц фотонов, характерных для непосредственно спонтанного режима ПР, сильно затруднено из-за невысокой чувствительности ТГц детекторов и значительных уровней их шумовых сигналов, в этих первых экспериментах удалось зарегистрировать только слабое (на уровне десятых долей процента) отличие $g^{(2)}$ от классического уровня.

Очевидно, что режим ПР с высоким коэффициентом усиления был бы более удобен для регистрации квантовых свойств оптико-терагерцовых полей. При исследовании пучков-близнецов, рождающихся в этом режиме при *частотно-вырожденном* ПР, в качестве параметров неклассичности обычно рассматривают ковариацию, фактор подавления шума разностного фототока (*noise reduction factor, NRF*) и другие связанные с ними характеристики, которые вычисляются на основании измерений токовых показаний оптических детекторов сигнального и холостого трактов ПР [18, 19]. На измерении этих параметров строятся современные методы квантовой сенсорики и безэталонной квантовой фотометрии [20–22]. Однако прямое перенесение этих методов в ТГц диапазон невозможно по одной простой причине. Все детекторы, применяемые в оптических сигнальных и холостых каналах ПР, являются однофотонными. Независимо от того, проводится регистрация в аналоговом режиме или в режиме счета фотонов, статистические корреляции показаний детекторов при этом однозначно определяют корреляцию фотонов в исходном поле ПР [23]. В терагерцовом же диапазоне детекторы с такими функциями пока практически недоступны.

Очевидно, что режим ПР с высоким коэффициентом усиления был бы более удобен для регистрации квантовых свойств оптико-терагерцовых полей. При исследовании пучков-близнецов, рождающихся в этом режиме при *частотно-вырожденном* ПР, в качестве параметров неклассичности обычно рассматривают ковариацию, фактор подавления шума разностного фототока (*noise reduction factor, NRF*) и другие связанные с ними характеристики, которые вычисляются на основании измерений токовых показаний оптических детекторов сигнального и холостого трактов ПР [18, 19]. На измерении этих параметров строятся современные методы квантовой сенсорики и безэталонной квантовой фотометрии [20–22]. Однако прямое перенесение этих методов в ТГц диапазон невозможно по одной простой причине. Все детекторы, применяемые в оптических сигнальных и холостых каналах ПР, являются однофотонными. Независимо от того, проводится регистрация в аналоговом режиме или в режиме счета фотонов, статистические корреляции показаний детекторов при этом однозначно определяют корреляцию фотонов в исходном поле ПР [23]. В терагерцовом же диапазоне детекторы с такими функциями пока практически недоступны.

¹⁾e-mail: novikova.ti15@physics.msu.ru

В настоящей работе мы рассматриваем NRF и относительную ковариацию токов, измеренных в сигнальном и холостом каналах ПР с помощью обычных аналоговых фотоприемников, не обязательно обладающих функциями однофотонного детектирования. Полученные общие выражения позволяют оценить влияние статистического разброса однофотонных откликов таких детекторов на процедуру характеристики квантовых свойств исходного поля ПР, а также разработать подходы для безэталонного измерения квантовой эффективности чувствительных элементов широкого класса обычных аналоговых детекторов.

Однофотонный отклик, моды и средние токи в каналах ПР. В процессе работы любого оптического приемника, а также ТГц детектора, регистрирующего интенсивность падающего излучения, можно выделить начальный этап, связанный с формированием элементарного импульса фототока в результате поглощения единичного фотона в фоточувствительном слое. В среднем, число таких импульсов за время регистрации отдельного показания прибора $\langle m \rangle$ заведомо отличается от среднего числа падающих фотонов за то же время $\langle n \rangle$, и составляет $\langle m \rangle = \eta \langle n \rangle$, где η – квантовая эффективность детектора. На выходе прибора при каждом элементарном акте k формируется импульс фототока

$$i_0^k(t) = q_k f_k(t). \quad (1)$$

Здесь q_k – это заряд, который переносит такой “однофотонный” импульс, а $f_k(t)$ описывает его временную форму; при этом $\int f_k(t) dt = 1$. Длительности и временные формы $f_k(t)$ элементарных импульсов определяются параметрами встроенной системы усиления и электронной обработки сигналов, поступающих с фоточувствительного слоя. В большинстве случаев, временные формы $f_k(t)$ практически не флуктуируют и могут считаться одинаковыми при всех элементарных актах регистрации фотона. Такое описание справедливо не только для так называемых “однофотонных” детекторов – счетчиков фотонов, у которых в каждом случае поглощения фотона на выходе специально формируется стандартизованный выходной импульс тока, но и для приемников, не способных работать в счетном режиме. Однако флуктуации q_k у детекторов, не способных работать в режиме счета фотонов (так называемых аналоговых детекторов), могут быть весьма значительными.

При работе в аналоговом режиме, т.е. при включении в цепь регистрации полного выходного тока, поступающие с чувствительного элемента детектора

элементарные фото-импульсы накладываются друг на друга, и в итоге регистрируется суммарный меняющийся во времени выходной ток

$$i(t) = \sum_{k=1}^m q_k f(t - t_k), \quad (2)$$

где m – число элементарных однофотонных импульсов, попадающих за время детектирования тока. Отметим, что в целях простоты рассмотрения здесь и далее мы считаем незначительными и не рассматриваем возможные дополнительные шумовые вклады электронной природы в полный ток. Время детектирования определяется быстродействием схемы регистрации, при использовании стробируемого интегратора в схеме измерения статистики токовых показаний – это время строба [24]. В общем случае значение фототока является случайной величиной, среднее значение которой пропорционально средней интенсивности падающего на детектор излучения. Переходя на язык чисел фотонов в моде входного излучения N и учитывая общее число $M = M_{\parallel} M_{\perp}$ продольных (M_{\parallel}) и поперечных (M_{\perp}) мод излучения, которое регистрирует детектор, можно записать [25]:

$$\langle i(t) \rangle = \sum_k \langle q_k f(t - t_k) \rangle = \langle q \rangle \eta M \langle N \rangle. \quad (3)$$

Подобное описание применимо к детекторам, регистрирующим пары фотонов, которые рождаются при ПР в нелинейном кристалле под действием монохроматической лазерной накачки. Каждый фотон из генерируемой пары регистрируется своим детектором: фотон большей частоты (оптический) регистрируется детектором сигнального канала с квантовой эффективностью η_s , а фотон меньшей частоты (терагерцовой, либо также оптической) – холостым детектором с квантовой эффективностью η_i . В простейшем идеальном случае регистрация фотонов идет двумя детекторами, согласованными по угловым апертурам и входным площадкам так, что каждый регистрирует излучение в пределах некоторого одинакового количества мод $M_{\parallel} M_{\perp} = M_c$ взаимно скоррелированных потоков фотонов. В реальном эксперименте всегда может быть некоторое рассогласование между спектральными интервалами и/или пространственными апертурами детектирования. Речь идет о рассогласовании, которое приводит к тому, что один или оба детектора регистрируют также нескоррелированное излучение своих частотных областей в модах M_{uj} (здесь и далее $j = i$ или s). В общем случае выражение (3) для среднего значе-

ния фототока каждого детектора можно переписать следующим образом:

$$\langle i_j \rangle = \langle q_j \rangle \eta_j (M_c + M_{uj}) \langle N \rangle. \quad (3a)$$

Среднее число фотонов в моде излучения параметрического рассеяния $\langle N \rangle$ зависит от величины коэффициента параметрического усиления [25]:

$$\beta_{si} \equiv \frac{2\pi\omega_s\omega_i}{c^2\sqrt{k_{sz}k_{iz}}} E_p \chi^{(2)} L \quad (4)$$

и расстройки фазового синхронизма. Здесь $\chi^{(2)}$ – действующее значение нелинейной восприимчивости кристалла, L – длина кристалла, E_p – амплитуда поля накачки, k_{sz} и k_{iz} – проекции волновых векторов сигнальных и холостых волн на направление накачки. В случае большого числа регистрируемых мод, общее число регистрируемых фотонов в каждом канале увеличивается с ростом коэффициента параметрического преобразования как [26]:

$$(M_c + M_{uj}) \langle N \rangle \cong (M_c + M_{uj}) \sinh^2 \beta_{si}. \quad (5)$$

Коэффициент двухмодового сжатия и фактор подавления шума разностного фототока (NRF). Сигнальный и холостой пучки, генерируемые при ПР, имеют одинаковые флуктуации чисел фотонов при любом коэффициенте параметрического усиления. Квантово-оптической характеристикой двухмодового сжатия по числу фотонов принято считать отношение дисперсии разности чисел фотоотсчетов в сигнальном (m_s) и холостом (m_i) каналах, измеренных с помощью однофотонных детекторов, к сумме соответствующих средних значений [18, 21, 22, 25, 27–29]:

$$\sigma^{(\text{phot})} \equiv \frac{\text{Var}(m_s - m_i)}{\langle m_s \rangle + \langle m_i \rangle}. \quad (6a)$$

Назовем этот фактор “фотонным” NRF. При использовании идеальных детекторов с $\eta_j = 1$, шум разностного фототока полностью подавлен, чем ниже квантовая эффективность детекторов, тем ближе фотонный NRF приближается к максимальному значению 1, характерному для классических некогерентных потоков фотонов.

Измерение коэффициента двухмодового сжатия с помощью однофотонных детекторов лежит в основе метода безэтальной калибровки квантовой эффективности счетных детекторов, работающих непосредственно в счетном режиме, или же в режиме аналоговой регистрации оптических сигналов высокой мощности [18, 21, 22, 25, 27–29]. При аналоговой

регистрации в эксперименте непосредственно вычисляется отношение дисперсии разности токовых показаний к средним токам детекторов сигнального и холостого каналов:

$$\sigma^{(\text{anal})} \equiv \frac{\text{Var}(i_s - i_i)}{\langle i_s \rangle + \langle i_i \rangle}. \quad (6б)$$

Для сокращения числа переменных часто вводят понятие “редуцированного” тока в одном из каналов (например, сигнальном), рассчитывая его как $\langle i'_s \rangle = \alpha \langle i_s \rangle$, где коэффициент $\alpha \equiv \langle i_i \rangle / \langle i_s \rangle$ легко измеряется экспериментально [25]. Вычисляя редуцированный “токовый” NRF

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} \equiv \frac{\text{Var}(i'_s - i_i)}{\langle i'_s \rangle + \langle i_i \rangle} \quad (6в)$$

и нормируя его на величину однофотонного заряда $\langle q_i \rangle$, можно определить коэффициент двухмодового сжатия по числу фотонов $\sigma_{\text{red}}^{(\text{phot})}$ и квантовую эффективность счетного детектора в холостом канале.

Получим общее выражение для токового NRF $\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})}$, не накладывая никаких ограничений на флуктуации амплитуд элементарных однофотонных импульсов детекторов. Согласно определению (6в),

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} = \frac{\text{Var}\langle i'_s \rangle + \text{Var}\langle i_i \rangle - 2(\langle i'_s i_i \rangle - \langle i'_s \rangle \langle i_i \rangle)}{\langle i'_s \rangle + \langle i_i \rangle}. \quad (7)$$

Пользуясь выводами из работы [25], запишем выражения для дисперсий фототоков каждого из детекторов:

$$\begin{aligned} \text{Var}\langle i_i \rangle &= \eta_i \langle q_i^2 \rangle (M_c + M_{ui}) \langle N \rangle (1 + \eta_i \langle N \rangle) = \\ &= \langle i_i \rangle \frac{\langle q_i^2 \rangle}{\langle q_i \rangle} (1 + \eta_i \langle N \rangle), \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\begin{aligned} \text{Var}\langle i'_s \rangle &= \alpha^2 \eta_s \langle q_s^2 \rangle (M_c + M_{us}) \langle N \rangle (1 + \eta_s \langle N \rangle) = \\ &= \alpha \langle i'_s \rangle \frac{\langle q_s^2 \rangle}{\langle q_s \rangle} (1 + \eta_s \langle N \rangle), \end{aligned} \quad (8б)$$

и корреляции их токов:

$$\langle i'_s i_i \rangle = \langle i_i \rangle \langle i'_s \rangle + \alpha \eta_i \eta_s \langle q_i \rangle \langle q_s \rangle M_c \langle N \rangle (1 + \langle N \rangle). \quad (9)$$

Для токового NRF в итоге получим:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} &= \frac{\alpha(1 + \varepsilon_s) \langle q_s \rangle (1 + \eta_s \langle N \rangle)}{2} + \\ &+ \frac{(1 + \varepsilon_i) \langle q_i \rangle (1 + \eta_i \langle N \rangle)}{2} - \frac{\langle q_i \rangle \eta_i M_c}{(M_c + M_{us})} (\langle N \rangle + 1). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь для каждого из детекторов введен параметр $\varepsilon_j \equiv \text{Var}(q_j) / \langle q_j \rangle^2$ ($j = s, i$), характеризующий степень флуктуаций амплитуды его однофотонного отклика.

Измерение квантовой эффективности детекторов по токовому NRF. У детекторов, способных работать в режиме счета фотонов, амплитуда однофотонного отклика практически не флуктуирует, дисперсия заряда q_j равна нулю, $\varepsilon_j = 0$. “Мгновенные” токовые показания и числа фотоотчетов связаны простым условием $m_j = i_j/q_j$. Отношение средних показаний детекторов холостого и сигнального каналов (см. (3а)) в этом случае составляет

$$\alpha = \frac{q_i \langle m_i \rangle}{q_s \langle m_s \rangle} = \frac{q_i \eta_i (1 + \kappa_i)}{q_s \eta_s (1 + \kappa_s)}. \quad (11)$$

Здесь коэффициенты $\kappa_j \equiv M_{uj}/M_c$ введены для обозначения доли нескоррелированных мод, попадающих в апертуры и полосы детектирования каждого приемника. Редуцированный коэффициент двухмодового сжатия $\sigma_{\text{red}}^{(\text{phot})} \equiv \frac{\text{Var}(\alpha^{(\text{phot})} m_s - m_i)}{\alpha^{(\text{phot})} \langle m_s \rangle + \langle m_i \rangle}$ (где $\alpha^{(\text{phot})} \equiv \langle m_i \rangle / \langle m_s \rangle = \alpha q_s / q_i$) совпадает с нормированным значением токового NRF: $\sigma_{\text{red}}^{(\text{phot})} = \sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} / q_i$. Исходя из общего соотношения (10), получим выражение для нормированного токового NRF в случае применения однофотонных детекторов:

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} / \langle q_i \rangle = \frac{\alpha^{(\text{phot})} + 1}{2} - \frac{\eta_i}{1 + \kappa_s} \left(1 - \langle N \rangle \frac{\kappa_s + \kappa_i}{2} \right), \quad (12)$$

при условии точного согласования мод, регистрируемых двумя детекторами, $M_{ui} = M_{us} = 0$ и соотношение (12) приобретает простой вид

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{phot})} = \frac{\alpha^{(\text{phot})} + 1}{2} - \eta_i. \quad (12a)$$

Соотношения (12) и (12a) лежат в основе известного метода безэталоной калибровки счетных детекторов [21, 22, 28, 29]. Безусловно, проще всего проводить измерения непосредственно в счетном режиме, поскольку не требуется информация о величине однофотонного заряда. Измерив $\sigma_{\text{red}}^{(\text{phot})}$ и соотношение средних показаний детекторов, с помощью (12a) рассчитывается квантовая эффективность детектора холостого канала η_i , а затем и квантовая эффективность детектора сигнального канала $\eta_s = \eta_i / \alpha^{(\text{phot})}$. В более сложном случае, когда наличием несогласованных мод пренебречь нельзя, необходимо применять соотношение (12). Если потоки фотонов настолько велики, что имеет место наложение однофотонных импульсов тока, переход в аналоговый режим регистрации также не представляет труда. Как видно из полученных соотношений, необходимо только дополнительно измерить величину однофотонного заряда.

Получим из общего соотношения (10) аналог выражения (12) для случаев, не ограниченных применением только счетных детекторов. При токовом режиме регистрации, применим к детекторам любого типа, связь токового NRF с квантовой эффективностью η_i приобретает вид

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} / \langle q_i \rangle = \frac{\alpha \frac{\langle q_s \rangle}{\langle q_i \rangle} (\varepsilon_s + 1) + (\varepsilon_i + 1)}{2} - \frac{\eta_i}{1 + \kappa_s} \times \left[1 - \langle N \rangle \left(\frac{\kappa_i + \kappa_s}{2} + \frac{\varepsilon_s (1 + \kappa_i) + \varepsilon_i (1 + \kappa_s)}{2} \right) \right]. \quad (13)$$

Простая линейная связь токового NRF с коэффициентом двухмодового сжатия нарушается, линейная связь с квантовой эффективностью холостого детектора становится существенно более опосредованной. Видно, что если детекторы не являются однофотонными, т.е. $\varepsilon_j \neq 0$, то даже в отсутствие нескоррелированных мод связь между токовым NRF и квантовой эффективностью η_i будет зависеть от числа фотонов в моде ПР $\langle N \rangle$:

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} / \langle q_i \rangle = \frac{\alpha \frac{\langle q_s \rangle}{\langle q_i \rangle} (\varepsilon_s + 1) + (\varepsilon_i + 1)}{2} - \eta_i \frac{2 - \langle N \rangle [\varepsilon_s + \varepsilon_i]}{2}. \quad (13a)$$

Даже если оба аналоговых детектора обладают идеальной квантовой эффективностью, полностью подавить флуктуации разностного фототока не удастся. Стартуя с некоторого ненулевого значения $\frac{\varepsilon_s + \varepsilon_i}{2} \langle q_i \rangle$, токовый NRF будет расти с ростом числа фотонов в моде ПР как $\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} = \frac{\varepsilon_s + \varepsilon_i}{2} (1 + \langle N \rangle) \langle q_i \rangle$.

Для абсолютного измерения квантовой эффективности аналогового детектора по токовому NRF необходимо заранее определить параметры однофотонных откликов детекторов – средний заряд $\langle q_j \rangle$ и дисперсию $\text{Var}(q_j)$. Эту информацию можно получить, аппроксимируя статистические распределения “мгновенных” токовых показаний каждого прибора. Успешный анализ гистограмм, позволяющий определить среднюю величину и дисперсию однофотонного заряда, проводился ранее для аналоговых детекторов различных спектральных диапазонов [29–31]. Однако этого недостаточно. В большинстве экспериментов, особенно при использовании сильно частотно-невырожденного ПР, когда схемы детектирования сигнального и холостого каналов принципиально различны, нельзя быть уверенным, что доли нескоррелированных мод пренебрежимо малы. Коэффициенты κ_i в соотношении (13) могут быть весьма значительными (как минимум для

одного из детекторов), и их значения необходимо также определять заранее.

Рассмотрим один из возможных подходов к измерению квантовой эффективности ТГц канала ПР с аналоговым ТГц детектором по токовому NRF. Расположим в оптическом сигнальном канале однофотонный фотоприемник с $\varepsilon_s = 0$. В силу большой разницы в длинах волн, холостое излучение ПР ТГц частот имеет гораздо большую угловую расходимость [12] и сложнее фокусируется на соответствующий детектор, чем оптическая составляющая излучения ПР. В этих условиях, максимально раскрыв входные апертуры и полосу приема в сигнальном канале, можно предположить, что ТГц приемник регистрирует только коррелированные моды, а оптический может захватывать значительно большую часть излучения в сигнальном канале ПР. Таким образом, $\kappa_i = 0$, но κ_s необходимо определить. Расположим в холостом тракте установки ПР перед ТГц детектором фильтр с переменным пропусканием T . Проанализируем линейные зависимости измеряемого в такой установке нормированного токового NRF от числа фотонов в моде ПР $\langle N \rangle$ и пропускания фильтра T :

$$\sigma_{\text{red}}^{(\text{anal})} / \langle q_i \rangle = \left(\frac{\alpha \langle q_s \rangle / \langle q_i \rangle + \varepsilon_i + 1}{2} - \frac{T \eta_i}{1 + \kappa_s} \right) + T \eta_i \left(\frac{1}{2(1 + \kappa_s^{-1})} + \frac{\varepsilon_i}{2} \right) \langle N \rangle. \quad (14)$$

Варьируя мощность лазерной накачки при постоянном T , будем менять $\langle N \rangle$ в соответствии с соотношениями (4), (5). Аппроксимация полученной зависимости линейной функцией позволит определить параметры

$$A_1(T) \equiv \frac{\alpha \langle q_s \rangle / \langle q_i \rangle + \varepsilon_i + 1}{2} - \frac{T \eta_i}{1 + \kappa_s},$$

$$B_1(T) = T \eta_i \left(\frac{1}{2(1 + \kappa_s^{-1})} + \frac{\varepsilon_i}{2} \right). \quad (15)$$

Проводя аппроксимации при различных пропусканиях фильтра T , найдем коэффициенты линейных зависимостей $A_1(T) = A_2 + B_2 T$ и $B_1(T) = B_3 T$:

$$A_2 = \frac{\alpha \langle q_s \rangle / \langle q_i \rangle + \varepsilon_i + 1}{2},$$

$$B_2 = \frac{\eta_i}{1 + \kappa_s}, \quad B_3 = \eta_i \left(\frac{1}{2(1 + \kappa_s^{-1})} + \frac{\varepsilon_i}{2} \right). \quad (16)$$

По этим трем числам могут быть определены квантовая эффективность ТГц детектора η_i , относительная дисперсия его однофотонного заряда ε_i и, попутно, коэффициент заполнения мод сигнального канала κ_s . Средние заряды обоих детекторов при этом

должны быть найдены заранее – например, из анализа статистических распределений соответствующих токовых показаний. Точность такого метода измерения квантовой эффективности будет в большой степени ограничена точностью результатов всех перечисленных аппроксимационных процедур.

Итак, хотя измерение токового NRF с использованием аналоговых детекторов не позволяет напрямую характеризовать степень двухфотонного сжатия в поле ПР, возможность определения квантовой эффективности таких детекторов по NRF все же остается. Однако при этом, помимо прямых измерений токового NRF, потребуются дополнительные привлечение нескольких аппроксимационных процедур. Точность полученного результата будет заведомо ниже, чем при аналогичной калибровке однофотонных приемников.

Измерение ковариации токов для калибровки квантовой эффективности. Теперь рассмотрим нормированную ковариацию холостого и редуцированного сигнального токов $C \equiv \langle \delta i'_s \delta i_i \rangle / (\langle i_i \rangle + \langle i'_s \rangle)$. Принимая во внимание соотношение (9), для любых типов используемых детекторов можно записать:

$$C / \langle q_i \rangle = \frac{\eta_i}{2(1 + \kappa_s)} (1 + \langle N \rangle). \quad (17)$$

Исследование зависимости этого корреляционного параметра от мощности лазера позволяет напрямую определить отношение $\frac{\eta_i}{(1 + \kappa_s)}$ без какой-либо дополнительной информации об уровне согласования мод в холостом канале κ_i и дисперсиях однофотонных откликов обоих детекторов. То же отношение можно измерить при постоянном известном числе фотонов $\langle N \rangle$, варьируя пропускание T элемента, помещенного в холостой канал. Однако для того, чтобы определить саму квантовую эффективность, необходимо знать $(1 + \kappa_s)$. Только при полной уверенности в том, что нескоррелированных мод в сигнальном канале нет и $\kappa_s = 0$, можно по ковариации измерить квантовую эффективность. Заметим, что дополнительное измерение среднего заряда $\langle q_i \rangle$ и нормировка ковариации на его величину не требуются в тех случаях, когда интересуют не квантовая эффективность детектора η_i , а его ампер-ваттная чувствительность, равная $\langle q_i \rangle \eta_i / (\hbar \omega_i)$.

Итак, при измерении квантовой эффективности аналоговых детекторов по ковариации требования значительно проще: нет необходимости в использовании однофотонного детектора в сигнальном канале, не надо регистрировать только коррелированные моды в холостом канале. Достаточно сузить набор мод сигнального канала настолько, чтобы в них попадали

только моды, согласованные хотя бы с частью мод ПР, регистрируемых холостым детектором.

При применении обоих рассмотренных методов точность измерения η_i будет зависеть от точности измерения токовых показаний, а также точности определения амплитуды однофотонного отклика калибруемого детектора $\langle q_i \rangle$ и точности определения среднего числа фотонов в моде поля $\langle N \rangle$. Точность определения $\langle q_i \rangle$ на основании аппроксимации гистограмм статистических распределений токовых показаний существенным образом зависит от выбора подхода к моделированию шумов каждого конкретного типа приемника [29–31]. Соответствующий вклад в относительную ошибку может достигать до 1–5%. Ошибка определения $\langle N \rangle$ зависит от ошибки измерения β_{si} . Это измерение осуществляется на основании аппроксимации экспериментальных зависимостей мощности детектируемого излучения ПР от мощности накачки в режиме высокого усиления. Хотя соответствующие относительные погрешности определения $\langle N \rangle$ растут с увеличением β_{si} , для измерений квантовой эффективности можно подобрать режим умеренных значений $\beta_{si} < 5$, при котором вклад этого типа погрешностей будет также на уровне, не превышающем несколько процентов. Как видно из соотношения (17), только эти три фактора определяют конечную ошибку измерения квантовой эффективности по ковариации, которая также может быть доведена до значений менее 10%. В случае же измерений на основании токового NRF потребуются дополнительные процедуры линейной аппроксимации, позволяющие определить коэффициенты A_2 , B_2 и B_3 (см. (16)). Без проведения прямых экспериментов сложно предсказать ошибку, вносимую этими процедурами, а также то, насколько они смогут компенсировать ошибку измерения NRF, связанную с неточностью отдельных токовых показаний.

В итоге, мы рассмотрели общие соотношения, описывающие влияние характеристик флуктуирующих однофотонных откликов сигнального и холостого детекторов на величину фактора подавления шума разностного фототока и нормированную ковариацию токов детекторов сигнального и холостого каналов в схеме многомодового параметрического рассеяния света. Анализ полученных соотношений показывает, что измерение токового NRF с использованием аналоговых детекторов не позволяет напрямую характеризовать степень двухфотонного сжатия в поле ПР. Для определения квантовой эффективности детекторов по NRF, помимо прямых измерений токового NRF, требуется дополнительное из-

мерение и аппроксимация статистических распределений токовых показаний детекторов, зависимостей NRF от числа фотонов в моде ПР и коэффициента пропускания каналов. Значительно менее громоздкой и более точной может стать предложенная в работе процедура определения квантовой эффективности аналоговых детекторов по ковариации сигнального и холостого токов. Полученные результаты будут важны при разработке экспериментальных основ безэталонных методов калибровки квантовой эффективности и определения ампер-ваттной чувствительности широкого круга аналоговых детекторов, включая ТГц детекторы, а также детекторы других спектральных диапазонов, не способные работать непосредственно в режиме счета фотонов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект # 22-12-00055 (в части разработки методов определения квантовой эффективности аналоговых детекторов), гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 20-32-90232 (в части расчетов фактора подавления шума разностного фототока) и гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00621 (в части расчетов ковариации).

1. A. Pathak, J. Krepelka, and J. Perina, *Phys. Lett. A* **377**, 2692 (2013).
2. C. Riek, D. V. Seletskiy, A. S. Moskalenko, J. F. Schmidt, P. Krauspe, S. Eckart, S. Eggert, G. A. Burkard, and A. Leitenstorfer, *Science* **350**, 420 (2015).
3. V. V. Kornienko, G. K. Kitaeva, F. Sedlmeir, G. Leuchs, and H. G. L. Schwefel, *APL Photonics* **3**, 051704 (2018).
4. M. Kutas, B. Haase, P. Bickert, F. Riexinger, D. Molter, and G. von Freymann, *SciAdv.* **6**, 8065 (2020).
5. G. K. Kitaeva, A. A. Leontyev, and P. A. Prudkovskii, *Phys. Rev. A* **101**, 053810 (2020).
6. Y. He, Y. Mao, D. Huang, Q. Liao, and Y. Guo, *Opt. Express* **28**, 32386 (2020).
7. M. Kutas, B. Haase, J. Klier, D. Molter, and G. von Freymann, *Optica* **8**, 438 (2021).
8. C. Liu, C. Zhu, M. Nie, H. Yang, and C. Pei, *Appl. Opt.* **60**, 7362 (2021).
9. R. Dahan, A. Gorlach, U. Haeusler, A. Karnieli, O. Eyal, P. Yousefi, M. Segev, A. Arie, G. Eisenstein, P. Hommelhoff, and I. Kaminer, *Science* **373**, 6561 (2021).
10. А. А. Леонтьев, К. А. Кузнецов, П. А. Прудковский, Д. А. Сафроненков, Г. Х. Китаева, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 635 (2021).
11. R. V. Zakharov and O. V. Tikhonova, *Laser Phys. Lett.* **15**, 055205 (2018).

12. G. Kh. Kitaeva, V. V. Kornienko, A. A. Leontyev, and A. V. Shepelev, *Phys. Rev. A* **98**, 063844 (2018).
13. K. A. Kuznetsov, G. Kh. Kitaeva, S. P. Kovalev, S. A. Germansky, A. M. Buryakov, A. N. Tuchak, and A. N. Penin, *Appl. Phys. B* **122**, 223 (2016).
14. K. A. Kuznetsov, E. I. Malkova, R. V. Zakharov, O. V. Tikhonova, and G. K. Kitaeva, *Phys. Rev. A* **101**, 053843 (2020).
15. T. I. Novikova, K. A. Kuznetsov, A. A. Leontyev, and G. Kh. Kitaeva, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 264003 (2020).
16. G. K. Kitaeva, V. V. Kornienko, K. A. Kuznetsov, V. Pentin, K. V. Smirnov, and Yu. B. Vakhtomin, *Opt. Lett.* **44**, 1198 (2019).
17. V. D. Sultanov, K. A. Kuznetsov, A. A. Leontyev, and G. K. Kitaeva, *JETP Lett.* **112**, 269 (2020).
18. I. N. Agafonov, M. V. Chekhova, T. Sh. Iskhakov, A. N. Penin, G. O. Rytikov, and O. A. Shumilkina, *Opt. Lett.* **36**, 1329 (2011).
19. E. Brambilla, L. Caspani, O. Jedrkiewicz, L. A. Lugiato, and A. Gatti, *Phys. Rev. A* **77**, 053807 (2008).
20. A. S. Clark, M. Chekhova, J. C. F. Matthews, J. G. Rarity, and R. F. Oulton, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 060401 (2021).
21. M. Genovese, *J. Opt.* **18**, 073002 (2016).
22. A. Meda, E. Losero, N. Samantaray, F. Scafirimuto, S. Pradyumna, A. Avella, I. Ruo-Berchera, and M. Genovese, *J. Opt.* **19**, 094002 (2017).
23. Д. Н. Клышко, *Квантовая электроника* **7**, 1932 (1980).
24. D. A. Safronenkov, N. A. Borshchevskaya, T. I. Novikova, K. G. Katamadze, K. A. Kuznetsov, and G. Kh. Kitaeva, *Opt. Express* **29**, 36644 (2021).
25. G. Brida, M. Genovese, I. Ruo-Berchera, M. Chekhova, and A. Penin, *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 2185 (2006).
26. D. N. Klyshko, *Photons and Nonlinear Optics*, Gordon and Breach, N.Y. (1988).
27. I. N. Agafonov, M. V. Chekhova, A. N. Penin, G. O. Rytikov, and O. A. Shumilkina, *Int. J. Quantum. Inform.* **9**, 251 (2011).
28. A. Meda, I. Ruo-Berchera, I. P. Degiovanni, G. Brida, M. L. Rastello, and M. Genovese, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 101113 (2014).
29. A. Avella, I. Ruo-Berchera, I. P. Degiovanni, G. Brida, and M. Genovese, *Opt. Lett.* **41**, 1841 (2016).
30. T. Bretz, R. Engel, and T. Hebbeker, *JINST* **13**, 06001 (2018).
31. P. Prudkovskii, A. Leontyev, K. Kuznetsov, and G. Kitaeva, *Sensors* **21**, 4964 (2021).

Многоямный потенциал в квантовом точечном контакте траншейного типа

Д. И. Сарыпов^{+,*}, Д. А. Похабов^{+,1)}, А. Г. Погосов^{+,*}, Е. Ю. Жданов^{+,*}, А. К. Бакаров^{+,*}

⁺ Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*} Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 7 июля 2022 г.

После переработки 3 августа 2022 г.

Принята к публикации 4 августа 2022 г.

Рассматривается физический механизм, объясняющий возникновение многоканального режима электронного транспорта в квантовых точечных контактах траншейного типа. Показано, что перераспределение электронов в двумерном электронном газе, обусловленное их кулоновским взаимодействием между собой, а также с заряженными донорами и X-долинными электронами, приводит к появлению многоканальности, наблюдаемой экспериментально. Результаты численного моделирования перераспределения электронов и их сравнение с экспериментальными измерениями кондактанса квантовых точечных контактов траншейного типа, изготовленного на основе гетероструктуры GaAs/AlGaAs, демонстрируют формирование многоямного ограничивающего потенциала.

DOI: 10.31857/S1234567822180033, EDN: kfoavh

1. Введение. Характерная черта квазиодномерного баллистического транспорта – квантование кондактанса, проявляющееся в виде плато на зависимости кондактанса проводника от его ширины на уровне значений $N \times 2e^2/h$ ($N = 1, 2, 3 \dots$) [1, 2]. Квантовый точечный контакт (КТК), обычно представляющий собой микросужение в двумерном электронном газе (ДЭГ) с шириной, сравнимой с фермиевской длиной волны электрона, является типичной структурой, демонстрирующей данное явление. Традиционно КТК создают с помощью технологии расщепленного металлического затвора. Альтернативный метод создания КТК состоит в вытравливании литографических траншей, отделяющих проводящую область от боковых затворов. Использование КТК траншейного типа, в отличие от структур с металлическим затвором, позволяет прикладывать на затворы большие напряжения, причем как положительные, так и отрицательные. Ранее было показано, что приложение разности потенциалов между затворами может индуцировать спиновую поляризацию в КТК [3–5]. Кроме этого, возможность оперировать напряжениями на боковых затворах независимо позволяет исследовать кондактанс КТК в широком диапазоне значений суммы и разности затворных напряжений. Подобные измерения позволяют обнаружить необычный режим квантования кондактанса нескольких проводящих каналов [6–9]. Как правило,

формирование нескольких каналов внутри одиночного КТК связывают с вигнеровской кристаллизацией [10–14] и объясняют происходящим в нем структурным фазовым переходом из одномерной цепочки электронов в зигзагообразную коррелированную двухрядную структуру (так называемый фазовый переход “зигзаг-струна”) [15–17]. В силу скоррелированности движения электронов, кондактансы каналов в такой вигнеровской двухрядной структуре оказываются зависимыми. В то же время в КТК траншейного типа экспериментально наблюдается многоканальный режим с почти независимым квантованием кондактанса каналов, который нельзя объяснить вышеописанной вигнеровской кристаллизацией. Именно этот многоканальный режим рассматривается в настоящей работе.

Физический механизм многоканальности до конца не ясен, но мы предполагаем, что в КТК, изготовленных на основе гетероструктур типа GaAs/AlGaAs, он связан с формированием многоямного ограничивающего потенциала из-за самосогласованного перераспределения зарядов в гетероструктуре (Г-долинные электроны в ДЭГ, заряженные доноры и локализованные на них X-долинные электроны), минимизирующего энергию системы. В смысле минимизации энергии системы рассматриваемый эффект аналогичен упомянутому переходу “зигзаг-струна” в вигнеровском кристалле с той разницей, что в нашем случае он относится прежде всего к заряженным донорам и

¹⁾e-mail: pokhabov@isp.nsc.ru

X-электронам. Важно, что в ходе охлаждения образца возникшее распределение заряженных доноров и X-электронов замораживается, фиксируя тем самым реализовавшийся потенциал для Г-электронов ДЭГ.

Численный расчет, представленный в работе [18], демонстрирует формирование двухъямного потенциала в КТК с металлическим затвором из-за кулоновского взаимодействия электронов в ДЭГ. Однако связанные с ним каналы оказываются зависимыми, как в вигнеровском кристалле. Кроме того, этот расчет не учитывает влияние X-электронов и заряженных доноров, а также заморозку создаваемого ими потенциала. В настоящей работе приводятся результаты численного моделирования КТК на основе гетероструктур GaAs/AlGaAs, демонстрирующие физический механизм многоканальности, связанный с перераспределением X-электронов и положительно заряженных доноров, а также заморозкой создаваемого ими потенциала. Численные расчеты описывают условия формирования двухъямного, трехъямного, а в общем случае – многоямного ограничивающего потенциала. Рассматриваются две модели: одна учитывает перераспределение X-электронов, другая – положительно заряженных доноров. Обе модели соответствуют нулевой температуре. В качестве одного из результатов выполненных самосогласованных расчетов мы представляем фазовую диаграмму основного состояния электронов в КТК, описывающую формирование одной, двух и трех ям в ограничивающем потенциале. Результаты расчетов сравниваются с измерениями контактного КТК как функции суммы и разности затворных напряжений, проведенными при температуре $T = 1.65$ К. Данные измерения демонстрируют наличие в КТК двух проводящих каналов, контактансы которых независимо квантуются. Наблюдение многоканальности не зависит от способа охлаждения образца и воспроизводится в разных циклах охлаждения.

2. Методика эксперимента. Для исследования многоканального режима электронного транспорта был изготовлен КТК на основе гетероструктуры GaAs/AlGaAs с ДЭГ, выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs (рис. 1а). Она представляет собой короткопериодную сверхрешетку AlAs/GaAs, содержащую в середине слой GaAs толщиной 13 нм, который формирует симметричную прямоугольную квантовую яму для электронов. Легирование структуры донорными δ -слоями Si, расположенными симметрично по обе стороны от квантовой ямы, позволяет заполнить квантовую яму электронами, формирующими ДЭГ. Концентрация и подвижность электронов при темпера-

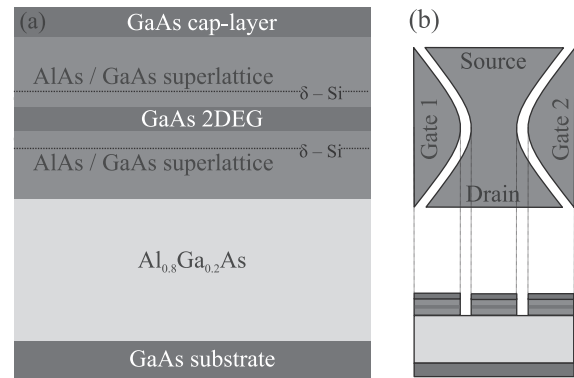


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическое изображение: (а) – гетероструктуры с ДЭГ, легированной δ -слоями Si (пунктирные линии); (б) – КТК траншейного типа

туре 4.2 К составляли $n_{2D} = (6 - 7) \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $\mu = 2 \times 10^6 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ соответственно. Особенность используемых гетероструктур состоит в том, что на донорах Si также локализованы низкоподвижные X-долинные электроны с характерной концентрацией $n_X \sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$, которые не вносят вклад в проводимость при низких температурах, но сглаживают флуктуации электростатического потенциала примесей, увеличивая за счет этого подвижность ДЭГ. Идея такого применения X-электронов предложена в работе [19]. Наличие слоя $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ между подложкой и сверхрешеткой не влияет на обсуждаемый эксперимент. Этот слой используется для создания подвешенных, т.е. отделенных от подложки, наноструктур [20, 21], однако в настоящей работе изучалась неподвешенная структура.

Изучаемый в данной работе КТК был создан путем вытравливания в гетероструктуре траншей шириной 150 нм, которые отделяли проводящую область от двух симметричных боковых затворов (рис. 1б). Траншеи формировались с помощью электронной литографии и последующего реактивного ионного травления. Литографическая ширина КТК составляла около 900 нм, а радиус кривизны затворов в непосредственной близости к КТК – 1 мкм.

Контактанс КТК при различных значениях затворных напряжений V_{G1} и V_{G2} измерялся методом синхронного детектирования переменного тока I_{AC} , протекающего через КТК, при приложении между истоком и стоком переменного напряжения с амплитудой $V_{AC} = 100$ мкВ. Измерения проводились в режиме линейного отклика при температуре $T = 1.65$ К. Измеряемый контактанс – величина, обратная полному сопротивлению, т.е. сопротивлению КТК и подводящих к нему областей:

$$G_m = \frac{I_{AC}}{V_{AC}} = \frac{1}{G_{QPC}^{-1} + R},$$

где G_m – измеряемый кондактанс, G_{QPC} – кондактанс КТК, R – сопротивление подводящих областей, не зависящее от затворных напряжений, составляющее около 1.6 кОм.

3. Результаты эксперимента. При синхронном изменении напряжений на боковых затворах была получена серия кривых, изображенная на рис. 2а. Каждая кривая из серии представляет собой зависимость кондактанса от суммы поданных на затворы напряжений ($V_{G1} + V_{G2}$) при фиксированной разности затворных напряжений $\Delta V_G = V_{G1} - V_{G2} = \text{const}$. Разность затворных напряжений менялась от кривой к кривой в диапазоне значений от -10 до $+10$ В. Для наглядности кривые были отделены друг от друга горизонтальным смещением в 0.125 В. Путем численного дифференцирования был получен транскондактанс $\partial G / \partial (V_{G1} + V_{G2})$ как функция суммы и разности затворных напряжений, представленный на рис. 2б в черно-белой шкале.

На экспериментальных кривых, приведенных на рис. 2а, наблюдаются плато на уровнях значений, кратных $2e^2/h$, но общая картина имеет более сложный вид, характерный для спаренных КТК, расположенных параллельно друг другу [22–24]. Отчетливо видно, что на отдельных кривых отсутствуют некоторые плато, наблюдающиеся на соседних кривых – вместо них наблюдаются скачки кондактанса на $4e^2/h$. Для наглядности на графике на рис. 2а расставлены числа, соответствующие значению кондактанса в единицах $2e^2/h$, а также добавлены линии, разделяющие области графика с различными плато кондактанса (при переходе из одной области графика на рис. 2а в другую через линию кондактанс изменяется на $2e^2/h$). Эти линии также видны на распределении транскондактанса (рис. 2б). Линии, которые могут быть разделены на две группы с приблизительно одинаковым наклоном, формируют сетку, ячейки которой содержат область графика (рис. 2б), соответствующую определенному плато кондактанса. Формирование сетки можно объяснить присутствием в КТК двух проводящих каналов, кондактансы которых квантуются и складываются [6, 7, 9]. Заметим, однако, что при больших значениях кондактанса, вблизи $(5 - 6) \times 2e^2/h$, плато, в отличие от нижележащих, уже нельзя разделить двумя группами кривых. При большом числе заполненных одномерных подзон кондактанс начинает управляться преимущественно суммой затворных напряжений и уже слабо зависит от их разности. В этом смысле, картина становится похожей на кар-

тину кондактанса одноканального КТК. Это соответствует появлению так называемых антикроссингов на распределении транскондактанса (рис. 2б), которые наблюдались ранее в работе [9]. На отдельных кривых наблюдается полуцелое плато кондактанса $0.5 \times 2e^2/h$ (красная стрелка на рис. 2а), появление которого обусловлено, вероятно, латеральным спин-орбитальным взаимодействием [4, 5].

Углы наклона линий, изображенных на рис. 2б, связаны с соответствующими емкостными коэффициентами, как описано в работе [9]. Таким образом, анализ этих углов позволил оценить расстояние между каналами, составляющее приблизительно 250 нм.

4. Численное моделирование. Возможная причина возникновения нескольких каналов внутри одиночного КТК состоит в самосогласованном скоррелированном перераспределении зарядов в проводящем канале, а также заряженных примесей и X-долинных электронов в сверхрешеточных слоях AlAs/GaAs, обусловленном их кулоновским взаимодействием. Механизм перераспределения схематически проиллюстрирован на рис. 3. На распределение зарядов внутри канала влияют также заряженные поверхностные состояния на стенках траншей, что учитывается в описанных ниже численных моделях путем введения создаваемого ими параболического ограничивающего потенциала. В результате легирования гетероструктуры δ -слоями доноров Si, помимо Γ -долинных электронов, составляющих ДЭГ, в ней также возникают вышеупомянутые X-электроны, локализующиеся на донорах. Гипотеза о природе многоканальности состоит в том, что распределение данных зарядов влияет на распределение Γ -электронов, вследствие чего последние могут самосогласованно перераспределиться, образовав несколько каналов так, что общая электростатическая энергия уменьшится. Описанное перераспределение зарядов может происходить при охлаждении образца от комнатной температуры до низких температур, когда распределение заряженных доноров Si, частично экранированных X-электронами, замораживается, фиксируя тем самым реализовавшийся внешний для Γ -электронов потенциал. В свою очередь Γ -электроны в ДЭГ остаются вырожденными и способными перераспределяться под воздействием поля боковых затворов, а также переносить электрический ток. Была предпринята попытка учесть влияние вышеописанных зарядов при помощи численных самосогласованных расчетов в рамках двух моделей: одна учитывает перераспределение X-электронов, а другая – перераспределение положительно заряженных доноров

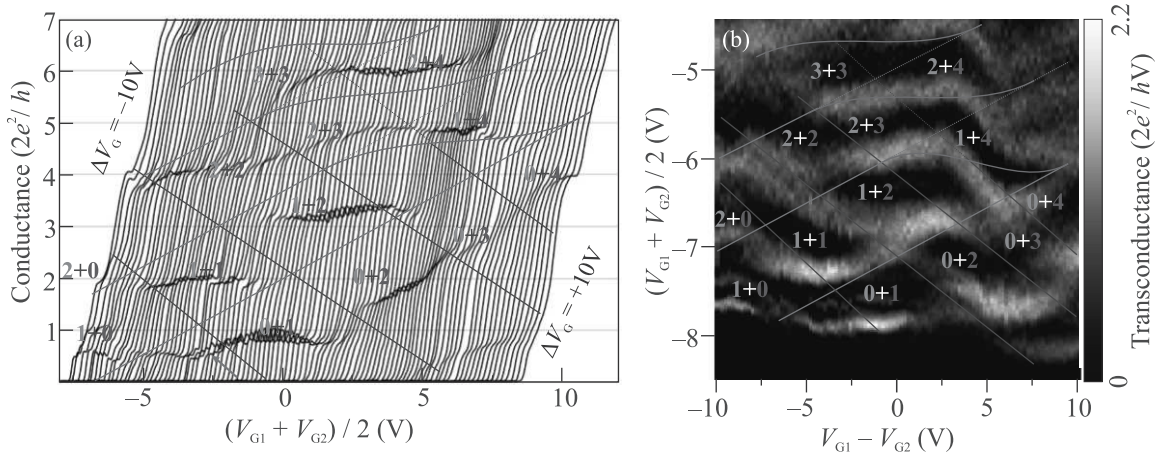


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость кондактанса от суммы затворных напряжений при фиксированной их разности. Крайняя левая кривая соответствует $\Delta V_G = -10$ В, а крайняя правая – $\Delta V_G = +10$ В. Красной стрелкой обозначено полупуцелое плато $0.5 \times 2e^2/h$. (b) – Распределение транскондактанса $\partial G/\partial(V_{G1} + V_{G2})$ как функции суммы и разности затворных напряжений. Темные области отвечают плато кондактанса, а светлые – областям роста кондактанса. Пары целых чисел на графиках соответствуют числу заполненных подзон в двух отдельных каналах, а их суммы – значению кондактанса в единицах $2e^2/h$. Цветные линии разделяют области графиков с плато кондактанса; линии с приблизительно одинаковым наклоном окрашены в один цвет

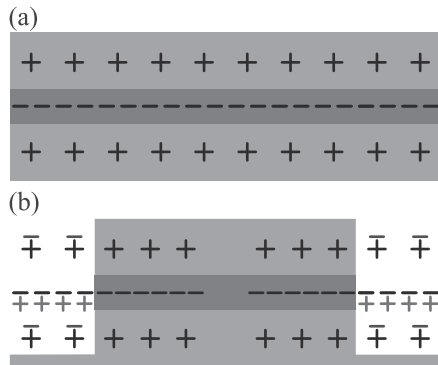


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Однородно распределенный отрицательный заряд в слое ДЭГ (–) и суммарный положительный заряд доноров и X-электронов в легированных δ -слоях (+). (b) – Вытравливание траншей электростатически эквивалентно добавлению нейтральных пар положительных и отрицательных виртуальных зарядов в областях траншей. В сравнении с однородным распределением это эквивалентно появлению дополнительных отрицательных виртуальных зарядов в плоскостях δ -слоев (показаны синим) и дополнительных положительных виртуальных зарядов в плоскости ДЭГ (показаны красным). В отличие от обедняющего воздействия поверхностных зарядов, указанные заряды создают в своих слоях обогащающий потенциал вблизи траншей

Si. Расчеты, проведенные в рамках обеих моделей, как будет показано ниже, приводят к возникновению многоямного потенциала для Γ -электронов ДЭГ.

4.1. Учет перераспределения X-электронов. В данной модели распределение доноров Si в δ -слоях оставалось равномерным и учитывалось взаимодействие Γ - и X-электронов, находящихся в слоях, разнесенных на расстояние $s = 30$ нм друг от друга вдоль оси роста гетероструктуры (рис. 4а). В силу того, что вдоль КТК (направление y) движение считалось свободным, плотность зарядов в этом направлении была принята однородной. Таким образом, все перераспределение происходит в поперечном направлении КТК (направление x), а элемент зарядовой плотности моделировался нитью конечной длины L . Можно ожидать, что учет влияния X-электронов приведет к латеральному перераспределению Γ -электронов в ДЭГ. Распределение положительного заряда доноров (синий цвет) и отрицательного заряда X-электронов (красный цвет) в слоях доноров, а также Γ -электронов (зеленый цвет) в слое ДЭГ схематически изображено на рис. 4б. Для примера показано перераспределение зарядов, соответствующее двухканальному случаю. Целью самосогласованного расчета являлась демонстрация возможности такого перераспределения. В рамках модели электроны распределялись в потенциале, являющемся суммой внешнего ограничивающего потенциала, моделирующего литографические границы КТК и накопленный на них поверхностный заряд, и самосогласованного потенциала, создаваемого электронами:

$$U_{X(\Gamma)} = U_{\text{ext}} + U_{\text{eff}}[\rho_{X(\Gamma)}],$$

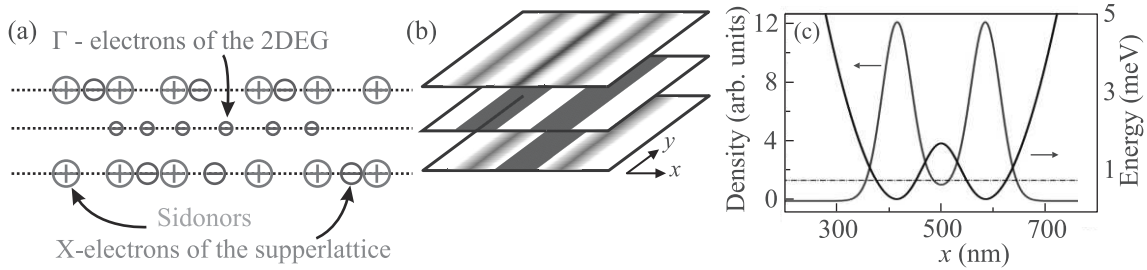


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Изображение присутствующих в гетероструктуре зарядов. (б) – Схематичное представление распределения плотности зарядов. (с) – Вычисленное распределение самосогласованного потенциала (синяя кривая) и плотности электронов в ДЭГ (зеленая кривая). Штрих-пунктирной линией обозначена нижняя подзона размерного квантования для электронов ДЭГ. Расчет выполнен при концентрациях $n_X = 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $n_\Gamma = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, ширине КТК 900 нм и $L = 3 \text{ мкм}$

где индекс $X(\Gamma)$ означает соответствие величины X- или Γ -электронам, а $U_{\text{eff}}[\rho]$ – самосогласованный потенциал, который является функционалом плотности и определяется выражением:

$$U_{\text{eff}}[\rho_{X(\Gamma)}] = e (\varphi_1[\rho_{X(\Gamma)}] + \varphi_2[\rho_{\Gamma(X)}]). \quad (1)$$

Первое слагаемое в выражении (1) обозначает потенциал, создаваемый электронами из того же слоя, в котором проводится расчет, а второе – потенциал электронов из соседнего слоя:

$$\varphi_1[\rho](x) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \times \int \rho(x') \ln \left[\frac{\sqrt{(L/2)^2 + (x-x')^2} + L/2}{\sqrt{(L/2)^2 + (x-x')^2} - L/2} \right] w dx', \quad (2)$$

$$\varphi_2[\rho](x) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \times \int \rho(x') \ln \left[\frac{\sqrt{(L/2)^2 + (x-x')^2 + s^2} + L/2}{\sqrt{(L/2)^2 + (x-x')^2 + s^2} - L/2} \right] w dx', \quad (3)$$

где $w = 13 \text{ нм}$ – ширина квантовой ямы, $1/4\pi\epsilon_0$ – коэффициент пропорциональности в законе Кулона, $\epsilon = 12.88$ – диэлектрическая проницаемость GaAs. Интегрирование в формулах (2)–(3) ведется по всей ширине КТК. Расчет электронной плотности производился методом последовательных приближений. На каждой итерации решалось уравнение Шредингера в слоях X- и Γ -электронов:

$$\hat{H}_{X(\Gamma)}\psi = E\psi, \quad (4)$$

$$\hat{H}_{X(\Gamma)} = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m_{X(\Gamma)}} + U_{X(\Gamma)},$$

где $m_{X(\Gamma)}$ – эффективная масса соответствующих электронов. С помощью волновой функции основного состояния ψ_0 , полученной из решения уравнения (4), вычислялась искомая плотность электронов, находящихся в нижней подзоне:

$$\rho_{X(\Gamma)}(x) = n_{X(\Gamma)} |\psi_0(x)|^2, \quad (5)$$

где $n_{X(\Gamma)}$ – концентрация электронов.

Плотность Γ -электронов $\rho_\Gamma(x)$ и соответствующий ей самосогласованный потенциал, вычисленные при концентрациях $n_X = 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $n_\Gamma = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, ширине КТК 900 нм и $L = 3 \text{ мкм}$, близких к значениям этих величин в эксперименте, показаны на рис. 4с. В результате учета взаимодействия электронов ДЭГ с X-электронами сформировался двухъямный потенциал. Приложение разности напряжений между затворами будет способствовать увеличению глубины одной из ям потенциала, т.е. в ней будет увеличиваться число заполненных подзон, а значит – вклад в кондуктанс от одного канала. Расстояние между ямами потенциала составляет около 200 нм (рис. 4с), что сравнимо с экспериментально определенным расстоянием между каналами.

4.2. Учет перераспределения заряженных доноров Si. Здесь также, согласно описанному выше принципу, элементы заряда моделировались нитями длины L , а создаваемые ими потенциалы описывались формулами (2), (3). Однако, в отличие от предыдущей модели, распределение заряженных доноров теперь не считалось равномерным и рассматривалось влияние их распределения на распределение Γ -электронов в ДЭГ. В ходе охлаждения образца доноры могут перезаряжаться и по достижении низкой температуры реализуется конфигурация их плотности, соответствующая минимуму электростатической энергии системы зарядов. Поскольку рас-

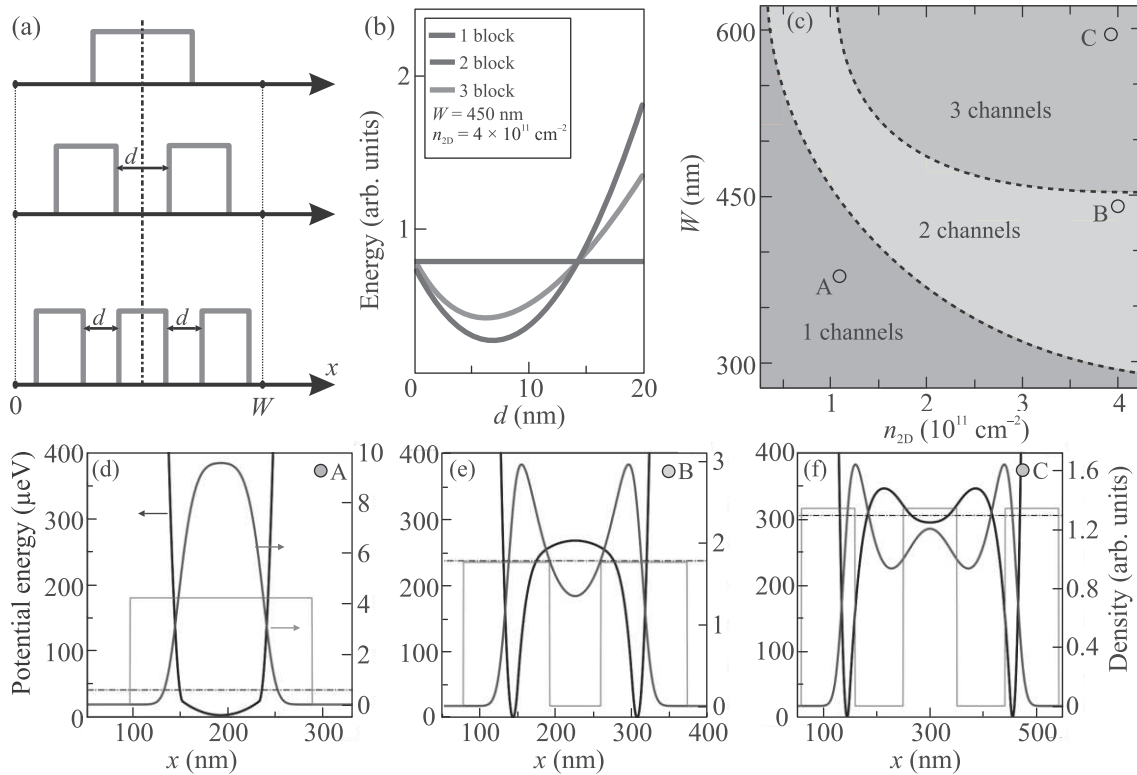


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Исследуемые конфигурации плотности доноров Si. (b) – Зависимость полной электростатической энергии системы от зазора между блоками доноров при ширине КТК $W = 450$ нм и $n_{2D} = 4 \times 10^{11}$ см $^{-2}$. Красная кривая соответствует одному блоку доноров, расположенному посередине КТК, синяя кривая – двум блокам доноров, зеленая кривая – трем блокам доноров. (c) – Фазовая диаграмма состояния электронов, соответствующего минимуму электростатической энергии, в зависимости от W и n_{2D} . (d)–(f) – Распределение самосогласованного потенциала (синяя кривая), электронной плотности (зеленая кривая) и плотностей доноров (голубая кривая) в точках А, В и С фазовой диаграммы соответственно. Штрих-пунктирной линией обозначена нижняя одномерная подзона размерного квантования для электронов

пределение заряженных доноров при низкой температуре почти не меняется (замораживается), их плотность задавалась, как начальное условие расчета и оставалась неизменной. Были исследованы различные конфигурации плотности доноров Si, моделированные ступеньками одинаковой ширины с высотой $2n_d/L$ (далее – блоки), показанные на рис. 5а. Целью расчета было выяснить, как электростатическая энергия меняется в зависимости от величины зазора между блоками доноров d при разных концентрациях зарядов $n_{2D} = n_e = n_d$ и разной ширине КТК W , а также узнать, какая электронная плотность соответствует минимуму электростатической энергии.

Ввиду того, что плотность доноров была зафиксирована, расчет плотности велся лишь для Г-электронов, распределение которых происходило в потенциале:

$$U_e = U_{\text{ext}} + U_{\text{eff}},$$

$$U_{\text{eff}} = e(\varphi_1[\rho_e] - \varphi_2[\rho_d]),$$

где U_{ext} – внешний потенциал, моделирующий литографические границы КТК и содержащийся на них поверхностный заряд, а выражения для потенциалов φ_i ($i = 1, 2$) даются формулами (2)–(3). Электронная плотность получалась с помощью волновой функции основного состояния

$$\rho_e(x) = n_{2D} |\psi_0(x)|^2,$$

вычисленной при решении уравнения Шредингера:

$$\hat{H}_e \psi = E_0 \psi_0,$$

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_e} + U_e.$$

Общая электростатическая энергия вычислялась по формуле:

$$E = e \int_0^W (\rho_e \varphi_1 [\rho_e] + \rho_d \varphi_1 [\rho_d] - \rho_e \varphi_2 [\rho_d] - \rho_d \varphi_2 [\rho_e]) L s dx.$$

Зависимость энергии от величины зазора между блоками доноров d , полученная при концентрации $n_{2D} = 4 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и ширине КТК $W = 450 \text{ нм}$, показана на рис. 5b. В случае одного блока доноров очевидно, учитывая влияние границ КТК, что энергия будет иметь минимальное значение, если доноры будут сосредоточены в середине КТК (это значение обозначено красной линией). Заметно также, что описывающие данную зависимость кривые, соответствующие двум и трем блокам доноров, имеют минимумы. При этом минимум энергии двухблочной конфигурации лежит ниже, чем минимумы трехблочной и одноблочной конфигурации. Профиль электронной и донорной плотности при тех же параметрах, изображенный на рис. 5е, показывает, что в данном случае минимум электростатической энергии соответствует двум каналам.

Минимизация энергии, описанная выше, была проведена для концентрации, меняющейся в пределах $(0.5 - 4) \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, и ширины КТК – в пределах 300–600 нм. Результат расчета представлен в виде фазовой диаграммы (рис. 5с). В различных точках фазовой диаграммы (А, В, С) были построены: распределения электронной и донорной плотности, а также самосогласованный потенциал с уровнем энергии нижней подзоны (рис. 5d–f). Полученные в рамках данной модели результаты качественно описывают смену одноямого потенциала для электронов в ДЭГ на двух- и трехъямный при увеличении их концентрации и ширины КТК. Кроме того, при значениях параметров, близких к экспериментальным, вычисленное расстояние между центрами блоков доноров (рис. 5е) составляет 240 нм, что близко к расстоянию между каналами, полученному экспериментально.

Стоит также отметить, что пики в плотности электронов расположены вблизи центров блоков доноров (рис. 5d–f). В работе [25] было вычислено похожее распределение зарядов в двухслойном графене, имеющее форму полос (одномерной волны зарядовой плотности) в отсутствии границ. Роль траншей в нашем случае сводится к тому, что они фиксируют фазу этой волны, привязывая ее к положению траншей. С этим связана воспроизводимость полученных результатов.

5. Заключение. Экспериментально исследован кондактанс одиночного КТК траншейного типа. Его

зависимость от суммы и разности затворных напряжений демонстрирует наличие в КТК двух проводящих каналов электронов, которые дают независимый вклад в суммарный кондактанс. Проведенные численные модельные расчеты показывают, что в основе эффекта многоканальности может лежать самосогласованное перераспределение электронов в ДЭГ, скоррелированное с распределением X-долинных электронов в сверхрешеточных слоях AlAs/GaAs и положительно заряженных доноров Si в δ -слоях, способствующее уменьшению электростатической энергии. Для более полного количественного сопоставления с экспериментом необходим более детальный расчет, учитывающий выше лежащие подзоны.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект # 22-12-00343 – экспериментальные измерения и численное моделирование) и Министерства науки и высшего образования РФ (проект # FWGW-2022-0011 – характеристика исходных гетероструктур).

1. B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988).
2. D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, L209 (1988).
3. J. Wan, M. Cahay, P. Debray, and R. Newrock, *Phys. Rev. B* **80**, 155440 (2009).
4. P. Debray, S. M. S. Rahman, J. Wan R. Newrock, M. Cahay, A. Ngo, S. Ulloa, S. Herbert, M. Muhammad, and M. Johnson, *Nat. Nanotechnol.* **4**, 759 (2009).
5. D. A. Pokhabov, A. G. Pogosov, E. Yu. Zhdanov, A. A. Shevyrin, A. K. Bakarov, and A. A. Shklyayev, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 082102 (2018).
6. T. Masuda, K. Sekine, K. Nagase, K. S. Wickramasinghe, T. D. Mishima, M. B. Santos, and Y. Hirayama, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 192103 (2018).
7. D. A. Pokhabov, A. G. Pogosov, E. Yu. Zhdanov, A. A. Shevyrin, A. K. Bakarov, and A. A. Shklyayev, *Appl. Phys. Lett.* **115**, 152101 (2019).
8. Д. А. Похабов, А. Г. Погосов, Е. Ю. Жданов, А. К. Бакаров, А. А. Шкляев, *ФТП* **54**, 1344 (2020).
9. D. A. Pokhabov, A. G. Pogosov, E. Yu. Zhdanov, A. K. Bakarov, and A. A. Shklyayev, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 012104 (2021).
10. W. K. Hew, K. J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G. A. C. Jones, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056804 (2009).
11. L. W. Smith, W. K. Hew, K. J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G. A. C. Jones, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **80**, 041306(R) (2009).

12. W. K. Hew, K. J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G. A. C. Jones, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. E* **42**, 1118 (2010).
13. S. Kumar, K. J. Thomas, L. W. Smith, M. Pepper, G. L. Creeth, I. Farrer, D. A. Ritchie, G. Jones, and J. Griffiths, *Phys. Rev. B* **90**, 201304(R) (2014).
14. S. Kumar, M. Pepper, H. Montagu, D. A. Ritchie, I. Farrer, J. Griffiths, and G. Jones, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 124002 (2021).
15. А. В. Чаплик, *Письма в ЖЭТФ* **31**, 275 (1980).
16. J. S. Meyer, K. A. Matveev, and A. I. Larkin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 126404 (2007).
17. J. S. Meyer and K. A. Matveev, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 023203 (2008).
18. I. I. Yakimenko and I. P. Yakimenko, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 105302 (2022).
19. K. J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, R. Klann, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4616 (1996).
20. A. G. Pogosov, A. A. Shevyrin, D. A. Pokhabov, E. Yu. Zhdanov, and S. Kumar, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 263001 (2022).
21. A. G. Pogosov, M. V. Budantsev, E. Yu. Zhdanov, D. A. Pokhabov, A. K. Bakarov, and A. I. Toropov, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 181902 (2012).
22. C. G. Smith, M. Pepper, R. Newbury, H. Ahmed, D. G. Hasko, D. C. Peacock, J. E. F. Frost, D. A. Ritchie, G. A. C. Jones, and G. Hill, *J. Phys. Condens. Matter* **1**, 6763 (1989).
23. P. J. Simpson, D. R. Mace, J. B. Ford, I. Zailer, M. Pepper, D. A. Ritchie, J. E. F. Frost, M. P. Grimshaw, and G. A. C. Jones, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3191 (1993).
24. I. M. Castleton, A. G. Davies, A. R. Hamilton, J. E. F. Frost, M. Y. Simmons, D. A. Ritchie, and M. Pepper, *Physica B Condens. Matter* **249**, 157 (1998).
25. M. Zarenia, D. Neilson, and F. M. Peeters, *Sci. Rep.* **7**, 11510 (2017).

Рентгеновские абсорбционные Co L -спектры для установления зарядовых и спиновых состояний ионов кобальта в кобальтитах $LnBaCo_2O_{5+\delta}$ ($Ln = Eu, Gd, Tb$)

В. Р. Галахов¹⁾, М. С. Удинцева, С. В. Наумов, С. Н. Шамин, Б. А. Гижевский

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 15 июля 2022 г.

После переработки 5 августа 2022 г.

Принята к публикации 6 августа 2022 г.

Рентгеновские абсорбционные Co L -спектры применены для определения зарядовых и спиновых состояний ионов в кобальтитах $LnBaCo_2O_{5+\delta}$ ($Ln = Tb, Eu$ и Gd , $0.08 \leq \delta \leq 0.55$). Показано, что с уменьшением содержания кислорода в кобальтитах (с уменьшением среднего зарядового состояния ионов кобальта) Co L_3 -максимум линейно смещается в сторону малых энергий фотонов. С помощью рентгеновских спектров Co L_3 найдено, что механическое воздействие на $GdBaCo_2O_{5.5}$ (одноосное сжатие и кручение под давлением) приводит к появлению двухвалентных ионов кобальта – фазы CoO. Фаза CoO возникает в образце под давлением даже при отсутствии сдвиговых деформаций. На основании измерений рентгеновских абсорбционных спектров при разных температурах установлено, что при 440 К, что выше точки перехода металл–изолятор, часть низкоспиновых ионов Co^{3+} в октаэдрах кобальтита $EuBaCo_2O_{5.52}$ переходит в высокоспиновое состояние. В $EuBaCo_2O_{5.24}$ изменения спинового состояния с температурой не найдены.

DOI: 10.31857/S1234567822180045, EDN: kfqhrr

Слоистые редкоземельные кобальтиты $LnBaCo_2O_{5+\delta}$ (Ln – редкая земля, $0 \leq \delta \leq 1$) – перспективные материалы для новых катодов твердооксидных топливных элементов благодаря высокому уровню как электронной, так и кислородно-ионной проводимости [1], а также из-за высокой активности кислородной реакции во многих процессах накопления и преобразования энергии [2]. Поэтому необходимо знать устойчивость этих материалов к внешним воздействиям.

Эти материалы интересны также для изучения спиновых состояний ионов кобальта. Во-первых, соединения $LnBaCo_2O_{5+\delta}$ имеют два типа структурных комплексов: октаэдры CoO_6 с ионами Co^{3+} и пирамиды CoO_5 , в которых при $\delta < 0.5$ сосуществуют Co^{3+} - и Co^{2+} -ионы. Во-вторых, в этих кобальтитах имеет место переход металл–изолятор. В-третьих, спиновый переход, связанный с переходом металл–изолятор, происходит при достаточно легко достижимых температурах (например, 360 К для $EuBaCo_2O_{5.5}$ [3, 4]).

Для ионов Co^{3+} в поле лигандов возможны следующие спиновые конфигурации: высокоспиновая (HS, $S = 2$), низкоспиновая (LS, $S = 0$), промежуточно-спиновая (IS, $S = 1$). Переход от одного спинового

состояния к другому достигается за счет изменения температуры, давления или фотовозбуждения. Реализация конкретного спинового состояния зависит от величины и симметрии кристаллического поля.

Спиновое состояние ионов кобальта в октаэдрах и пирамидах кобальтитов выше и ниже точки перехода металл–изолятор является предметом интенсивных дискуссий. Литературные данные об исследовании спиновых состояний ионов Co^{3+} в кобальтитах представлены в наших работах [5, 6]. Основное противоречие относится к проблеме спиновых состояний ионов Co^{3+} в пирамидах. Вывод о промежуточно-спиновом характере ионов Co^{3+} в пирамидах следует из магнитных исследований [3, 7–9]. Однако измерения спектров рентгеновского поглощения и магнитного дихроизма указывают на высокоспиновый характер ионов Co^{3+} в пирамидах [10–12].

Рентгеновские Co $L_{2,3}$ - и O K -спектры поглощения в интервале температур 70–500 К измерены в работах [10, 12, 13]. Ранее мы измерили K -спектры кислорода кобальтитов при комнатной температуре и при 440 К, однако изменений спинового состояния ионов кобальта с температурой не обнаружили [14]. Следует отметить, что спиновый кроссовер происходит плавно в определенном диапазоне температур. Поэтому невозможно зафиксировать точную температуру спиновых переходов, а можно говорить толь-

¹⁾e-mail: galakhov@ifmlrs.uran.ru

ко об изменении числа электронов на ионах кобальта со спиновым состоянием, отличным от исходного.

В данной работе мы рассматриваем следующие вопросы: 1) как зависит энергетическое положение рентгеновской абсорбционной Co L_3 -линии от среднего зарядового состояния (средней валентности) ионов кобальта; 2) как происходит разложение кобальтитов за счет механического воздействия (при деформации кручения под давлением); 3) как изменяются спектры кобальтитов с температурой (происходит ли спиновый кроссовер).

Поликристаллические образцы кобальтитов синтезированы твердофазным методом. Технология синтеза детально описана в нашей работе [14]. Фазовый состав и кристаллическую структуру образцов устанавливали с помощью рентгеновской дифракции при комнатной температуре. Абсолютное содержание кислорода определяли методом восстановления образцов в атмосфере водорода до исходных оксидов (Eu_2O_3 , Tb_2O_3 , Gd_2O_3 , BaO) и металлического кобальта. Погрешность определения содержания кислорода в приготовленных кобальтитах составляла ± 0.02 (например, для кобальтита европия – в соответствии с химической формулой $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52 \pm 0.02}$).

Образец кобальтита $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ был подвергнут интенсивной пластической деформации – одноосному сжатию до давления 7 ГПа, а также кручению под давлением с поворотом наковален, между которыми зажат образец, до 180° . Использован пресс усилием 100 тонн и наковальни из сплава ВК-6. Спектры поглощения для $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$, подвергнутого кручению под давлением на 360° , ранее были опубликованы в работе [15]. В настоящем исследовании акцент будет сделан на анализ спектра кобальтита, подверженного лишь давлению без деформации кручения под давлением.

Рентгеновские абсорбционные $L_{2,3}$ -спектры кобальта измерены на Российско-Германской линии накопительного кольца BESSY-II в режиме полного выхода фотоэлектронов. Интенсивности спектров нормированы на ток электронов в накопительном кольце. Спектры $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$ измерены как при комнатной температуре, так и при 440 К.

Одной из ключевых проблем при изучении кобальтитов является установление содержания в них кислорода, от которого зависит зарядовое состояние (валентность) ионов кобальта. Хотя метод восстановления образцов в водороде предполагает определение погрешности кислорода в химической формуле кобальтитов ± 0.02 , тем не менее существует возможность того, что кислород образует с барием и уг-

леродом новые фазы на поверхности кристаллитов. Кроме того, соотношение других элементов (редкоземельных элементов, кобальта и бария) в кобальтите также может отличаться от ожидаемого из химической формулы. Рассмотрим, как изменение средней валентности влияет на L -спектры кобальта.

На рисунке 1 показаны рентгеновские абсорбционные Co L_3 -спектры некоторых кобальтитов

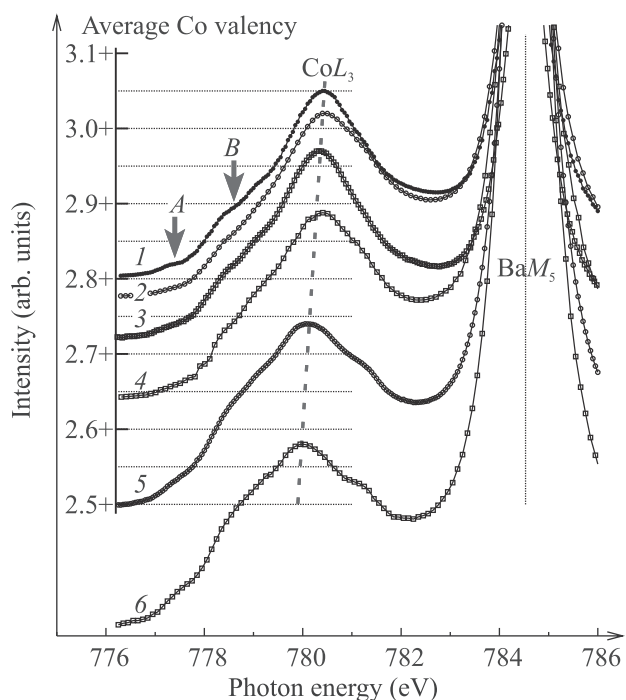


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рентгеновские абсорбционные Co L_3 -спектры некоторых кобальтитов: $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.55}$ (1), $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (2), $\text{TbBaCo}_2\text{O}_{5.47}$ (3), $\text{Tb}_{0.95}\text{Ba}_{1.05}\text{Co}_{1.9}\text{O}_{5.21}$ (4), $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$ (5), $\text{TbBaCo}_2\text{O}_{5.08}$ (6). Спектры нормированы на максимум Co L_3 -линии. По оси ординат отмечены валентности (зарядовые состояния) ионов кобальта. Спектры сдвинуты вдоль оси ординат так, чтобы максимальная интенсивность спектра соответствовала средней валентности ионов кобальта, вычисленной по химической формуле. Наклонная линия проведена через максимумы спектров

$\text{LnBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$. Рентгеновские спектры поглощения Co $L_{2,3}$ возникают вследствие электронного перехода $2p^6 3d^n \rightarrow 2p^5 3d^{n+1}$. Эти спектры определяются кулоновским и обменным взаимодействиями между Co $2p$ -дыркой и Co $3d$ -электронами, а также зависят от величины кристаллического поля. Интенсивный пик при 784.5 эВ – M_5 -линии бария. Ва $M_{4,5}$ -спектры обусловлены процессом $3d^{10} 4f^0 \rightarrow 3d^9 4f^1$. Co $L_{2,3}$ - и Ва $M_{4,5}$ -спектры близки друг к другу по энергии, но не перекрываются. В отличие от

линии кобальта энергетическое положение линии бария практически не меняется. Таким образом, бариевую линию можно использовать в качестве внутреннего энергетического стандарта. По отклонению максимума $\text{Co } L_3$ -спектра от ожидаемого положения для предполагаемой валентности ионов кобальта можно судить о соответствии реального состава кобальтита заявленной химической формуле.

Кобальтиты $\text{LnBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ отличаются содержанием кислорода и, соответственно, средними зарядовыми состояниями (средними валентностями) ионов кобальта. Положение $\text{Co } L_3$ -максимума, коррелирующее с валентностью ионов кобальта, показано наклонной линией. Наличие в кобальтите ионов Co^{2+} (уменьшение средней валентности ионов кобальта) приводит к смещению максимумов спектров в сторону низких энергий, так как при уменьшении валентности понижается энергия связи $\text{Co } 2p$ -электронов, задействованных в спектральном процессе.

Отклонения положения спектральных максимумов от прямой линии можно объяснить отличием элементного состава кобальтита от предполагаемого химической формулой. Возможно, что некоторые ионы кислорода не входят в состав соединения, а образуют примеси на основе бария. Представленная зависимость положения спектральных максимумов от среднего зарядового состояния ионов кобальта может быть использована для выявления отклонения реального состава кобальтита от его химической формулы. В частности, отличие положения максимума спектра от ожидаемого наблюдается для кобальтита $\text{Tb}_{0.95}\text{Ba}_{1.05}\text{Co}_{1.9}\text{O}_{5.21}$, в котором валентность кобальта должна быть несколько выше, чем следует из химической формулы. Таким образом, с уменьшением содержания кислорода в кобальтитах (с уменьшением среднего зарядового состояния ионов кобальта) $\text{Co } L$ -максимум линейно смещается в сторону малых энергий фотонов.

Изменение зарядового состояния ионов кобальта также сопровождается изменением формы спектров. В $\text{Co } L_3$ -спектрах особенность *A* сформирована Co^{2+} -ионами, которые возникают в кобальтите вследствие небольшого дефицита кислорода либо из-за эффекта восстановления трехвалентных ионов кобальта на поверхности [10]. Особенность *B* формируется вкладами ионов $\text{HS-Co}_{\text{oct}}^{3+}$, $\text{HS-Co}_{\text{pyr}}^{3+}$ и $\text{HS-Co}_{\text{oct}}^{2+}$. Эта часть спектра будет использована для выявления ионов $2+$ в кобальтитах, подвергнутых механическому воздействию, и для подтверждения изменения спиновых состояний трехвалентных ионов в октаэдрах под влиянием температуры.

Известно, что при температурах $500\text{--}700^\circ\text{C}$ в атмосфере $\text{CO}_2\text{--O}_2$ орторомбический $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ распадается на тетрагональный $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$, GdCoO_3 , BaCO_3 и Co_3O_4 [16]. Механическое воздействие может быть аналогично тепловому. Интенсивные пластические деформации приводят к частичному разложению кобальтита и появлению менее окисленных фаз в системе Co-O . В случае кручения под давлением появляется фаза CoO [15] и образуются наночастицы размером $50\text{--}70$ нм (по данным рентгеновского дифракционного анализа). При размоле вследствие меньшей степени деформационного воздействия и появления со временем конкурирующего процесса окисления мелких частиц восстановление происходит до фазы Co_3O_4 [17]. Процессы восстановления и окисления оксидов при размоле рассмотрены в работе [18]. На подобные процессы указывают также немонотонное изменение объема элементарной ячейки в манганите $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ с увеличением времени размола [19]. При уменьшении содержания кислорода параметр элементарной ячейки перовскита увеличивается, соответственно, с увеличением содержания кислорода параметр уменьшается, что и было показано в [19].

Остались невыясненными вопросы: (1) возникает ли вторая фаза, если образец находится под давлением при отсутствии вращения наковален; (2) как это отображается на спектрах кобальтитов? Именно механическое воздействие на образцы позволяет проследить отклик $\text{Co } L$ -спектров на появление ионов Co^{2+} . $\text{Co } L_3$ -спектры образца $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ после деформации показаны на рис. 2.

В спектре образца $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ после деформации, характеризуемом углом поворота наковален на 180° , явно проявляются сигналы от CoO (отмечены стрелками). Меньше заметны эти особенности на спектре образца после давления – без вращения. Чтобы выделить спектральные сигналы, от CoO мы вычли спектр исходного образца из спектров образцов после деформации. К сожалению, из-за отсутствия внутреннего стандарта ($\text{Ba } M_5$ -линия сохраняет энергетическое положение, но меняется по интенсивности от образца к образцу за счет неконтролируемого выделения бария на поверхности керамики) вычитание проводили подбором коэффициентов, на которые умножали интенсивности спектров. На рисунке 2 интенсивности спектров взяты в соответствии с подобранными коэффициентами. Данная процедура вычитания позволила получить разностные спектры, хорошо совпадающие со спектром CoO , как для образца под давлением после вращения наковален на 180° , так и при отсутствии вращения. Та-

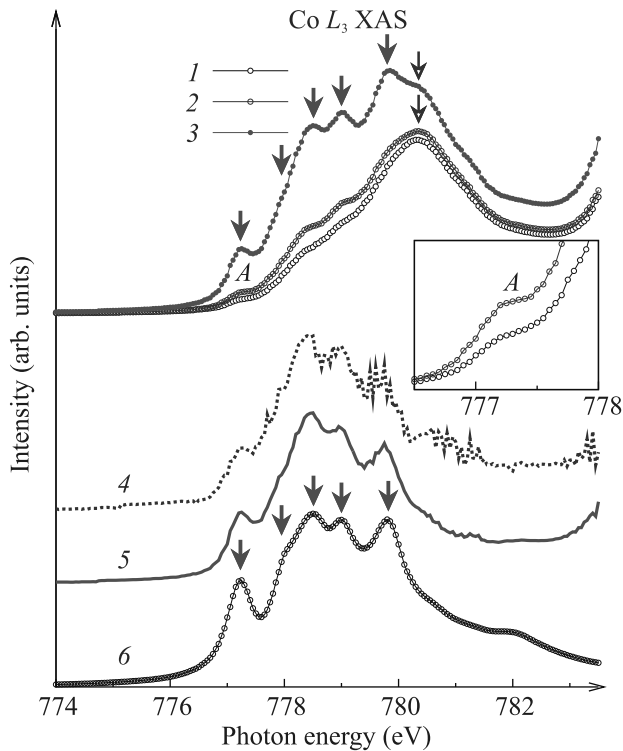


Рис. 2. (Цветной онлайн) Рентгеновские абсорбционные Co L_3 -спектры $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ в исходном состоянии и после деформационного воздействия – под давлением 7 ГПа без вращения и после поворота наковален под давлением на угол 180° . Разностные спектры (4 и 5) получены вычитанием спектра исходного образца (1) из спектров образцов после деформации (соответственно спектры 2 и 3). Показан спектр CoO (6). Для сравнения со спектром CoO разностные спектры 3 и 4 умножены на коэффициенты соответственно 8.0 и 1.4. Заполненные стрелки показывают структурные особенности в спектре CoO . Синие открытые стрелки при энергии около 780.4 эВ относятся к положению максимума спектра кобальтита гадолиния. На вставке для двух образцов кобальтитов $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ (в исходном состоянии и после деформационного воздействия под давлением 7 ГПа без вращения) показаны спектры в увеличенном масштабе в области пика А

ким образом, даже при малой степени деформации под давлением возникает исключительно фаза CoO . Никаких признаков Co_3O_4 после такой обработки образцов в спектре не наблюдается.

На рисунке 3 показаны рентгеновские абсорбционные Co L_3 -спектры $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$, измеренные при комнатной температуре и при 440 К. Как уже отмечено выше, особенность В спектра $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ определяется вкладами ионов Co^{3+} как в октаэдрах, так и в пирамидах, а также ионами Co^{2+} в пирамидах. Повышение температуры при-

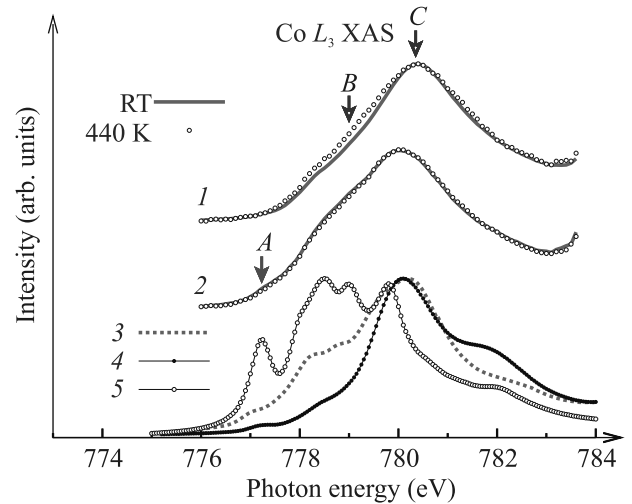


Рис. 3. (Цветной онлайн) Рентгеновские абсорбционные Co L_3 -спектры $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (1), $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$ (2), $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{Cl}$ (3 – высокоспиновые Co^{3+} -ионы в пирамидах), EuCoO_3 (4 – низкоспиновые Co^{3+} -ионы в октаэдрах), CoO (5 – высокоспиновые Co^{2+} -ионы в октаэдрах). Спектры $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$ измерены при комнатной температуре (RT) и при 440 К

водит к увеличению интенсивности особенности В в спектрах $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$. Чтобы исключить вклад ионов Co^{2+} , воспользуемся спектрами деформированных кобальтитов, показанных на рис. 2. Пик А указывает на присутствие в образце ионов Co^{2+} . В Co L_3 -спектре $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ отсутствует особенность А. Это означает, что этот образец не содержит ионов Co^{2+} . Ионы двухвалентного кобальта возникают в $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$: в спектре появляется особенность А. Таким образом, особенность В в спектрах $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ определяется исключительно вкладами ионов Co^{3+} . Используя расчеты зонной структуры, мы обнаружили, что при комнатной температуре в октаэдрах CoO_6 в $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ ионы Co^{3+} находятся в низкоспиновом состоянии, а в пирамидах – в высокоспиновом состоянии [14]. Концентрация пирамид в кобальтитах $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ не меняется с повышением температуры, поэтому увеличение спектральной интенсивности В с ростом температуры следует отнести к появлению высокоспиновых ионов Co^{3+} .

С другой стороны, спектры кобальтитов $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$ не меняются с температурой. Известно, что кобальтиты $\text{LnBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta < 0.45$ находятся в состоянии изолятора и не претерпевают перехода металл–изолятор [20]. Поскольку переход с изменением спина коррелирует с переходом металл–изолятор, отсутствие изменения спина в этом

соединении с повышением температуры в нашем эксперименте подтверждает данное положение. Следовательно, мы можем предположить, что при высоких температурах (440 К) часть низкоспиновых ионов Co^{3+} в октаэдрах $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ превращается в высокоспиновые ионы. Изменения спина при этой температуре в $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$ не обнаружено.

Таким образом в настоящей работе Со L_3 -спектроскопия применена для изучения зарядового и спинового состояний ионов в кобальтатах $\text{LnBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ ($\text{Ln} = \text{Tb}, \text{Eu}$ и Gd). Показано, что с уменьшением содержания кислорода в кобальтатах (с уменьшением среднего зарядового состояния ионов кобальта) Со L -максимум линейно смещается в сторону малых энергий фотонов. С помощью рентгеновских спектров проведен фазовый анализ кобальтита $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$, подвергнутого механическому воздействию – одноосному сжатию и кручению под давлением. Показано, что при этом воздействии в $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ появляются двухвалентные ионы кобальта (фаза CoO). Фаза CoO возникает в образце под давлением даже при отсутствии сдвиговых деформаций. Найдено, что при температуре выше точки перехода металл–изолятор часть низкоспиновых ионов Co^{3+} в октаэдрах $\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ превращается в высокоспиновые ионы. В кобальтите с меньшим содержанием кислорода ($\text{EuBaCo}_2\text{O}_{5.24}$) изменения спинового состояния не обнаружено.

Авторы благодарят д-ров Д. А. Смирнова (Dresden University of Technology, Germany) и А. А. Макарову (Freie Universität Berlin, Germany) за измерение некоторых спектров кобальтитов на BESSY.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (темы “Электрон”, # 122021000039-4 и “Спин”, # 122021000036-3) при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект # 20-02-00461. Измерения рентгеновских спектров выполнены при частичной финансовой поддержке двухсторонней программы “Российско-Германская лаборатория на BESSY”.

1. S. Sengodan, S. Choi, A. Jun, T. H. Shin, Y. W. Ju, H. Y. Jeong, J. Shin, J. T. Irvine, and G. Kim, *Nature Mater.* **14**, 205 (2015).
2. B. Zhao, L. Zhang, D. Zhen, S. Yoo, Y. Ding, D. Chen, Y. Chen, Q. Zhang, B. Doyle, X. Xiong, and M. Liu, *Nat. Commun.* **8**, 14586 (2017).
3. C. Martin, A. Maignan, D. Pelloquin, N. Nguyen, and B. Raveau, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 421 (1997).

4. A. Maignan, C. Martin, D. Pelloquin, N. Nguyen, and B. Raveau, *J. Solid State Chem.* **142**, 247 (1999).
5. S. V. Naumov, V. I. Voronin, I. F. Berger, M. S. Udintseva, V. V. Mesilov, B. A. Gizhevskii, S. V. Telegin, and V. R. Galakhov, *J. Alloys Compd.* **817**, 152775 (2020).
6. В. Р. Галахов, *Физика металлов и металловедение* **122**, 91 (2021) [V. R. Galakhov, *Phys. Met. Metallogr.* **122**, 83 (2021)].
7. V. P. Plakhty, Y. P. Chernenkov, S. N. Barilo, A. Podlesnyak, E. Pomjakushina, E. V. Moskvina, and S. V. Gavrilov, *Phys. Rev. B* **71**, 214407 (2005).
8. Т. И. Арбузова, С. В. Наумов, С. В. Телегин, *Физика твердого тела* **59**, 517 (2017) [T. I. Arbuzova, S. V. Naumov, and S. V. Telegin, *Phys. Solid State* **59**, 532 (2017)].
9. A. Kumari, C. Dhanasekhar, and A. Das, *J. Alloys Compd.* **802**, 409 (2019).
10. M. García-Fernández, V. Scagnoli, U. Staub, A. M. Mulders, M. Janousch, Y. Bodenthin, D. Meister, B. D. Patterson, A. Mirone, Y. Tanaka, T. Nakamura, S. Grenier, Y. Huang, and K. Conder, *Phys. Rev. B* **78**, 054424 (2008).
11. M. Laskioti, E. Goering, S. Gold, G. Schütz, S. N. Barilo, S. V. Shiryayev, G. L. Bychkov, P. Lemmens, V. Hinkov, J. Deisenhofer, and A. Loidl, *New J. Phys.* **10**, 123030 (2008).
12. Z. Hu, H. Wu, T. C. Koethe, S. N. Barilo, S. V. Shiryayev, G. L. Bychkov, C. Schüssler-Langeheine, T. Lorenz, A. Tanaka, H. H. Hsieh, H.-J. Lin, C. T. Chen, N. B. Brookes, S. Agrestini, Y.-Y. Chin, M. Rotter, and L. H. Tjeng, *New J. Phys.* **14**, 123025 (2012).
13. P. Miao, X. Lin, S. Lee, Y. Ishikawa, S. Torii, M. Yonemura, T. Ueno, N. Inami, K. Ono, Y. Wang, and T. Kamiyama, *Phys. Rev. B* **95**, 125123 (2017).
14. М. С. Удинцева, А. В. Ефремов, Д. Смирнов, А. Макарова, С. В. Наумов, С. Н. Шамин, В. Р. Галахов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 546 (2021) [M. S. Udintseva, A. V. Efremov, D. Smirnov, A. Makarova, S. V. Naumov, S. N. Shamin, and V. R. Galakhov, *JETP Lett.* **114**, 475 (2021)].
15. В. В. Месилов, М. С. Удинцева, С. Н. Шамин, С. В. Наумов, С. В. Телегин, Б. А. Гижевский, В. Р. Галахов, *Физика твердого тела* **59**, 810 (2017) [V. V. Mesilov, M. S. Udintseva, S. N. Shamin, S. V. Naumov, S. V. Telegin, B. A. Gizhevskii, and V. R. Galakhov, *Phys. Solid State* **59**, 829 (2017)].
16. A. Tarancón, J. Pena-Martínez, D. Marrero-López, A. Morata, J. C. Ruiz-Morales, and P. Núñez, *Solid State Ionics* **179**, 2372 (2008).
17. V. R. Galakhov, M. S. Udintseva, V. V. Mesilov, B. A. Gizhevskii, S. V. Naumov, S. V. Telegin, and D. A. Smirnov, *Appl. Surf. Sci.* **493**, 1048 (2019).
18. A. Y. Fishman, M. Ivanov, S. Petrova, and R. G. Zakharov, *Diffusion in Solids and Liquids V*,

- Defect and Diffusion Forum*, Trans Tech Publications Ltd, Baech, Switzerland (2010), v. 297, p. 1306.
19. N. Loshkareva, E. Mostovshchikova, A. Korolyov, S. Naumov, B. Gizhevskii, N. Solin, L. Naumova, S. Telegin, and L. Elokhina, *J. Magn. Magn. Mater.* **341**, 49 (2013).
20. A. A. Taskin, A. N. Lavrov, and Y. Ando, *Phys. Rev. B* **71**, 134414 (2005).

Спектр нейтральных возбуждений в Лафлиновской жидкости 1/3

О. А. Григорьев, Л. И. Мусина, А. А. Загитова¹⁾, А. Б. Ваньков, Л. В. Кулик

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 25 июля 2022 г.

После переработки 7 августа 2022 г.

Принята к публикации 8 августа 2022 г.

Развита вычислительная схема для определения энергий нейтральных возбуждений со спином 1 в Лафлиновской жидкости на факторе заполнения 1/3. Вычислены параметры ограничивающего потенциала электронной системы в квантовых ямах GaAs/AlGaAs, а также области магнитных полей, при которых возбуждения со спином 1 окажутся нижайшими по энергии.

DOI: 10.31857/S1234567822180057, EDN: kfzzip

В двумерных электронных системах (ДЭС) могут существовать экзотические частицы, называемые энионами, квантовая статистика которых не является ни бозонной, ни фермионной [1, 2]. Например, было предсказано, что элементарные возбуждения ДЭС в режиме дробного квантового эффекта Холла (ДКЭХ) при факторе заполнения $\nu = 1/m$ (где m – нечетное целое число) подчиняются абелевой дробной статистике с фазой ϕ , связанной с обменом двумя частицами, равной π/m [3, 4]. На сегодняшний день единственной системой, в которой экспериментально наблюдалась энионная статистика частиц, является состояние ДКЭХ при факторе заполнения $\nu = 1/3$ [5, 6]. Следует отметить, что обнаружение дробной статистики произошло в транспортных экспериментах, в то время как квазичастицы в объеме ДЭС, для которых предсказаны нетривиальные статистические свойства, не вносят вклад в проводимость. Поэтому изучение связи между транспортными характеристиками дробных краевых состояний и квазичастиц в объеме ДЭС является отдельной нетривиальной задачей [7, 8]. Существующие представления о нейтральных возбуждениях непосредственно в объеме энионной системы, не активных в транспортных экспериментах, еще более ограничены. Пионерские работы по исследованию микроволнового поглощения в двумерных гетероструктурах с нарушенной трансляционной симметрией И. В. Кукушкина и соавторов [9, 10] качественно подтвердили выводы теоретических предсказаний, полученных в рамках однододового приближения [11, 12], для ряда дробных состояний из Джейновской иерархии ДКЭХ [13, 14]. Однако сделать какие-либо выводы о статистических свойствах магниторотонов из этих экспериментов не

представляется возможным ввиду того, что подобные возбуждения имеют короткие времена жизни [9], что не оставляет возможностей для экспериментальных манипуляций с макроскопическими ансамблями этих возбуждений.

Возможность создания и исследования долгоживущего неравновесного ансамбля нейтральных возбуждений оптическими методами была описана для двумерной электронной системы в режиме целочисленного квантово-холловского изолятора $\nu = 2$ [15]. Несмотря на значительное сходство с равновесным электрон-дырочным состоянием КЭХ $\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$, которое было обнаружено в двухслойных электронных системах [16, 17], неравновесные ансамбли нейтральных возбуждений, обнаруженные на факторе заполнения 2, имеют ряд особенностей, отличающих их от других конденсированных состояний электронной материи [15, 18]. Оказывается, что для формирования макроскопического ансамбля нейтральных возбуждений необходимым условием является требование, чтобы нижайшими по энергии были возбуждения с изменением полного спина электронной системы, неактивные в процессах взаимодействия со светом (темные возбуждения со спином). Формирование таких возбуждений осуществляется релаксационными механизмами в нижайшее возбужденное состояние после закачки в электронную систему энергии посредством разрешенных высокоэнергетических оптических переходов. В таком случае, благодаря большому времени релаксации нижайших по энергии возбуждений, которое связано с необходимостью одновременного изменения спина электронной системы и испускания большого числа фононов с определенными энергиями, удастся сформировать макроскопические неравновесные ансамбли этих возбуждений. На первый взгляд подобный вариант в случае ДЭС при

¹⁾e-mail: zagitova@issp.ac.ru

$\nu = 1/3$ кажется нереализуемым, поскольку в рамках однодогового приближения, доказавшего свою эффективность при описании нейтральных возбуждений с нулевым спином, предсказывается, что единственным возбуждением со спином 1 является спиновый экситон, активный в испускании ЭПР фотона, дисперсия которого аналогична дисперсии спинового экситона в холловском ферромагнетике при $\nu = 1$ [19]. С другой стороны, точное решение уравнения Шредингера для многочастичной электронной системы указывает на то, что в дробном состоянии $\nu = 1/3$ появляются возбуждения со спином 1 и импульсом порядка обратной магнитной длины, которые могут иметь меньшую энергию, чем минимальная энергия магнито-ротона [20]. Данный результат не учитывает вклад в энергию этих возбуждений одночастичной зеемановской энергии, линейно зависящей от магнитного поля. Поэтому вопрос о том, могут ли нейтральные возбуждения с единичным спином иметь меньшую энергию, чем магнито-ротон, по крайней мере для высокоподвижных GaAs/AlGaAs квантовых ям, остается открытым. В данной работе представлены результаты решения уравнения Шре-

дингера для двумерной электронной системы при $\nu = 1/3$ с конечным числом частиц, из которых следует, что, действительно, при определенных параметрах ограничивающего потенциала квантовой ямы AlGaAs/GaAs, нижайшими по энергии оказываются возбуждения с изменением спина электронной системы на 1.

Рассмотрим ДЭС с кулоновским взаимодействием и периодическими граничными условиями в виде прямоугольной ячейки $\Lambda \ni z = \alpha\tau_1 + \beta\tau_2$, $0 \leq \alpha, \beta \leq 1$, где z – комплексная координата, а $\tau_{1,2}$ – вектора ячейки. Пусть магнитное поле B перпендикулярно плоскости ДЭС, и ячейку пронизывает целое число N_s квантов магнитного потока. В такой системе одноэлектронный спектр представляет собой дискретные уровни Ландау $\hbar\omega_C (n + \frac{1}{2})$, где $\omega_C = \frac{eB}{m}$, n – целое число. Кратность вырождения уровня Ландау равна N_s . Для системы из N_e электронов базисные состояния можно определить в результате диагонализации кинетической части гамильтониана $\prod_{j=1}^{N_e} a_{i_j, n_j}^\dagger |0\rangle$. Парное взаимодействие задается выражением

$$\hat{H}_C = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} \sum_{n_1, n_2, n_3, n_4} V_{i_1 i_2 i_3 i_4}^{n_1 n_2 n_3 n_4} a_{\alpha, i_1, n_1}^\dagger a_{\beta, i_2, n_2}^\dagger a_{\beta, i_3, n_3} a_{\alpha, i_4, n_4}, \quad (1)$$

где $a_{\alpha, i_k, n_k}^\dagger$ и a_{α, i_k, n_k} – соответственно операторы рождения и уничтожения k -го электрона со спином α в состоянии ψ_i^n . Здесь n обозначает номер уровня Ландау ($0 \leq n < \infty$), а i – число состояний в пределах уровня Ландау ($1 \leq i \leq N_s$).

Для нахождения энергетического спектра данной системы необходимо вычислить матричные элементы кулоновского потенциала и провести диагонализацию (1). Будем считать, что циклотронная энергия $\hbar\omega_C$ и энергия зеемановского расщепления намного превышают энергию кулоновского взаимодействия электронов $\frac{e^2}{\epsilon l_B}$. Тогда можно пренебречь вкладом верхних уровней Ландау и считать, что все электроны поляризованы по спину. В этом случае для точной диагонализации достаточно учесть конечное число матричных элементов. Для многоэлектронной системы с N_e электронами, занимающими N_s возможных состояний, фоковский базис состоит из $C_{N_s}^{N_e}$ векторов, что делает процесс точной диагонализации даже для простых дробей весьма непростой задачей. Однако используя наблюдение [21] о существовании некоторого оператора, подобного операто-

ру импульса, с квантовыми числами $\text{gcd}(N_e, N_s)$, становится возможным построить более простую схему.

Гамильтониан электрона в постоянном магнитном поле имеет вид $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \frac{e}{c}A)^2$. Одноэлектронное состояние на нижнем уровне Ландау можно представить [22] как

$$\psi(x, y) = f(z) \exp\left(-\frac{y^2}{2l_B^2}\right), \quad z = x + iy. \quad (2)$$

Оператор трансляций в магнитном поле $\hat{t}_m(\tau) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\hat{p} - \frac{e}{c}A) \tau\right)$ удовлетворяет периодическим граничным условиям $\hat{t}_m(\tau_{1,2})\psi = \psi$. В калибровке Ландау $\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \end{pmatrix}$, следовательно, по формуле Кэмпбелла–Хаусдорфа

$$\hat{t}_m(\tau) = \exp\left(\frac{i\tau_x \tau_y}{2l_B^2}\right) \exp\left(\frac{i\tau_y x}{l_B^2}\right) \hat{t}(\tau), \quad (3)$$

$$\hat{t}_m(\tau_1)\hat{t}_m(\tau_2) = \exp\left(\frac{i(\tau_{1x}\tau_{2y} - \tau_{1y}\tau_{2x})}{l_B^2}\right) \hat{t}_m(\tau_2)\hat{t}_m(\tau_1), \quad (4)$$

где $\hat{t}(\tau)$ соответствует переносу на $\tau = \tau_x + i\tau_y$. Чтобы состояние сохранялось при трансляции, $\hat{t}(\tau_1)$ и $\hat{t}(\tau_2)$ должны коммутировать:

$$\tau_{1x}\tau_{2y} - \tau_{1y}\tau_{2x} = 2\pi N_s l_B^2, \quad N_s \in \mathbb{Z}. \quad (5)$$

Применяя (3) к (2) и учитывая, что $\hat{t}_m(\tau_{1,2})\psi = \psi$, получаем следующее условие на f :

$$\frac{f(z + \tau_i)}{f(z)} = \exp\left(-\frac{i(\tau_i + 2z)\tau_{iy}}{2l_B^2}\right). \quad (6)$$

Задавая $\tau_1 \in \mathbb{R}$, $\tau_2 = |\tau_2|e^{i\theta}$ (заметим, что (5) дает $\tau_1|\tau_2|\sin\theta = 2\pi N_s l_B^2$), получаем $\frac{f(z+\tau_1)}{f(z)} = 1$, и, следовательно, представляем f в виде ряда Фурье: $f(z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} c_k \exp\left(i\frac{2\pi k z}{\tau_1}\right)$. Чтобы найти его коэффициенты, подставляем его в (6), что дает

$$c_{k+N_s} = \exp\left(\frac{i\tau_2\pi N_s}{\tau_1}\right) \exp\left(i\frac{2\pi k\tau_2}{\tau_1}\right) c_k. \quad (7)$$

Функция $f(z)$, соответствующая состояниям нижнего уровня Ландау и периодичному граничному усло-

вию, образует линейное пространство размерности N_s , так что

$$f_r(z) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \exp\left(i\frac{m(m|\tau_2|\sin\theta + 2X_r)|\tau_2|e^{i\theta}}{2l_B^2}\right) \times \exp\left(i\frac{(X_r + m|\tau_2|\sin\theta)z}{l_B^2}\right), \quad X_r = \frac{2\pi l_B^2 r}{\tau_1}. \quad (8)$$

Волновые функции нижнего уровня Ландау имеют вид

$$\psi_r(x, y) = \left(\frac{1}{\tau_1\sqrt{\pi}l_B}\right)^{\frac{1}{2}} \times \sum_{m \in \mathbb{Z}} \exp\left(i\frac{(m^2|\tau_2|^2\sin\theta + 2X_r m|\tau_2|\cos\theta)}{2l_B^2}\right) \times \exp\left(i\frac{(X_r + m|\tau_2|\sin\theta)x}{l_B^2}\right) \times \exp\left(-\frac{(y + X_r + m|\tau_2|\sin\theta)^2}{2l_B^2}\right).$$

Аналогично, на n -м уровне Ландау

$$\psi_r^n = \left(\frac{1}{L_1\sqrt{\pi}2^n n! l_B}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{im\left(2\pi j\frac{L_2\cos\theta}{L_1}\right)} e^{i\frac{m^2 L_2^2 \sin 2\theta}{4l_B^2}} \exp\left(i\frac{(X_r + mL_2\sin\theta)x}{l_B^2}\right) \times \exp\left(-\frac{(y + X_r + mL_2\sin\theta)^2}{2l_B^2}\right) H_n\left(\frac{y + X_r + mL_2\sin\theta}{l_B}\right). \quad (9)$$

Наконец, нужно оценить матричные элементы в (1). Пользуясь трансляционной инвариантностью волновых функций, их можно переписать как $A_{j_1 j_2 j_3 j_4}^{n_1 n_2 n_3 n_4} = \int_{\Lambda} dr_1 \int_{\Lambda} dr_2 \psi_{j_1}^{n_1*}(r_1) \psi_{j_2}^{n_2*}(r_2) \tilde{V}(r_1 - r_2) \psi_{j_3}^{n_3}(r_2) \psi_{j_4}^{n_4}(r_1)$, где $\tilde{V}(r) = \sum_{k_1, k_2} \frac{e^2}{|r+k_1\tau_1+k_2\tau_2|}$. Будучи двоякопериодической функцией, она также может быть представлена рядом Фурье $\tilde{V}(z) = \frac{2\pi l_B^2}{\sigma} \sum_{q \in L^{-1}} \frac{e^2}{q} \exp(i(q, r))$, где σ обозначает площадь примитивной ячейки, и $L = \{k_1\tau_1 + k_2\tau_2, k_1, k_2 \in \mathbb{Z}\}$. Суммирование ряда происходит по обратной решетке L^{-1} , $\forall q \in L^{-1}, r \in L(q, r) = 2\pi N, N \in \mathbb{Z}$.

Для учета геометрического ослабления кулоновского взаимодействия в фурье-компоненту кулонов-

ского потенциала был введен геометрический форм-фактор $F(q)$, вычисляемый по профилю огибающей волновой функции электронов в нижней подзоне зоны проводимости в квантовой яме GaAs/AlGaAs:

$$\tilde{V}(z) = \frac{2\pi l_B^2}{\sigma} \sum_{q \in L^{-1}} \frac{e^2 F(q)}{q} \exp(i(q, r)). \quad (10)$$

Подставляя выражения из (9) и (10), получаем

$$A_{j_1 j_2 j_3 j_4}^{n_1 n_2 n_3 n_4} = \frac{2e^2}{\sigma} \sum_{q \in L^{-1}} \frac{F(q)}{q} \mathcal{G}^{n_1, n_4}(q) \mathcal{G}^{n_2 n_3}(-q), \quad (11)$$

где $(L_n^k - \text{обобщенный многочлен Лагерра})$

$$\mathcal{G}^{n_s n_t}(q) = \sqrt{\pi} \exp\left(i\frac{2\pi^2 \cot\theta l_B^2}{\tau_1} \left(j_s - j_t - \frac{q_x \tau_1}{2\pi}\right) \left(j_s + j_t - \frac{q_x \tau_1}{2\pi}\right)\right) \exp\left(iq_y \left(X_{j_s} + \frac{q_x l_B^2}{2}\right)\right) e^{-(\frac{1}{2}lq)^2} \times \sqrt{\frac{\min(n_s, n_t)!}{\max(n_s, n_t)!}} \left(\frac{l(\text{sign}(n_t - n_s)q_x + iq_y)}{\sqrt{2}}\right)^{|n_s - n_t|} L_{\min(n_s, n_t)}^{|n_s - n_t|} \left(\frac{q^2 l^2}{2}\right) \delta'_{\frac{q_x \tau_1}{2\pi} + j_t - j_s}. \quad (12)$$

Функция $F(q)$ вычислялась для реальных параметров экспериментального образца и затем аппроксимировалась выражением $F(q) = \frac{1.5060801}{q+1} - \frac{0.48825941}{(q+1)^2} - 0.02609079$. Моделирование проводилось для ДЭС в GaAs с $\epsilon = 12.5$, $m^* = 0.067m_0$ и $n_e = 8 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$.

Чтобы убедиться в точности нашей вычислительной схемы, в первую очередь мы сравнили аналитический расчет дисперсии спиновых экситонов для холловского ферромагнетика $\nu = 1$ [19] с численным решением уравнения Шредингера для системы из 28, 29 и 30 электронов. На рисунке 1 видно, что оба

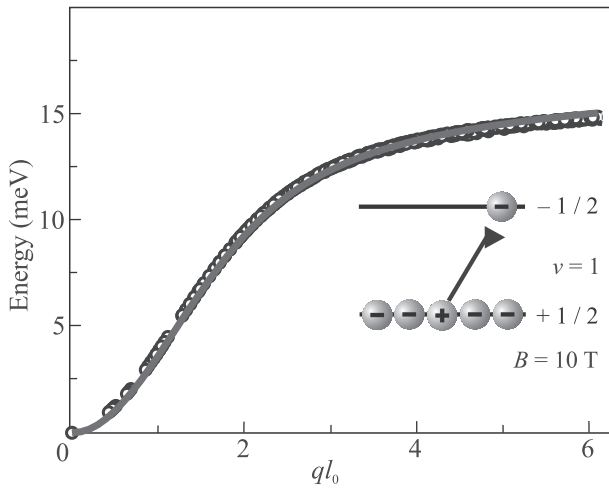


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кружками обозначены данные, полученные при решении уравнения Шредингера для идеальной ДЭС из 28, 29 и 30 электронов во внешнем магнитном поле 10 Тл (одночастичная зеemannовская энергия считается равной нулю, а геометрический форм-фактор равен единице). Сплошной линией показан аналитический расчет по формуле $E_0(q) = \frac{e^2}{\epsilon l_0} \left[\frac{\pi}{2} \right]^{1/2} \left[1 - e^{-q^2 l_0^2 / 4} I_0 \left(\frac{q^2 l_0^2}{4} \right) \right]$ из [19], где I_0 - модифицированная функция Бесселя, l_0 - магнитная длина. На вставке схематично изображен спиновый экситон

результата хорошо согласуются между собой. Следующим шагом в проверке нашей вычислительной схемы является сравнение решения уравнения Шредингера для конечного числа частиц (7, 8 и 9) в дробном состоянии $\nu = 1/3$ с дисперсионной зависимостью магниторотонов, полученной в одномодовом приближении [11, 12]. Видно, что при значениях импульса меньше обратной магнитной длины численные расчеты для магниторотонной ветви совпадают с результатом в одномодовом приближении (рис. 2).

Также в области импульсов около полутора обратных магнитных длин воспроизводится минимум на дисперсионной зависимости магниторотонов, хотя он

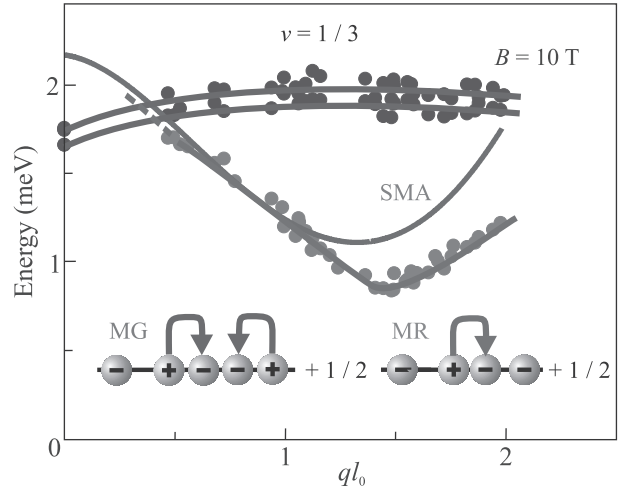


Рис. 2. (Цветной онлайн) Энергии нейтральных возбуждений в дробном состоянии $\nu = 1/3$, вычисленные путем решения уравнения Шредингера для ДЭС с δ -функциональной квантовой ямой GaAs/AlGaAs, состоящей из 7, 8 или 9 электронов, во внешнем магнитном поле 10 Тл. Зеленые точки соответствуют ветви магниторотонов, фиолетовые - двум нижайшим ветвям континуума биротонов. Сплошные и пунктирные линии добавлены для удобства. Сплошная красная кривая - аналитический расчет магниторотонной дисперсии на основе одномодового приближения. На вставках схематически изображены магниторотон (MR) и биротон (MG) с нулевым спином

и оказывается глубже, чем предсказывает одномодовое приближение. Помимо магниторотонной ветви, в дисперсионной зависимости появляется континуум колебаний электронной плотности с полным угловым моментом 2, что согласуется с предположениями, сделанными в работе [23]. Далее будем называть этот тип нейтральных возбуждений магнитограви-тонами в соответствии с теоретической номенклатурой, сложившейся в научной литературе по таким возбуждениям [23–25], или биротонами, что больше соответствует интуитивным представлениям о природе этих возбуждений. Биротоны с нулевым спином вблизи $q = 0$ представляют собой комплексы из двух магниторотонов с противоположно направленными импульсами равной величины [26]. При нулевом импульсе энергия биротона минимальна и равна удвоенной энергии ротонного минимума (без учета взаимодействия между магниторотонами). Остальные двойные комбинации магниторотонов имеют большую энергию, что приводит к положительной дисперсии биротонов.

Центральным результатом наших расчетов является появление ветви возбуждений с меньшей энергией, чем у магниторотонов. Чтобы исследовать при-

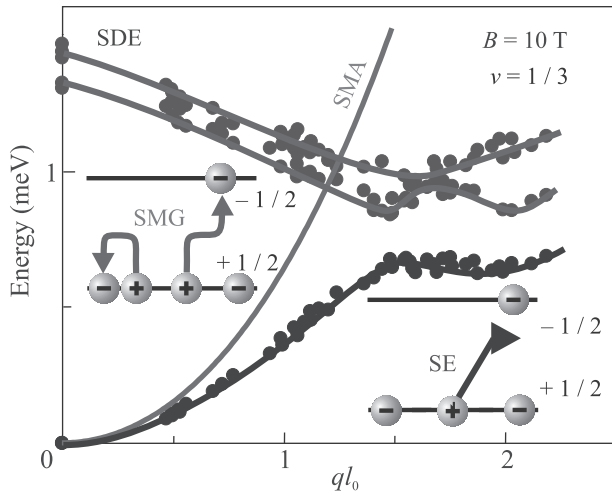


Рис. 3. (Цветной онлайн) Энергии возбуждений со спином 1 в дробном состоянии $\nu = 1/3$, полученные путем решения уравнения Шредингера для ДЭС с δ -функциональной квантовой ямой GaAs/AlGaAs, состоящей из 7, 8 или 9 электронов, во внешнем магнитном поле 10 Тл. Синие точки соответствуют возбуждению спиновых экситонов, фиолетовые точки – двум нижним ветвям континуума биротонов со спином 1. Сплошная красная линия – аналитический расчет дисперсии спиновых экситонов в одномодовом приближении. На вставках схематически изображены спиновый экситон (SE) и спиновый биротон (SMG)

роду этой ветви, рассмотрим дисперсию трех нижайших по энергии возбуждений со спином 1 (рис. 3). Наличие спинового экситона (возбуждения на нулевом уровне Ландау с переворотом спина) согласуется с предсказанием в одномодовом приближении [20]. Однако оказывается, что, помимо этого возбуждения, в спектре присутствуют комбинированные ветви спин-зарядовых возбуждений. Спин-зарядовые ветви соответствуют возбуждениям с одновременными осцилляциями плотности заряда на нижнем спиновом подуровне нулевого уровня Ландау и переворотом спина. Назовем данные возбуждения биротонами со спином 1, поскольку их можно представить как комбинацию магниторотонов с нулевым и единичным спинами. При некотором импульсе энергии ветвей спиновых биротонов и спиновых экситонов пересекаются, что приводит к расталкиванию данных ветвей и образованию локальных минимумов энергии. Соответственно, при импульсах, близких к нулю, спиновая ветвь с наименьшей энергией ведет себя как спин-экситонная, а при импульсах порядка обратной магнитной длины становится спиновой магниторотонной ветвью. При этом в случае δ -функциональной квантовой ямы GaAs/AlGaAs ее энергия оказывается наименьшей

среди всех остальных нейтральных возбуждений в электронной системе.

Для использования полученных результатов в эксперименте необходимо установить, насколько учет геометрического форм-фактора, связанного с нелокальностью электронных волновых функций в направлении роста полупроводниковых гетероструктур с квантовыми ямами GaAs/AlGaAs, ослабляющего кулоновское взаимодействие [27] и одночастичной зеемановской энергии [28], может повлиять на вычисленные энергии возбуждений, и будут ли ветви спиновых возбуждений по-прежнему иметь наименьшую энергию. На рисунке 4 представлены зависимости энергии ротонных минимумов от магнитного поля и ширины квантовой ямы. Оказывается, что ниже некоторого критического магнитного поля энергия ветви возбуждений со спином 1 имеет наименьшее значение. В этом случае комбинация магниторотонов с нулевым и единичным спинами, т.е. биротон со спином 1, будет иметь энергию меньше, чем энергия биротона со спином 0. Таким образом, спиновый экситон с одночастичной зеемановской энергией и спиновый биротон будут нижайшими по энергии нейтральными возбуждениями в электронной системе.

Таким образом, нами представлена расчетная схема для определения дисперсионных зависимостей нейтральных возбуждений в дробном состоянии КЭХ $1/3$. Показано, что при определенных ограничениях, накладываемых на величину магнитного поля (электронную концентрацию) и ширину квантовой ямы GaAs/AlGaAs, можно реализовать экспериментальные условия для формирования макроскопического ансамбля нейтральных возбуждений со спином 1. Существуют две низкоэнергетические ветви спиновых возбуждений при нулевом импульсе (ситуация, наиболее просто реализуемая в эксперименте): спиновый экситон и спиновый биротон (магнитогравитон). Формирование макроскопического ансамбля спиновых экситонов в условиях стационарного оптического возбуждения электронной системы невозможно вследствие слишком короткого времени жизни этих возбуждений [28], в то время как создание макроскопического ансамбля спиновых биротонов (магнитогравитонов) является вполне реализуемой экспериментальной задачей [29].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект # 18-12-00246.

1. J. Leinaas and J. Myrheim, Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. B **37**, 1 (1977).
2. F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **49**, 957 (1982).

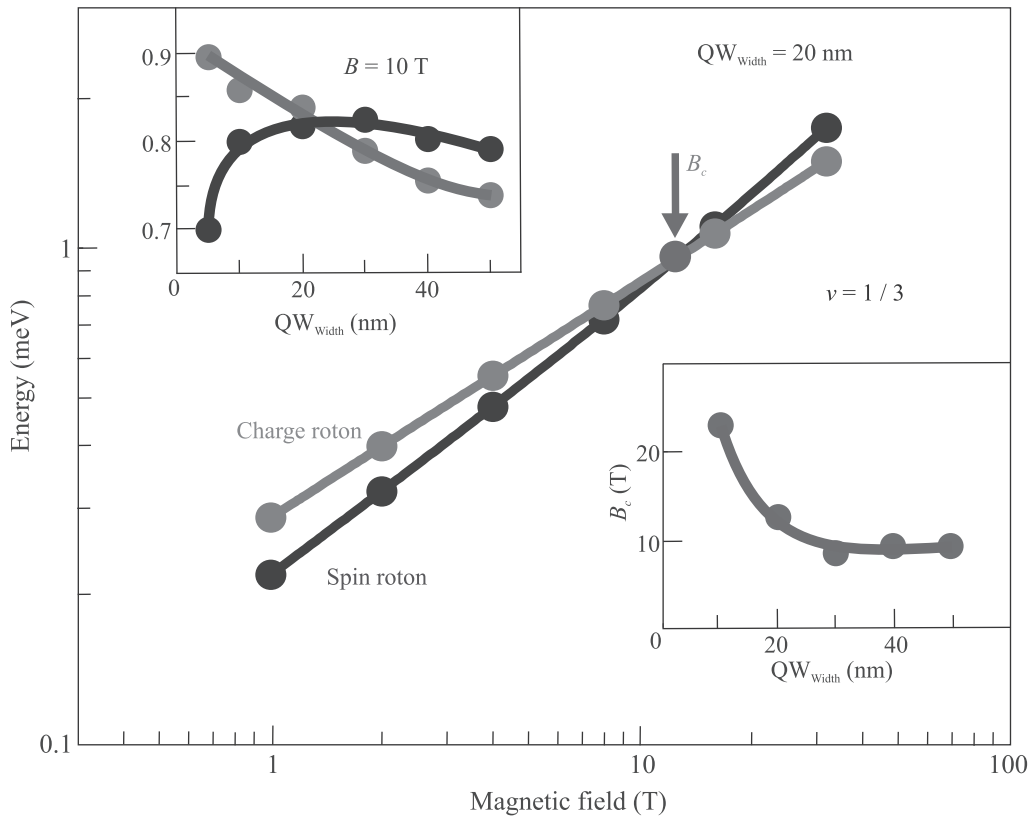


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости энергии ротонных минимумов для биротонных со спином 0 и 1 (зеленые и синие точки соответственно) от магнитного поля для квантовой ямы GaAs/AlGaAs шириной 20 нм, полученные путем решения уравнения Шредингера для ДЭС из 7, 8 или 9 электронов. На верхней вставке показана зависимость энергии ротонных минимумов при 10 Тл в зависимости от ширины квантовой ямы. Значения одночастичной зеемановской энергии для различных ширин ям взяты из [27]. На нижней вставке показана зависимость величины критического магнитного поля, в котором энергии ротонных минимумов для возбуждений со спинами 0 и 1 становятся равными, от ширины квантовой ямы

3. B. I. Halperin, Phys. Rev. Lett. **52**, 1583 (1984).
4. D. Arovas, J. R. Schrieffer, and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **53**, 722 (1984).
5. H. Bartolomei, M. Kumar, R. Bisognin, A. Marguerite, J. M. Berroir, E. Bocquillon, B. Plaças, A. Cavanna, Q. Dong, U. Gennser, Y. Jin, and G. Féve, Science **368**, 173 (2020).
6. J. Nakamura, S. Liang, G. C. Gardner, and M. J. Manfra, Nature Phys. **16**, 931 (2020).
7. X. G. Wen, Mod. Phys. Lett. B **5**, 39 (1991).
8. A. Lerda, *Anyons: Quantum Mechanics of Particles with Fractional Statistics*, Springer-Verlag, Berlin (1992).
9. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, V. W. Scarola, V. Umansky, and K. von Klitzing, Science **324**, 1044 (2009).
10. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Nature **415**, 409 (2002).
11. S. M. Girvin, A. H. MacDonald, and P. M. Platzman, Phys. Rev. Lett. **54**, 581 (1985).
12. S. M. Girvin, A. H. MacDonald, and P. M. Platzman, Phys. Rev. B **33**, 2481 (1986).
13. J. K. Jain, Phys. Rev. B **41**, 7653 (1990).
14. B. I. Halperin, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **47**, 7312 (1993).
15. L. V. Kulik, A. S. Zhuravlev, S. Dickmann, A. V. Gorbunov, V. B. Timofeev, I. V. Kukushkin, and S. Schmult, Nat. Commun. **7**, 13499 (2016).
16. J. P. Eisenstein and A. H. MacDonald, Nature **432**, 691 (2004).
17. Yu. E. Lozovik and V. I. Yudson, ZhETF **71**, 738 (1976) [Sov. Phys. JETP **44**, 389 (1976)].
18. A. B. Горбунов, А. В. Ларионов, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **114**, 479 (2021) [JETP Lett. **114**, 417 (2021)].
19. Y. A. Bychkov, S. V. Iordanskii, and G. M. Eliashberg, JETP Lett. **33**, 143 (1981).
20. J. P. Longo and C. Kallin, Phys. Rev. B **47**, 4429 (1993).
21. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **55**, 2095 (1984).
22. D. Yoshioka, Phys. Rev. B **29**, 6833 (1984).
23. B. Yang, Z. Hu, Z. Papić, and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **108**, 256807 (2012).

24. S. Golkar, D. X. Nguyen, and D. T. Son, *J. High Energy Phys.* **2016**, 21 (2016).
25. A. Gromov and D. T. Son, *Phys. Rev. X* **7**, 041032 (2017).
26. K. Park and J. K. Jain, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5576 (2000).
27. M. J. Snelling, G. P. Flinn, A. S. Plaut, R. T. Harley, A. C. Tropper, R. Eccleston, and C. C. Phillips, *Phys. Rev. B* **44**, 11345 (1991).
28. A. S. Zhuravlev, S. Dickmann, L. V. Kulik, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B* **89**, 161301 (2014).
29. А. С. Журавлев, Л. В. Кулик, Л. И. Мусина, Е. И. Белозеров, А. А. Загитова, И. В. Кукушкин, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 474 (2021).

Магнитные свойства тетраборатов Fe_4VO_7 и Mn_4VO_7 в трех структурных типах

А. С. Шинкоренко¹⁾

Институт физики им. Л. В. Киренского “Федеральный исследовательский центр
“Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН”, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 19 июля 2022 г.

После переработки 12 августа 2022 г.

Принята к публикации 22 августа 2022 г.

Кристаллическая структура и магнитные свойства тетраборатов Fe_4VO_7 и Mn_4VO_7 были изучены в рамках приближения DFT-GGA. Соединения из семейства тетраборатов могут существовать в различных структурных модификациях. Были рассмотрены три из них, а именно: *Pbca* (тип $\alpha\text{-ZnV}_4\text{O}_7$), *Cmcm* (тип $\beta\text{-ZnV}_4\text{O}_7$) и *P6_522* (тип $\gamma\text{-NiV}_4\text{O}_7$). Возможные магнитные упорядочения в данных структурных типах впервые описаны в рамках теоретико-группового анализа. Последующие DFT расчеты позволили впервые описать магнитную структуру Fe_4VO_7 и Mn_4VO_7 в трех структурных типах. При сравнении полной энергии соединений тетраборатов в трех структурных типах без учета спиновой поляризации установлено, что $\alpha\text{-ZnV}_4\text{O}_7$ и $\gamma\text{-NiV}_4\text{O}_7$ структуры обладают наименьшей энергией в Mn_4VO_7 и Fe_4VO_7 соответственно. Показано, что учет магнитной структуры приводит к тому, что $\alpha\text{-ZnV}_4\text{O}_7$ становится наиболее выгодным структурным типом для обоих исследуемых соединений. Исследовано поведение энгалгии под давлением и показано, что при давлении структурный тип $\beta\text{-ZnV}_4\text{O}_7$ является наиболее энергетически выгодным.

DOI: 10.31857/S1234567822180069, EDN: kgclsa

1. Введение. В последнее время возрос интерес к системам с пониженной размерностью и конкурирующими обменными взаимодействиями (низкоразмерные магнетики, фрустрированные магнитные системы). Свойства таких систем существенно отличаются от свойств обычных магнетиков. Одними из таких соединений являются тетрабораты переходных металлов с общей химической формулой $\text{Me}^{+2}\text{V}_4\text{O}_7$, где Me — переходный металл. Данные соединения образуются в нескольких структурных модификациях, с треугольниками VO_3 и/или тетраэдрами VO_4 в качестве структурных единиц [1–7]. В тетраборатах переходных металлов существует два основных структурных типа: так называемые $\alpha\text{-ZnV}_4\text{O}_7$ (пр. гр. *Pbca*) и $\beta\text{-ZnV}_4\text{O}_7$ (пр. гр. *Cmcm*). Кроме того, недавно в [6] была обнаружена новая структурная модификация тетрабората никеля $\gamma\text{-NiV}_4\text{O}_7$ с пространственной группой симметрии *P6_522*.

Магнитные свойства тетраборатов с атомами переходных металлов, таких как железо, марганец, кобальт и никель, в настоящее время изучены недостаточно [2, 5, 6]. В частности, магнитная структура тетраборатов Fe_4VO_7 и Mn_4VO_7 до сих пор не выяснена.

В то же время интерес вызывает возможность возникновения фрустрации обменных взаимодействий и появления низкоразмерного магнетизма в известных структурных типах соединений тетраборатов переходных металлов. Так, например, исследование магнитных свойств тетрабората $\gamma\text{-NiV}_4\text{O}_7$ с пространственной группой симметрии *P6_522* показывает, что это соединение является одномерным гейзенберговским антиферромагнетиком [5]. В [8] показано, что квазиодномерный магнетизм в этой фазе обусловлен магнитным взаимодействием вдоль цепочек октаэдров Me^{+2}O_6 .

В настоящей работе в рамках расчетов *ab initio* рассмотрены три структурные модификации тетраборатов FeV_4O_7 и MnV_4O_7 , а именно, *Pbca* (α -структурный тип), *Cmcm* (β -структурный тип) и *P6_522* (γ -структурный тип). В этих структурных модификациях магнитные атомы образуют необычные структурные мотивы. В работе впервые получена магнитная структура FeV_4O_7 и MnV_4O_7 в исследуемых структурных модификациях, а также изучена возможность их стабилизации под действием давления.

2. Детали расчета. Расчеты проводились с использованием пакета Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [9, 10] с использованием PAW —

¹⁾e-mail: shas@iph.krasn.ru

псевдопотенциалов [11, 12]. Конфигурация валентных электронов для ионов Fe, Mn, V и O была: $3d^7 4s^1$, $3p^6 4s^2$, $3d^6$, $2s^2 2p^1$, $2s^2 2p^4$, соответственно. Обменно-корреляционный функционал учитывался с использованием приближения обобщенного градиента (GGA) [13]. Число плоских волн было ограничено энергией 600 эВ. При оптимизации кристаллических структур сетка Монкхорста–Пака [14] выбиралась таким образом, чтобы плотность k -точек в разных структурных типах была одинаковой. Для этого использовался параметр KSPACING = 0.2, что соответствует сеткам Монкхорста–Пака $4 \times 4 \times 3$, $3 \times 5 \times 6$ и $4 \times 4 \times 1$ для структур с группами симметрии $Pbca$, $Cmct$ и $P6_522$ соответственно. Для каждого структурного типа проводилась полная оптимизация кристаллической структуры. Параметры и координаты атомов оптимизировались до тех пор, пока силы на ионах не достигали величины не более, чем 1 мэВ/А. Теоретико-групповой анализ магнитных структур выполнен в пакете FullProf (BASIREPS) [15] для волнового вектора $\mathbf{k} = 0$.

3. Результаты и обсуждение.

3.1. Кристаллическая структура. На рисунке 1 приведены кристаллические структуры α - (рис. 1а), β - (рис. 1б), γ - (рис. 1с) структурных типов. Кристаллическая структура α -типа с пространственной группой симметрии $Pbca$ содержит восемь формульных единиц ($Z = 8$) и состоит из бор-кислородных тетраэдров и треугольников, образующих разреженную сеть. Магнитные атомы образуют димеры, связанные между собой зигзагообразными цепочками. Структуры β -типа и γ -типа с $Cmct$ ($Z = 4$) и $P6_522$ ($Z = 6$) пространственными группами симметрии соответственно, состоят из бор-кислородных тетраэдров и более плотно упакованы. Магнитные атомы в β -структурном типе образуют слои неправильных сот, расположенных в плоскостях bc вдоль оси a . В структуре γ -типа магнитные атомы также образуют слои в плоскостях ab вдоль оси c , состоящие из правильных шестиугольников.

Рассмотрим вначале неспинполяризованный случай. В таблице 1 приведены параметры решетки и полные энергии относительно самого низкоэнергетического структурного типа для всех рассмотренных структур вместе с известными экспериментальными данными.

Как видно из табл. 1, в неспинполяризованном случае для тетрабората FeV_4O_7 наиболее энергетически выгодным является γ -структурный тип, а для MnV_4O_7 – α -структурный тип. Экспериментально известно, что тетраборат MnV_4O_7 синтезирован в двух стабильных модификациях: в фазе α - MnV_4O_7

при нормальном давлении [4] и β - MnV_4O_7 при давлении $P = 7.5$ ГПа [6]. Однако, как следует из нашего расчета, структурный тип γ - MnV_4O_7 лежит ниже по энергии, чем β - MnV_4O_7 . Что касается тетрабората FeV_4O_7 , то его структурная модификация при нормальном давлении неизвестна, а синтез под давлением $P = 10.5$ ГПа [3] приводит к формированию структурного типа β - FeV_4O_7 . Как видно из табл. 1, структурный тип β - FeV_4O_7 всего на 0.07 эВ выше по энергии, чем γ - FeV_4O_7 . Однако этот расчет был проведен без учета магнитной структуры. В настоящее время неизвестны экспериментально установленные магнитные структуры в соединениях FeV_4O_7 и MnV_4O_7 . Для определения возможных магнитных структур в исследуемых тетраборатах был проведен теоретико-групповой анализ.

3.2. Теоретико-групповой анализ магнитных структур в α -, β - и γ -структурных типах.

а) α -структурный тип. α -структурный тип имеет орторомбическую симметрию с пространственной группой симметрии $Pbca$ (# 61). Для этой группы симметрии существует восемь одномерных неприводимых представлений. Разложение магнитного представления по неприводимым представлениям имеет вид: $\Gamma = 3\tau_1 + 3\tau_2 + 3\tau_3 + 3\tau_4 + 3\tau_5 + 3\tau_6 + 3\tau_7 + 3\tau_8$.

Для каждой компоненты спинового магнитного момента возможны ферромагнитная (ФМ) и семь различных антиферромагнитных (АФМ) конфигураций. В табл. 2 приведены возможные типы АФМ упорядочений на примере z -компоненты спинового магнитного момента. Для оценки возможности реализации того или иного магнитного упорядочения были рассчитаны энергии этих упорядочений (табл. 2). Магнитные моменты для всех типов магнитного упорядочения равны $3.6 \mu_B$ и $4.5 \mu_B$ для тетраборатов FeV_4O_7 и MnV_4O_7 соответственно.

Как видно, различные АФМ конфигурации имеют близкие энергии. Как в α - MnV_4O_7 , так и в α - FeV_4O_7 наименьшую энергию имеет АФМ₅ тип упорядочения (рис. 2). Как видно, в данном случае внутри зигзагообразных цепочек имеет место ФМ упорядочение, а взаимодействия между цепочками антиферромагнитны. ФМ упорядочение является наименее энергетически выгодным для обоих тетраборатов.

б) β -структурный тип. β -структурный тип имеет пространственную группу симметрии $Cmct$ (# 63). Для этой группы симметрии существует восемь одномерных неприводимых представлений. Разложение магнитного представления в неприводимых представлениях выглядит следующим образом: $\Gamma = \tau_2 + \tau_3 + \tau_4 + \tau_5 + \tau_7 + \tau_8$.

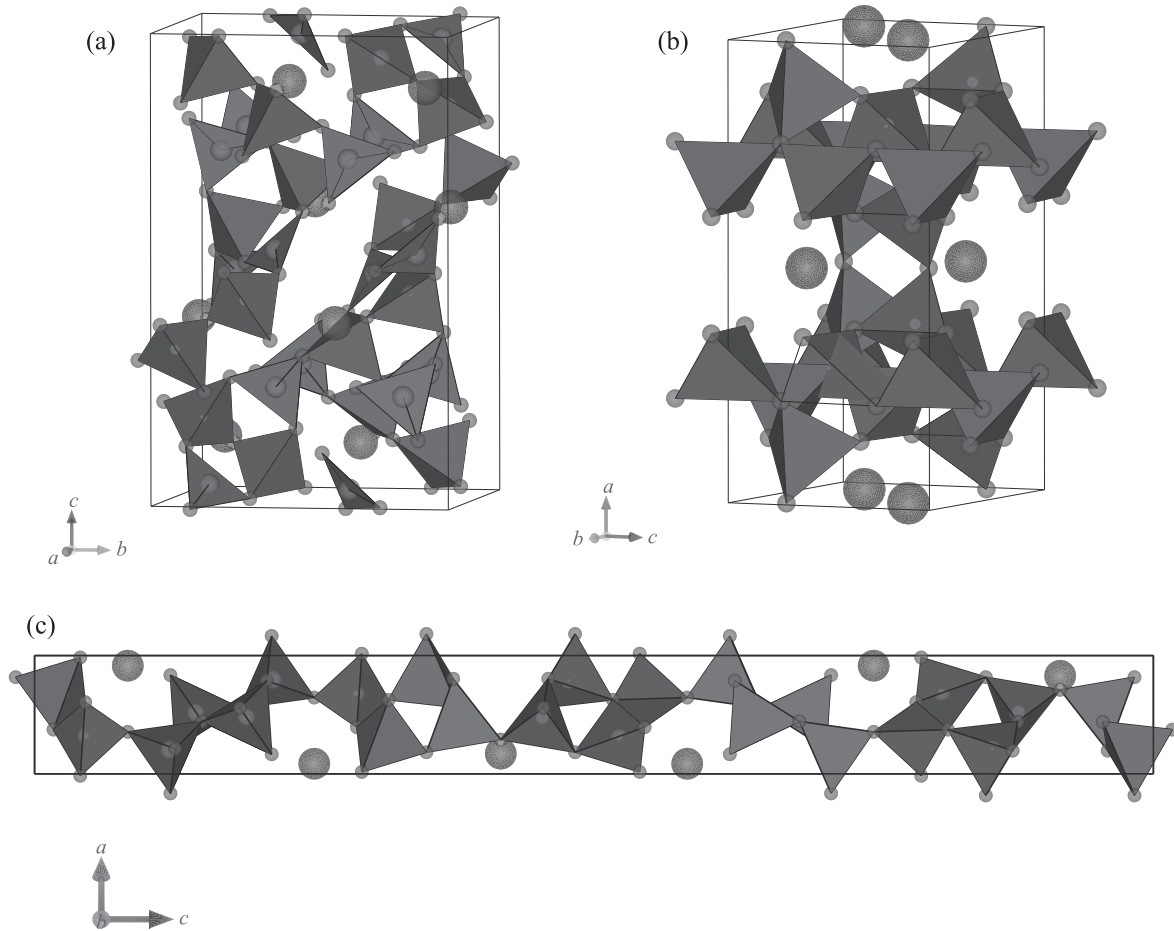


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кристаллическая структура: (a) – α -типа (пр. гр. $Pbca$); (b) – β -типа (пр. гр. $Cmcm$); (c) – γ -типа (пр. гр. $P6_522$)

Таблица 1. Вычисленные параметры решетки (a , b , c) и разность энергий относительно самого низкоэнергетического структурного типа (ΔE) в неспинполяризованном случае. В скобках приведены известные экспериментальные параметры решетки

Структурный тип	Группа симметрии	FeV ₄ O ₇ [3]			
		a , Å	b , Å	c , Å	ΔE , эВ/ф.ед.
α -тип	$Pbca$	13.60	8.08	8.68	0.35
β -тип	$Cmcm$	10.95 (10.88)	6.30 (6.52)	5.23 (5.20)	0.07
γ -тип	$P6_522$	4.34	4.34	35.30	0.00
MnV ₄ O ₇ [4, 6]					
α -тип	$Pbca$	13.77 (14.01)	8.13 (8.07)	8.75 (8.62)	0.00
β -тип	$Cmcm$	10.98 (10.89)	6.39 (6.63)	5.23 (5.19)	0.39
γ -тип	$P6_522$	4.37	4.37	35.55	0.02

В β -структурном типе возможны только коллинеарные ФМ и АФМ упорядочения. Энергии обоих возможных магнитных упорядочений для β -FeV₄O₇ и β -MnV₄O₇ приведены в табл. 3. Магнитные моменты для всех магнитных конфигураций равны $3.6 \mu_B$ и $4.5 \mu_B$ для β -FeV₄O₇ и β -MnV₄O₇ соответственно.

Как видно из табл. 3, в обоих случаях энергетически выгодной является антиферромагнитная структура. На рисунке 3 изображено АФМ упорядочение: в плоскости обмен между магнитными ионами ФМ, а между плоскостями – АФМ. Заметим, что энергии двух магнитных упорядочений в обоих тетраборатах

Таблица 2. Энергии возможных магнитных конфигураций соединений $\alpha\text{-FeV}_4\text{O}_7$ и $\alpha\text{-MnV}_4\text{O}_7$ (ΔE) относительно ФМ упорядочения (полная энергия ФМ состояния для $\alpha\text{-FeV}_4\text{O}_7$ $E = -95.8063$ эВ, для $\alpha\text{-MnV}_4\text{O}_7$ $E = -97.9077$ эВ)

Типы магнитного упорядочения		$\alpha\text{-FeV}_4\text{O}_7$	$\alpha\text{-MnV}_4\text{O}_7$
		ΔE , эВ/ф.ед.	ΔE , эВ/ф.ед.
τ_3 (ФМ)	+++++++	0.0000	0.0000
τ_1 (АФМ ₁)	+ + - - + + - -	-0.0037	-0.0033
τ_2 (АФМ ₂)	+ + - - - + + +	-0.0040	-0.0028
τ_4 (АФМ ₃)	+ + + + - - - -	-0.0032	-0.0031
τ_5 (АФМ ₄)	+ - - + + - - +	-0.0047	-0.0038
τ_6 (АФМ ₅)	+ - - + - + + -	-0.0060	-0.0048
τ_7 (АФМ ₆)	+ - - + - + - +	-0.0023	-0.0020
τ_8 (АФМ ₇)	+ - - - - + + +	-0.0042	-0.0036

Таблица 3. Энергии возможных магнитных упорядочений тетраборатов $\beta\text{-FeV}_4\text{O}_7$ и $\beta\text{-MnV}_4\text{O}_7$ (ΔE) относительно ФМ упорядочения (энергия ФМ состояния для $\beta\text{-FeV}_4\text{O}_7$ $E = -95.0701$ эВ, для $\beta\text{-MnV}_4\text{O}_7$ $E = -97.1917$ эВ)

Типы магнитного упорядочения	$\beta\text{-FeV}_4\text{O}_7$	$\beta\text{-MnV}_4\text{O}_7$
	ΔE , эВ/ф.ед.	ΔE , эВ/ф.ед.
τ_3 (ФМ)	0.0000	0.0000
τ_8 (АФМ)	-0.0055	-0.0058

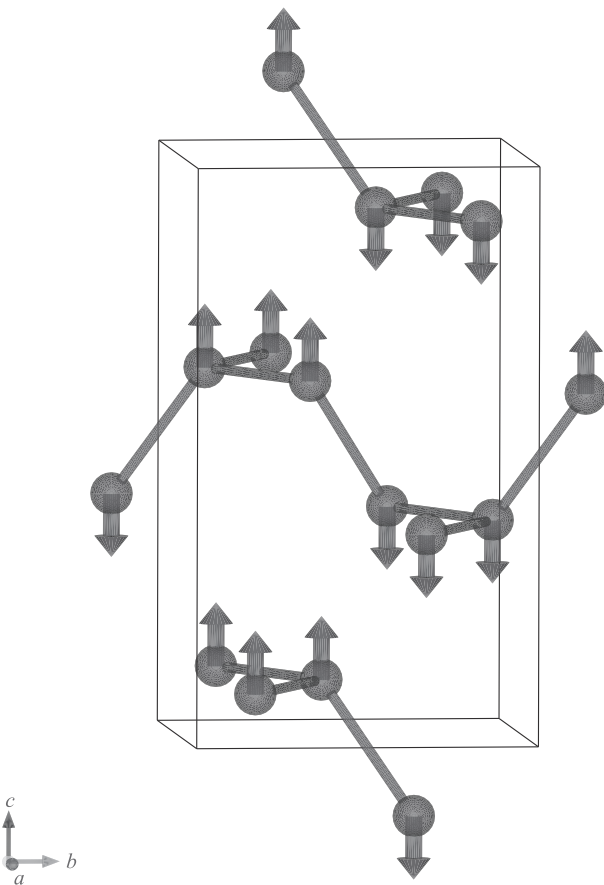


Рис. 2. (Цветной онлайн) Магнитная структура для АФМ₅ типа упорядочения в α -структурном типе (см. табл. 3). Показаны только магнитные атомы

близки, что указывает на возможную фрустрацию магнитных подсистем в них.

в) γ -структурный тип. γ -структурный тип имеет гексагональную симметрию с пространственной группой симметрии $P6_522$ (# 179). Разложение магнитного представления в неприводимых представле-

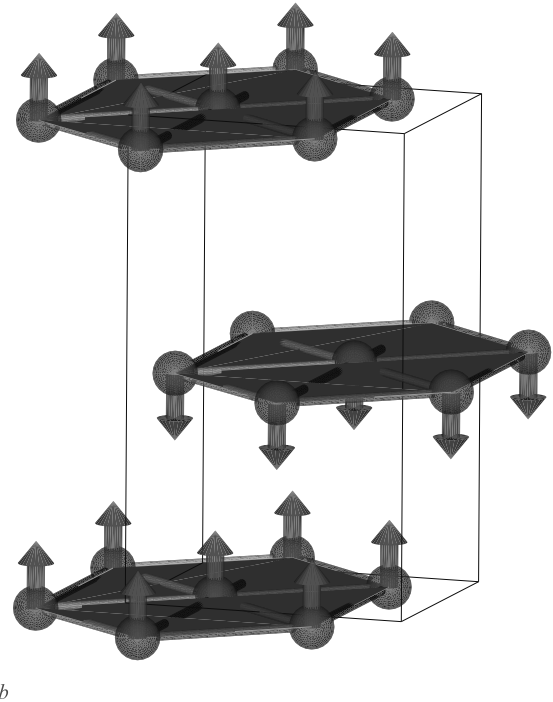


Рис. 3. (Цветной онлайн) АФМ структура для β -структурного типа, показаны только магнитные атомы

ниях выглядит следующим образом: $\Gamma = \tau_1 + 2\tau_2 + 3\tau_3 + 2\tau_4 + \tau_5 + 3\tau_6$.

В γ -структурном типе возможны как коллинеарные, так и неколлинеарные магнитные структуры. Энергии возможных магнитных упорядочений для соединений $\gamma\text{-FeV}_4\text{O}_7$ и $\gamma\text{-MnV}_4\text{O}_7$ приведены в табл. 4. Средние магнитные моменты для всех типов магнитного упорядочения равны $3.6 \mu_B$ и $4.5 \mu_B$ для $\gamma\text{-FeV}_4\text{O}_7$ и $\gamma\text{-MnV}_4\text{O}_7$ соответственно. В тетраборате железа коллинеарное ферромагнитное упорядочение имеет наименьшую энергию. В то же время в тетраборате марганца ситуация более сложная: три неколлинеарные магнитные конфигурации близки по энергии, что также указывает на возможную фрустрацию магнитных подсистем в них.

Таблица 4. Энергии возможных магнитных упорядочений тетраборатов FeV_4O_7 и MnV_4O_7 (ΔE) относительно ФМ упорядочения в структурном типе $\gamma-NiV_4O_7$ (энергия ФМ состояния для FeV_4O_7 $E = -95.1303$ эВ, для MnV_4O_7 $E = -96.9742$ эВ)

Типы магнитного упорядочения	$\gamma-FeV_4O_7$	$\gamma-MnV_4O_7$
	ΔE , эВ/ф.ед	ΔE , эВ/ф.ед
Коллинеарная ФМ (τ_2)	0.0000	0.0000
Коллинеарная АФМ (τ_4)	0.0015	-0.0003
Неколлинеарная АФМ (τ_1)	0.0006	-0.0056
Неколлинеарная АФМ (τ_2)	0.0342	-0.0057
Неколлинеарная АФМ (τ_4)	0.0006	-0.0010
Неколлинеарная АФМ (τ_5)	0.0007	-0.0057

Таким образом, в рамках теоретико-группового анализа и DFT расчетов впервые найдено основное магнитное состояние тетраборатов FeV_4O_7 и MnV_4O_7 . Из сравнения полных энергий видно, что в обоих тетраборатах α -структурный тип имеет более низкую энергию, чем β - и γ -структурные типы. При этом разница энергий между этими структурными типами велика, $\Delta E \sim 0.7$ эВ/ф.ед. (FeV_4O_7) и ~ 0.9 эВ/ф.ед. (MnV_4O_7). Таким образом, учет магнитной структуры приводит к тому, что α -структурный тип становится более выраженным в MnV_4O_7 по сравнению с другими структурными типами, а в $\alpha-FeV_4O_7$ становится наиболее энергетически выгодным структурным типом вместо γ -структурного типа.

3.3. Поведение под давлением. Как следует из предыдущего раздела, γ -структурный тип не является энергетически выгодным для обоих соединений. Однако, как следует из [5], фаза $\gamma-NiV_4O_7$ обладает необычными магнитными свойствами. Исследуемые тетрабораты FeV_4O_7 и MnV_4O_7 имеют изоморфные структуры с тетраборатом NiV_4O_7 , поэтому не исключено, что структурный тип $\gamma-NiV_4O_7$ также может реализовываться в исследуемых соединениях, например, под давлением. Для проверки этого предположения было проведено исследование поведения различных структурных типов под давлением.

Для каждого структурного типа мы использовали тип магнитного упорядочения с наименьшей энергией для каждого соединения (см. табл. 2–4). В табл. 5 приведены параметры решетки для каждого структурного типа.

Как видно из рис. 4, α -структурный тип имеет наименьшую энергию в обоих соединениях при нулевом давлении. Энергии β - и γ -структурных типов выше на ~ 1 эВ/ф.ед. в обоих тетраборатах. Этот результат хорошо согласуется с экспериментальными

данными для тетрабората марганца [4, 6]. Как упоминалось выше, экспериментальная структура для тетрабората железа не известна при нулевом давлении, но наши результаты предсказывают, что для него α -структурный тип также будет фазой с самой низкой энергией. Дальнейшее увеличение давления (4.4 ГПа для тетрабората железа и 4.6 ГПа для тетрабората марганца) приводит к тому, что β -структурный тип становится выгодным по энергии в обоих соединениях, что также согласуется с экспериментом [3, 6]. β -структурный тип остается самой низкоэнергетической фазой и при дальнейшем увеличении давления. Заметим, что γ -структурный тип не становится энергетически выгодным вплоть до давления 8 ГПа. Однако следует отметить, что в тетраборате железа в диапазоне давлений 4–5 ГПа энергии всех трех структурных типов близки и можно предположить возможное появление γ -структурного типа в некоторых интервалах давлений в процессе синтеза. Так, в тетраборате никеля эта фаза появляется экспериментально именно при данном давлении [5].

Выводы. Таким образом, были исследованы структурные и магнитные свойства магнитных тетраборатов MnV_4O_7 и FeV_4O_7 . Были рассмотрены три возможных варианта структур: α - (типа $\alpha-ZnV_4O_7$), β - (типа $\beta-ZnV_4O_7$) и γ - (типа $\gamma-NiV_4O_7$) структурные типы. Поскольку экспериментальные данные о магнитной структуре в тетраборатах MnV_4O_7 и FeV_4O_7 отсутствуют в литературе, для определения возможных магнитных упорядочений и поиска наиболее энергетически выгодной магнитной структуры данных соединений был проведен теоретико-групповой анализ с последующим DFT расчетом. Было получено, что во всех структурных типах тетраборат MnV_4O_7 обладает АФМ упорядочением. Тетраборат FeV_4O_7 в α - и β -структурных типах также обладает АФМ упорядочением, однако в γ -структурном типе ФМ фаза оказывается более энергетически выгодной. Обнаружено, что при нулевом давлении и в отсутствие магнитных взаимодействий $\alpha-MnV_4O_7$ и $\gamma-FeV_4O_7$ фазы имеют самую низкую энергию среди других структурных типов. Учет магнитных взаимодействий приводит к тому, что α -структурный тип становится наиболее выгодным по энергии как для MnV_4O_7 , так и для FeV_4O_7 . Это согласуется с экспериментальными результатами для тетрабората марганца и может служить предсказанием возможной структуры тетрабората железа при нормальном давлении. Приложенное давление в диапазоне 4–5 ГПа приводит к тому, что β -структурный тип становится более энергетически выгодным в обоих случаях. В тетраборате железа

Таблица 5. Вычисленные (спин-поляризованные) и экспериментальные параметры решетки (a , b , c) и разность энергий относительно самого низкоэнергетического структурного типа (ΔE). В скобках приведены экспериментальные параметры решетки

Структурный тип	Группа симметрии	FeB ₄ O ₇ [3]			
		a , Å	b , Å	c , Å	ΔE , эВ/ф.ед.
α -тип	$Pbca$	13.98	8.16	8.73	0
β -тип	$Cmcm$	10.96 (10.88)	6.53 (6.52)	5.25 (5.20)	0.73
γ -тип	$P6_322$	4.33	4.33	35.30	0.67
MnB ₄ O ₇ [4, 6]					
α -тип	$Pbca$	14.12 (14.01)	8.53 (8.07)	8.79 (8.62)	0
β -тип	$Cmcm$	10.95 (10.89)	6.69 (6.63)	5.23 (5.19)	0.72
γ -тип	$P6_322$	4.36	4.36	35.52	0.93

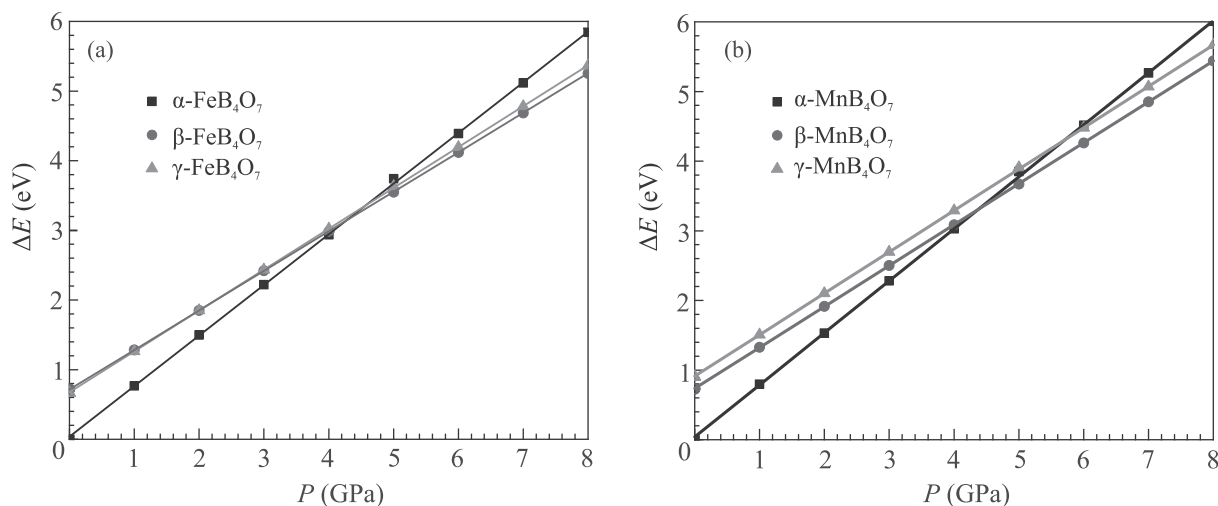


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости энтальпии от давления для различных структурных типов тетраборатов: (a) – FeB₄O₇; (b) – MnB₄O₇. Энергия α -структурного типа при нулевом давлении принята за ноль. Каждая точка на графике соответствует энтальпии кристалла, полученной при приложении гидростатического давления к кристаллу и последующей релаксации

энергии трех структурных типов при давлении 4.2–4.6 ГПа близки, что предполагает возможность существования γ -структурного типа в узком диапазоне давлений. Поскольку экспериментальные данные отсутствуют, существующие теоретические предсказания магнитной структуры тетраборатов могут быть полезны и интересны для будущих экспериментальных работ.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда # 22-22-20024, <https://rscf.ru/project/22-22-20024/>.

Расчеты выполнены с использованием компьютерных ресурсов «Комплексное моделирование и обработка данных научно-исследовательских установок мега-класса НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.urcki.ru>).

1. J. L. C. Rowsell, N. J. Taylor, and L. F. Nazar, *J. Solid State Chem.* **174**, 189 (2003).
2. T. Yang, Y. Wang, D. Yang, G. Lib, and J. Lin, *Solid State Sciences* **19**, 32 (2013).
3. S. C. Neumair, H. Huppertz, J. S. Knyrim, R. Glaum, and H. Huppertz, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **635**, 2002 (2009).
4. S. C. Abrahams, J. L. Bernstein, P. Gibart, M. Robbins, and R. C. Sherwood, *J. Chem. Phys.* **60**, 5 (1974).
5. M. K. Schmitt, O. Janka, O. Niehaus, T. Dresselhaus, R. Pöttgen, F. Pielhofer, R. Wehrich, M. Krzhizhanovskaya, S. Filatov, R. Bubnova, L. Bayarjargal, B. Winkler, R. Glaum, and H. Huppertz, *Inorg. Chem.* **56**, 4217 (2017).

6. J. S. Knyrim, J. Friedrichs, S. Neumair, F. Roeffner, Y. Floredo, S. Jakob, D. Johrendt, R. Glaum, and H. Huppertz, *Solid State Sciences* **10**, 168 (2008).
7. Т. Хамаганова, *Неорганические материалы* **57**(8), 866 (2021) [T. N. Khamaganova, *Inorganic Materials* **57**(8), 824 (2021)].
8. А. С. Шинкоренко, В. И. Зиненко, М. С. Павловский, *ФТТ* **63**(3), 376 (2021) [A. S. Shinkorenko, V. I. Zinenko, and M. S. Pavlovskii, *Physics of the Solid State* **63**(3), 468 (2021)].
9. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
10. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **54**(11), 169 (1996).
11. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **9**, 1758 (1999).
12. P. E. Blochl, *Phys. Rev. B* **50**(17), 953 (1994).
13. J. P. Perdew, in *Electronic Structures of Solids'91*, ed. by P. Ziesche and H. Eschrig, Akademie Verlag, Berlin (1991), p. 11.
14. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
15. J. Rodriguez-Carvajal, *Physica B* **192**, 55 (1993).

Особенности магнитотранспорта в двойной квантовой яме HgTe/CdHgTe с промежуточной степенью инверсии зон

М. В. Якунин¹⁾, В. Я. Алешкин*, С. М. Подгорных⁺, В. Н. Неверов⁺, М. Р. Попов⁺, Н. Н. Михайлов[×],
С. А. Дворецкий[×]

⁺Институт физики металлов Уральского отделения РАН, 620219 Екатеринбург, Россия

*Институт физики микроструктур РАН, 607680 Н. Новгород, Россия

[×]Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 1 августа 2022 г.
После переработки 12 августа 2022 г.
Принята к публикации 12 августа 2022 г.

В двойной квантовой яме, состоящей из двух слоев HgTe толщиной 8.5 нм, разделенных барьером 3 нм, обнаружена ступенеобразная структура холловского магнитосопротивления $\rho_{yx}(B)$ с почти вертикальным ростом вокруг нуля и дальнейшим ходом, близким к h/e^2 . Особенностью зонного спектра данных двойной квантовой ямы является наличие острого максимума в центре зоны Бриллюэна, расположенного близко по энергии к боковому максимуму. Наблюдаемый резкий рост $\rho_{yx}(B)$ вблизи нуля согласуется с исчезающе малой концентрацией легких дырок в этом максимуме, однако выход на почти горизонтальный дальнейший ход не соответствует классическому описанию $\rho_{yx}(B)$ для большой концентрации малоподвижных дырок в боковом максимуме и предполагает квантовые эффекты. Обнаружена высокая чувствительность наблюдаемой структуры $\rho_{yx}(B)$ к воздействиям (перпендикулярное слоям электрическое поле, параллельное магнитное поле), что согласуется с изменением тонкого баланса положений центрального и бокового максимумов. Показано, что это свойство обусловлено наличием в двойной квантовой яме своеобразного дипольного момента, отличающего ее от одиночной ямы с похожими особенностями зонного спектра, поэтому реакция одиночной ямы должна быть несопоставимо слабее.

DOI: 10.31857/S1234567822180070, EDN: kgczue

1. Введение. Двойная квантовая яма (ДКЯ) в гетеросистеме HgTe/CdHgTe – это простейший вариант многослойной структуры, используемой для изготовления ИК-фотодетекторов. Поэтому ДКЯ удобны для исследования определенных свойств многослойных систем, например – межслойных взаимодействий. Для фундаментальной физики ДКЯ в этой системе интересны тем, что в них можно создавать различные неординарные варианты энергетического спектра из-за резкой зависимости взаимного положения уровней размерного квантования разного типа от ширины ямы в сочетании с эффектами туннелирования сквозь барьер. Так, при критической толщине слоев HgTe $d_w = d_c = 6.3 \div 6.5$ нм (когда в одиночной яме такой ширины реализуется дираковский конусообразный спектр) в ДКЯ формируется энергетический спектр, похожий на спектр двухслойного графена, но со своими особенностями [1]. Необычность зонной структуры здесь привела к обнаружению необычной возвратной структуры кван-

тового эффекта Холла (КЭХ) [1, 2]. Было показано, что природа найденных особенностей обусловлена сочетанием следующих факторов: (i) наличие бокового максимума в валентной зоне с присущей ему высокой плотностью состояний дырок, который стабилизирует положение уровня Ферми; (ii) наложение этого максимума на спектр подзоны легких дырок и (iii) существование в КЯ HgTe аномальных уровней Ландау. Последний фактор приводит к существованию особых, топологических, состояний на периметре двумерного слоя [3, 4], интерес к которым весьма велик в последние годы в свете перспектив их использования в спинтронике. Особую привлекательность ДКЯ в этом аспекте создает предполагаемая возможность реализации состояния с “двойной инверсией” топологических фаз [5], что можно связать с состоянием топологического изолятора высокого порядка.

В настоящей работе описаны результаты магнитотранспортных исследований ДКЯ в той же системе, но со слоями HgTe несколько большей толщины: $d_w = 8.5$ нм. В одиночной КЯ при такой ши-

¹⁾e-mail: yakunin@imp.uran.ru

рине имеет место пересечение наинизшего уровня в серии электроноподобных состояний, образованных преимущественно сферическими волновыми функциями s -симметрии, $E1$, со вторым уровнем в серии с преимущественным вкладом функций p -типа тяжелых дырок, $HH2$ (на вставке рис. 1 этому соответ-

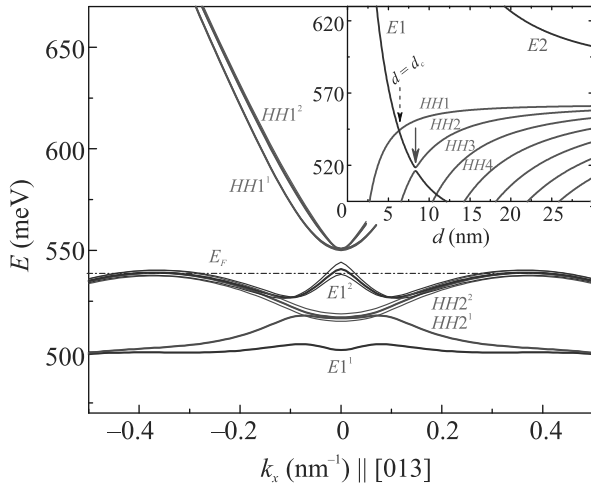


Рис. 1. (Цветной онлайн) Энергетический спектр исследуемой ДКЯ (угроенные кривые – для вариации толщины слоев в пределах погрешностей). На вставке: уровни в одиночной яме, их движение с ростом ширины ямы. В исследуемой ДКЯ ширина слоев HgTe соответствует правой зеленой стрелке. Состояния $E1$ при $k = 0$ в ДКЯ туннельно связаны сильно, расщепляясь на два уровня $E1^1$ и $E1^2$. Состояния $HH2$ практически не связаны, но с ростом k все четыре компоненты волновой функции перемешиваются и ветви $HH2^1$ и $HH2^2$ также расходятся

ствует правая стрелка, а левая – для d_c). Для данной величины d_w спектр и одиночной ямы и ДКЯ имеет инвертированный характер, где зоной проводимости является подзона $HH1$, а валентной – гибридные подзоны $E1$ и $HH2$ (рис. 1; расчеты уровней и спектра выполнены 8-зонным $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ методом [6]).

2. Эксперимент и интерпретация. Квазидвумерные структуры HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te выращены молекулярно-лучевой эпитаксией на подложке GaAs ориентацией (013) поверх нескольких буферных слоев ZnTe и CdTe [2]. Исследовались ДКЯ, вырезанные из одной пластины, в ней слой HgTe толщиной $d_w = 8.5 \pm 0.2$ нм разделены барьером Cd_xHg_{1-x}Te в 3 ± 0.1 нм, центральный и боковые барьеры имеют долю Cd $x = 0.67$. Толщины слоев определялись по ходу роста методом одноволновой эллисометрии, они однородны в пределах указанных погрешностей. Структуры специально не легировались. Из исходной пленочной структуры вытраивались холлов-

ские мостики общим размером 3×1 мм², на один из мостиков нанесен алюминиевый затвор поверх диэлектрического слоя парилена. Представлены результаты измерений продольного и холловского магнитосопротивления (МС), $\rho_{xx}(B)$ и $\rho_{yx}(B)$, при температуре 1.8 К на двух образцах без затвора (образцы **b** и **c**) и одном с затвором (**d**).

В исследуемых ДКЯ при дырочном типе проводимости уровень Ферми E_F жестко привязан к вершинам боковых максимумов (БМ) валентной зоны из-за высокой плотности состояний в них (рис. 1). Уровни Ландау (УЛ) здесь формируют густую сетку со значительным перекрытием уровней [2], поэтому эффекты, связанные с квантованием в перпендикулярном магнитном поле, при проводимости по этим состояниям выражены слабо. На рисунке 2 приведены результаты для образца **b**; здесь кривые

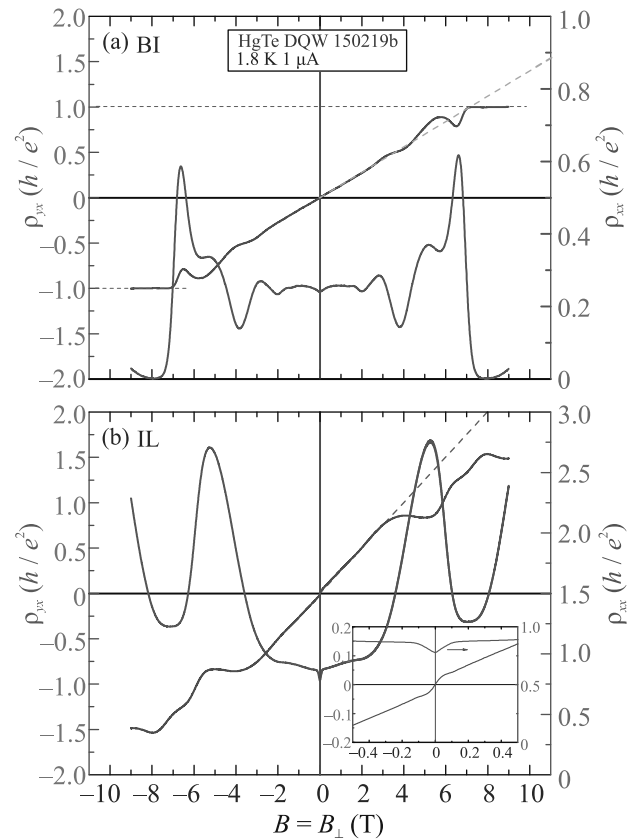


Рис. 2. (Цветной онлайн) МС в образце **b** до (а) и после (б) ИК-подсветки. Вставка на рис. (б) – увеличенная часть вблизи нуля. Она указывает на магнитотранспорт с участием двух типов дырок. Наклонные штриховые прямые соответствуют $p_s = (1.7 \text{ и } 0.96) \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$

МС наиболее близки к традиционной структуре слабо выраженного квантового эффекта Холла (КЭХ). Представлены результаты для образца, охлажденно-

го в темноте (а), и после ИК-подсветки (б). Кривые $\rho_{yx}(B)$ имеют искажения, характерные для КЭХ в валентной зоне с БМ [7]. Наличие хорошо выраженного линейного хода $\rho_{yx}(B)$ в полях умеренной величины позволяет оценить полную концентрацию дырок: $p_s = (1.7 \text{ и } 0.96) \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$ до и после подсветки, соответственно. ИК-подсветка уменьшает концентрацию дырок.

В состоянии после подсветки в $\rho_{xx}(B)$ вблизи нуля имеется острый минимум, похожий на эффект слабой антилокализации. Но наличие изгиба на $\rho_{yx}(B)$ вокруг нуля в том же диапазоне полей указывает скорее на классический магнитотранспорт с участием двух типов дырок, поскольку для интерференционных поправок к проводимости зависимость $\rho_{yx}(B)$ должна оставаться линейной. В рассчитанном спектре (рис. 1) понятна природа этих дырок: это большая концентрация дырок в БМ (p_2) с низкой подвижностью (μ_2) и малая концентрация высокоподвижных дырок (p_1, μ_1) в центральном максимуме (ЦМ) $E1^2$, который при номинальных параметрах ДКЯ оказывается чуть выше БМ, но с учетом погрешностей толщин слоев балансирует на грани заполнения.

Данный вариант мы пытались описать количественно в рамках классических уравнений (рис. 3):

$$\rho_{yx} = \frac{B}{|e|} \frac{(p_1 + p_2)\mu_1^2\mu_2^2 B^2 + (p_1\mu_1^2 + p_2\mu_2^2)}{(p_1 + p_2)^2\mu_1^2\mu_2^2 B^2 + (p_1\mu_1 + p_2\mu_2)^2},$$

$$\rho_{xx} = \frac{1}{|e|} \frac{(p_1\mu_2 + p_2\mu_1)\mu_1\mu_2 B^2 + (p_1\mu_1 + p_2\mu_2)}{(p_1 + p_2)^2\mu_1^2\mu_2^2 B^2 + (p_1\mu_1 + p_2\mu_2)^2}.$$

В результате удается добиться хорошего воспроизведения $\rho_{xx}(B)$, хотя при этом наблюдаются некоторые отклонения от эксперимента для $\rho_{yx}(B)$. Отклонения могут быть связаны со сложной структурой валентной зоны (что можно было бы описать введением третьего типа носителей [7]), некоторого участия электронов из близко расположенной подзоны проводимости, влиянием компоненты проводимости по топологическим состояниям на периметре образца и т.д.

Отметим на первый взгляд противоречивый результат: структура в МС вокруг нулевого поля после подсветки выражена сильнее (так, глубина минимума примерно в 5 раз больше после подсветки, чем до: см. рис. 3), тогда как сама эта структура обусловлена наличием легких дырок, но подсветка приводит к уменьшению концентрации дырок. На самом деле, как это следует из приведенных на рис. 3 полученных значений, эффект обусловлен игрой параметров. Действительно, концентрация легких дырок после подсветки падает на порядок, тяжелых —

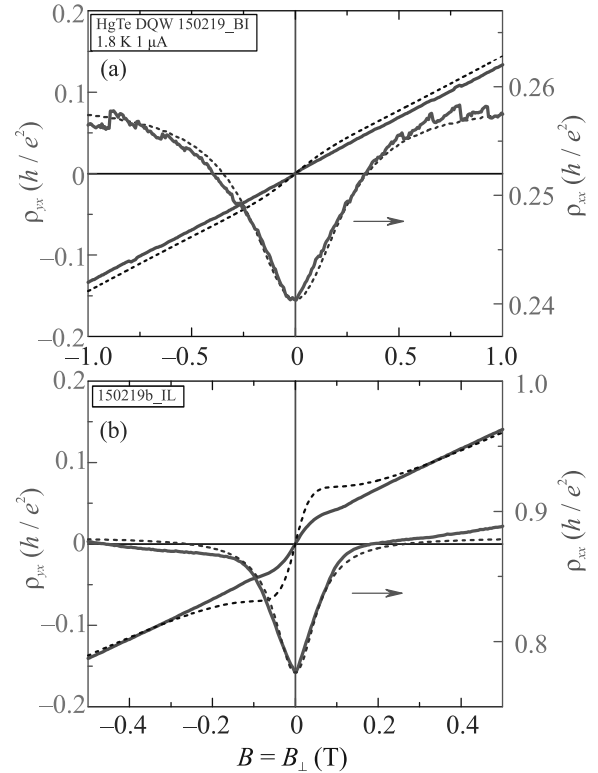


Рис. 3. (Цветной онлайн) Результаты подгонки МС образца **b** до (а) и после подсветки (б) под классический магнитотранспорт с двумя типами дырок (штриховые кривые). Найденные параметры: (а) — p_1 и $p_2 = (0.022 \text{ и } 1.7) \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$, μ_1 и $\mu_2 = (4.2 \text{ и } 0.54) \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$; (б) — p_1 и $p_2 = (0.002 \text{ и } 0.97) \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$, μ_1 и $\mu_2 = (19 \text{ и } 0.28) \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$

в 1.75 раз, но при этом подвижность легких дырок увеличивается в 5 раз (что можно объяснить непараболичностью), а подвижность тяжелых, наоборот, падает (из-за ослабления экранирования при уменьшении общей концентрации).

Неожиданным в настоящих экспериментах оказалось то, что при аналитических указаниях на хорошую однородность слоев в исследуемой пластине (и это подтверждалось в наших предыдущих экспериментах при работе на пластинах из того же источника), в этом случае картины МС с разных образцов из одной пластины существенно различаются. На рисунке 4 представлены результаты на вырезанном из той же пластины образце **c**, полученные в идентичных экспериментальных условиях. График $\rho_{yx}(B)$ здесь абсолютно нетрадиционный, наблюдается ярко выраженная ступенчатая структура с почти вертикальным ростом вокруг нуля. Амплитуда этой ступеньки еще вдвое увеличивается после ИК-подсветки (т.е. после уменьшения полной концентрации дырок), так

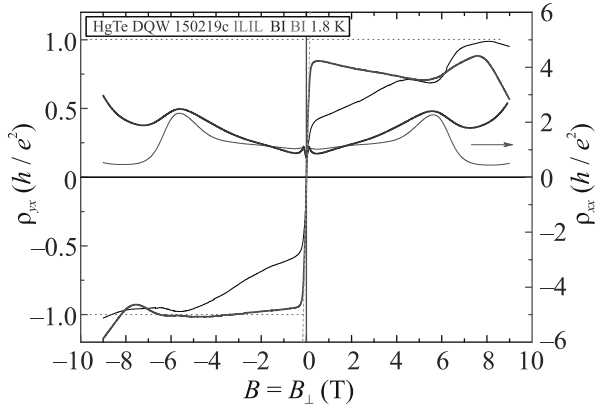


Рис. 4. (Цветной онлайн) МС в образце **c** до (BI) и после (IL) подсветки

что быстрый рост вблизи нуля выводит $\rho_{yx}(B)$ на искаженное плато, положение которого стремится к фундаментальной величине h/e^2 (особенно хорошо это видно при отрицательной полярности поля).

Результат подгонки под МС для этого образца после подсветки для классической модели двух типов дырок представлен на рис. 5. Полная концентрация бралась такая же, как для образца **b** после подсветки.

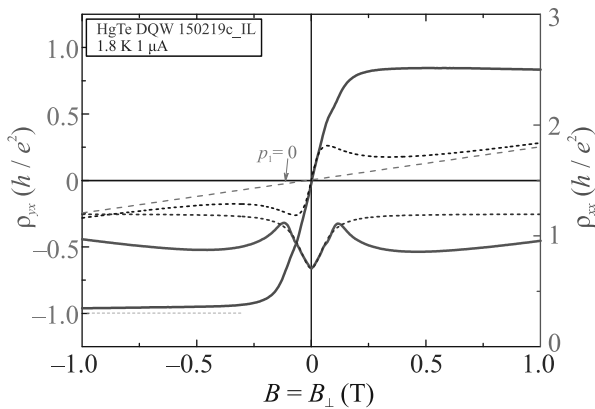


Рис. 5. (Цветной онлайн) МС в слабых полях в образце **c** после подсветки (толстые кривые) и попытка его анализа для классического двухкомпонентного дырочного газа (штриховые кривые). Найденные параметры: (а) – p_1 и $p_2 = (0.0055 \text{ и } 0.96) \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$, μ_1 и $\mu_2 = (26 \text{ и } 0.24) \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$

Эволюцию МС и представленные на рис. 5 отклонения от расчетов можно объяснить следующим образом. В самых слабых магнитных полях классическое описание работает. Но с ростом поля в энергетическом спектре проявляются щели между УЛ, и когда E_F попадает в такую щель, то $\rho_{xx}(B)$ устремляется к нулю, а $\rho_{yx}(B)$ – к выходу на плато КЭХ.

Необычность картины МС здесь в том, что $\rho_{yx}(B)$ сразу стремится к выходу на плато $i = 1$ с самых малых полей. Естественно, в классическом анализе такое поведение не смоделировать. Для сравнения на рис. 5 приведена расчетная прямая $\rho_{yx}(B)$ при отсутствии легких дырок ($p_1 = 0$, зеленая штриховая). Видно, что присутствие легких дырок, несмотря на их мизерную концентрацию, радикально меняет картину МС.

В образце **d** (с затвором) картина МС, так же как в образце **c**, имеет ступенчатый характер $\rho_{yx}(B)$ (рис. 6). В отсутствие напряжения затвора, $V_g = 0$,

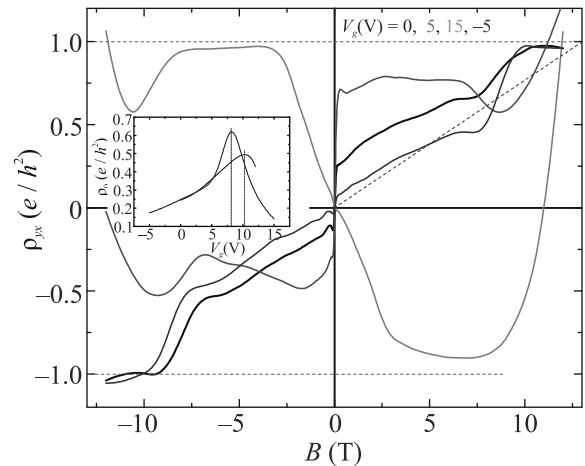


Рис. 6. (Цветной онлайн) МС в образце **d** с применением напряжения затвора V_g (величина отмечена цветом). На вставке: сопротивление в нулевом поле как функция V_g одного образца ДКЯ в разных циклах охлаждения

кривая $\rho_{yx}(B)$ почти точно воспроизводит таковую в неосвещенном образце **c**. При положительном V_g , т.е. с уменьшением полной концентрации дырок, ступенька растет и переходит в структуру в виде искаженного плато, однако при дальнейшем росте V_g плато, не достигнув фундаментальной величины h/e^2 , начинает двигаться вниз из-за того, что уровень Ферми достигает участка картины УЛ, где начинают заполняться электронные уровни [7]. При предельных положительных V_g характер проводимости сменяется на электронный. При отрицательных V_g ступенька вокруг нуля уменьшается, и общий ход кривой $\rho_{yx}(B)$ все больше похож на тот, что в образце **b**.

Отсюда видно, что наблюдаемая специфическая структура МС чувствительна к перпендикулярному электрическому полю F . Роль поля F двояка. Во-первых оно меняет концентрацию носителей (как в полевом транзисторе), вплоть до замены дырок электронами. Но в квазидвумерных структурах, имею-

щих некую протяженность вдоль оси роста z , какими являются ДКЯ, важен и другой фактор воздействия поля F – создание градиента потенциала вдоль z , т.е. перекося потенциального профиля ДКЯ, нарушение ее симметрии.

На рисунке 7а приведен рассчитанный спектр ДКЯ в перпендикулярном слое электрическом по-

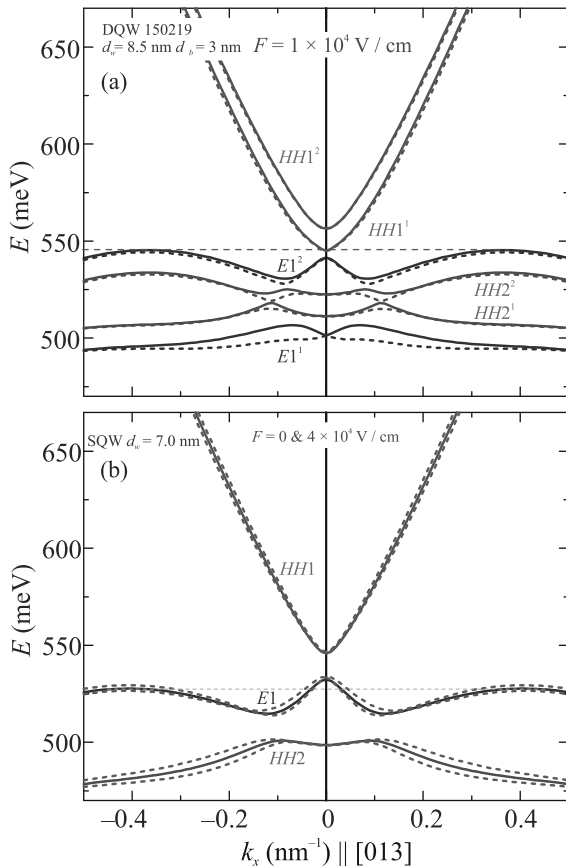


Рис. 7. (Цветной онлайн) (а) – Спектр ДКЯ в перпендикулярном электрическом поле $F = 1 \times 10^4$ В/см. Сплошные и штриховые линии для разных ориентаций спина. (б) – В спектре одиночной квантовой ямы шириной 7 нм также имеется тонкий баланс между ЦМ и БМ. Но поле F на него практически не влияет. Здесь сплошные линии без поля, а штриховые – спектр в поле $F = 4 \times 10^4$ В/см. Изменения проявляются только в виде слабо выраженного эффекта Рашбы – в небольшом расщеплении по спину вследствие перекося ямы

ле пробной величины $F = 1 \times 10^4$ В/см (вполне реальной для нашей структуры). Важное следствие наклона профиля ДКЯ в поле F состоит в том, что центральная часть спектра опускается ниже БМ (сравните с рис. 1), в результате ЦМ опустошается, опускаясь ниже уровня Ферми, дырки из него переходят в БМ. При этом, наоборот, приближается зона проводимости, и могут появиться электроны, даже если бы

полная концентрация носителей в образце не менялась. Таким образом легкие дырки выводятся из игры, а вместо них приходят другие легкие носители – электроны. Также из расчетов видно, что в результате перекося ДКЯ появляется спиновое расщепление (в нулевом магнитном поле) – эффект Рашбы.

Поле F присутствует в образцах и без приложения V_g . На это указывает то, что напряжение зарядовой нейтральности существенно отличается от $V_g = 0$: см. на вставке рис. 6 сильно сдвинутое от нуля положение максимума сопротивления. Более того, это встроенное поле даже может меняться в разных циклах охлаждения одного образца (две кривые на вставке рис. 6). Природа этого поля может быть связана с локальными зарядами на поверхности или гетерограницах, а также с неравномерным распределением заряженных дефектов по глубине структуры [8].

Таким образом, наблюдаемую специфическую структуру картины МС можно связать с наличием ЦМ, расположенного на уровне БМ, притом что баланс между этими максимумами легко (и спонтанно) меняется, приводя к существенному различию структуры кривых МС в разных образцах из одной пластины, и даже к некоторому невоспроизведению их на одном образце в разных циклах охлаждения.

Примечательно, что такой же баланс между ЦМ и БМ можно получить и в одиночной квантовой яме при ее ширине в 7 нм. Но в этом случае влияние поля F на спектр несравнимо слабее, чем в ДКЯ: рис. 7б. Причина в том, что ДКЯ – это своего рода диполь, и абсолютные величины смещения по энергии, накапливающиеся на длине плеча диполя, не сопоставимо больше, чем в пределах одной квантовой ямы.

Энергетический спектр традиционных ДКЯ высокочувствителен к (параллельному) магнитному полю, сориентированному в плоскости слоев, $B_{\parallel} \equiv B_y$: см. работу [9] и ссылки в ней. Связано это с тем, что спектры отдельных слоев ДКЯ в параллельном поле сдвигаются в k -пространстве относительно друг друга на величину $\Delta k_x = eB_y d / \hbar$ (d – эффективное расстояние между центрами слоев ДКЯ). При этом коллективный спектр ДКЯ содержит модификации, обусловленные наличием туннельной щели [10], и МС в параллельном поле может содержать связанные с этим особенности.

Интересно посмотреть, как проявится инвертированный характер спектра слоев HgTe в эволюции спектра ДКЯ с параллельным полем и как это скажется на найденных здесь особенностях МС.

Экспериментально эволюция МС с добавкой компоненты B_{\parallel} была получена в серии вращений образ-

да относительно магнитного поля фиксированной величины, $\rho_{yx,x}(\theta)[B]$ (рис. 8), где θ – угол поля отно-

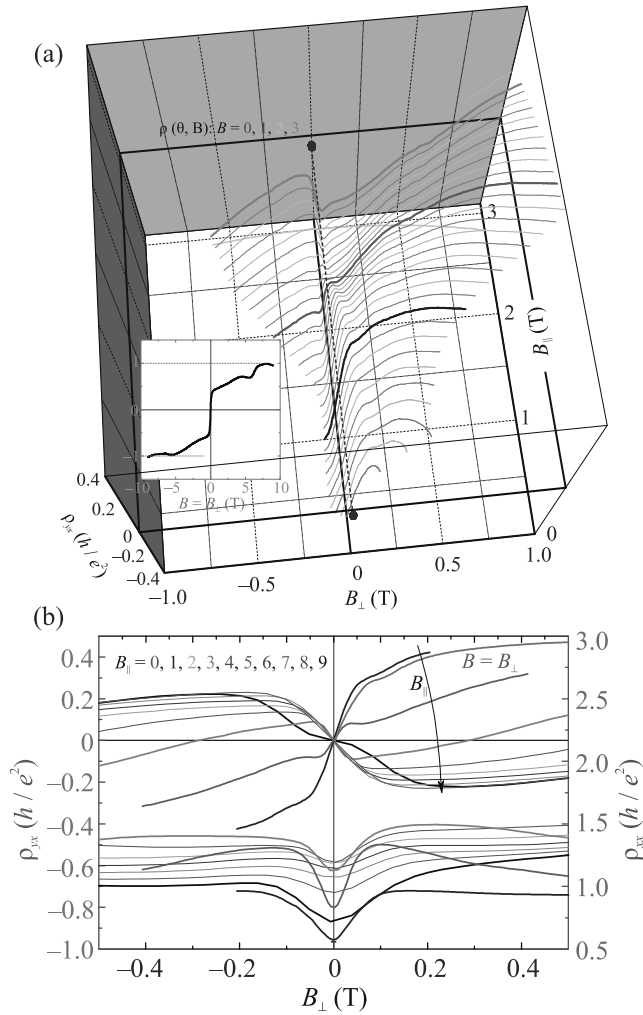


Рис. 8. (Цветной онлайн) Изменение наклона холловского МС $\rho_{yx}(B_{\perp})$ вокруг нуля при добавлении компоненты поля B_{\parallel} , параллельной слоям: (a) – в виде объемного графика со вставкой для чисто перпендикулярного поля в широком диапазоне; (b) – проекции этих кривых, а также $\rho_{xx}(B_{\perp})$, на плоский график в широком диапазоне B_{\parallel}

сительно нормали к слоям образца. В малой окрестности ориентаций поля вдоль слоев, $B_{\perp} \ll B$, параллельную компоненту можно считать постоянной: $B_{\parallel} \approx B$. Главный результат этого эксперимента в том, что резкий положительный рост $\rho_{yx}(B)$ вокруг нуля в чисто перпендикулярном поле с добавлением компоненты B_{\parallel} переворачивается, становится отрицательным. Вероятнее всего это означает, что существовавшая изначально малая концентрация высокоподвижных легких дырок с ростом B_{\parallel} снижается и заменяется на малую концентрацию высокоподвиж-

ных электронов. По этому признаку воздействие параллельного магнитного поля оказалось в некоторой степени аналогично воздействию перпендикулярного электрического.

Расчет спектра ДКЯ в параллельном поле был проведен по аналогии с работой [11], где потенциал одиночной ямы HgTe заменен на потенциал ДКЯ: см. рис. 9а. Как видно из результатов расчета, вли-

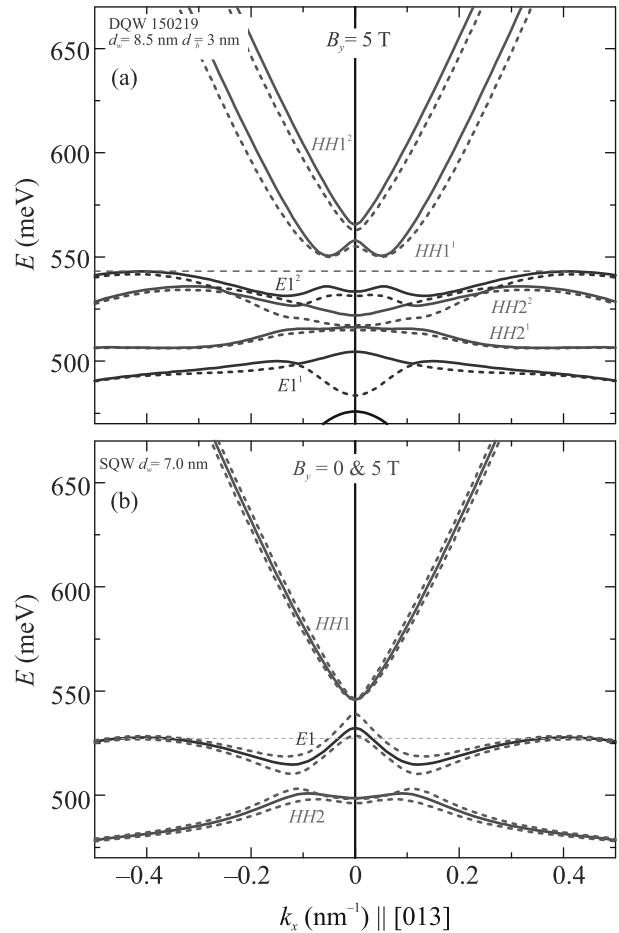


Рис. 9. (Цветной онлайн) (a) – Спектр ДКЯ в параллельном поле 5 Тл. Сплошные и пунктирные – подзоны с разной ориентацией спина. (b) – Воздействие параллельного поля в 5 Тл на спектр одиночной ямы шириной 7 нм. Сплошные – без поля, штриховые – в параллельном поле

яние параллельного поля B_y сводится как к характерному для традиционных ДКЯ сдвигу парабол по k_x – в зоне проводимости, – так и к более сложным трансформациям. Для описанного здесь эксперимента важно то, что центральная структура в валентной подзоне в параллельном поле опускается ниже БМ (сравните с рис. 1), следовательно, изначально присутствовавшие в ЦМ легкие дырки исчезают. При

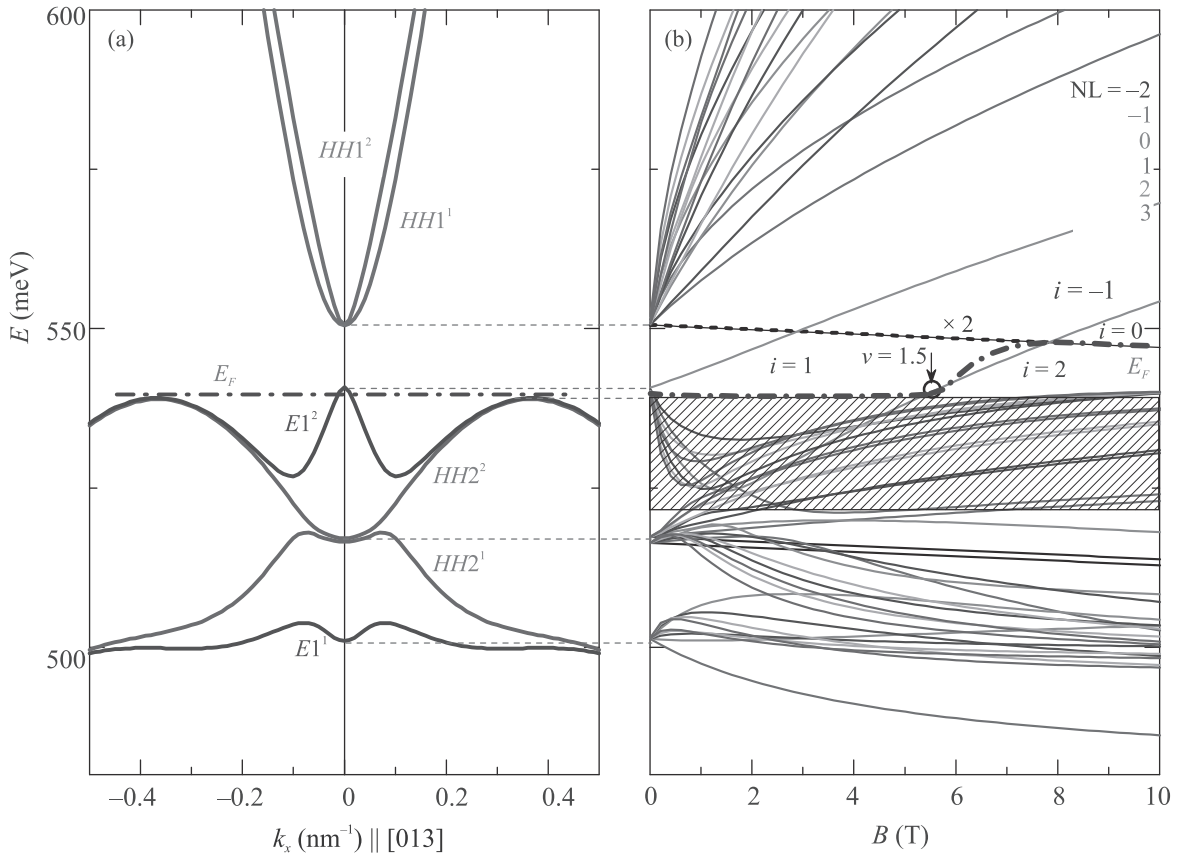


Рис. 10. (Цветной онлайн) Спектр ДКЯ симметричного профиля (а) и результат его квантования в УЛ (б). E_F привязан к вершинам БМ, отсекая острый центральный максимум. Расставленные номера i в щелях спектра УЛ должны соответствовать номерам плато КЭХ, когда E_F проходит через данную щель. Фактор заполнения $\nu = 1.5$ должен соответствовать переходу плато-плато 1–2 и положению соответствующего пика в $\rho_{xx}(B)$. Заштрихованный сектор соответствует всей сетке УЛ, связанной с БМ (если бы расчет шел для бесконечного числа уровней) [2]. Толстая штрихпунктирная кривая – движение уровня Ферми. Толстая штриховая линия, наложенная на сплошную для $NL = -2$ и знак “ $\times 2$ ” – чтобы выделить, что здесь наложено два уровня

этом к БМ (а следовательно, и к уровню Ферми) приближается дно подзоны проводимости и появляются электроны.

Как и при анализе влияния перпендикулярного электрического поля, сравним с воздействием параллельного магнитного поля на одиночную яму шириной 7 нм, у которой изначально слегка заселены легкими дырками ЦМ валентной подзоны: рис. 9б. И в этом случае влияние на спектр одиночной ямы значительно слабее, чем для ДКЯ. Изменения в параллельном магнитном поле сводятся только к спиновым расщеплениям зон, без смещения по энергии их центра тяжести. Поэтому уменьшения концентрации легких дырок в этом варианте не ожидается. Причина более сильного влияния параллельного магнитного поля на ДКЯ, чем на одиночную яму, такая же, как и при анализе перпендикулярного электрического поля – протяженность структуры ДКЯ вдоль

оси z . В ДКЯ воздействие параллельного магнитного поля, в простейшем случае сводящаяся к смещению парабол по k_x , пропорционально расстоянию между ямами. Этого фактора нет в одиночной яме.

3. Обсуждение. Выход $\rho_{yx}(B)$ на плато $i = 1$ в столь слабом магнитном поле ~ 0.2 Тл (рис. 4) выглядит необычно, как некий переключатель фазы. Хотя в некоторой степени похожая ситуация наблюдалась и в ДКЯ со слоями HgTe критической толщины 6.5 нм, только наклон зависимости $\rho_{yx}(B)$ в слабых полях там был много меньше [1, 2]. Мы полагаем, что общую специфику здесь создает та особенность энергетического спектра, что центральный максимум валентной зоны располагается на фоне чуть ниже расположенного БМ с высокой плотностью состояний. При толщине слоя в 6.5 нм привязанный к БМ E_F отсекает от центрального максимума фрагмент высотой 15–20 мэВ, и это соответствует концентрации

легких дырок около $0.4 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$. Данной концентрации было достаточно, чтобы в массиве УЛ легких дырок разрешить серию из нескольких плато, которые и формировали в слабых полях фрагмент традиционной картины КЭХ. В больших магнитных полях электронная система переходила в другой режим, где E_F движется в определенной фиксированной щели в широком интервале полей. В ДКЯ со слоями HgTe в 6.5 нм это была щель $i = 2$, соответственно, наблюдалось аномально широкое плато $i = 2$. В рассматриваемой здесь ДКЯ отсекаемый фрагмент ЦМ значительно меньше и концентрации легких дырок в нем меньше более чем на порядок. В таком варианте E_F проходит весь массив УЛ легких дырок в очень слабых полях, где реализуется только классический эффект Холла.

Особенностью картины УЛ здесь является то, что E_F , выходя из веера легких дырок в очень слабых полях, сразу попадает в щель $i = 1$: рис. 10. Здесь для определения номера щели берется алгебраическая сумма дырочных УЛ выше щели минус электронные УЛ ниже щели. Для реализации состояния КЭХ E_F должен проходить по щели $i = 1$ выше края густой сетки УЛ из БМ, где он движется по локализованным состояниям в хвостах уровней сетки, как это схематически представлено на рис. 11а. Если же в несимметричной ДКЯ или по другим причинам ЦМ находится ниже БМ, то $E_F(B)$ уже с нулевого поля идет по состояниям густой сетки УЛ БМ (рис. 11б), т.е. по густому набору делокализованных состояний, когда проявления КЭХ невозможны, и только в сильных магнитных полях E_F поднимается в щель $i = 1$ [2], в результате в эксперименте появляется соответствующее плато (рис. 2). В рассматриваемой версии именно это различие приводит к полученным качественно разным картинам КЭХ. Хотя, конечно же, все это требует более глубокого теоретического анализа и не исключено, что специфика геликоидальных токов на периметре образцов, связанных с высокоподвижными дырками из ЦМ валентной подзоны, вносит свой дополнительный вклад в формирование картины КЭХ.

Для количественных оценок учтем, что в образцах ДКЯ со слоями HgTe толщиной 6.5 нм переход в квантовые поля, где начинаются осцилляции Шубникова–де Гааза и изгибы на $\rho_{yx}(B)$, имел место с полями 0.17 Тл [1, 2]. В исследуемом здесь образце перегиб зависимости $\rho_{yx}(B)$ находится в сопоставимых полях 0.2–0.3 Тл, значит УЛ здесь уже достаточно разрешены для проявления квантовых эффектов, что дает аргументы в пользу нашей интерпретации эксперимента.

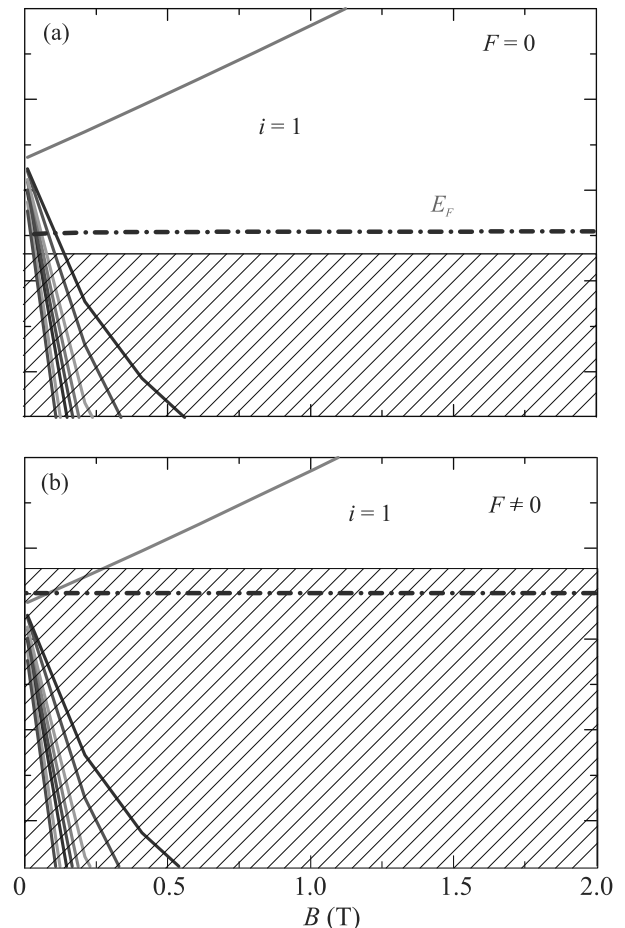


Рис. 11. (Цветной онлайн) Схематически, различные варианты движения траектории $E_F(B)$ относительно верхнего края густой сетки УЛ в БМ в слабых магнитных полях. (а) – В симметричной ДКЯ $E_F(B)$ в самых слабых полях проходит по состояниям легких дырок ЦМ и сразу выходит в щель $i = 1$. (б) – В несимметричной ДКЯ (например, в перпендикулярном поле F) ЦМ опускается ниже БМ и $E_F(B)$ сразу попадает в состояния густой сетки УЛ БМ, где уровни не разрешены, поэтому квантовый магнитотранспорт не проявляется

Резюмируя, в ДКЯ с промежуточной толщиной слоев HgTe в 8.5 нм обнаружена необычная ступенчатая форма холловского МС с почти вертикальным ростом вокруг нулевого поля и резким выходом на близкий к горизонтальному участок, положение которого стремится к h/e^2 . Предлагается объяснение на основе имеющегося в этих ДКЯ тонкого баланса между положениями бокового и центрального максимумов и переходом уровня Ферми уже в слабых магнитных полях из состояний центрального максимума в локализованные состояния в щели между уровнями Ландау для фазы КЭХ $i = 1$. Показано, что в ДКЯ данный баланс высокочувствителен к воз-

действиям, в частности, из-за встроенного неконтролируемого перпендикулярного слоям электрического поля картина КЭХ получается качественно разной в образцах, вырезанных из одной пластины, при хорошей геометрической однородности слоев. Этим ДКЯ отличаются от одиночного слоя HgTe толщиной 7 нм, где также положения центрального и бокового максимумов близки, но баланс между ними мало чувствителен к воздействиям.

Авторы благодарят Г. М. Минькова за нанесение затвора на исследуемый образец. Часть измерений выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования ИФМ УрО РАН. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. M. V. Yakunin, S. S. Krishtopenko, S. M. Podgornykh, M. R. Popov, V. N. Neverov, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, *JETP Lett.* **104**, 403 (2016).
2. M. V. Yakunin, S. S. Krishtopenko, W. Desrat, S. M. Podgornykh, M. R. Popov, V. N. Neverov,

- S. A. Dvoretzky, N. N. Mikhailov, F. Teppe, and B. Jouault, *Phys. Rev. B* **102**, 165305 (2020).
3. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
4. E. Y. Ma, M. R. Calvo, J. Wang et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **6**, 7252 (2015).
5. S. S. Krishtopenko, W. Кнар, and F. Teppe, *Sci. Rep.* **6**, 30755 (2016).
6. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **72**, 035321 (2005).
7. M. V. Yakunin, A. V. Suslov, M. R. Popov, E. G. Novik, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **93**, 085308 (2016).
8. T. Ihn, *Semiconductor nanostructures*, Oxford university press, Oxford (2010), ch. 7.
9. M. V. Yakunin, G. A. Alshanskii, Yu. G. Arapov, V. N. Neverov, G. I. Kharus, N. G. Shelushinina, B. N. Zvonkov, E. A. Uskova, A. de Visser, and L. Ponomarenko, *Semiconductors* **39**, 107 (2005).
10. G. S. Boebinger, A. Passner, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **43**, 12673 (1991).
11. O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **85**, 045310 (2012).

Эффект Фарадея в FeVO_3 , обусловленный компонентой намагниченности параллельной оси C_3

В. Е. Зубов¹⁾, А. Д. Кудakov⁺, Д. А. Булатов⁺, М. Б. Стругацкий*, С. В. Ягупов*

⁺ Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

* Физико-технический институт Крымского федерального университета, 295007 Симферополь, Россия

Поступила в редакцию 23 июня 2022 г.

После переработки 16 августа 2022 г.

Принята к публикации 16 августа 2022 г.

В ромбоэдрическом слабом ферромагнетике FeVO_3 предсказан и впервые экспериментально наблюдался эффект Фарадея, обусловленный компонентой намагниченности параллельной оси C_3 кристалла, которая почти на три с половиной порядка меньше намагниченности в базисной плоскости. Величина измеренного эффекта на шесть порядков меньше эффекта Фарадея, обусловленного намагниченностью в базисной плоскости. Обсуждаются причины, приводящие к значительному различию величины эффекта Фарадея, обусловленного намагниченностью в базисной плоскости и намагниченностью параллельной оси C_3 .

DOI: 10.31857/S1234567822180082, EDN: kgeazq

Слабый ферромагнетик бората железа FeVO_3 к настоящему времени хорошо изучен, но до сих пор этот кристалл привлекает внимание исследователей как модельный объект для изучения новых магнитных свойств, проявляющихся, в частности, в экспериментах по сверхбыстрой магнитной динамике и при сверхвысоких давлениях. Кроме того, исследование магнитных свойств кристаллов FeVO_3 как модельных объектов позволяют углубить наши представления о природе магнитной анизотропии, в частности, о взаимодействии Дзялошинского–Мория. Обзор последних результатов по исследованию магнитных свойств бората железа представлен в работе [1]. Подробно изучены также магнитооптические свойства бората железа, в частности, линейные магнитооптические эффекты (см. [2, 3]). В настоящей работе сообщается о первом наблюдении эффекта Фарадея (ЭФ), обусловленном компонентой намагниченности параллельной оси C_3 кристалла FeVO_3 .

Дзялошинским показано, что появление небольшой спонтанной намагниченности (m_D) в базисной плоскости ромбоэдрических антиферромагнетиков является естественным следствием симметрии этих кристаллов [4]. Намагниченность m_D возникает при учете в разложении по компонентам намагниченности подрешеток термодинамического потенциала антиферромагнетика членов не выше второго порядка. Спонтанная намагниченность обусловлена реля-

тивистскими взаимодействиями спин-решетка кристалла. Отношение величины m_D к сумме величин намагниченностей подрешеток антиферромагнетика пропорционально квадрату отношения скорости электронов в кристалле к скорости света $(v/c)^2$ и обычно составляет $10^{-2}–10^{-5}$. При учете в термодинамическом потенциале членов четвертого порядка по компонентам намагниченности подрешеток теория предсказывает наличие спонтанной намагниченности (m_z) вдоль оси третьего порядка C_3 кристалла перпендикулярной базисной плоскости. Намагниченность m_z определяется дважды релятивистскими взаимодействиями и ее относительная величина пропорциональна $(v/c)^4$. Предсказываемая угловая зависимость m_z при повороте m_D вокруг оси C_3 описывается выражением $m_z = m_{z0} \cdot \cos 3\varphi$, где φ – угол в базисной плоскости между направлением m_D и линией пересечения базисной плоскости с зеркальной плоскостью симметрии. Существование предсказанной компоненты намагниченности было обнаружено в гематите ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) и борате железа (FeVO_3) Фландерсом методом вращения образцов вокруг оси C_3 в постоянном магнитном поле, параллельном базисной плоскости, и измерением компоненты m_z на частоте, в три раза превышающей частоту вращения [5], а также в CoCO_3 Бажаном и Крейнесс использованием усовершенствованного вибрационного магнетометра [6]. Измеренная величина намагниченности вдоль оси C_3 была на несколько порядков меньше намагниченности в базисной плоскости. В част-

¹⁾e-mail: vizubov@mail.ru

ности, в борате железа величина m_z оказалась в две с половиной тысячи раз меньше, чем m_D [5]. Таким образом, существование компоненты m_z экспериментально установлено в нескольких ромбоэдрических антиферромагнетиках. Порядок величины и угловая зависимость m_z полностью согласуются с выводами, полученными в работе [4]. Отметим существенные отличия между m_D и m_z : 1) очень большая разница в величинах; 2) m_D лежит в базисной плоскости кристалла и ее величина не зависит от ориентации в этой плоскости; 3) m_z перпендикулярна базисной плоскости и при повороте m_D и спинов магнитных подрешеток вокруг оси C_3 на 360° компонента m_z меняет знак 6 раз. Таким образом, в образце имеются две взаимно перпендикулярные совершенно различные по своим свойствам компоненты намагниченности.

Во всех магнетиках, обладающих спонтанным магнитным моментом: ферромагнетиках, аморфных ферромагнетиках, ферримагнетиках, слабых ферромагнетиках наблюдались линейные по намагниченности магнитооптические эффекты. Поэтому естественно предположить возможность существования линейных магнитооптических эффектов в ромбоэдрических антиферромагнетиках, обусловленных компонентой намагниченности m_z , в частности, магнитооптического эффекта Фарадея (ЭФ). Основным применением магнитооптических методов в физике магнитоупорядоченных кристаллов является исследование энергетического спектра магнитоактивных ионов в ферромагнитных и антиферромагнитных диэлектриках, а также изучение электронной структуры металлов и сплавов [7]. Магнитооптическая методика – это обычная спектроскопическая методика: на кривых зависимости самих магнитооптических эффектов от энергии квантов света или лучше на определенных из них кривых недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости (ε) обнаруживают некоторые особенности, которые затем отождествляют с определенными оптическими переходами. По сравнению с обычными оптическими магнитооптические методы имеют преимущество в том, что они чувствительны к знаку спина электрона, т.е., например, для ферромагнитного металла они в принципе позволяют выяснить к какой спиновой подзоне относится данный переход. С учетом сказанного выше, исследование спектра магнитооптических эффектов, обусловленных компонентой m_z , и сравнение его со спектром магнитооптических эффектов, обусловленных компонентой m_D , может дать дополнительную информацию, способ-

ствующую расшифровке энергетического спектра данного антиферромагнитного диэлектрика. В силу большого отличия величин и симметричных свойств векторов m_D и m_z , не вызывает сомнения, что магнитооптические эффекты, обусловленные m_D и m_z , должны отличаться не только по величине, но должны быть различны их спектральные зависимости, т.е. максимумы, минимумы, области смены знака этих эффектов могут происходить в отличающихся друг от друга точках спектра. В частности, для бората железа спектр комплексной недиагональной компоненты ε в широком спектральном диапазоне, обусловленной m_D , был получен ранее [2], и представляется интересным его сравнение с аналогичной компонентой, обусловленной m_z . В настоящей работе поставлена задача поиска и измерения в случае обнаружения ЭФ в монокристаллах бората железа, обусловленного компонентой намагниченности m_z .

Монокристаллы бората железа прозрачны в видимой области спектра. Поэтому среди линейных по намагниченности магнитооптических эффектов (ЭФ, эффекты Керра и др.) ЭФ является наиболее подходящим для решения поставленной задачи, поскольку его величина обычно на несколько порядков превосходит величину других указанных эффектов. Исследованные образцы представляли собой тонкие пластинки зеленого цвета параллельные базисной плоскости кристалла с поперечными размерами ~ 3 мм. Толщина образцов составляла 5 и 8 мкм. Среди имеющихся образцов были выбраны наиболее тонкие, поскольку они обладают высокой оптической однородностью и совершенными гранями. Для уменьшения механических напряжений в образце он крепился между двумя листами бумаги с отверстиями для прохождения света. Измерения проводились в области прозрачности бората железа. Источником света служила дуговая ксеноновая лампа. Для уменьшения расходимости пучка света освещение образца производилось тонким лучом диаметром 1 мм, угловая расходимость луча была меньше, чем 10^{-2} радиана. Образец помещался во вращающееся магнитное поле, плоскость вращения которого совпадала с базисной плоскостью кристалла $FeVO_3$. Вращающееся магнитное поле создавалось двумя парами одинаковых катушек Гельмгольца, ориентированных перпендикулярно друг к другу. Фаза тока в парах катушек отличалась на 90° . Частота вращающегося магнитного составляла $f = 265$ Гц, его величина -10 Э и на порядок превосходила поле насыщения в базисной плоскости образцов [8]. Небольшое возможное отклонение по углу плоскости вращения магнитного поля от базисной плоскости образца не мо-

жет повлиять на результаты эксперимента, поскольку приложенное поле много больше поля насыщения образца, и при этом приложенное поле не может изменить величину намагниченности насыщения, так как оно на четыре порядка меньше поля Дзялошинского, определяющего величину намагниченности в базисной плоскости бората железа. Свет был направлен вдоль оси C_3 . Измерения эффекта Фарадея производились на утроенной частоте $3f$. Сигнал с фотоэлектронного умножителя PMT поступал на селективный измерительный усилитель SA, настроенный на частоту $3f$, а затем на фазовый детектор PD, настроенный на ту же частоту.

Блок-схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. Свет от источника L проходит

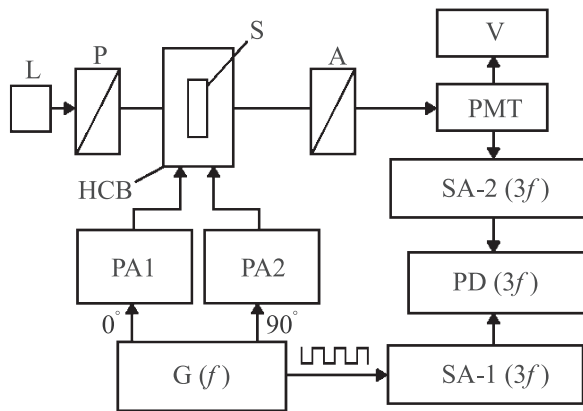


Рис. 1. Блок-схема установки

через поляризатор P, затем через образец S, размещенный в блоке катушек Гельмгольца НСВ, и далее через анализатор А, плоскость поляризации которого повернута к плоскости поляризации поляризатора на угол 45° . В результате поворот плоскости поляризации света, прошедшего через образец, после анализатора преобразуется в изменение интенсивности света. PMT регистрирует переменную и постоянную составляющие интенсивности света. С PMT постоянный сигнал поступает на вольтметр V, а переменный – на измерительный усилитель SA-1($3f$) и далее на фазовый детектор PD($3f$). Используемый генератор G сигналов специальной формы имеет несколько выходов: основной сигнал с фазой 0° , дополнительный сигнал с фазой, сдвинутой на 90° по отношению к основному, а также прямоугольный сигнал, совпадающий по фазе с основным. Два синусоидальных сигнала со сдвигом фаз 90° поступают на входы двух усилителей мощности PA1 и PA2, которые питают взаимно перпендикулярно ориентированные пары катушек Гельмгольца, создающие вращающе-

ся в плоскости образца магнитное поле с частотой f . Прямоугольный сигнал в соответствии с разложением Фурье может быть представлен как сумма гармонических сигналов с частотами: $f, 3f, 5f, \dots$. Для выделения сигнала с частотой $3f$ использовался селективный усилитель SA-2($3f$), настроенный на эту частоту. Выходной сигнал с этого усилителя использовался как опорный сигнал в фазовом детекторе.

Образец крепился в цилиндре, который можно вращать на 360° вокруг своей оси. В цилиндре просверлен канал для прохождения света. Цилиндр расположен внутри НСВ, создающих магнитное поле в плоскости образца. Была предусмотрена тонкая настройка вращения НСВ вокруг двух взаимно перпендикулярных осей, вертикальной и горизонтальной, расположенных в плоскости образца для юстировки образца перпендикулярно падающему лучу света. Угол поворота НСВ регулируется с точностью $5 \cdot 10^{-3}$ радиана относительно каждой из осей.

ЭФ, обусловленный компонентой m_z , с периодом 120° при повороте образца вокруг оси C_3 , был обнаружен в обоих образцах толщиной 5 и 8 мкм. На рисунке 2 представлена типичная эксперименталь-

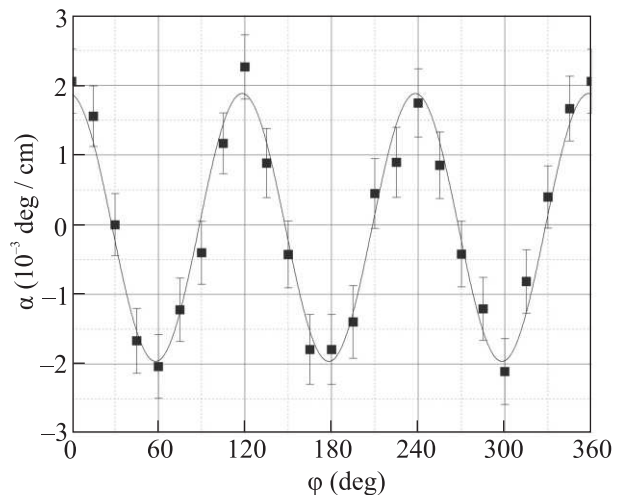


Рис. 2. Угловая зависимость эффекта Фарадея, обусловленного компонентой намагниченности параллельной оси C_3 кристалла $FeVO_3$ в образце толщиной 8 мкм

ная угловая зависимость эффекта Фарадея, измеренная в образце толщиной 8 мкм. Экспериментальные точки аппроксимированы синусоидой. Величина амплитуды синусоиды для первого образца составила $\alpha_0 = (2.3 \pm 0.5) \cdot 10^{-3}$ град/см, для второго – $\alpha_0 = (1.9 \pm 0.5) \cdot 10^{-3}$ град/см. Максимум эффекта наблюдается при углах $\varphi = 0^\circ, 120^\circ, 240^\circ, 360^\circ$, что согласуется с результатами работы [4]. Величина фарадеевского вращения, обусловленного компонен-

той m_D , в области максимальной прозрачности бората железа на длине волны $\lambda = 525$ нм составляет 2300 град/см [3]. Таким образом, разница между величинами $\Theta\Phi$, обусловленного компонентами намагниченности m_D и m_z , составляет шесть порядков.

Вследствие большого различия величин $\Theta\Phi$, обусловленного компонентами m_D и m_z , возникает вопрос о возможном влиянии первого $\Theta\Phi$ на результаты измерения второго. Для уменьшения этого влияния производилась юстировка ориентации образца перпендикулярно падающему лучу света, а также была минимизирована расходимость пучка света, о чем говорилось выше. Отклонение луча света от оси C_3 , а также расходимость пучка приводят во вращающемся магнитном поле частотой f к появлению в измеряемом $\Theta\Phi$ компоненты, обусловленной намагниченностью m_D и имеющей такую же частоту f . Эффективным способом подавления паразитной компоненты на частоте f является использование метода фазового детектирования на частоте $3f$, на которой наблюдается искомым сигнал. Использование фазового детектирования на частоте $3f$ исключает проникновение сигнала на частоте f в сигнал, измеряемый на частоте $3f$. Влияние сигнала на частоте f может приводить только к увеличению погрешности измеряемого эффекта. Погрешность, обусловленная статистическим шумом по свету, аппаратными и другими эффектами, определяет точность приведенных выше численных результатов эксперимента.

Проведен анализ возможного влияния механических напряжений и возникающего двупреломления света под действием напряжений. Крепление образца, как указывалось, предполагало минимизацию на него механического воздействия, однако не исключало такого воздействия полностью. При наличии одноосного напряжения в образце при его вращении вокруг своей оси на 360° наблюдался бы вклад в измеряемый эффект с периодичностью 180° , при случайном распределении напряжений такой вклад в зависимость эффекта от угла имел бы случайный характер. Поскольку экспериментальная угловая зависимость $\Theta\Phi$ имела период равный 120° , то это подтверждает отсутствие влияния механических напряжений на эффект.

Еще при первых исследованиях магнитооптических свойств слабых ферромагнетиков было обращено внимание на неожиданно большую величину их линейных магнитооптических эффектов [7]. Наиболее ярко это аномальное поведение проявилось при исследовании ромбоэдрического слабого ферромагнетика гематита $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Измеренный экваториальный эффект Керра в гематите оказался примерно

таким же, как и в ферримагнитных диэлектриках, хотя спонтанная намагниченность гематита примерно в тысячу раз меньше, чем суммарная намагниченность его подрешеток [9]. В случае бората железа экваториальный эффект Керра имеет тот же порядок величины как в гематите, а его спонтанная намагниченность в шестьдесят раз меньше суммарной намагниченности подрешеток [10]. В работе [9] было показано, что аномально большие магнитооптические эффекты в слабых ферромагнетиках обусловлены не абсолютной величиной результирующего магнитного момента и не его переориентацией, а переориентацией вектора антиферромагнетизма, сопровождающей перемагничивание слабого ферромагнетика. Был сделан вывод о том, что те же микроскопические механизмы, которые приводят к появлению поля Дзялошинского и вектора m_D , приводят также и к появлению аномально больших недиагональных компонент тензора ϵ , которые изменяют знак при переориентации вектора m_D , поля Дзялошинского и вектора антиферромагнетизма, и тем самым вызывают аномально большие линейные по величине m_D магнитооптические эффекты в слабых ферромагнетиках.

В борате железа величина m_D почти на три с половиной порядка, больше чем m_z , а соответствующие значения $\Theta\Phi$, обусловленные этими компонентами намагниченности, отличаются на 6 порядков. Естественно, что не может быть прямой пропорциональной зависимости между величиной $\Theta\Phi$ и соответствующей компонентой намагниченности в данном случае. Иными словами, $\Theta\Phi$, обусловленный m_z , не должен быть обязательно на три с половиной порядка меньше $\Theta\Phi$, обусловленного m_D . Это связано с тем, что микроскопические механизмы, приводящие к появлению m_z , отличаются от механизмов, определяющих линейные магнитооптические эффекты, в частности $\Theta\Phi$, обусловленных m_z . Аналогичные рассуждения справедливы в отношении m_D и соответствующего $\Theta\Phi$. Остается вопрос, связанный с тем, что отличие между соотношениями величин m_D и m_z и соответствующими соотношениями $\Theta\Phi$ достаточно велико: три с половиной и шесть порядков, соответственно. Для объяснения этого результата можно предположить, что аномально большая величина $\Theta\Phi$, обусловленного компонентой m_D и определяемой релятивистскими взаимодействиями в кристалле, не реализуется в случае дважды релятивистских взаимодействий, определяющих m_z и соответствующий $\Theta\Phi$. Проверка данной гипотезы может быть проведена путем измерения линейных магнитооптических эффектов, обусловленных компонентой m_z в ге-

матите, который обладает структурой аналогичной структуре бората железа.

1. С. Г. Овчинников, В. В. Руденко, Н. В. Казак, И. С. Эдельман, В. А. Гавричков, *ЖЭТФ* **158**, 184 (2020).
2. К. Г. Архипов, В. Е. Зубов, *Оптика и спектроскопия* **73**, 952 (1992).
3. R. Wolfe, A. J. Kurtzig, and R. C. Le Craw, *J. Appl. Phys.* **41**, 1218 (1970).
4. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **32**, 1547 (1957).
5. P. J. Flanders, *J. Appl. Phys.* **43**, 2430 (1972).
6. А. Н. Бажан, Н. М. Крейнес, *Письма в ЖЭТФ* **15**, 533 (1972).
7. Г. С. Кринчик, *Физика магнитных явлений*, Изд-во Моск. ун-та, М. (1985), 336 с.
8. В. Е. Зубов, А. Д. Кудаков, Н. Л. Левшин, М. Б. Стругацкий, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 675 (2017).
9. Г. С. Кринчик, В. Е. Зубов, *Письма в ЖЭТФ* **20**, 307 (1974).
10. А. М. Кадомцева, Р. З. Левитин, Ю. Ф. Попов, В. В. Усков, В. Н. Селезнев, *ФТТ* **14**, 214 (1972).

Mobility edge in the Anderson model on partially disordered random regular graphs

O. Valba⁺¹), A. Gorsky^{*×}

⁺Department of Applied Mathematics, Tikhonov Moscow Institute of Electronics and Mathematics,
National Research University Higher School of Economics, 123458 Moscow, Russia

^{*}Institute for Information Transmission Problems of the Russian Academy of Sciences (Kharkevich Institute), 127051 Moscow, Russia

[×]Moscow Institute for Physics and Technology, 141700 Dolgoprudny, Russia

Submitted 28 July 2022
Resubmitted 23 August 2022
Accepted 28 August 2022

DOI: 10.31857/S1234567822180094, EDN: kggkzm

Recently new mechanisms of ergodicity breaking in the complicated interacting many-body systems have been uncovered. The combination of interaction and strong enough disorder amounts to the emergent many-body localization (MBL) phase with full ergodicity breaking [1–5]. The Anderson model on random regular graph (RRG) serves as the toy model for a identification of MBL phase in the physical space, see [6] for the recent review. The many-body localization in the physical space presumably gets mapped into the one-particle localization in a Hilbert space [7].

We study non-interacting spinless fermions hopping over RRG with connectivity $p = 3$ in a potential disorder described by Hamiltonian

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_i c_j^\dagger) + \sum_{i=1}^{\beta N} \epsilon_i c_i^\dagger c_i, \quad (1)$$

where the first hopping sum runs over the nearest-neighbor sites of the RRG, the second sum runs over βN nodes with potential disorder. The energies ϵ_i are independent random variables sampled from a uniform distribution on $[-W/2, W/2]$. We consider gaps between adjacent levels, $\delta_i = E_{i+1} - E_i$, where the eigenvalues of a given realization of the Hamiltonian for a given total number of particles, E_i , are listed in ascending order. The dimensionless quantity we have chosen to characterize the correlations between adjacent gaps in the spectrum is the ratio of two consecutive gaps: $r_i = \min(\delta_i, \delta_{i+1}) / \max(\delta_i, \delta_{i+1})$. In turn, a direct measure of the (de)localization of the eigenfunctions is obtained by the inverse participation ratio (IPR),

$\text{IPR}(i) = \sum_n |\psi_n^{(i)}|^4$, where $\psi_n^{(i)}$ is the i -th eigenstate of the matrix and n is the basis state index.

We analyze the ratio $\langle r \rangle$ and IPR for different parts of the spectrum, dividing the sorting spectrum into $k = 100$ equal parts and average the ratio $\langle r \rangle$ and IPR over each window. The ordinate $\alpha = i/(N - 1)$ in Fig. 1 corresponds the normalized level position with $i = 0, 1, \dots, N - 1$, the energy level, the ordinate window respectively is $\Delta\alpha = 1/k$.

The heat maps Fig. 1a, c explicitly demonstrate, that there is the mobility edge λ_m separating sharply the spectrum into two different regimes for RRG with partial disorder in vertices. For $|\lambda| > \lambda_m$ we observe localisation state with the ratio $\langle r \rangle$ close to $\langle r \rangle_P$ and independence of IPR on N , while for central spectrum part with $|\lambda| \leq \lambda_m$ the ratio $\langle r \rangle$ and IPP indicate on the delocalized state. Note, that the mobility edge λ_m weakly depends on the disorder W and is observed even for small W . Moreover, we do not observe the phase transition at large W to completely localized phase which is familiar for completely disordered RRG (see Fig. 1b, d, f with the same plots for $\beta = 1.0$).

We consider partially disordered RRG as the toy model of a Hilbert space for some interacting disordered many-body system with the topologically protected subsector. The nodes of RRG free from disorder correspond to topologically protected states in many-body system. To some extend our model probes the effect of disorder on topologically protected states.

It is found that at some density of clean nodes in partially disordered RRG the sharp mobility edge emerges in the spectrum of Anderson model and exists up to arbitrarily large diagonal flat disorder W . We have studied the distribution of the eigenfunctions in RRG and have

¹)e-mail: ovalba@hse.ru

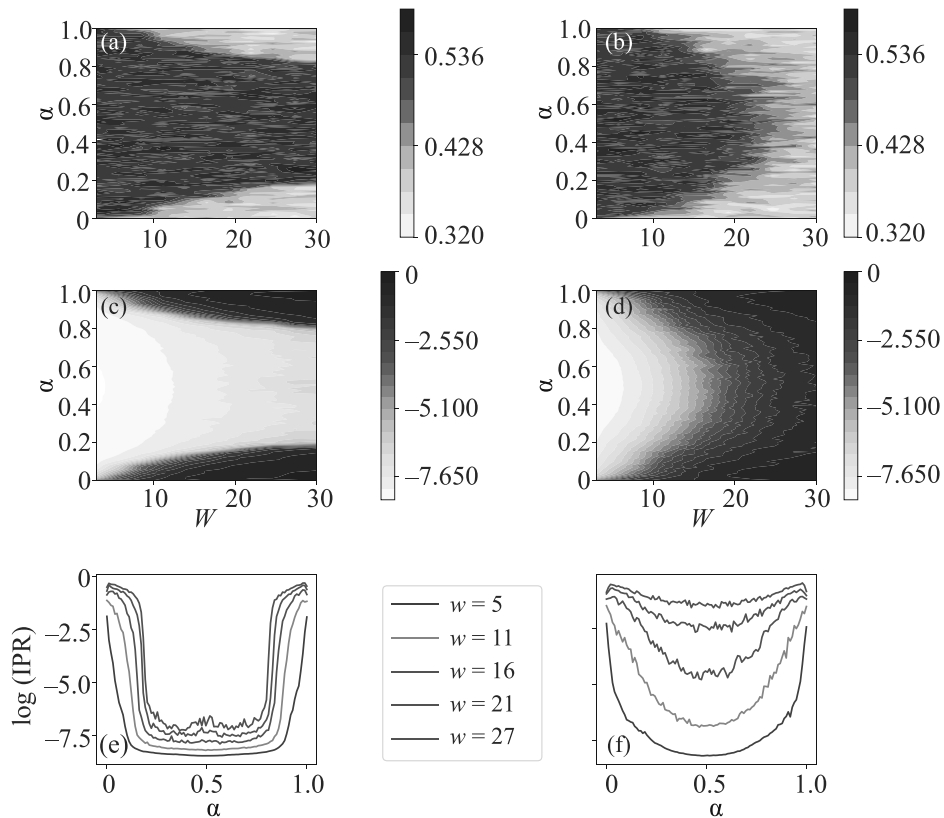


Fig. 1. (Color online) The ratio $\langle r \rangle$ in dependence on the disorder value W and the spectrum part α for $\beta = 0.5$ (a) and $\beta = 1$ (b); the value $\log(\text{IPR})$ in dependence on the disorder value W and the spectrum part α for $\beta = 0.5$ (c) and $\beta = 1$ (d); the dependencies of $\log(\text{IPR})$ on the spectrum position α for different values of W and $\beta = 0.5$ (e) and $\beta = 1$ (f)

found that localized states are distributed almost solely within the dirty nodes while the delocalized part of the spectrum mainly involves the clean nodes with small disorder dependent contribution of the dirty nodes.

The model certainly oversimplifies the issue, nevertheless it can be considered as the indication that a one-particle mobility edge in the hopping model in the Hilbert space and a mobility edge in the MBL phase could be related. Indeed if the mechanism behind the mobility edge in MBL involves density of highly degenerate zero-modes in the physical space then the density of clean nodes in the Hilbert space is its relevant counterpart.

This is an excerpt of the article “Mobility edge in the Anderson model on partially disordered random regu-

lar graphs”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601750

1. D. Basko, I. Aleiner, and B. Altshuler, *Ann. Physics* **321**(5), 1126 (2006).
2. I. Gornyi, A. Mirlin, and D. Polyakov, *Phys. Rev. Lett.* **95**(20), 206603 (2005).
3. R. Nandkishore and D. A. Huse, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**(1), 15 (2015).
4. F. Alet and N. Laflorencie, *C. R. Phys.* **19**, 498 (2018).
5. D. A. Abanin, E. Altman, I. Bloch, and M. Serbyn, *Rev. Mod. Phys.* **91**(2), 021001 (2019).
6. K. S. Tikhonov and A. D. Mirlin, arXiv:2102.05930.
7. B. L. Altshuler, Y. Gefen, A. Kamenev, and L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **78**(14), 2803 (1997).

Аномальный радиационный нагрев металлической наночастицы при движении вблизи металлической пластины¹⁾

Г. В. Дедков²⁾

Кабардино-Балкарский государственный университет, 360004 Нальчик, Россия

Поступила в редакцию 8 августа 2022 г.

После переработки 19 августа 2022 г.

Принята к публикации 21 августа 2022 г.

Представлены результаты расчета скорости радиационного нагрева (охлаждения) металлической наночастицы, движущейся вблизи поверхности металлической пластины в случае низких температур обоих тел (порядка 1–10 К). При описании диэлектрических свойств материалов частицы и пластины использовано приближение Друде с зависящей и не зависящей от температуры частотой релаксации электронов. Показано, что движение нагретой частицы может приводить к ее дальнейшему нагреву в определенном интервале разности температур.

DOI: 10.31857/S1234567822180100, EDN: kgjild

Радиационный поток тепла через вакуумный промежуток между телами с разной температурой является одним из проявлений флуктуационных электромагнитных полей, существующих в веществе и в вакууме [1–3]. При ширине промежутка $d \leq \lambda_W$ (λ_W – виновская длина волны теплового излучения) теплообмен осуществляется нерадиационными (ближними) модами электромагнитного поля $k > \omega/c$ (где k , ω – волновое число и частота волны, c – скорость света в вакууме). При этом поток тепла на несколько порядков выше аналогичной величины, предсказываемой классическим законом Стефана Больцмана для излучения абсолютно черного тела. Возможна также когерентность теплового излучения в зоне ближнего поля [4, 5]. В связи с этим теоретическое и экспериментальное исследование радиационного теплообмена (РТ) модами ближнего поля вызывает большой интерес, начиная с основополагающих работ [6, 7]. Подробные обзоры последнего времени представлены в [8–12].

Насколько известно, динамические эффекты РТ в ближнем поле до сих пор не рассматривались, хотя общие выражения для скорости РТ в различных конфигурациях, вообще говоря, содержат динамические факторы, зависящие от относительной скорости движения тел [9, 13, 14], которые могут, при определенных условиях, существенно изменить скорость и направление РТ. При этом оказывается, что более нагретое тело, движущееся в ближнем поле друго-

го тела, может дополнительно нагреваться в определенном интервале температур, скоростей V и расстояний d . Здесь нет нарушения второго начала термодинамики, поскольку система, включающая тела и флуктуационное электромагнитное поле, является неравновесной.

Целью работы является анализ скорости РТ нагрева (охлаждения) малой металлической частицы при нерелятивистском движении со скоростью V вблизи металлической поверхности (толстой пластины). Выбор материалов (металлов) обусловлен тем, что аномальное направление РТ более заметно проявляется при достаточно низких температурах и небольших скоростях движения. Нормальные немагнитные металлы обладают значительной температурной зависимостью диэлектрических свойств в низкочастотной области спектра, отвечающей за РТ в силу возрастания плотности электромагнитных мод. В отличие от этого, в диэлектрических материалах типа SiO_2 или SiC поглощение электромагнитного излучения “привязано” к пикам мнимой части диэлектрической проницаемости, находящимся в инфракрасном диапазоне спектра. Поэтому для реализации аномального РТ между диэлектрическими телами необходимы значительно более высокие скорости движения V и жесткие ограничения на соотношения между различными параметрами, что делает экспериментальное наблюдение аномального РТ трудно реализуемым.

Конфигурация системы показана на рис. 1. Магнитные проницаемости μ материалов частицы и пластины прием равными единице, а диэлектрические

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

²⁾e-mail: gv_dedkov@mail.ru

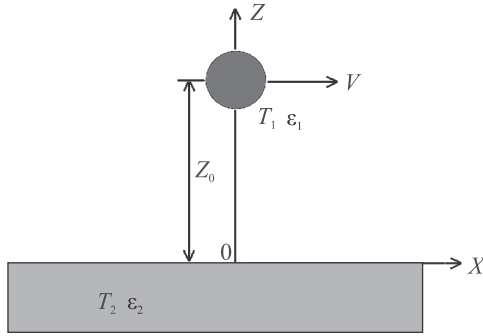


Рис. 1. (Цветной онлайн) Конфигурация системы

проницаемости ϵ будем считать зависящими от частоты ω .

Общее релятивистское выражение для скорости нагрева малой частицы в ее собственной системе отсчета было получено в [14] и в более компактной форме определяется формулами (6) и (147) в [13]. В пределе $V \ll c$ с учетом эффекта запаздывания соответствующее выражение имеет вид (см. дополнительный материал)

$$\frac{dQ}{dt} = -\frac{\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int d^2k k^2 \omega^+ \alpha_m''(\omega^+) \Delta_m''(\omega) \frac{e^{-2q_0 z_0}}{q_0} \times \left[\coth\left(\frac{\hbar\omega^+}{2T_1}\right) - \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T_2}\right) \right] (m \rightarrow e), \quad (1)$$

где α_m'' и Δ_m'' – мнимые части магнитной поляризуемости частицы и коэффициента отражения электромагнитных волн с S-поляризацией от пластины, определяемые соотношениями

$$\alpha_m = \frac{2\pi R^3}{15} \left(\frac{\omega R}{c}\right)^2 (\epsilon(\omega) - 1), \quad \Delta_m = \frac{q_0 - q}{q_0 + q}. \quad (2)$$

Кроме того, $q_0 = \sqrt{k^2 - \omega^2/c^2}$, $q = \sqrt{k^2 - \epsilon(\omega)\omega^2/c^2}$, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ – двумерный волновой вектор в плоскости пластины, $\omega^+ = \omega + k_x V$, R – радиус частицы, z_0 – расстояние центра частицы от поверхности (рис. 1). Заметим также, что выражение (2) для магнитной поляризуемости справедливо при условии $R \ll \delta$ (где δ – глубина скин-слоя). Оно хорошо выполняется для наночастиц с радиусом $1 \div 5$ нм [15]. Наличие множителя ω^+ (“сдвинутой частоты”) под знаком интеграла в формуле (1) является принципиально важным и неоднократно подчеркивалось ранее (см. дополнительный материал, [13] и ссылки). Слагаемое ($m \rightarrow e$), имеющее такой же вид, как и первое, обусловлено электромагнитными модами P-поляризации, но при флуктуационно-электромагнитном взаимодействии металлических тел его вклад на несколько

порядков величины меньше вклада S-мод [9, 13, 15], поэтому в рассматриваемом случае его можно не учитывать.

Эффект аномального нагрева частицы можно непосредственно заметить при анализе формулы (1). Пусть $T_1, T_2 \rightarrow 0$, но $T_1 > T_2$, тогда (1) принимает более простой вид

$$\frac{dQ}{dt} \cong \frac{4\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y k e^{-2kz_0} \times \int_0^{k_x V} d\omega \Delta_m''(\omega) (\omega - k_x V) \alpha_m''(\omega - k_x V). \quad (3)$$

Очевидно, что $dQ/dt > 0$, поскольку $\alpha_m''(\omega)$ является нечетной функцией частоты. При переходе от (1) к (3) используется условие $V/c \ll 1$ и приближение $q_0 \approx k$ без упрощения исходного выражения (2) для $\Delta_m''(\omega)$. При этом тепловой фактор $\left[\coth\left(\frac{\hbar\omega^+}{2T_1}\right) - \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T_2}\right) \right]$ обращается в -2 при $\omega^+ < 0$ и равен нулю в остальных случаях. Этот результат, очевидно, имеет место и в квантовом пределе $T_1 = T_2 = 0$. Более общий случай аномального нагрева частицы, описываемый формулой (1), очевидно, обусловлен фотонами с проекциями волновых векторов $k_x < 0$, поскольку $\omega^+ = \omega + k_x V < 0$ при $\omega < |k_x|V$. В частности, заметим, что тангенциальная сила диссипативного взаимодействия частицы с пластиной (и сила квантового трения) получаются из (1) заменой множителя ω^+ на $-k_x$ под знаком интеграла [13].

Для проведения конкретных численных расчетов по формуле (1) воспользуемся формулой Друде для диэлектрической проницаемости металла

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)}, \quad (4)$$

где ω_p – частота плазмы, а ν – параметр затухания. Примем также, что ν зависит от температуры T по закону Блоха–Грюнрайзена [16]

$$\nu(T) = 0.0212(T/\theta)^5 \int_0^{\theta/T} x^5 \operatorname{sh}(x/2)^{-2} dx \quad (\text{эВ}), \quad (5)$$

при этом параметры $\theta = 175$ К и $\omega_p = 9.03$ эВ (для золота) будем считать не зависящими от температуры, а коэффициенты ν – зависящими от локальных температур T_1 и T_2 частицы и пластины. Далее эти ($\nu_i = \nu_i(T_i)$) и другие величины, относящиеся к частице и пластине, обозначим индексами $i = 1, 2$.

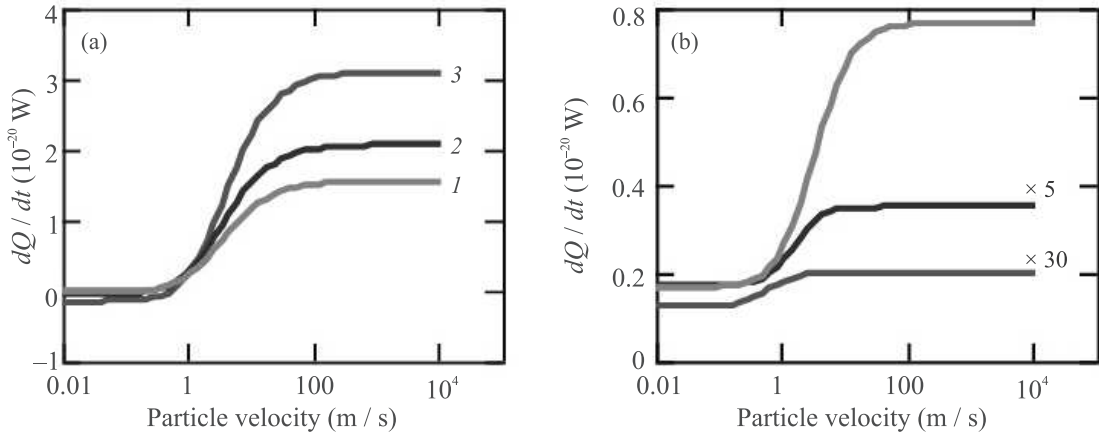


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость скорости нагрева частицы ($R = 3\text{ нм}$, $z_0 = 10\text{ нм}$) от скорости движения. (а) – Кривые 1–3 соответствуют температурам: $T_1 = 4.2$, $T_2 = 1.5\text{ К}$ (1); $T_1 = 4.2$, $T_2 = 2\text{ К}$ (2); $T_1 = 4.2$, $T_2 = 3\text{ К}$ (3). (б) – Верхняя кривая – $T_1 = 1.5$, $T_2 = 4.2\text{ К}$; средняя – $T_1 = 2$, $T_2 = 4.2\text{ К}$; нижняя – $T_1 = 3$, $T_2 = 4.2\text{ К}$. Значения dQ/dt для двух нижних кривых увеличены в 5 и 30 раз

Для дальнейшего введем переменные $\omega = \nu_1 t$, $k = (\omega_p c) \sqrt{y^2 + \beta_1^2 t^2}$ и параметры $\beta_1 = \nu_1 / \omega_p$, $\alpha_i = \hbar \nu_i / T_i$ ($i = 1, 2$), $\gamma = \nu_1 / \nu_2$, $\lambda = \omega_p z_0 / c$, $w = T_1 / T_2$. Кроме того, перейдем к полярным координатам (k, ϕ) в плоскости волновых векторов (k_x, k_y) , обозначая $\omega^+ = \nu_1 t_+ = \nu_1 t + \eta y \cos \phi$ и $\eta = \omega_p V / c$. Тогда формула (1) примет вид

$$\frac{dQ}{dt} = -\frac{2}{15\pi} (\hbar \nu_1^2) \left(\frac{\omega_p R}{c}\right)^5 \times \int_0^\infty dt \int_0^\infty dy (y^2 + \beta_1^2 t^2) e^{-2\lambda y} \Delta''(y, \gamma t) f(y, t), \quad (6)$$

$$f(y, t) = \int_0^\pi d\phi \frac{t_+^2}{(1+t_+^2)} \left[\coth \frac{\alpha_1 t_+}{2} - \coth \frac{\alpha_1 \omega t}{2} \right], \quad (7)$$

$$\Delta''_m(y, t) = \text{Im} \left[\frac{y - \sqrt{y^2 + t/(t+i)}}{y + \sqrt{y^2 + t/(t+i)}} \right]. \quad (8)$$

Результаты численного расчета скорости нагрева dQ/dt наночастицы золота с радиусом $R = 3\text{ нм}$ в приближении Друде–Блоха–Грюнайзена представлены на рис. 2–4. Эффект аномального нагрева демонстрирует рис. 2а, соответствующий случаю, когда температура частицы выше температуры поверхности. Можно видеть, что при небольших скоростях частицы ($V < 1\text{ м/с}$) скорость нагрева dQ/dt еще отрицательна (частица охлаждается), но затем (при $V \sim 10\text{ м/с}$) величина dQ/dt значительно возрастает, изменяя знак, и выходит на плато. При этом более сильный нагрев соответствует меньшей разности температур частицы и поверхности. Это вполне

понятно, поскольку эффект нагрева, обусловленный фотонами с проекциями волнового вектора $k_x < 0$, частично компенсируется “нормальным” потоком тепла от частицы к пластине. Рисунок 2б демонстрирует случай “нормального” направления теплового потока, когда пластина имеет более высокую температуру. Увеличение скорости частицы также вызывает рост dQ/dt , но значительно слабее, чем в случае рис. 2а. При этом величина скорости нагрева возрастает с увеличением разности температур (что тоже понятно).

На рисунке 3 приведена зависимость dQ/dt от температуры частицы T_1 и скорости V при фиксиро-

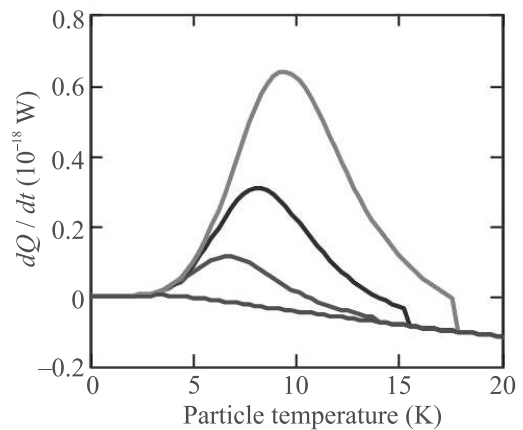


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость скорости нагрева частицы от ее температуры ($R = 3\text{ нм}$, $z_0 = 10\text{ нм}$) при фиксированной температуре пластины (4.2 К). Порядок кривых снизу вверх соответствует значениям скорости частицы $V = 0, 20, 50, 100\text{ м/с}$

ванной температуре $T_2 = 4.2$ К пластины. Как видно из приведенных кривых, аномальный нагрев наблюдается при не слишком большой разности температур частицы и пластины, максимальная величина которой (в максимуме зависимостей dQ/dt) возрастает с увеличением скорости, но при дальнейшем увеличении разности температур происходит возврат к “нормальным” значениям dQ/dt (нижняя кривая, соответствующая $V = 0$), когда частица снова охлаждается. При увеличении скорости движения этот возврат происходит при большей разности температур.

Зависимости dQ/dt от расстояния z_0 показаны на рис. 4. За исключением кривой 2 ($V = 1$ м/с, $T_1 = 4.2$,

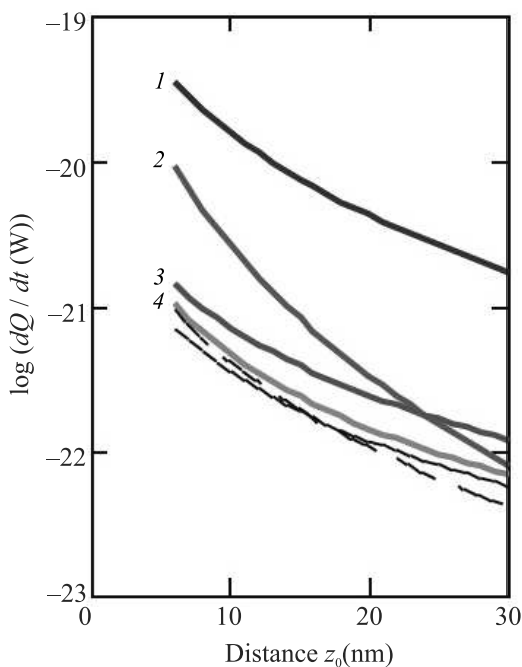


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость скорости нагрева частицы ($R = 3$ нм) от расстояния z_0 до поверхности пластины. Кривые 1 и 3 соответствуют скорости $V = 10$ м/с, кривые 2 и 4 — $V = 1$ м/с, черные сплошная и штриховая кривые — $V = 0$. Температурные конфигурации: $T_1 = 4.2$, $T_2 = 2$ К (кривые 1 и 2); $T_1 = 2$, $T_2 = 4.2$ К (кривые 3 и 4); сплошная черная кривая ($\log(|dQ/dt|)$): $T_1 = 4.2$, $T_2 = 2$ К; штриховая черная кривая: $T_1 = 2$, $T_2 = 4.2$ К. Основание логарифма на оси ординат равно 10

$T_2 = 2$ К), все остальные имеют довольно близкие наклоны степенных зависимостей $dQ/dt \propto z_0^{-s}$ с показателем степени $s \approx 1.7 \div 1.9$. Кривая 2 имеет больший наклон с $s \approx 2.95$. Кривые 3, 4 и две нижние непронумерованные кривые на рис. 4 соответствуют случаю нормального направления теплообмена, а

кривые 1, 2 — случаю аномального, но для кривой 2 скорость частицы на порядок меньше. Эти особенности объясняются сложным перекрестным влиянием параметров T_1 , T_2 , V и z_0 на величину интегралов в формуле (6).

Представляет также интерес исследовать наличие или отсутствие аномального нагрева частицы в случае не зависящей от температуры частоты столкновений в (4), т.е. без учета зависимости (5). Результаты таких расчетов показаны на рис. 5, причем кривые 2 и 5 на рис. 5а построены с дополнительным коэффициентом 0.01. В этом случае $\gamma = \nu_1/\nu_2 = 76.3$, т.е. частота релаксации электронов пластины и ее удельное сопротивление ($\rho = 4\pi\nu/\omega_p^2$) значительно меньше, чем у частицы. Можно отметить близкий вид зависимостей 1, 3 на рис. 2а и зависимостей 3, 1 на рис. 5а, соответствующих одинаковым температурам частицы и пластины, за исключением области малых скоростей $V < 1$ м/с, когда играет роль различие параметров $\gamma = \nu_1/\nu_2$. Характер температурных зависимостей dQ/dt на рис. 3 и рис. 5b отличается более заметно. Линейный вид кривых на рис. 5b продолжается вплоть до высоких температур частицы. В частности, кривая 5, соответствующая $V = 0$ и $T_2 = 4.2$ К, выходит на значение $-1.24 \cdot 10^{-18}$ Вт при $T_1 = 300$ К. Отсутствие максимумов на кривых рис. 5b обусловлено отсутствием температурной зависимости множителя ν_1^2 в формуле (6). В случае рис. 3 именно уменьшение этого множителя при низких температурах приводит к формированию максимумов dQ/dt . В области максимума оно компенсируется возрастанием плотности низкочастотных электромагнитных мод. Этим обусловлен также рост тангенциальной диссипативной силы, как было показано в [17] в случае трения металлических пластин.

Таким образом, рис. 2–5 подтверждают ключевую роль частотного фактора $\omega^+ = \omega + k_x V$ (где $0 < \omega < \infty$, $-\infty < k_x < \infty$) при формировании аномального нагрева движущейся частицы. Численные значения dQ/dt определяются видом зависимости диэлектрической проницаемости от частоты и других параметров. В приближении Друде–Блоха–Грюнайзена абсолютные значения скорости радиационного нагрева движущейся наночастицы золота оказываются одного порядка или на один-два порядка величины выше соответствующих значений для покоящейся частицы.

Закключение. Направление теплового потока между движущейся металлической наночастицей и поверхностью металлической пластины зависит от величины скорости частицы и может изменять знак. При этом более нагретая частица продолжает

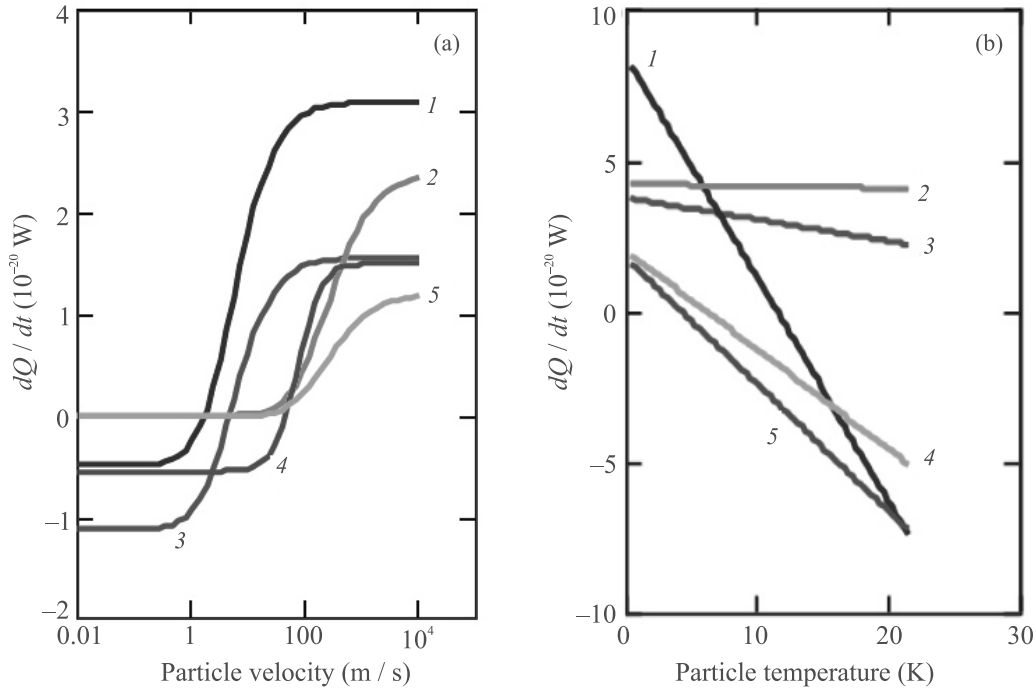


Рис. 5. (Цветной онлайн) Скорость нагрева частицы ($R = 3$ нм, $z_0 = 10$ нм) как функция скорости движения (а) и температуры (б) при отсутствии температурной зависимости частоты релаксации в формуле Друде. В случае (а) кривые 1–5 соответствуют конфигурациям: $T_1 = 4.2$, $T_2 = 3$ К, $\nu_1 = \nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$ (1); $T_1 = 4.2$, $T_2 = 3$ К, $\nu_1 = 9.77 \cdot 10^9$, $\nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$ (2); $T_1 = 4.2$, $T_2 = 1.5$ К, $\nu_1 = \nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$ (3); $T_1 = 4.2$, $T_2 = 3$ К, $\nu_1 = 1.28 \cdot 10^8$, $\nu_2 = 9.77 \cdot 10^9$ с $^{-1}$ (4); $T_1 = 4.2$, $T_2 = 1.5$ К, $\nu_1 = 9.77 \cdot 10^9$, $\nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$ (5). Кривые 2 и 5 построены с коэффициентом 1/100. В случае (б) кривые 1–5 соответствуют: $\nu_1 = 9.77 \cdot 10^9$, $\nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$, $V = 20$ м/с (1); $\nu_1 = \nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$, $V = 100$ м/с (2); $\nu_1 = \nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$, $V = 20$ м/с (3); $\nu_1 = 1.28 \cdot 10^8$, $\nu_2 = 9.77 \cdot 10^9$ с $^{-1}$, $V = 50$ м/с (4); $\nu_1 = \nu_2 = 1.28 \cdot 10^8$ с $^{-1}$, $V = 0$ м/с (5). В случае (б) температура пластины $T_2 = 4.2$ К. Значения $\nu_{1,2} = 1.28 \cdot 10^8$ и $9.77 \cdot 10^9$ с $^{-1}$ соответствуют формуле (5) при температурах 4.2 и 10 К

нагреваться от холодной поверхности. Величина скорости аномального нагрева зависит от соотношения между температурами тел, скоростью движения и расстоянием.

1. С. М. Рытов, *Теория электромагнитных флуктуаций и теплового излучения*, АН СССР, М. (1953).
2. М. Л. Левин, С. М. Рытов, *Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике*, Наука, М. (1967).
3. Е. А. Виноградов, И. А. Дорофеев, *Термостимулированные электромагнитные поля твердых тел*, Физматлит, М. (2010).
4. D. Maestre and R. Petit, *Opt. Commun.* **17**, 196 (1976).
5. J.-J. Greffet, R. Carminati, K. Joulain, J.-P. Mulet, S. Mainguy, and Y. Chen, *Nature* **416**, 61 (2002).
6. D. Polder and M. van Hove, *Rev. B* **4**, 3303 (1971).
7. М. Л. Левин, В. Г. Полевой, С. М. Рытов, *ЖЭТФ* **79**(6), 2087 (1980) [M. L. Levin, V. G. Polevoi, and S. M. Rytov, *Sov. Phys. JETP* **52**, 1053 (1980)].

8. K. Joulain, J.-P. Mulet, F. Marquier, R. Carminati, and J.-J. Greffet, *Surf. Sci. Rep.* **57**, 59 (2005).
9. A. I. Volokitin and B. N. J. Persson, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1291 (2007).
10. K. Park and Zh. Zhang, *Front. Heat Mass Transf. (FHMT)* **4**, 013001 (2013).
11. G. Bimonte, T. Emig, M. Kardar, and M. Kruger, *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **8**, 119 (2016).
12. J.-J. Greffet, *C. R. Physique* **18**, 24 (2017).
13. Г. В. Дедков, А. А. Кясов, *УФН* **187**(6), 599 (2017) [G. V. Dedkov and A. A. Kyasov, *Phys.-Usp.* **60**, 559 (2017)].
14. G. V. Dedkov and A. A. Kyasov, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 354006 (2008).
15. P.-O. Chapuis, M. Laroche, S. Volz, and J.-J. Greffet, *J. Appl. Phys.* **92**(20), 201906 (2008).
16. *Handbook of Physics*, ed. by E. U. Condon and H. Odishaw, McGraw Hill, N.Y. (1967).
17. Г. В. Дедков, *Письма в ЖЭТФ* **114**(11), 779 (2021) [G. V. Dedkov, *JETP Lett.* **114**(11), 713 (2021)].

Комментарий к статье

“Теория вращающегося двумерного вигнеровского кластера”

(Письма в ЖЭТФ 115(10), 642 (2022))

К. В. Чукбар¹⁾

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2022 г.

После переработки 1 июля 2022 г.

Принята к публикации 16 августа 2022 г.

DOI: 10.31857/S1234567822180112, EDN: kgnwoo

В работе [1] изучалось поведение двумерного кластера взаимодействующих электронов в переменном магнитном поле. Полученные результаты весьма интересны и актуальны, однако, как представляется, в тексте недостаточно прослежен общезначимый контекст решаемых задач.

В частности, авторы пишут, что изменение однородного магнитного поля, перпендикулярного плоскости жесткого кластера, с B_1 на B_2 вызывает его вращение как целого с частотой, равной разности “циклотронных полужабот”: $\Omega = (\omega_{B_1} - \omega_{B_2})/2$, $\omega_B = eB/(mc)$. Эта полужабота имеет стандартное наименование в физической номенклатуре, а сам эффект является прямым следствием так называемой теоремы Лармора. Вот как она формулируется в классическом курсе [2] (§ 45, с. 142): “...в нерелятивистском случае поведение системы зарядов с одинаковыми отношениями e/m , совершающих финитное движение в центрально-симметричном электрическом поле и в слабом однородном магнитном поле \mathbf{V} , эквивалентно поведению этой же системы зарядов в том же электрическом поле в системе координат, вращающейся с угловой скоростью $\mathbf{\Omega} = e\mathbf{V}/(2mc)$...”, а угловая скорость $\Omega = eB/(2mc)$ называется *ларморовой частотой*.

В случае кластера роль внешнего электрического поля, обеспечивающего финитность эволюции системы, играет внешний же параболический потенциал. Как можно увидеть из доказательства теоремы Лармора в [2], ни электрическая его природа, ни центральная симметрия не требуются, используется только зависимость этого потенциала лишь от расстояний частиц до центра системы, так что аксиальной симметрии и направленности как магнитного поля, так и частоты вращения вдоль оси кластера вполне достаточно. Под слабостью же магнитно-

го поля понимается малость циклотронной частоты в сравнении с собственными частотами системы, а у жесткого кластера такие частоты стремятся к бесконечности.

Вообще, ларморовы частоты проявляются в самых разных случаях. Наряду с разобранным эффектом, можно сослаться на указанную в [3] (§ 64, с. 310) эквивалентность задачи об определении переменного магнитного поля вокруг неравномерно вращающегося тела задаче об определении магнитного же поля вокруг неподвижного тела, находящегося в однородном внешнем поле с $\mathbf{V} = -2mc\mathbf{\Omega}/e$ или на “классическое” объяснение эффекта Зеемана в томсоновской модели атома – см. задачу к § 21 на с. 79 в [2]. Да достаточно просто сравнить выражения для двух гироскопических сил: магнитной составляющей силы Лоренца $m\omega_B \times \mathbf{v}$ и силы Кориолиса $m2\mathbf{\Omega} \times \mathbf{v}$.

Далее, утверждение авторов [1], что свободные электроны в аналогично изменяющемся магнитном поле “будут вращаться вокруг некоторых положений” также не вполне корректно. По крайней мере, если под свободой понимать отсутствие взаимодействия не только с параболическим потенциалом, но и между собой и при не слишком быстром переключении от B_1 до B_2 за время τ , удовлетворяющее неравенству $\omega_B \tau \gg 1$, их поведение не таково. Следует заметить, что даже если магнитное поле очень мало (~ 1 Гс), то время переключения должно превышать всего лишь половину микросекунды (для $\omega_B \tau \sim 10$), т.е. в реальном эксперименте при создании B магнитными катушками указанное соотношение будет выполняться с большим запасом.

В таком режиме основным эффектом будет радиальное смещение электронов к центру или от центра системы в зависимости от того, растет или падает внешнее поле. Согласно гл. III в [4] при выполнении этого неравенства в уравнении движения электрона

¹⁾e-mail: Chukbar_KV@nrcki.ru

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

под воздействием какой-либо перпендикулярной к внешнему магнитному полю силы \mathbf{F} можно пренебречь инерцией в левой части в сравнении с последним членом в правой части. В результате эта сила приводит к так называемому дрейфовому движению со скоростью, направленной вдоль $-\mathbf{F} \times \mathbf{B}$ (аналог прецессии гироскопа). В данном случае в цилиндрической системе координат в задаче присутствует переменное во времени, но однородное в пространстве магнитное поле $\mathbf{B} = B(t)\mathbf{e}_z$ с вектор-потенциалом $\mathbf{A} = Br/2 \cdot \mathbf{e}_\varphi$, порождающее индукционное электрическое поле $\mathbf{E} = -1/c \cdot \partial \mathbf{A} / \partial t$.

Согласно сказанному выше, исходно покоящийся в таком \mathbf{B} электрон в первом приближении будет испытывать дрейф в скрещенных полях $\mathbf{v}_E = c\mathbf{E} \times \mathbf{B}/B^2$. Его скорость равна $v_E = \dot{r} = -\dot{B}r/(2B)$, т.е. движение происходит с сохранением интеграла $r^2B = \text{const}$ (смена знака магнитного поля в таком подходе не описывается, поскольку вблизи $B \rightarrow 0$ дрейфовое приближение неизбежно нарушается). Иными словами, при изменении B , скажем, в два раза, кластер “свободных” электронов как простая совокупность невзаимодействующих (например, из-за большой разреженности) частиц сожмется или расширится в $\sqrt{2}$ раз. Поскольку данный вариант соответствует другой крайности – случаю предельно мягкой системы (с нулевыми собственными частотами), то не удивительно, что в реалистичных расчетах [1] наблюдалось и вращение, и сжатие кластера. В принципе, в движении можно учесть и следующий член разложения по параметру $(\omega_B \tau)^{-1}$ – дрейф под воздействием силы инерции $-m\dot{\mathbf{v}}_E$, который из-за связи с переменностью уже электрического поля принято называть “поляризационным” [4]. Нетрудно видеть, что он приводит к угловому смещению электрона по закону $r\dot{\varphi} = \dot{v}_E/\omega_B$, или, если угодно, с учетом указанного закона сохранения

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{mc}{e\sqrt{B}} \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{1}{\sqrt{B}} \right)$$

(при $B > 0$, в противном случае под корнем стоит $-B$, и знак правой части меняется). Иными словами, мягкий кластер не только сжимается/расширяется, но и слегка проворачивается, однако смещение по углу много меньше радиального. “Вращаются вокруг некоторых положений” только электроны, помещенные в магнитное поле с исходно ненулевой скоростью (но и при этом дрейф неизбежен) или испытывавшие “скачок” этого поля с $\omega_B \tau \ll 1$, при котором уже инерция доминирует над магнитной составляющей силы Лоренца. Однако, как указано выше, реализовать такой режим на практике, а не в расчетах крайне непросто.

И в заключение следует отметить, что и вращение жесткого, и сжатие мягкого кластера являются тривиальным следствием закона сохранения обобщенного углового импульса (момента импульса) системы вследствие нетривиальной симметрии ее лагранжиана:

$$\sum_i \left[mr_i^2 \dot{\varphi}_i - \frac{e}{c} A(t, r_i) r_i \right] = \text{const.}$$

Просто в первом случае ввиду невозможности радиального движения компенсация переменной полевой составляющей происходит за счет механической, а во втором все решается внутри члена с вектор-потенциалом (инерция дрейфового движения ничтожна). Лагранжев и гамильтонов подход позволяет сделать очень многое, например, проанализировать, как модифицируется дрейфовый интеграл r^2B при прохождении $B(t)$ через 0.

Автор благодарен А. С. Иоселевичу и В. П. Пастухову за ценные обсуждения.

1. М. М. Махмудиан, М. М. Махмудиан, М. В. Энтин, Письма в ЖЭТФ **115**, 642 (2022).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика, т. II. Теория поля*, Наука, М. (1973), 504 с.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика, т. VIII. Электродинамика сплошных сред*, Наука, М. (1982), 624 с.
4. Д. А. Франк-Каменецкий, *Лекции по физике плазмы*, Атомиздат, М. (1968), 288 с.

Ответ на комментарий к статье “Теория вращающегося двумерного вигнеровского кластера” (Письма в ЖЭТФ 115(10), 642 (2022))

Махмуд М. Махмудиан^{+*1)}, Мехрдад М. Махмудиан^{+*1)}, М. В. Энтин⁺¹⁾

⁺ Институт физики полупроводников, Сибирское отделение РАН, 630090 Новосибирск, Россия

*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 16 июля 2022 г.

После переработки 15 августа 2022 г.

Принята к публикации 16 августа 2022 г.

DOI: 10.31857/S1234567822180124, EDN: kgvwjh

Мы согласны с тем, что результат “ $\omega_c/2$ ” для жесткого кластера следует из фундаментальных формул. Однако, заметим, что в нашем случае критически важным являлось предположение о пропорциональности механического момента инерции и момента силы со стороны вихревого поля: то, что вклад каждого электрона в момент силы пропорционален квадрату расстояния до центра. Например, если рассмотреть тот же кластер в поле соленоида конечного радиуса, универсальность пропадет. В то же время для точечного соленоида (см. [1]) универсальность (правда, выраженная через поток магнитного поля) остается, так как снаружи его магнитное поле равно нулю.

Далее, по поводу поведения мягкого кластера в переменном магнитном поле. На самом деле имеются различные сценарии движения сложной системы электронов во внешнем потенциале и переменном магнитном поле. Мы считали [2], что включение магнитного поля достаточно быстрое, $\omega_c\tau \ll 1$. На рисунке 1 прослежен другой вариант, соответствующий адиабатическому пределу $\omega_c\tau \gg 1$. В этом случае вначале электроны приводятся в движение по азимуту за счет вихревого поля. Затем формируются циклотронные орбиты, дрейфующие под действием вихревого электрического поля к центру кластера. После установления магнитного поля вихревое поле исчезает, а поле потенциальной ямы остается, поэтому электроны начинают дрейфовать по азимуту. Подчеркнем, что в дрейфовом приближении кластер сжимается, сохраняя свою структуру.

Мы не согласны с тем, что быстрое включение магнитного поля неосуществимо. На самом деле, ви-

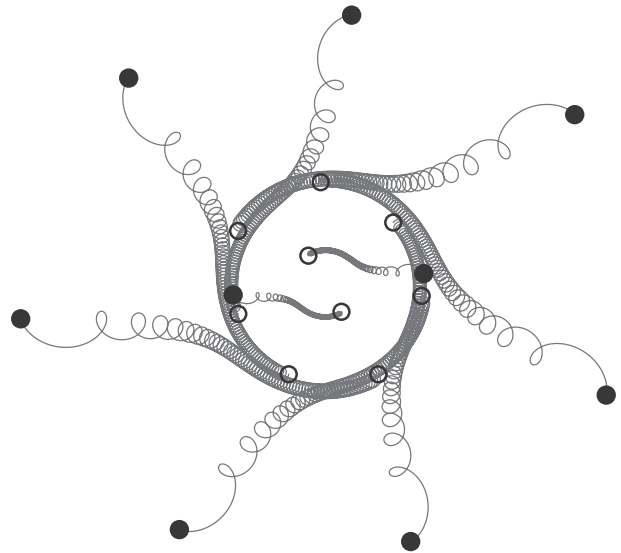


Рис. 1. (Цветной онлайн) Двумерный вигнеровский кластер с $N = 9$ электронами в магнитном поле $B(t) = B_0(\text{th}((t - t_0)/c_0) + 1)$ при $B_0 = 50$, $t_0 = 1$, $c_0 = 1$. Сплошные и пустые кружки – начальные и конечные положения электронов, линии – их траектории

димо, это возможно, если поместить над двумерным вигнеровским кластером сверхпроводящую пластину, экранирующую внешнее магнитное поле, либо сверхпроводящее кольцо с захваченным потоком. Если быстро перевести сверхпроводник в нормальное состояние, например, за счет нагрева лазерным импульсом, то магнитное поле, действующее на электроны, изменится от нуля до конечного значения в первом случае и от конечного значения до нуля во втором. Поскольку лазерный импульс может быть очень коротким, время изменения магнитного поля может достичь значения обратной проводимости нормального образца, т.е. для свинца 10^{-14} с и менее. Конечно, это сильно заниженное значение, так

¹⁾ e-mail: mahmood@isp.nsc.ru; m.makhmudian1@g.nsu.ru; entin@isp.nsc.ru

как сам нагрев образца является достаточно инерционным. Примем в качестве времени нагрева 10^{-10} с. При поле 0.01 Тл это дает $\omega_c \tau = 0.16$, что соответствует неадиабатическому случаю.

1. Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сендс, *Фейнмановские лекции по физике, Электродинамика*, АСТ, М. (2020), 352 с, гл. 17, § 4.
2. М. М. Махмудиан, М. М. Махмудиан, М. В. Энтин, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 642 (2022).

Текущий авторский указатель тома 115 ¹⁾

EDN: kgyqpk

- Ahmad S. **115**, 593 (539)
Atalikov K. **115**, 809 ()
Barash Yu. S. **115**, 304 (267)
Batulin R. G. **115**, 108 (98)
Belonovskii A. V. **115**, 611 ()
Bensaid D. **115**, 593 (539)
Bera M. K. **115**, 448 (406)
Chaplik A. V. **115**, 656 ()
Deviatov E. V. **115**, 304 (267)
Dimri A. K. **115**, 448 (406)
Doumi B. **115**, 593 (539)
Evtikhiev V. P. **115**, 611 ()
Girshova E. I. **115**, 611 ()
Kaliteevski M. A. **115**, 611 ()
Kiimov A. G. **115**, 108 (98)
Kolesnikov N. N. **115**, 304 (267)
Kotikov A. V. **115**, 467 (429);
115, 609 ()
Kuznetsov M. D. **115**, 108 (98)
Lebed A. G. **115**, 392 (356)
Levitskii I. V. **115**, 611 ()
Magarill L. I. **115**, 656 ()
Mitrofanov M. I. **115**, 611 ()
Nikolaev N. N. **115**, 683 ()
Parmar A. **115**, 448 (406)
Podivilov E. **115**, 601 (553)
Pollock M. D. **115**, 610 ()
Pozina G. **115**, 611 ()
Rodin S. N. **115**, 611 ()
Shvetsov O. O. **115**, 304 (267)
Smirnov S. **115**, 601 (553)
Sturman B. **115**, 601 (553)
Tayurskii D. A. **115**, 108 (98)
Timonina A. V. **115**, 304 (267)
Vitlina R. Z. **115**, 656 ()
Volovik G. E. **115**, 306 (276);
115, 498 (461)
Voznyuk G. V. **115**, 611 ()
Zemlyakov I. A. **115**, 609 ()
Zotov A. **115**, 809 ()
Абдуллаев Н. А. **115**, 801 ()
Аблясова О. С. **115**, 571 (518)
Агамалин М. А. **115**, 322 (292)
Агеев Э. И. **115**, 213 (186)
Алексеев Б. А. **115**, 474 (439)
Алексеев В. В. **115**, 745 ()
Алешин А. Н. **115**, 10 (7)
Алешин П. А. **115**, 10 (7)
Алиева Е. Н. **115**, 801 ()
Алиев В. Ш. **115**, 89 (79)
Алиев З. С. **115**, 801 ()
Ализаде Е. Г. **115**, 801 ()
Алоджанц А. П. **115**, 685 ()
Амирасланов И. Р. **115**, 801 ()
Андрианов А. В. **115**, 10 (7)
Андрющенко П. Д. **115**, 500 (466)
Анкудинов В. Е. **115**, 778 ()
Арбузов А. Б. **115**, 417 (377)
Аронин А. С. **115**, 308 (280)
Арсланов Т. Р. **115**, 218 (190)
Архипенко М. В. **115**, 528 (491)
Архипов М. В. **115**, 3 (1)
Архипов Р. М. **115**, 3 (1)
Афанасьев А. Е. **115**, 562 (509)
Афонин Г. В. **115**, 110 (102)
Ашитков С. И. **115**, 576 (523)
Бабенко П. Ю. **115**, 603 (560)
Баженов А. Ю. **115**, 685 ()
Бакурский С. В. **115**, 786 ()
Бакшт Е. Х. **115**, 710 ()
Балдин А. А. **115**, 474 (439)
Балькин В. И. **115**, 562 (509)
Батулин Р. Г. **115**, 190 (167)
Белан С. А. **115**, 811 ()
Белослудов В. Р. **115**, 144 (124)
Белослудов Р. В. **115**, 144 (124)
Белотелов В. И. **115**, 224 (196)
Бержанский В. Н. **115**, 224 (196)
Благов А. Е. **115**, 170 (148);
115, 492 (456)
Блеко В. В. **115**, 474 (439)
Богач А. В. **115**, 150 (130)
Богданова Н. А. **115**, 520 (484)
Богданов Ю. И. **115**, 520 (484)
Богомоллов Ю. В. **115**, 745 ()
Божко Ю. Ю. **115**, 144 (124)
Болдырев К. Н. **115**, 40 (34)
Бондаренко С. Г. **115**, 547 (495)
Борисов А. Э. **115**, 270 (239)
Бункин А. Ф. **115**, 528 (491)
Буньков Ю. М. **115**, 740 ()
Бутько В. Г. **115**, 47 (41)
Быкова Д. В. **115**, 562 (509)
Вайгель Т. **115**, 492 (456)
Валеев Б. Ю. **115**, 103 (93)
Васильев Е. В. **115**, 500 (466)
Васильев П. П. **115**, 35 (29);
115, 424 (384)
Васин К. В. **115**, 190 (167);
115, 420 (380)
Вахитов Р. М. **115**, 123 (118)
Вейнгер А. И. **115**, 730 ()
Вершков В. А. **115**, 360 (324)
Виноградов Н. П. **115**, 710 ()
Водолазов Д. Ю. **115**, 658 ()
Волков В. А. **115**, 163 (141)
Волотовский Р. А. **115**, 500 (466)
Воронин А. А. **115**, 437 (396)
Вуколов А. В. **115**, 474 (439)
Высоцкий М. И. **115**, 67 (59)
Габбасов Б. Ф. **115**, 190 (167)
Гайдар С. М. **115**, 417 (377)
Галенко П. К. **115**, 778 ()
Гамзатов А. Г. **115**, 218 (190)
Гелаш А. А. **115**, 51 (45)
Герасимов К. И. **115**, 769 ()
Гец К. В. **115**, 144 (124)
Глазкова Д. А. **115**, 241 (213);
115, 315 (286)
Глезер А. М. **115**, 110 (102)
Гоголев А. С. **115**, 170 (148)
Годунов С. И. **115**, 67 (59)
Головенчиц Е. И. **115**, 262 (231)
Голубь А. П. **115**, 629 ()
Голяшов В. А. **115**, 315 (286)
Грашин С. А. **115**, 360 (324)
Григорьев С. В. **115**, 717 ()
Гриценко В. А. **115**, 89 (79)
Гришаков К. С. **115**, 457 (422)
Гудин С. А. **115**, 218 (190)
Гудовских А. С. **115**, 213 (186)
Гусев А. А. **115**, 47 (41)
Гусев Н. С. **115**, 658 ()
Гусев С. А. **115**, 658 ()
Давыдов М. А. **115**, 528 (491)
Данилов П. А. **115**, 287 (251)
Дворецкий С. А. **115**, 230 (202)
Дегтяренко Н. Н. **115**, 457 (422)
Демин В. А. **115**, 184 (161)
Демишев С. В. **115**, 150 (130);
115, 717 ()
Демокритов С. О. **115**, 736 ()
Джахангирли З. А. **115**, 801 ()
Дмитриенко В. Е. **115**, 492 (456)
Долганов В. К. **115**, 236 (208)
Долганов П. В. **115**, 236 (208)
Дормидонов А. Е. **115**, 15 (11)
Драбинский М. А. **115**, 360 (324)
Дремин А. А. **115**, 595 (548)
Дудников В. А. **115**, 650 ()
Екимов Е. А. **115**, 692 ()
Елисеев Л. Г. **115**, 360 (324)
Еремин М. В. **115**, 190 (167);
115, 420 (380)
Ермольчик В. Л. **115**, 547 (495)
Естюнин Д. А. **115**, 241 (213);
115, 315 (286)
Жаховский В. В. **115**, 20 (16);
Жаховский В. В. **115**, 80 (71);
115, 576 (523)
Жданов Р. К. **115**, 144 (124)
Желтиков А. М. **115**, 353 (318);
115, 437 (396)
Жемчугов Е. В. **115**, 67 (59)
Жидовцев Н. А. **115**, 71 (63)
Жорнак М. **115**, 492 (456)
Жуков А. А. **115**, 484 (449)
Жукова М. О. **115**, 3 (1)
Заболотных А. А. **115**, 163 (141)
Забродский А. Г. **115**, 730 ()
Заварцев Ю. Д. **115**, 394 (362)
Задорожная Л. А. **115**, 554 (502)
Залозная Е. Д. **115**, 15 (11)
Захарян А. А. **115**, 322 (292)

¹⁾ В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 115(1)–115(9).

- Звездин А. К. **115**, 224 (196)
Зверев В. Н. **115**, 801 ()
Земцов И. А. **115**, 360 (324)
Зиновьев А. Н. **115**, 603 (560)
Зицунова Е. В. **115**, 176 (153)
Зуев Д. А. **115**, 213 (186)
Иванов А. А. **115**, 437 (396)
Иванов А. В. **115**, 176 (153)
Ильющин И. Г. **115**, 500 (466)
Иногамов Н. А. **115**, 20 (16);
Иногамов Н. А. **115**, 80 (71);
115, 576 (523)
Ионин А. А. **115**, 699 ()
Исмагилов А. О. **115**, 3 (1)
Исхакзай Просвирин Р. М. Х. И. П.
115, 89 (79)
Иудин В. А. **115**, 213 (186)
Ишханян А. М. **115**, 401 (368)
Калиновская Л. В. **115**, 547 (495)
Кандидов В. П. **115**, 15 (11)
Каневский В. М. **115**, 554 (502)
Капитан В. Ю. **115**, 500 (466)
Капитан Д. Ю. **115**, 500 (466)
Карасев М. С. **115**, 717 ()
Каратаев П. В. **115**, 474 (439)
Каркарьян Е. К. **115**, 67 (59)
Касахара Ё. **115**, 636 ()
Катаев А. Л. **115**, 753 ()
Катамадзе К. Г. **115**, 613 ()
Кауль А. Р. **115**, 218 (190)
Кац Е. И. **115**, 236 (208)
Квашнин А. Г. **115**, 322 (292)
Квашнин Д. Г. **115**, 103 (93)
Квон З. Д. **115**, 230 (202)
Киямов А. Г. **115**, 190 (167)
Кленов Н. В. **115**, 786 ()
Климов А. И. **115**, 479 (444)
Климовских И. И. **115**, 315 (286)
Клумов Б. А. **115**, 117 (108)
Кобелев Н. П. **115**, 110 (102);
115, 308 (280)
Ковалев М. С. **115**, 287 (251)
Ковальчук М. В. **115**, 170 (148);
115, 492 (456)
Кожевников В. Ю. **115**, 710 ()
Козлов Д. А. **115**, 230 (202)
Козловская К. А. **115**, 492 (456)
Козырев А. В. **115**, 710 ()
Коковин А. С. **115**, 710 ()
Колобов Ю. Р. **115**, 576 (523)
Колпак В. И. **115**, 636 ()
Компанец В. О. **115**, 15 (11)
Кондрин М. В. **115**, 692 ()
Конев В. Ю. **115**, 479 (444)
Кончаков Р. А. **115**, 308 (280)
Коржов В. А. **115**, 170 (148)
Королева А. В. **115**, 315 (286)
Король А. О. **115**, 500 (466)
Косарева О. Г. **115**, 699 ()
Кох К. А. **115**, 315 (286)
Кочарян В. Р. **115**, 170 (148)
Крайнов В. П. **115**, 401 (368)
Красиков К. М. **115**, 150 (130)
Кретова М. А. **115**, 110 (102)
Крупин В. А. **115**, 360 (324)
Кубанкин А. С. **115**, 474 (439)
Кудряшов С. И. **115**, 287 (251)
Кузьмин Е. В. **115**, 287 (251)
Куковицкий Е. Ф. **115**, 270 (239)
Кукушкин И. В. **115**, 595 (548)
Кулеева Н. А. **115**, 444 (402)
Кулик С. П. **115**, 613 ()
Куприянов М. Ю. **115**, 786 ()
Курбанова Д. Р. **115**, 505 (471)
Кустов П. Н. **115**, 213 (186)
Кутовой С. А. **115**, 394 (362)
Кучинский Э. З. **115**, 444 (402)
Лавриков А. С. **115**, 554 (502)
Ланин А. А. **115**, 437 (396)
Лахдеранта Э. **115**, 730 ()
Лахин В. П. **115**, 360 (324)
Лебедев В. Г. **115**, 256 (226)
Леванова О. А. **115**, 745 ()
Левичев М. Ю. **115**, 658 ()
Левченко А. О. **115**, 287 (251)
Леднев В. Н. **115**, 287 (251)
Ли Я. **115**, 437 (396)
Лобанов Н. Д. **115**, 793 ()
Лосев А. С. **115**, 59 (52)
Лудт К. **115**, 492 (456)
Лукичев В. Ф. **115**, 520 (484)
Лункин А. В. **115**, 328 (297)
Лысенко С. Е. **115**, 360 (324)
Магадеев Е. Б. **115**, 123 (118)
Магомедов М. А. **115**, 505 (471)
Майдыковский А. И. **115**, 297 (261)
Майоров А. Г. **115**, 745 ()
Макаров А. Г. **115**, 500 (466)
Макаров А. С. **115**, 110 (102);
115, 308 (280)
Макарова Т. П. **115**, 315 (286)
Макаров Г. Н. **115**, 292 (256);
115, 703 ()
Максимовская А. А. **115**, 786 ()
Малахов В. В. **115**, 745 ()
Мамедов Н. Т. **115**, 801 ()
Мамонов Е. А. **115**, 297 (261)
Манохин С. С. **115**, 576 (523)
Маркелова М. Н. **115**, 218 (190)
Мартьянов С. Н. **115**, 724 ()
Матвеев О. В. **115**, 379 (343);
115, 793 ()
Махмудиан М. М. **115**, 642 ()
Мельников А. А. **115**, 40 (34)
Мельников А. В. **115**, 360 (324)
Мигаль Е. А. **115**, 431 (390)
Миёши Ё. **115**, 636 ()
Миннегалиев М. М. **115**, 769 ()
Митетело Н. В. **115**, 297 (261)
Михайлова Ю. В. **115**, 213 (186)
Михайлов Н. Н. **115**, 230 (202)
Михеев К. Е. **115**, 431 (390)
Мишняков В. **115**, 512 (477)
Мкртчян А. Г. **115**, 170 (148)
Мнев П. Н. **115**, 59 (52)
Мовсисян А. Е. **115**, 170 (148)
Могилевский М. М. **115**, 28 (23);
115, 636 ()
Моисеев С. А. **115**, 353 (318);
115, 769 ()
Моисеенко И. Л. **115**, 636 ()
Мокроусова Д. В. **115**, 699 ()
Молокоедов В. С. **115**, 753 ()
Моргун Л. А. **115**, 270 (239)
Морозова М. А. **115**, 379 (343);
115, 793 ()
Москалюк О. А. **115**, 10 (7)
Мурзина Т. В. **115**, 297 (261)
Муртазаев А. К. **115**, 505 (471)
Мухин И. С. **115**, 213 (186)
Надолинский А. М. **115**, 469 (434)
Наумов С. В. **115**, 585 (531)
Неласов И. В. **115**, 576 (523)
Немец А. Р. **115**, 360 (324)
Низамов Б. А. **115**, 281 (245)
Никитина М. М. **115**, 685 ()
Никитин Н. А. **115**, 528 (491)
Никитов С. А. **115**, 793 ()
Николаева И. А. **115**, 699 ()
Новиков В. А. **115**, 67 (59)
Нургалиев М. Р. **115**, 360 (324)
Нурмухаметов А. Р. **115**, 420 (380)
Овчинникова Е. Н. **115**, 492 (456)
Овчинникова Т. М. **115**, 650 ()
Овчинников П. А. **115**, 500 (466)
Овчинников С. Г. **115**, 650 ()
Орлов Ю. С. **115**, 650 ()
Осипов А. А. **115**, 339 (305);
115, 411 (371)
Остриков С. А. **115**, 287 (251)
Отроков М. М. **115**, 801 ()
Павлов А. Е. **115**, 417 (377)
Падалко М. А. **115**, 500 (466)
Панов Н. А. **115**, 699 ()
Пахомов А. В. **115**, 3 (1)
Пашенькин И. Ю. **115**, 658 ()
Пашенко А. В. **115**, 613 ()
Пегель И. В. **115**, 479 (444)
Перевалов Т. В. **115**, 89 (79)
Пержу А. В. **115**, 500 (466)
Перминов Н. С. **115**, 353 (318)
Перов Е. А. **115**, 80 (71)
Першин С. М. **115**, 528 (491)
Петин А. Н. **115**, 292 (256)
Петрова Е. А. **115**, 213 (186)
Петров Ю. В. **115**, 80 (71);
115, 576 (523)
Писаревский Ю. В. **115**, 492 (456)
Пихлер Г. **115**, 346 (312)
Подливаев А. И. **115**, 384 (348)
Пойдашев Д. Г. **115**, 571 (518)
Половец С. Е. **115**, 150 (130)
Полулях С. Н. **115**, 224 (196)
Попель С. И. **115**, 629 ()
Попов З. И. **115**, 322 (292)
Потемкин Ф. В. **115**, 71 (63);
115, 431 (390)
Потылицын А. П. **115**, 474 (439)
Прекул А. Ф. **115**, 139 (119)
Прокофьев В. Ю. **115**, 692 ()
Пудалов В. М. **115**, 270 (239)
Пушкарев Д. В. **115**, 699 ()
Пушкин А. В. **115**, 431 (390)
Пширков М. С. **115**, 281 (245)
Рамазанов М. К. **115**, 505 (471)

- Расковалов А. А. **115**, 51 (45)
 Ризаев Г. Э. **115**, 699 ()
 Розанов А. Н. **115**, 67 (59)
 Розанов Н. Н. **115**, 3 (1)
 Романенко Д. В. **115**, 379 (343)
 Романова А. В. **115**, 613 ()
 Рубан В. П. **115**, 450 (415)
 Ружицкий В. И. **115**, 786 ()
 Румянцев Б. В. **115**, 431 (390)
 Румянцев Л. А. **115**, 547 (495)
 Рыбин А. Е. **115**, 500 (466)
 Рыжков М. С. **115**, 230 (202)
 Рябов Е. А. **115**, 571 (518)
 Сабиров Т. Н. **115**, 769 ()
 Савицкий И. В. **115**, 437 (396)
 Садовский М. В. **115**, 444 (402)
 Сазонов С. В. **115**, 207 (181)
 Самарин А. Н. **115**, 717 ()
 Санина В. А. **115**, 262 (231)
 Саргсян А. **115**, 346 (312)
 Саркисян Д. **115**, 346 (312)
 Сахин В. О. **115**, 270 (239)
 Сдвиженский П. А. **115**, 287 (251)
 Селезнев Л. В. **115**, 699 ()
 Селиванов Ю. Г. **115**, 40 (34)
 Семенихин П. В. **115**, 730 ()
 Семенов А. В. **115**, 717 ()
 Семук Е. Ю. **115**, 224 (196)
 Сергеева Д. Ю. **115**, 762 ()
 Серебрянников Е. Е. **115**, 437 (396)
 Ситников Д. С. **115**, 576 (523)
 Скакуненко П. И. **115**, 562 (509)
 Складнева И. Ю. **115**, 801 ()
 Случанко Н. Е. **115**, 150 (130)
 Соколов А. Э. **115**, 650 ()
 Солдатов К. С. **115**, 500 (466)
 Солин Н. И. **115**, 585 (531)
 Соловаров Н. К. **115**, 394 (362)
 Соловьев И. И. **115**, 786 ()
 Сориа С. **115**, 297 (261)
 Старков Д. Е. **115**, 811 ()
 Степанов Е. А. **115**, 437 (396)
 Стремоухов С. Ю. **115**, 431 (390)
 Сулейманова Д. З. **115**, 71 (63)
 Сун Я. **115**, 213 (186)
 Супрун П. **115**, 512 (477)
 Суханов А. А. **115**, 394 (362)
 Суханова Е. В. **115**, 322 (292)
 Таланов Ю. И. **115**, 270 (239)
 Терещенко Г. Б. **115**, 710 ()
 Тарасенко С. В. **115**, 94 (84)
 Тарасов А. П. **115**, 554 (502)
 Тарасов В. Ф. **115**, 394 (362)
 Таргонский А. В. **115**, 170 (148)
 Тейтельбаум Г. Б. **115**, 270 (239)
 Терещенко О. Е. **115**, 315 (286)
 Тищенко А. А. **115**, 762 ()
 Токсумаков А. Н. **115**, 103 (93)
 Тотъменинов Е. М. **115**, 479 (444)
 Тютин В. В. **115**, 666 ()
 Урманчиев Р. В. **115**, 769 ()
 Усольцев А. С. **115**, 270 (239)
 Уставщиков С. С. **115**, 658 ()
 Фастовец Д. В. **115**, 520 (484)
 Федоров А. Н. **115**, 528 (491)
 Федотов А. Б. **115**, 437 (396)
 Федянин А. А. **115**, 157 (136)
 Филипов В. Б. **115**, 150 (130)
 Филиппов А. В. **115**, 197 (174)
 Фортова С. В. **115**, 80 (71)
 Хабанов Ф. О. **115**, 360 (324)
 Ханнанов Б. Х. **115**, 262 (231)
 Харчев Н. К. **115**, 360 (324)
 Хачатурова Т. А. **115**, 47 (41)
 Хилков С. А. **115**, 176 (153)
 Хисамеева А. Р. **115**, 595 (548)
 Хищенко К. В. **115**, 576 (523)
 Хомский Д. И. **115**, 444 (402)
 Хоник В. А. **115**, 110 (102);
115, 308 (280)
 Хоперский А. Н. **115**, 469 (434)
 Хорошилов А. Л. **115**, 150 (130)
 Хохлов В. А. **115**, 20 (16);
115, 576 (523)
 Худайбердиев Д. А. **115**, 230 (202)
 Ху М. **115**, 437 (396)
 Цзюао Ц. Ч. **115**, 110 (102)
 Цыпкин А. Н. **115**, 3 (1)
 Чекалин С. В. **115**, 15 (11);
115, 40 (34)
 Чекерес О. С. **115**, 59 (52)
 Чен Л. -Дж. **115**, 144 (124)
 Чень Ц. **115**, 287 (251)
 Чернозатонский Л. А. **115**,
 103 (93);
115, 184 (161)
 Чернышов А. А. **115**, 28 (23);
115, 636 ()
 Черосов М. А. **115**, 190 (167)
 Чугунин Д. В. **115**, 28 (23);
115, 636 ()
 Чулков Е. В. **115**, 801 ()
 Шавров В. Г. **115**, 94 (84)
 Шевелев М. В. **115**, 474 (439)
 Шевченко Ю. А. **115**, 500 (466)
 Шелухин Д. А. **115**, 360 (324)
 Шепелев В. В. **115**, 80 (71);
115, 576 (523)
 Шестаков Н. П. **115**, 650 ()
 Шикин А. М. **115**, 241 (213);
115, 315 (286)
 Шилкин Д. А. **115**, 157 (136)
 Шипило Д. Е. **115**, 699 ()
 Ширяев А. А. **115**, 692 ()
 Шицевалова Н. Ю. **115**, 150 (130)
 Щеголихина Н. И. **115**, 139 (119)
 Щепетильников А. В. **115**,
 595 (548)
 Элиович Я. А. **115**, 170 (148);
115, 492 (456)
 Энтин М. В. **115**, 642 ()
 Юдин В. Е. **115**, 10 (7)
 Юманс Д. Р. **115**, 59 (52)
 Юсупов Р. **115**, 190 (167)
 Язынин С. Г. **115**, 745 ()
 Ярошенко В. В. **115**, 213 (186)

Содержание
Том 116, выпуск 5
Поля, частицы, ядра

Shilpashree S.P., Shastri Venkataramana Neutron polarization observables in $d(\vec{\gamma}, \vec{n})p$ at low energies of interest to astrophysics 273

Оптика, лазерная физика

Федюхин Л.А., Колосовский Е.А., Горчаков А.В. Метод угловых инвариантов – эксперимент 275

Luo Y., Hao Y.-Q. Numerical simulation of GaAs/AlO_x high index contrast sub-wavelength gratings for GaAs-based vertical cavity surface emitting lasers 282

Плазма, гидро- и газодинамика

Белоплотов Д.В., Тарасенко В.Ф., Сорокин Д.А. Убегающие электроны при формировании положительной волны ионизации в азоте и воздухе 284

Тимохин В.М., Сергеев В.Ю., Ануфриев Е.А., Коробко Д.Д., Шаров И.А., Варфоломеев В.И., Новохацкий А.Н., Бахарев Н.Н., Векшина Е.О., Долгова К.В., Жильцов Н.С., Кавин А.А., Капралов В.Г., Киселев Е.О., Коваль А.Н., Курские Г.С., Лобанов К.М., Минаев В.Б., Мирошников И.В., Мухин Е.Е., Петров Ю.В., Рожанский В.А., Сахаров Н.В., Скоков В.Г., Тельнова А.Ю., Ткаченко Е.Е., Токарев В.А., Толстяков С.Ю., Тюхменева Е.А., Хромов Н.А. Спектроскопическая диагностика периферийной плазмы токамака “Глобус-М2” с использованием инжекции нейтрального гелия 292

Конденсированное состояние

Рыжкин М.И., Левченко А.А., Рыжкин И.А. Пайерлсовская неустойчивость решетки Либа 300

Жолудев М.С., Румянцев В.В., Морозов С.В. Расчет дискретных и резонансных уровней акцепторов в узкозонных твердых растворах CdHgTe 307

Белослудов В.Р., Гец К.В., Жданов Р.К., Божко Ю.Ю., Субботин О.С. Модифицированная молекулярная модель для описания конденсированных фаз тяжелой воды 313

Высотин М.А., Тарасов И.А., Федоров А.С., Варнаков С.Н., Овчинников С.Г. О возможных магнитных свойствах ультратонких пленок Mn₂GaS на подложках Al₂O₃ 318

Рубан В.П. Системы вихрей в бинарном бозе-конденсате типа “ядро-оболочка” 324

Биофизика

Сосоров А.Ю., Парашук О.Д., Харланов О.Г., Чичерин И.В., Трубицын А.А., Каменский П.А., Парашук Д.Ю. Низкочастотное комбинационное рассеяние транспортной и рибосомной РНК 330

Содержание

Том 116, выпуск 6

Поля, частицы, ядра

Zakharov B.G. Medium effects for hadron-tagged jets in proton-proton collisions 341

Оптика, лазерная физика

Новикова Т.И., Леонтьев А.А., Китаева Г.Х. Измерение квантовой эффективности аналоговых детекторов в поле параметрического рассеяния света 343

Конденсированное состояние

Сарыпов Д.И., Похабов Д.А., Погосов А.Г., Жданов Е.Ю., Бакаров А.К. Многоямный потенциал в квантовом точечном контакте траншейного типа 350

Галахов В.Р., Удинцева М.С., Наумов С.В., Шамин С.Н., Гижевский Б.А. Рентгеновские абсорбционные S_o L -спектры для установления зарядовых и спиновых состояний ионов кобальта в кобальтитах $LnBaCo_2O_{5+\delta}$ ($Ln = Eu, Gd, Tb$) 358

Григорьев О.А., Мусина Л.И., Загитова А.А., Ваньков А.Б., Кулик Л.В. Спектр нейтральных возбуждений в Лафлиновской жидкости $1/3$ 364

Шинкоренко А.С. Магнитные свойства тетраборатов Fe_4VO_7 и Mn_4VO_7 в трех структурных типах 371

Якунин М.В., Алешкин В.Я., Подгорных С.М., Неверов В.Н., Попов М.Р., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А. Особенности магнитотранспорта в двойной квантовой яме $HgTe/CdHgTe$ с промежуточной степенью инверсии зон 378

Зубов В.Е., Кудаков А.Д., Булатов Д.А., Стругацкий М.Б., Ягупов С.В. Эффект Фарадея в $FeVO_3$, обусловленный компонентой намагниченности параллельной оси C_3 387

Valba O., Gorsky A. Mobility edge in the Anderson model on partially disordered random regular graphs 392

Разное

Дедков Г.В. Аномальный радиационный нагрев металлической наночастицы при движении вблизи металлической пластины 394

Дискуссия

Чукбар К.В. Комментарий к статье “Теория вращающегося двумерного вигнеровского кластера” (Письма в ЖЭТФ 115(10), 642 (2022)) 399

Махмудиан М.М., Махмудиан М.М., Энтин М.В. Ответ на комментарий к статье “Теория вращающегося двумерного вигнеровского кластера” (Письма в ЖЭТФ 115(10), 642 (2022)) 401

Текущий авторский указатель тома 115 403