

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 113

Выпуск 5

10 марта 2021

*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>

Поиск модификации свойств ω -мезона в холодной ядерной материи в эксперименте Гиперон-М

С. В. Евдокимов¹⁾, В. И. Изучеев, Е. С. Кондратюк, Б. В. Полищук, С. А. Садовский, Ю. В. Харлов, А. А. Шангараев

НИЦ “Курчатовский институт” – ИФВЭ, 142281 Протвино, Россия

Поступила в редакцию 31 декабря 2020 г.

После переработки 25 января 2021 г.

Принята к публикации 25 января 2021 г.

Модификация спектральной функции векторных мезонов в ядерной среде предсказывается во многих теоретических моделях. Однако, существующие экспериментальные результаты, направленные на проверку этих моделей, весьма противоречивы. В эксперименте Гиперон-М проведен поиск возможных эффектов модификации массы и ширины ω -мезонов, образующихся во взаимодействии положительно-заряженных мезонов с импульсом 7 ГэВ/с с ядерными мишенями C, Be, Al, Cu, Sn и Pb. Измеренные значения массы и ширины ω -мезонов, рожденных на указанных ядрах, согласуются друг с другом с высокой точностью, не подтверждая таким образом теоретические модели, в которых предсказываются изменения массы и/или ширины ω -мезона в ядерной среде.

DOI: 10.31857/S1234567821050013

Введение. Динамическое нарушение киральной симметрии в вакууме приводит к ненулевым эффективным массам кварков, называемым конститuentными массами. В ядерной среде с ненулевой температурой или ненулевой плотностью нарушенная киральная симметрия может частично или полностью восстанавливаться, что отражается в изменении спектральной функции адронов в ядерной среде по сравнению с вакуумом.

Ряд теоретических моделей полагает, что заметное изменение кваркового конденсата [1] ожидается не только при высокой температуре, но и в ядерной среде при нормальной плотности. Согласно модели, основанной на правилах суммирования КХД [2], массы векторных мезонов ρ и ω могут быть меньше на сотню МэВ/с² в ядре по сравнению с массами этих мезонов в вакууме. Ряд более новых теоретических работ, выполненных в последние десятилетия, указывает на то, что масса ω -мезона в ядерной среде отличается от массы свободного ω -мезона лишь незначительно, но его спектральная функция может существенно уширяться (до 60 МэВ/с²) за счет резонансного взаимодействия ωN [3]. В модели взаимодействия ω -мезонов с нуклонами [4] также предсказывается увеличение ширины ω на 120 ± 10 МэВ/с². Недавние вычисления масс легких скалярных и векторных мезонов в рамках линейной сигма-модели с тремя ароматами и модели четных дублетов с двумя

ароматами [5] указывают на возможную зависимость массы ω - и ρ -мезонов от плотности ядерной среды, причем вариации массы зависят от выбора величины киральной инвариантной массы, которая может быть подогнана под экспериментальные данные.

Интерес к данной тематике не ограничивается только лишь теоретическими работами. Ряд исследований посвящен поиску модификаций свойств адронов в ядерной материи. В эксперименте E325 на КЕК PS [6], изучающем распады векторных мезонов ρ , ω , ϕ на e^+e^- в столкновениях протонов с импульсом 12 ГэВ/с с ядрами C и Cu, было обнаружено превышение спектров дилептонов слева от массовых пиков, соответствующих векторным мезонам, что интерпретировалось как уменьшение массы мезонов в ядерной среде в соответствии с моделью [2]. В детекторе Crystal Barrel/TAPS на комплексе меченных фотонов ELSA, где изучалось фоторождение ω -мезонов на ядрах от C до Pb [7], было обнаружено значительное увеличение ширины ω до 130–150 МэВ/с². В 2005 году этой же коллаборацией было сообщено [8] о наблюдении уменьшения массы ω на 14% на ядрах Nb, однако повторный анализ данных не подтвердил этот эффект [9]. Поиск эффектов модификации легких векторных мезонов осуществлялся и коллаборацией CLAS [10]. Эти результаты указывают на наличие незначительного уменьшения массы ρ -мезона в ядрах. Экспериментальное изучение возможного изменения кирального конденсата проводилось и в условиях горячей материи в столкно-

¹⁾e-mail: Sergey.Evdokimov@ihep.ru

вениях ультрарелятивистских тяжелых ионов. Эксперимент CERES/NA45 [11] обнаружил значительное превышение спектра масс e^+e^- -пар в области $0.3\text{--}0.7\text{ ГэВ}/c^2$ в Pb-Au столкновениях при энергии 158 ГэВ , которое может быть связано с уменьшением масс ρ - и ω -мезонов в ядерной среде. Более детальный обзор экспериментальных результатов приведен в работах [12, 13].

Целью данной работы является измерение массы и ширины ω -мезонов, образующихся в мезон-ядерных взаимодействиях при импульсе $7\text{ ГэВ}/c$ на различных ядерных мишенях для поиска возможных эффектов модификации параметров ω -мезонов, образовавшихся и сформировавшихся в ядре-мишени. Ядра мишеней в эксперименте (C, Be, Al, Cu, Sn, Pb) были подобраны таким образом, чтобы провести измерения в зависимости от радиуса R_A ядра-мишени, связанного с массовым числом ядра A соотношением $R_A \approx 1.2A^{1/3}\text{ Фм}$.

Эксперимент Гиперон-М [14] проведен на вторичном положительном пучке адронов на базе ускорительного комплекса У-70. В течение 2008–2018 гг. были получены данные, в которых реконструированы в общей сложности около 550 тыс. событий распада $\omega \rightarrow \pi^0\gamma$, рожденных в инклюзивной реакции

$$\pi^+(K^+, p) + {}^AZ \rightarrow M_{\rightarrow n\gamma}^0 + X. \quad (1)$$

Результаты эксперимента по измерению свойств нейтральных мезонов с использованием статистики 2008–2009 гг. приведены в работе [15], в которой нет однозначного вывода о возможной модификации массы ω -мезона из-за недостаточной статистической обеспеченности и ряда неучтенных аппаратных эффектов.

Структура работы следующая: в первой главе описаны постановка эксперимента Гиперон-М и задача измерения параметров ω -мезона в реакции (1), рассмотрены аппаратные эффекты, искажающие результаты, и способы их коррекции. Во второй главе обсуждается процедура обработки данных эксперимента применительно к ω -мезону в сеансах 2008–2018 гг. Подробно рассмотрены особенности идентификации и отбора ансамблей $\pi^0\gamma$ -событий, которые включают и изучаемые события распада $\omega \rightarrow \pi^0\gamma$. В третьей главе излагается методика Монте-Карло (МК) моделирования эксперимента, рассмотрены генератор событий, модель экспериментальной установки и параметризация модельных спектров масс $\pi^0\gamma$ -систем аппаратными функциями. В четвертой главе рассмотрена процедура параметрического анфолдинга массы и ширины ω -мезона на каждой мишени, обсуждается коррекция измерений с учетом

аппаратных эффектов, и приводятся окончательные результаты измерений.

1. Эксперимент Гиперон-М. Схема эксперимента Гиперон-М приведена на рис. 1. Установка включает в себя пучковый телескоп сцинтилляционных счетчиков $\{S_1, S_2, S_4\}$, три черенковских счетчика C_{1-3} , ядерную мишень Т, сцинтилляционный триггерный антисчетчик S_A и электромагнитный черенковский спектрометр полного поглощения LGD2, который располагался на расстоянии 370 см от мишени.

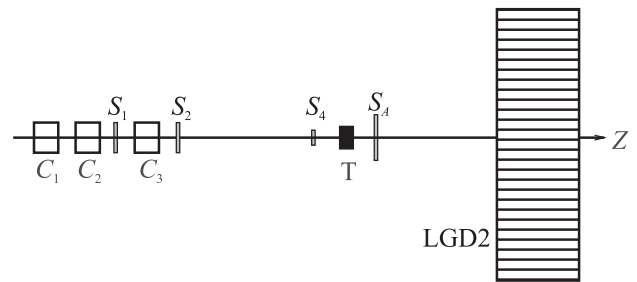


Рис. 1. Схема экспериментальной установки Гиперон-М: S_1, S_2, S_4 – пучковые сцинтилляционные счетчики; C_{1-3} – черенковские счетчики; Т – мишень; S_A – триггерный сцинтилляционный антисчетчик; LGD2 – черенковский электромагнитный спектрометр с радиаторами из свинцового стекла

Спектрометр LGD2 собран в виде матрицы 24×24 из блоков свинцового стекла, к торцевой поверхности которых приклеены фотоумножители. Размер блоков – $85 \times 85 \times 350\text{ мм}^3$. Центральная часть спектрометра выполнена из 8×8 блоков в два раза меньшего поперечного размера – $42.5 \times 42.5 \times 350\text{ мм}^3$. Более подробное описание установки, электроники и системы сбора данных эксперимента можно найти в работах [15–17].

Для измерений использовались семь ядерных мишеней: СН (полистирол), C, Be, Al, Cu, Sn и Pb, с радиационной толщиной от 0.16 до $0.45 X_0$, см. табл. 1, которые облучались на вторичном пучке несепарированных положительных частиц ($53\% \pi^+$, $7\% K^+$, $40\% p$) с импульсом $7\text{ ГэВ}/c$ и общей интенсивностью за цикл ускорителя У-70, варьировавшейся в пределах $\sim (0.2 - 1.5) \cdot 10^6\text{ част./с}$. Измерения на мишени из полистирола (СН) являются здесь контрольными, так как данные с этой мишени должны совпадать с данными на углеродной мишени (С), поскольку изучаемая в эксперименте реакция (1) подавлена на ядрах водорода, входящего в состав полистирольной мишени.

Для формирования триггерного сигнала Trg требовалось наличие пучковой частицы в пучковом те-

Таблица 1. Характеристики ядерных мишеней, использовавшихся в эксперименте, данные взяты из таблицы частиц [18]

Мишень	Радиус ядра мишени (Фм)	Толщина мишени (см)	Радиационная толщина (X/X_0)	Ядерная толщина мишени (l/λ)
C	2.3	7.5	0.399	0.193
CH	2.3	8.0	0.159	0.091
Be	3.0	7.8	0.221	0.185
Al	3.6	3.5	0.393	0.088
Cu	4.8	0.65	0.375	0.038
Sn	5.9	0.50	0.414	0.022
Pb	7.1	0.25	0.445	0.014

лескопе счетчиков $\{S_1, S_2, S_4\}$ и отсутствие сигнала с антисчетчика S_A :

$$\text{Trg} = S_1 \cdot S_2 \cdot S_4 \cdot \bar{S}_A. \quad (2)$$

Триггер позволял эффективно выделять инклюзивные события с нейтральными мезонами, вылетающими в телесный угол спектрометра LGD2 и распадающимися в конечном счете на фотоны. Уровень триггера, т.е. доля триггерных событий по отношению к падающему на мишень потоку пучковых частиц, как правило, имел величину $\approx (1 - 3) \cdot 10^{-2}$ в зависимости от интенсивности пучка, типа и толщины облучаемой мишени. Эффективность пучкового телескопа была достаточна для регистрации максимально возможного числа событий, принимаемых системой сбора данных. При этом эффективность антисчетчика S_A была измерена и составляла $98 \pm 1\%$. События, инициированные протонами, подавлялись посредством отбора по черенковским счетчикам (отсутствие сигналов со всех черенковских счетчиков).

Для дальнейшего изложения важно отметить здесь ряд существенных деталей эксперимента и особенностей обработки данных применительно к задаче измерения параметров ω -мезона.

Геометрия установки. Кассета, в которую вставлялась конкретная мишень Т для экспозиции на пучке, позволяет фиксировать положение мишени вдоль пучка с точностью ≈ 0.3 см, что приводит к неопределенности реконструкции массы M^0 в реакции (1) порядка 0.1 %. Чтобы убрать этот источник погрешности, следует проводить относительные измерения. В качестве нормировки была использована масса η -мезона, известная с точностью $\approx 3 \cdot 10^{-5}$ [18] и не подверженная модификации в ядрах мишеней, поскольку все η -мезоны в данном эксперименте распадаются вне ядра из-за своего большого времени жизни.

Калибровка спектрометра. Спектрометр был откалиброван на физических событиях (1) с реконстру-

ированной множественностью фотонов $n = 2$. Для этого использовались события двухфотонного распада π^0 -мезонов, образующихся на бериллиевой мишени с энергией пары $E_{2\gamma} > 1000$ МэВ. Определение калибровочных коэффициентов LGD2 проводилось методом их итерационной коррекции [19]: положение пика от распада π^0 -мезона с координатами одного из фотонов в данной ячейке спектрометра выставлялось на табличное значение его массы. Коррекция калибровочного коэффициента для каждой ячейки калориметра проводилась независимо от других. Конечная статистика и убывающая от центра к периферии калориметра заселенность ячеек калибровочными фотонами приводят к погрешностям определения калибровочных коэффициентов и, как следствие, массы системы M^0 .

Программа реконструкции идентифицирует фотоны в спектрометре, выделяя кластеры ячеек калориметра с амплитудами, превышающими порог в 10 отсчетов 12-битных АЦП. Кластерами считались группы ячеек с общей границей. В качестве энергии фотона бралась суммарная энергия кластера, а его координаты определялись по центру тяжести логарифмов амплитуд с эмпирической коррекцией на углы входа фотонов в спектрометр, которые могли достигать 20 градусов, детали см. в работах [15, 20, 21]. Этот тандем, реконструкция событий – калибровка – реконструкция событий, в эксперименте Гиперон-М приводит к целому ряду взаимосвязанных и взаимообусловленных эффектов.

Нелинейность энергетической шкалы LGD2 приводит к нелинейности шкалы эффективной массы системы M^0 в реакции (1). Это проявляется в несоответствии положения пика от распада $\eta \rightarrow 2\gamma$ табличному значению его массы, несмотря на проведенную калибровку спектрометра. Нелинейность энергетической шкалы обусловлена рядом аппаратных эффектов, включая рост с энергией боковых и продольных утечек фотонных ливней за пределы ячеек, ненулевой порог регистрации сигналов, а также различные угловые эффекты развития ливней. Для компенсации указанных эффектов была проведена коррекция энергетической шкалы LGD2 [22]. В результате нелинейность шкалы по массе зарегистрированных двухфотонных событий в реакции (1), измеренную по отношению масс η - и π^0 -мезонов, удалось подавить до уровня менее чем 0.2 %.

Неоднородность засветки спектрометра LGD2 фотонами калибровочных событий приводит, как уже отмечалось, к меньшей статистической обеспеченности калибровочных коэффициентов на периферии калориметра. Это влечет дополнительные иска-

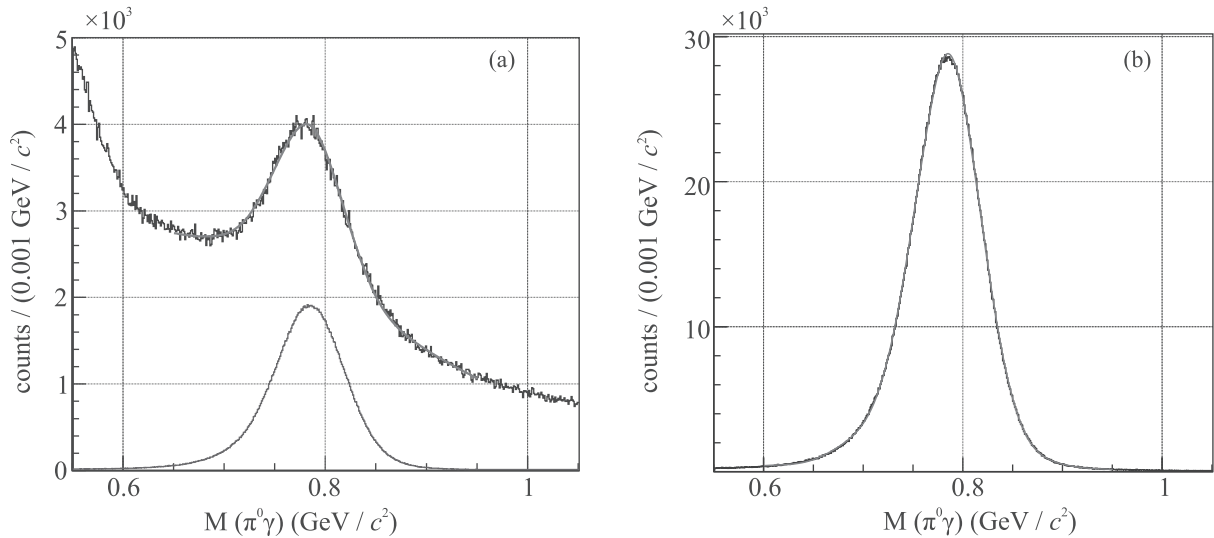


Рис. 2. (Цветной онлайн) Реконструированные спектры масс $\pi^0\gamma$ -событий с $E_{\pi^0\gamma} > 4000$ МэВ на Ве мишени: (а) – в эксперименте и (б) – в результате МК моделирования. Синей линией на рис. (а) показан МК спектр, масштабированный в соответствии с величиной сигнала в эксперименте

жения при измерении масс состояний с широким углом разлета фотонов, таких как η - и ω -мезонов. Данный факт также обуславливает расхождение наблюдаемых в эксперименте масс η - и π^0 -мезонов.

Высокая загрузка центральной части спектрометра в интенсивном пучке приводит к уменьшению коэффициента усиления фотоумножителей и, следовательно, к дрейфу калибровочных коэффициентов. Другим следствием высокой интенсивности пучка является искажение энергетического разрешения в центральной части спектрометра из-за наложения близких по времени событий, следующих друг за другом, за время оцифровки АЦП (140 нс). Уменьшить эти эффекты можно, если использовать события с фотонами преимущественно вне центральной области спектрометра LGD2.

Наконец, при переходе от одной ядерной мишени к другой следует учитывать аппаратные эффекты сдвигки измеряемой массы мезонов за счет изменения относительного вклада событий, происходящих на счетчике S_4 , к числу событий на самой мишени, поскольку ядерная толщина использованных мишеней изменяется более чем на порядок величины, см. табл. 1. Эти эффекты были учтены методом МК моделирования, см. ниже главу 3.

2. Обработка данных. Обработка данных эксперимента Гиперон-М, полученных в отдельных сеансах, подробно описана в работе [15]. Здесь мы остановимся на существенных для дальнейшего изложения деталях, а также процедуре совместной обработки данных всех сеансов (2008–2018 гг.) с целью

учесть рассмотренные выше аппаратные эффекты и, как результат, просуммировать данные сеансов по конкретным мишеням, чтобы уменьшить статистические ошибки. В данной работе, в отличие от [15], нас интересуют только 3γ - и 2γ -события реакции (1). Первые включают в себя множество распадов $\omega \rightarrow \pi^0\gamma$ с последующим распадом $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$, а вторые – для калибровки LGD2 и коррекции измеренных на различных мишенях параметров ω -мезона по измеренным в этом же эксперименте массам π^0 - и η -мезонов и табличным значениям их масс, известных с высокой точностью [18]. Параметры ω -мезона определялись по спектру масс $\pi^0\gamma$ -систем, выделенных из множества трехфотонных событий реакции (1) в результате 1C кинематического фита с двумя конкурирующими гипотезами: $\pi^0\gamma$ и $\eta\gamma$. Отбирались события с $\chi^2_{\pi^0\gamma} < 5.2$ и $\chi^2_{\pi^0\gamma} < \chi^2_{\eta^0\gamma}$.

В качестве иллюстрации на рис. 2а приведен спектр масс $\pi^0\gamma$ -событий с энергией $E_{\pi^0\gamma} > 4000$ МэВ на Ве мишени по суммарной статистике 2008–2018 гг.

Аналогичные спектры были получены для всех экспонированных в эксперименте мишеней (C, CH, Be, Al, Cu, Sn, Pb). Высокая статистическая обеспеченность наблюдаемых в $\pi^0\gamma$ -спектрах масс пиков от распада ω -мезона позволяет восстановить его параметры путем фитирования полученных экспериментальных спектров масс параметризацией этих спектров из МК моделирования. Этот метод известен как параметрический анфолдинг. Процедура МК моделирования данных эксперимента Гиперон-М рассмотрена в следующей главе.

3. МК моделирование. МК моделирование включает в себя генератор первичных событий квазидвухчастичной реакции (1), модель экспериментальной установки Гиперон-М, транспортный код, отбор, оцифровку и форматирование МК-событий с тем, чтобы их можно было обрабатывать при помощи той же системы программ, что и экспериментальные события.

В генераторе квазидвухчастичной реакции (1) используются два эмпирических распределения: 1) распределение по квадрату переданного импульса системе M^0 и 2) распределение по массе системы M_X . Оба распределения для η - и ω -мезонов были подобраны таким образом, чтобы спектры реконструированных МК-событий качественно согласовывались с таковыми в эксперименте. Распады мезонов проводились равномерно по фазовому объему.

В модель установки Гиперон-М были включены сцинтилляционный счетчик S_4 , мишень Т, сцинтилляционный антисчетчик S_A и спектрометр LGD2, см. рис. 1. Учитывался пространственный, угловой и импульсный разброс частиц пучка.

Для учета взаимодействия как первичных, так и вторичных частиц с элементами установки Гиперон-М использовался транспортный пакет GEANT3 [23], в том числе и для моделирования электромагнитных ливней в спектрометре LGD2, инициированных фотонами от распада системы M^0 в реакции (1). Имитация триггера осуществлялась посредством отбора событий по выделившимся энергиям в триггерных сцинтилляционных счетчиках. Отбирались события выше порога регистрации заряженной частицы в счетчике S_4 и ниже такового в S_A .

В каналах спектрометра LGD2 оцифрованные амплитуды вычислялись как результат деления выделившихся в ячейках спектрометра энергий на соответствующие калибровочные коэффициенты с добавлением случайной величины для имитации шума считывающей электроники.

МК моделирование рождения ω -мезонов в реакции (1) с последующим распадом их на $\pi^0\gamma$ было использовано для получения параметризации спектра реконструированных эффективных масс $\pi^0\gamma$ -систем в зависимости от массы и ширины резонанса. В дальнейшем эту параметризацию мы будем называть аппаратной функцией эксперимента для ω -мезона. Для ее определения была проведена генерация событий $\omega \rightarrow \pi^0\gamma$ на вычислительном кластере общего пользования ИФВЭ [24]. В качестве распределения по массе резонанса использована функция Брейта-Вигнера для релятивистского резонанса со спином 1 [25] с массой и шириной ω -мезона:

$$BW_\omega(m, m_\omega, \Gamma_\omega) = \left| \frac{m}{\sqrt{q}} \cdot \frac{m_\omega \Gamma}{m_\omega^2 - m^2 - im_\omega \Gamma} \right|^2, \quad (3)$$

$$\Gamma = \Gamma_\omega \left(\frac{q}{q_\omega} \right)^{2l+1} \frac{D_l(rq_\omega)}{D_l(rq)},$$

где m_ω и Γ_ω – табличные значения параметров ω -мезона, $l = 1$ – его спин, q – импульс π^0 -мезона в системе центра масс $\pi^0\gamma$ -системы, q_ω – импульс π^0 -мезона в системе покоя резонанса при $m = m_\omega$, $r = 1$ Фм – радиус взаимодействия, $D_l(x)$ – факторы Блатта-Вайскопфа, см. [26]. Спектр эффективных масс $\pi^0\gamma$ -систем для бериллиевой мишени, полученный в результате моделирования, приведен на рис. 2b.

Аппаратурная функция эксперимента для ω -мезонов в канале распада на $\pi^0\gamma$ выбрана в виде

$$F_\omega(m, m_\omega, \Gamma_\omega) = \left| \frac{m}{\sqrt{q}} \cdot \frac{m_\omega \Gamma}{m_\omega^2 - m^2 - im_\omega(\Gamma + \Gamma_a)} \right|^2 \times$$

$$\times \sum_{i=0}^n a_i H_i \left(\frac{m - m_\omega}{m_0} \right), \quad (4)$$

где $H_i(x)$ – функции Эрмита, т.е. полиномы Эрмита, умноженные на весовую функцию $e^{-x^2/2}$, а m_0 , Γ_a и коэффициенты a_i – параметры аппаратной функции. Для их определения МК спектры $\pi^0\gamma$ -масс для всех ядерных мишеней были профитированы указанной функцией с фиксированными массой и шириной ω -мезона, равными их табличным значениям, которые были использованы при моделировании. Параметры аппаратной функции оставались при этом свободными. Количество функций Эрмита в формуле (4) $n = 12$ выбиралось таким образом, чтобы качество описания МК спектра, $\chi^2/\text{n.d.f.}$, не улучшалось при добавлении очередного члена. Аналогичные параметризации были получены для всех ядерных мишеней, использованных в эксперименте.

4. Анфолдинг параметров ω -мезона. Процедура анфолдинга [27] параметров применительно к ω -мезону, наблюдаемому в спектре масс $\pi^0\gamma$ -систем, см. рис. 2а, была разработана в работе [15] для сравнительно небольшой статистики событий. В данной работе использовалась иная параметризация аппаратной функции, а именно, параметризация (4), причем она определялась отдельно для каждой ядерной мишени, экспонированной в эксперименте. Было изменено также и описание нерезонансного фона. Теперь для параметризации фона была выбрана линейная функция массы системы $\pi^0\gamma$. Был учтен также и физический фон от распада $\rho^0 \rightarrow \pi^0\gamma$, поскольку сечения образования ρ^0 - и ω -мезонов в реак-

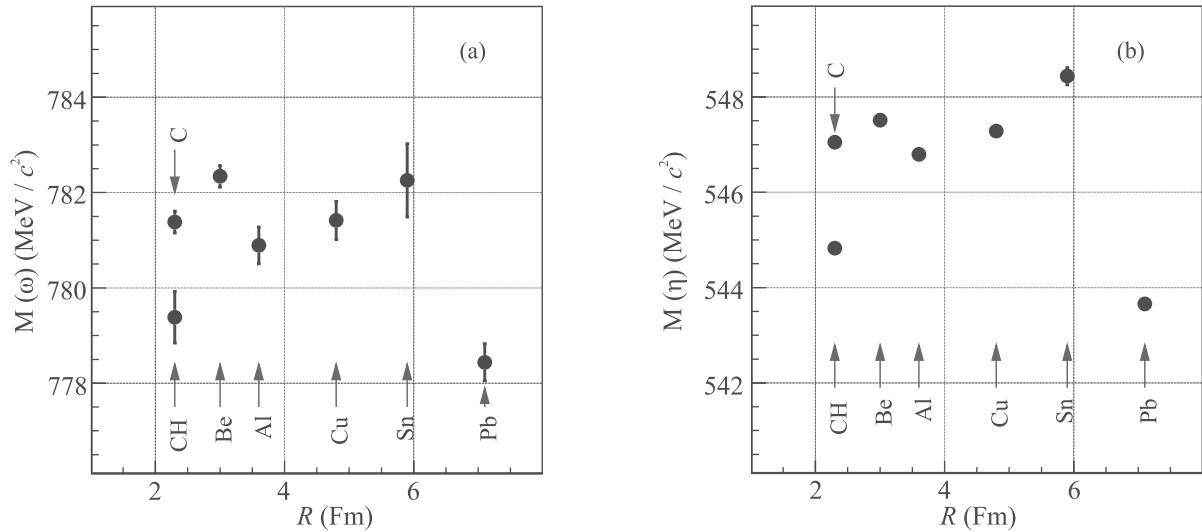


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Масса ω -мезона в зависимости от радиуса ядра-мишени, полученная в результате фитирования спектров масс $\pi^0\gamma$ -систем при $E_{\pi^0\gamma} > 4000$ МэВ аппаратурной функцией и линейным фоном с учетом вклада ρ^0 -мезонов. (б) – Массы η -мезонов, полученные на тех же мишенях при отборе по энергии $E_{2\gamma} > 4000$ МэВ, подробности см. в основном тексте

ции (1) сравнимы по порядку величины, а отношение вероятностей их $\pi^0\gamma$ -распадов равно $BR(\rho^0 \rightarrow \pi^0\gamma)/BR(\omega \rightarrow \pi^0\gamma) = 5.6 \cdot 10^{-3}$, см. [18], что неизбежно приводит к фоновым $\pi^0\gamma$ -событиям со средней массой, близкой к массе ω -мезона, и шириной распределения ≈ 150 МэВ/ c^2 . Чтобы количественно учесть этот эффект, было проведено моделирование процессов рождения ρ^0 -мезонов (с табличными значениями массы и ширины) в реакции (1) и их последующим распадом на $\pi^0\gamma$. Аналогичным образом были получены параметризации (4) спектров масс $\pi^0\gamma$ -систем от распадов ρ^0 -мезона для всех ядерных мишеней.

Для определения массы и ширины ω -мезона на всех ядерных мишенях измеренные спектры эффективных масс $\pi^0\gamma$ -систем для каждой мишени были профитированы аппаратурной функцией ω -мезона (4) с массой и шириной резонанса в качестве свободных параметров, линейным фоном и функцией, описывающей вклад фоновых событий от распада $\rho^0 \rightarrow \pi^0\gamma$. Пример описания экспериментального спектра масс $\pi^0\gamma$ -систем по всем данным сеансов 2008–2018 гг. на бериллиевой мишени при отборе по энергии $E_{\pi^0\gamma} > 4000$ МэВ показан на рис. 2а. Аналогичные описания экспериментальных спектров масс $\pi^0\gamma$ -систем получены и для остальных мишеней. Соответствующие значения массы ω -мезона в зависимости от радиуса ядра мишени показаны на рис. 3а. При этом для ядер Be и C значения их радиусов были взяты из работы [28], а для других ядер определены по формуле $R_A \approx 1.2A^{1/3}$ Фм.

Как видно из этого рисунка, значение массы ω -мезона заметно варьируется от мишени к мишени, что следует рассматривать как проявления аппаратурных искажений, подробно рассмотренных в первой главе. Аналогичные смещения наблюдаются и в измерениях массы η -мезона, проведенных параллельно на тех же мишенях. Значения массы η -мезона, полученные в результате фита спектров масс 2γ -событий функцией Гаусса с линейным фоном, приведены на рис. 3б. Как видно, качественно вариации измеренных масс ω - и η -мезонов от мишени к мишени повторяют друг друга.

Что касается количественного соотношения в смещениях масс ω - и η -мезонов, то следует принять во внимание, что одни и те же аппаратурные эффекты приводят к разным сдвигам масс η - и ω -мезонов. Действительно, масса η -мезона определяется как эффективная масса пары фотонов. В то же время масса ω -мезона вычисляется как масса системы $\pi^0\gamma$, для которой импульсы троек фотонов в 3γ -событиях реакции (1) были предварительно скорректированы процедурой кинематического 1С-фита. Поэтому, например, ошибка в расстоянии от мишени Т до калориметра LGD2 приводит к разному относительному изменению масс ω - и η -мезонов. Количественно их связь была определена методом МК моделирования. Были отдельно оценены смещения масс указанных мезонов при одной и той же вариации (на 0.5 %) расстояния мишени Т от калориметра LGD2 в МК моделировании при неизменном значении это-

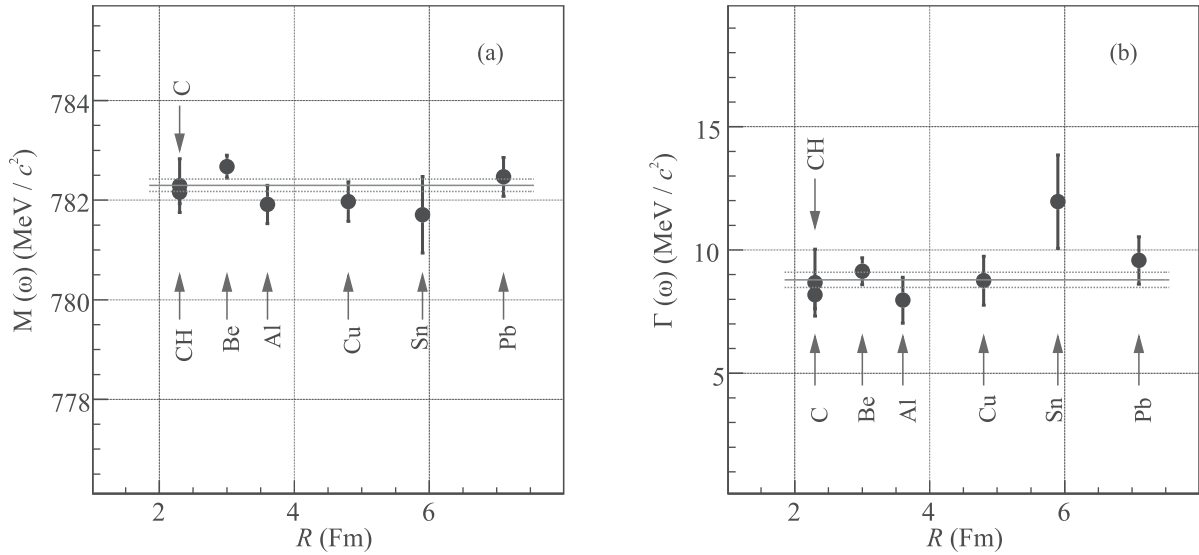


Рис. 4. (Цветной онлайн) Масса (a) и ширина (b) ω -мезона в зависимости от радиуса ядра-мишени, измеренные в сеансах 2008–2018 гг., $E_{\pi^0\gamma} > 4000$ МэВ. Сплошными линиями на рисунках показаны фитирования константами массы и ширины ω -мезона в зависимости от радиуса ядра-мишени R , а штриховыми – интервалы ошибок, соответствующие 1 стандартному отклонению

го параметра в программе реконструкции событий. С учетом этого эффекта скорректированную массу ω -мезона m_ω на измеренную в этом же эксперименте массу η -мезона следует вычислять по формуле:

$$m_\omega = m_\omega^{\text{meas}} \left(1 - \alpha \frac{m_\eta^{\text{meas}} - m_\eta^{\text{PDG}}}{m_\eta^{\text{meas}}} \right), \quad (5)$$

где m_ω^{meas} – измеренная в эксперименте масса ω -мезона (рис. 3a), m_η^{meas} – измеренная масса η -мезона (рис. 3b), m_η^{PDG} – табличная масса η -мезона [18] и $\alpha = 0.6706$ – вычисленный методом МК коэффициент коррекции. Вариация на 0.5 % калибровочных коэффициентов в МК моделировании при их неизменности в программе анализа приводит с высокой точностью к тому же значению коэффициента коррекции α . На рисунке 4 показаны полученные скорректированные значения массы (a) и ширины (b) ω -мезона в зависимости от радиуса ядра-мишени R_A . Прямыми линиями на рисунках показаны результаты фитирования представленных данных константами. Полученные при этом значения χ^2 на число степеней свободы: $\chi_m^2/\text{n.d.f.} = 0.92$ и $\chi_\Gamma^2/\text{n.d.f.} = 0.97$ свидетельствуют об отсутствии статистически значимой зависимости измеренных параметров ω -мезона от радиуса ядра-мишени R , а полученные в результате фита константы следует рассматривать как массу и ширину ω -мезона, измеренные по всей статистике сеансов эксперимента Гиперон-М в 2008–2018 гг.

Систематические погрешности измерений массы и ширины ω -мезона были оценены изменением области фитирования спектра масс $\pi^0\gamma$ -систем, см. рис. 2, и энергетического порога E_{th} при отборе $\pi^0\gamma$ -систем $E_{\pi^0\gamma} > E_{\text{th}}$. Проведенный анализ показал, что при этом статистически значимой зависимости параметров ω -мезона от размера ядра не возникает. Также было изучено влияние неэффективности антисчетчика S_A с помощью МК моделирования: значимых смещений масс мезонов при изменении порога регистрации заряженных частиц не наблюдается. Полученные в результате значения массы и ширины ω -мезона

$$\begin{aligned} m_\omega &= 782.30 \pm 0.13 \text{ (stat)} \pm 0.26 \text{ (sys)} \text{ МэВ}/c^2 \\ \Gamma_\omega &= 8.78 \pm 0.30 \text{ (stat)} \pm 0.35 \text{ (sys)} \text{ МэВ}/c^2 \end{aligned} \quad (6)$$

согласуются в пределах ошибок с табличными значениями [18]: $m_\omega^{\text{PDG}} = 782.65 \pm 0.12 \text{ МэВ}/c^2$, $\Gamma_\omega^{\text{PDG}} = 8.49 \pm 0.08 \text{ МэВ}/c^2$. При этом достигнутая в эксперименте относительная точность измерения массы ω -мезона равна $\approx 4 \cdot 10^{-4}$, а его ширины – $\approx 5 \cdot 10^{-2}$.

Заключение. В эксперименте Гиперон-М во взаимодействиях мезонов с импульсом 7 ГэВ/с с ядерными мишенями осуществлен поиск модификации параметров ω -мезона в холодной ядерной материи. Для измерения массы и ширины ω -мезона применен метод параметрического анфолдинга. Статистически значимой зависимости массы и ширины ω -мезона в его моде распада на $\pi^0\gamma$ от радиуса ядра мишеней

не обнаружено. Усредненные по данным всех мишей параметры ω -мезона согласуются с табличными значениями [18] в пределах погрешностей измерения.

Данное исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 18-32-00266.

Авторы выражают благодарность А. М. Зайцеву за стимулирование данной работы, а также М. Ю. Боголюбскому, В. А. Викторову, Д. И. Паталаху и М. В. Столповскому за сотрудничество на ранних этапах проведения данного эксперимента.

1. N. O. Agasian, JETP Lett. **111**(4), 201 (2020).
2. T. Hatsuda and S. H. Lee, Phys. Rev. C **46**(1), 34 (1992).
3. S. Leupold, V. Metag, and U. Mosel, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 147 (2010).
4. A. Ramos, L. Tolos, R. Molina, and E. Oset, Eur. Phys. J. A **49**, 148 (2013).
5. D. Suenaga and P. Lakaschus, Phys. Rev. C **101**(3), 035209 (2020).
6. K. Ozawa, H. En'yo, H. Funahashi et al. (E325 Collaboration), Phys. Rev. Lett. **86**, 5019 (2001).
7. M. Kotulla, D. Trnka, P. Muhlich et al. (CBELSA/TAPS Collaboration), Phys. Rev. Lett. **100**, 192302 (2008) [erratum: Phys. Rev. Lett. **114**(19), 199903 (2015)].
8. D. Trnka, G. Anton, J. C. S. Bacelar et al. (CBELSA/TAPS Collaboration), Phys. Rev. Lett. **94**, 192303 (2005).
9. M. Nanova, V. Metag, G. Anton et al. (CBELSA/TAPS Collaboration), Phys. Rev. C **82**, 035209 (2010).
10. M. H. Wood, R. Nasseripour, D. P. Weygand et al. (CLAS Collaboration), Phys. Rev. C **78**, 015201 (2008).
11. G. Agakichiev, R. Baur, P. Braun-Munzinger et al. (CERES/NA45 Collaboration), Phys. Lett. B **422**, 405 (1998).
12. R. S. Hayano and T. Hatsuda, Rev. Mod. Phys. **82**(4), 2949 (2010).
13. V. Metag, M. Nanova, and K. T. Brinkmann, EPJ Web Conf. **134**, 03003 (2017); doi:10.1051/epjconf/201713403003.
14. А. А. Асеев, М. Ю. Боголюбский, В. А. Викторов и др. (Коллаборация Гиперон-М), Препринт ИФВЭ 2002-3, Протвино (2002).
15. М. Ю. Боголюбский, С. В. Евдокимов, В. И. Изучеев, Д. И. Паталах, Б. В. Полищук, С. А. Садовский, А. С. Соловьев, М. В. Столповский, Ю. В. Харлов, Н. А. Кузьмин, В. П. Обудовский, Ю. П. Петухов, С. Я. Сычков, ЯФ **76**(11), 1 (2013).
16. М. Ю. Боголюбский, В. А. Викторов, В. С. Петров и др. (Коллаборация Гиперон-М), ПТЭ **1**, 67 (2006).
17. М. Ю. Боголюбский, В. А. Викторов, В. А. Онучин и др. (Коллаборация Гиперон-М), ПТЭ **5**, 93 (2007).
18. P. A. Zyla, R. M. Barnett, J. Beringer et al. (Particle Data Group), Prog. Theor. Exp. Phys. **2020**, 083C01 (2020).
19. С. А. Акименко, А. В. Банников, В. И. Белоусов, А. М. Блик, В. Н. Колосов, В. М. Кутын, З. В. Крумштейн, А. И. Павлинов, А. С. Соловьев, Препринт ИФВЭ 82-149, Серпухов (1982).
20. С. А. Акименко, А. В. Банников, В. И. Белоусов, А. М. Блик, В. Н. Колосов, В. М. Кутын, З. В. Крумштейн, А. И. Павлинов, А. С. Соловьев, ПТЭ **1**, 66 (1984).
21. В. Ю. Батусов, Н. Л. Русакович, Препринт ОИЯИ Р1-95-423, Дубна (1995).
22. М. Ю. Боголюбский, Д. И. Паталах, Б. В. Полищук, С. А. Садовский, А. С. Соловьев, М. В. Столповский, Ю. В. Харлов, ПТЭ **5**, 88 (2011).
23. R. Brun, F. Bruyant, F. Carminati, S. Giani, M. Maire, A. McPherson, G. Patrick, and L. Urban, CERN (1994); doi:10.17181/CERN.MUHF.DMJ1.
24. V. Kotliar, V. Gusev, V. Kukhtenkov, and N. Savin, CEUR Workshop Proceedings. February 2017, v. **1787**, p. 323.
25. D. Alde, F. G. Binon, M. Boutemour et al. (GAMS Collaboration), Eur. Phys. J. A **3**, 361 (1998).
26. J. Blatt and W. Weiskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley & Sons, N.Y. (1952), p. 359.
27. В. Б. Аникеев, В. П. Жигунов, ЭЧАЯ **24**(3), 989 (1993).
28. Р. Хофстадтер, УФН **63**(12), 693 (1957).

Усиление поглощения излучения интенсивных фемтосекундных лазерных импульсов видимого диапазона в пленке серебра

П. А. Данилов⁺, С. И. Кудряшов⁺¹⁾, К. П. Мигдал*, А. С. Ривнюк[×], А. А. Ионин⁺

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

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

[×] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 30 декабря 2020 г.

После переработки 15 января 2021 г.

Принята к публикации 15 января 2021 г.

Коэффициент пропускания серебряной пленки толщиной 30 нм для одиночных лазерных импульсов видимого диапазона с длиной волны 515 нм и длительностью 300 фс монотонно падает с ростом пиковой интенсивности лазерного излучения, указывая на связанный с этим рост коэффициента поглощения материала. С учетом высокой начальной плотности свободных s -электронов в материале нагрев электронного газа соответствует монотонному росту коэффициента поглощения серебра в зависимости от электронной температуры. С другой стороны, фотоинжекция дополнительных неравновесных свободных носителей ($\sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$) за счет многофотонных межзонных d - s переходов из квазисвязанных d -состояний ниже уровня Ферми также неплохо описывает качественное поведение зависимости коэффициента поглощения серебра от пиковой интенсивности лазерного излучения. На примере серебра показывается, что для описания изменения оптических свойств переходных металлов в течение возбуждающего ультракороткого лазерного импульса необходимо учитывать как межзонную фотоинжекцию дополнительных носителей, так и возникающие в связи с этим неравновесные состояния электронного газа, вклады которых во многом определяются соотношением ширины зонной щели между уровнем Ферми в s -зоне и потолком d -зон, и энергией фотона.

DOI: 10.31857/S1234567821050025

1. Возбуждение электронной подсистемы металлов ультракороткими, наиболее часто – фемтосекундными, лазерными импульсами (УКИ) исследуется уже более пятидесяти лет [1], в том числе для целей абляции при высоких интенсивностях излучения ($> 10 \text{ ТВт/см}^2$) – уже около 30 лет [3, 4]. В то же время, диагностика неравновесных состояний электронного газа, в том числе – в абляционном режиме и для металлов со сложным электронным спектром (переходные металлы, лантаниды), до сих пор опирается на упрощенные модели с неизменным числом носителей [5, 6]. Лишь в последнее десятилетие для диэлектрической проницаемости в явном виде стал учитываться вклад межзонных переходов [7, 8], тогда как ранее им пренебрегали в силу слабого возбуждения [9, 10] или учитывали в виде константы [3]. Более обобщенная модель фотовозбуждения материала УКИ, учитывающая изменение плотности свободных носителей в результате межзонных переходов, была разработана для полупроводников [11].

Однако, по сравнению с полупроводниками, в наиболее распространенных переходных металлах на фоне высокой начальной плотности свободных электронов и мощной пертурбации их газа интенсивными УКИ вклад межзонных переходов, зачастую – многофотонный [12], с фотоинжекцией дополнительных свободных носителей [7, 8, 12], но также и включением бесщелевого процесса Оже-рекомбинации с генерацией “горячих” электронов [13], долгое время считался маргинальным. Количественным критерием соотношения вкладов межзонных и внутризонных переходов в металлах со сложным электронным спектром, как и в случае полупроводников, может выступать соотношение ширины межзонной щели между уровнем Ферми в s -зоне свободных электронов и потолком d -зон квазисвязанных электронов, и энергией фотона. Для большой величины соотношения вероятность многофотонных межзонных переходов мала по сравнению с вероятностью внутризонных переходов свободных носителей (нагрев), тогда как при сопоставимых значениях ширины щели и энергии фотона могут доминировать межзонные переходы. На

¹⁾ e-mail: kudryashovsi@lebedev.ru

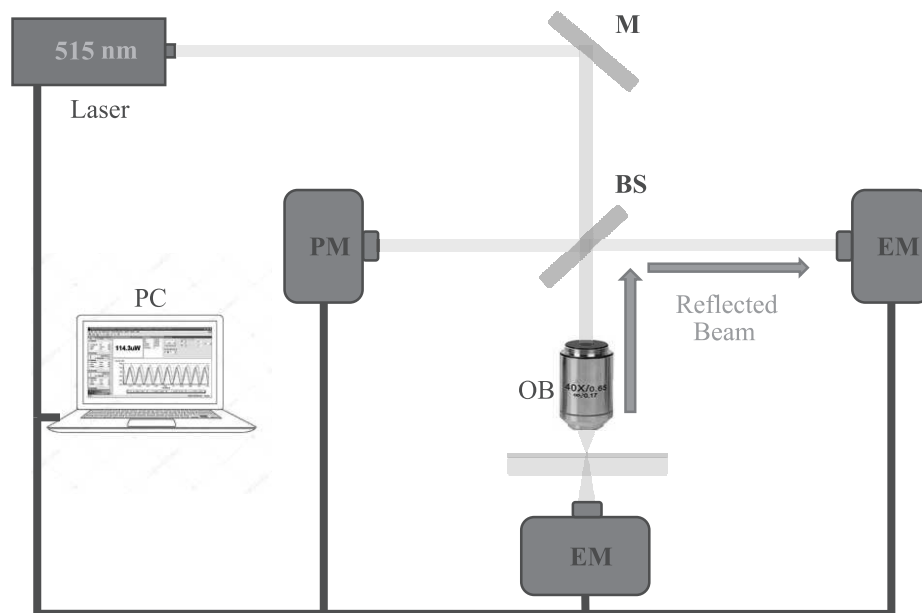


Рис. 1. (Цветной онлайн) Экспериментальная измерительная схема: М – зеркало, BS – 50 %-делитель пучка, ОВ – фокусирующий объектив с $NA = 0.65$, РМ – измеритель мощности лазерного излучения, ЭМ – измеритель энергии лазерных импульсов, PC – управляющий компьютер с программным обеспечением StarLab (Ophir)

самом деле, лишь в последние годы на полуколичественном уровне появились некоторые экспериментальные свидетельства существенного вклада межзонных переходов в плотность свободных электронов в переходных металлах [7, 8], однако, без существенного теоретического обоснования. Поэтому требуются дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования неравновесной динамики межзонных переходов и плотности свободных носителей в нетермализованном состоянии при воздействии на поверхность переходных металлов интенсивных УКИ с различными длинами волн.

В настоящей работе в одноимпульсном режиме воздействия экспериментально исследована зависимость коэффициента пропускания тонкой серебряной пленки от пиковой интенсивности УКИ видимого диапазона (длина волны – 515 нм). Было интересно сравнить данные результаты с предыдущими, показывающими монотонный спад коэффициента поглощения серебряной пленки при воздействии УКИ ближнего ИК-диапазона (длина волны – 1 мкм) из-за преобладающего нагревания электронного газа, увеличивающего частоту соударений носителей выше лазерной частоты [14]. Кроме того, серебро – один из металлов с широкой (около 4 эВ) щелью между уровнем Ферми и потолком d -зон, и воздействие УКИ с фотонами с разной энергией должно показать разные основные тенденции в электронной динамике материала (при умеренной интенсивности УКИ

предельные случаи – нагрев электронного газа для длинноволновых фотонов и межзонная фотоинжекция электронов с ростом их вырождения для коротковолновых электронов). Соответственно, обнаруженный необычный рост коэффициента поглощения материала при увеличении пиковой интенсивности УКИ сопоставлен с нагревом электронного газа и межзонной фотоинжекцией дополнительных свободных носителей.

2. Измерение зависимостей коэффициентов пропускания и отражения от интенсивности лазерного излучения для серебряной пленки толщиной 30 ± 5 нм, напыленной методом магнетронного распыления (SC7620, Quorum Technologies) в атмосфере аргона на подложке силикатного стекла, проводилось с использованием 50 %-делителя лазерного пучка (рис. 1) и измерителей мощности и энергии лазерных импульсов (Ophir). В качестве источника излучения использовалась вторая гармоника (ВГ) волоконного иттербиевого фемтосекундного лазера Satsuma с длиной волны $\lambda_{\text{las}} = 515$ нм, длительностью импульса $\tau \approx 300$ фс, максимальной энергией в импульсе ВГ $E_{\text{max}} = 4$ мкДж в ТЕМ₀₀-море в одноимпульсном режиме. Лазерное излучение фокусировалось на поверхность образцов через микрообъектив Levenhuk с числовой апертурой $NA = 0.65$ в пятно с радиусом $R_{1/e} \approx 1.6 \pm 0.1$ мкм, соответственно. Образец закреплялся на трехкоординатной моторизированной шаговой трансляционной платформе

(Standa) с минимальным шагом перемещения 150 нм. Толщина пленок измерена с помощью сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) Certus Standard.

3. Полученные зависимости коэффициента пропускания серебряной пленки толщиной $d = 30$ нм от пиковой интенсивности показывают монотонный спад от начального значения 0.45 (рис. 2) до асимп-

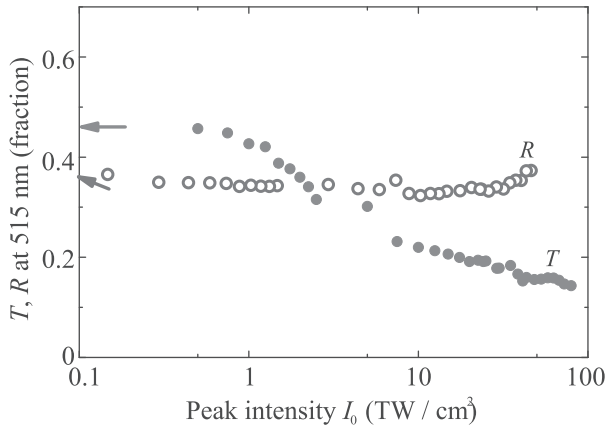


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициентов пропускания T (серые круги) и отражения R (светлые круги) серебряной пленки толщиной 30 нм от пиковой интенсивности I_0 . Стрелки показывают начальные значения T и R для невозбужденной пленки

тотической величины 0.15 ± 0.01 . Соответствующий коэффициент экстинкции составляет $\kappa(I_0) \approx \frac{1}{d} \ln \left(\frac{T_0}{(1-R(I_0))T(I_0)} \right)$, где T_0 – коэффициент пропускания стеклянной подложки, $R(I_0)$ и $T(I_0)$ – зависимости зеркального отражения и пропускания пленки в зависимости от I_0 , и отвечает преимущественно поглощению, поскольку рассеяние на зернистой структуре пленки невелико. Для коэффициента отражения R , слабо изменяющегося (0.32–0.38) с ростом I_0 (рис. 2), разложение по малой величине R дает

$$\kappa(I_0) \approx \frac{1}{d} \ln \left(\frac{T_0}{(1-R(I_0))T(I_0)} \right). \quad (1)$$

В наших экспериментах начальная величина $\kappa \approx 3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ уступает табличному значению для невозбужденного серебра на длине волны 515 нм $\kappa_0 \approx 7.5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ [15] из-за зернистости пленки и дополнительного плазмонно-индуцированного пропускания по границам зерен, и нуждается в корректировке на множитель ≈ 2.5 . С поправкой на этот фактор, величина κ_0 с ростом I_0 сублинейно увеличивается примерно в 2 раза (рис. 3), что демонстрирует тенденцию, прямо противоположную результатам воздействия на серебряные пленки при схожих условиях УКИ ближнего ИК-диапазона [14], по-

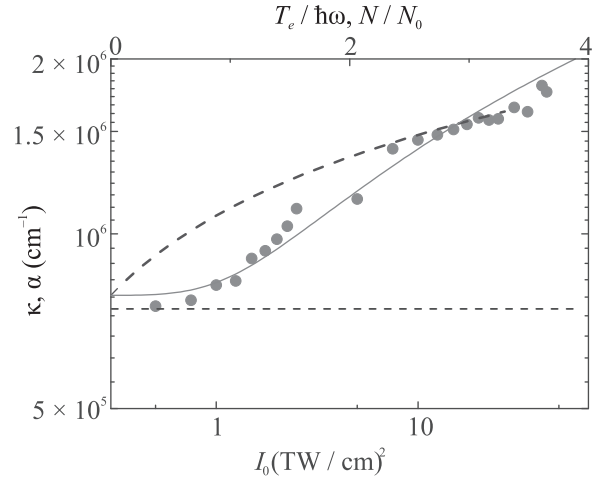


Рис. 3. (Цветной онлайн) Экспериментальная зависимость коэффициента экстинкции κ серебряной пленки толщиной 30 нм от пиковой интенсивности I_0 (нижняя ось) с учетом поправки на отражение и расчетные зависимости коэффициента поглощения α серебра на длине волны 515 нм от безразмерных параметров N/N_0 (синяя кривая) и $T_e/\hbar\omega$ (розовая кривая) на верхней оси. Диапазоны изменения $N = (0-2) \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ и $T_e = 0-10 \text{ эВ}$. Горизонтальной линией показано начальное значение коэффициента поглощения невозбужденного серебра на длине волны 515 нм (по данным [15])

видимому, ввиду вдвое меньшего соотношения зонной щели и энергии фотона. Наблюдаемый рост поглощения может указывать как на рост концентрации поглощающих свободных электронов на величину N в результате двухфотонной инжекции или термической ионизации из d -зон (помимо начальной концентрации $N_0 \approx 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$), так и на лазерный нагрев электронного газа с ростом частоты электронных соударений ниже частоты лазерного излучения, по сравнению с результатами для УКИ ближнего ИК-диапазона [14].

Для выяснения возможных причин роста коэффициента поглощения серебра были рассмотрены два модельных предельных случая – фотоинжекция дополнительных свободных носителей N (полная концентрация $N_0 + N$) при сохранении электронного газа “холодным” и, напротив, нагревания электронного газа до температуры T_e при постоянной концентрации свободных носителей N_0 . Реальная ситуация является только качественно промежуточной, поскольку помимо внутризонных переходов свободных s -электронов в лазерном поле в результате межзонных переходов, связанных с фотоинжекцией неравновесных d -электронов, в d -зоне возникают дырки, которые рекомбинируют по Оже-механизму с одновременной генерацией надтепловых свободных

электронов. Это еще более усложняет динамику релаксации s -электронов.

При моделировании лазерно-индуцированного поглощения серебра учитывалось, что на длине волны возбуждающего УКИ (515 нм) линейный оптический отклик носителей связан преимущественно с внутризонными переходами свободных s -электронов, т.е. определяется только вкладом Друде [2, 3]

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{\nu^2 + \omega^2} + i\frac{\omega_{\text{pl}}^2\nu}{\omega(\nu^2 + \omega^2)}, \quad (2)$$

где $\omega \approx 3.6$ ПГц, ω_{pl} и ν – частоты лазерного излучения, плазменных колебаний s -электронов и частота их взаимного рассеяния соответственно. Частота плазменных колебаний $\omega_{\text{pl}} \approx 14$ ПГц определяется путем аппроксимации табулированных данных для оптических постоянных невозбужденного серебра [15] по алгоритму из работы [7], если взять выражение для частоты рассеяния из теории Ферми-жидкости [16, 17]

$$\nu = K_{ee} \frac{(\hbar\omega)^2 + (\pi T_e)^2}{1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T_e}\right)}, \quad K_{ee} = \frac{\pi^2 \sqrt{3} \omega_{\text{pl}}}{128 E_F^2}, \quad (3)$$

где ν зависит от энергии фотона, температуры газа и коэффициента рассеяния K_{ee} , тогда как последний зависит только от концентрации свободных носителей через плазменную частоту $\omega_{\text{pl}} (\propto N_0^{1/2})$ и энергию уровня Ферми $E_F (\propto N_0^{2/3})$. Для начальной концентрации электронов $N_0 \approx 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ по тому же алгоритму находится величина $K_{ee} \approx 0.4 \text{ фс}^{-1} \cdot \text{эВ}^{-2}$, т.е. при комнатной температуре для энергии фотона лазерного излучения 2.4 эВ частота рассеяния $\nu \sim 1$ ПГц $\ll \{\omega, \omega_{\text{pl}}\}$. Отметим, что ранее при воздействии УКИ ближнего ИК диапазона нами для падающего с ростом I_0 коэффициента поглощения серебра был измерен коэффициент $K_{ee} = a/(\hbar E_F) \approx 6 \text{ фс}^{-1} \cdot \text{эВ}^{-2}$ для $a \approx 20$, $E_F \approx 5.5 \text{ эВ}$ и $\hbar \approx 0.6 \text{ эВ} \cdot \text{фс}$ [14], тогда как другие известные для серебра значения K_{ee} существенно ниже ($\sim 0.04\text{--}0.3 \text{ фс}^{-1} \cdot \text{эВ}^{-2}$, см., например, [16]).

При этом условии в области доминирующего внутризонного поглощения можно, в первом приближении, пренебречь соответствующим слагаемым ν^2 в выражении (2), использовать табличные значения оптических постоянных невозбужденного серебра $\varepsilon_{1,0} \approx -10$, $\varepsilon_{2,0} \approx 0.8$ [15], а эффект увеличения концентрации свободных носителей на величину

N учитывать в безразмерном множителе $(1 + N/N_0)$ вида

$$\varepsilon_1(N) \approx \varepsilon_{1,0} \left(1 + \frac{N}{N_0}\right), \quad \varepsilon_2(N) \approx \varepsilon_{2,0} \left(1 + \frac{N}{N_0}\right)^{\frac{1}{6}}, \quad (4)$$

или, аналогично, для нагревания электронного газа при постоянной концентрации носителей N_0 записать с множителем вида $[1 + (\pi T_e/\hbar\omega)^2]$

$$\varepsilon_1(T_e) \approx \varepsilon_{1,0}, \quad \varepsilon_2(T_e) \approx \varepsilon_{2,0} \left[1 + \left(\frac{\pi T_e}{\hbar\omega}\right)^2\right]. \quad (5)$$

Полученные расчетные зависимости α от безразмерной концентрации электронов $N/N_0 = 0\text{--}3$ или их температуры $T_e/\hbar\omega = 0\text{--}4$ представлены на рис. 3.

Данные кривые показывают, что оба предельных случая объясняют рост коэффициента поглощения серебра при увеличении пиковой интенсивности УКИ в диапазоне 0.5–50 ТВт/см², хотя “тепловая” модель достигает лучшего согласия. В случае “холодной” фотоинжекции при увеличении I_0 полная концентрация поглощающих свободных носителей $(N_0 + N)$ растет на величину N до $2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ (примерно 3 d -электрона), но из-за сопутствующего вырождения электронного газа падает частота рассеяния носителей. Напротив, в “тепловой” модели при постоянной концентрации поглощающих свободных электронов коэффициент поглощения растет вслед за частотой рассеяния электронов, стремящейся к частоте лазерного излучения, при изменении T_e в диапазоне до 10 эВ. При этом надо отметить линейную шкалу для переменных N/N_0 и $T_e/\hbar\omega$ против логарифмической шкалы для I_0 , т.е. в рамках данного подхода указанные параметры N и T_e определяются кубическими степенными зависимостями от I_0 . Отметим также, что похожие результаты были получены для более тонкой пленки толщиной 15 нм. Также, выше мы оперировали средними значениями переменных N/N_0 и $T_e/\hbar\omega$ в течение УКИ, тогда как реальная электронная динамика, несомненно, гораздо сложнее и связана не только с нагреванием термализованного электронного газа или фотоинжекцией дополнительных неравновесных носителей, но и сильно неравновесными носителями, возникающими вследствие оже-процессов рекомбинации и генерации надтепловых электронов [13]. Более детальная физическая картина электронной динамики будет представлена нами с использованием теоретического моделирования в рамках готовящейся развернутой статьи.

4. В заключение, в отличие от случая фотовозбуждения тонкой серебряной пленки ультракоротки-

ми лазерными импульсами ближнего ИК-диапазона в одноимпульсном режиме воздействия, при возбуждении фемтосекундным лазерным излучением видимого диапазона экспериментально обнаружен рост коэффициента поглощения материала при увеличении пиковой интенсивности излучения. Эффект может быть сопоставлен как с нагревом электронного газа, так и с многофотонной межзонной инжекцией дополнительных свободных носителей при их сопутствующей неравновесной динамике для данного, более низкого соотношения межзонной щели между уровнем Ферми и потолком d -зон, и энергией фотона.

1. С. И. Анисимов, Я. А. Имас, Г. С. Романов, Ю. В. Ходыко, *Действие излучения большой мощности на металлы*, Наука, М. (1970).
2. M. C. Downer, R. L. Fork, and C. V. Shank, *JOSA B* **2**(4), 595 (1985).
3. X. Y. Wang and M. C. Downer, *Opt. Lett.* **17**(20), 1450 (1992).
4. S. Nolte, C. Momma, H. Jacobs, A. Tünnermann, B. N. Chichkov, B. Wellegehausen, and H. Welling, *JOSA B* **14**(10), 2716 (1997).
5. S. T. Weber and B. Rethfeld, *Appl. Surf. Sci.* **417**, 64 (2017).
6. G. D. Tsibidis, *J. Appl. Phys.* **123**(8), 085903 (2018).
7. Е. В. Голосов, А. А. Ионин, Ю. Р. Колобов, С. И. Кудряшов, А. Е. Лигачев, Ю. Н. Новоселов, Д. В. Синицын, *ЖЭТФ* **140**(1), 21 (2011).
8. S. I. Kudryashov, A. A. Samokhvalov, S. N. Shelygina, and V. P. Veiko, *Appl. Phys. Lett.* **115**(16), 161903 (2019).
9. C. K. Sun, F. Vallée, L. H. Acioli, E. P. Ippen, and J. G. Fujimoto, *Phys. Rev. B* **50**(20), 15337 (1994).
10. N. Del Fatti, R. Bouffanais, F. Vallee, and C. Flytzanis, *Phys. Rev. Lett.* **81**(4), 922 (1998).
11. H. M. van Driel, *Phys. Rev. B* **35**(15), 8166 (1987).
12. S. G. Bezhanov, P. N. Danilov, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, V. N. Lednev, S. M. Pershin, and S. A. Uryupin, *Laser Phys. Lett.* **13**(3), 035302 (2016).
13. I. Campillo, A. Rubio, J. M. Pitarke, A. Goldmann, and P. M. Echenique, *Phys. Rev. Lett.* **85**(15), 3241 (2000).
14. S. G. Bezhanov, P. A. Danilov, A. V. Klekovkin, S. I. Kudryashov, A. A. Rudenko, and S. A. Uryupin, *Appl. Phys. Lett.* **112**(11), 113104 (2018).
15. *Handbook of optical constants of solids*, ed. by E. D. Palik, Academic press, San Diego (1998), v. 3.
16. R. H. Groeneveld, R. Sprik, and A. Lagendijk, *Phys. Rev. B* **51**(17), 11433 (1995).
17. M. Bauer, A. Marienfeld, and M. Aeschlimann, *Progr. Surf. Sci.* **90**(3), 319 (2015).

Усиление плазменных нелинейностей и генерация СВЧ-ТГц-суперконтинуума в поле субтераваттных импульсов среднего инфракрасного диапазона

А. В. Митрофанов^{a,b,c,d}, Д. А. Сидоров-Бирюков^{a,b,c,e,g}, А. А. Воронин^{a,b,e}, М. В. Рожко^{a,b}, П. Б. Глек^a,
М. М. Назаров^c, Е. Е. Серебрянников^{a,b,f}, А. Б. Федотов^{a,b,e,g}, А. М. Желтиков^{a,b,c,e,f1)}

^a Физический факультет, МГУ им. М. В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

^b Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Россия

^c Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^d Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал Федерального научно-исследовательского центра “Кристаллография и фотоника” РАН, 140700 Шатура, Россия

^e Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева, 420126 Казань, Россия

^f Department of Physics and Astronomy, Texas A&M University, College Station TX 77843, USA

^g Национальный исследовательский технологический университет МИСиС, 119049 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 января 2021 г.

После переработки 16 января 2021 г.

Принята к публикации 17 января 2021 г.

Малость скорости v индуцируемого лазерным полем движения электронов по сравнению со скоростью света c выступает одним из фундаментальных физических факторов, ограничивающих эффективность нелинейно-оптических процессов в плазменных средах. В настоящей работе показано, что использование мощных сверхкоротких импульсов среднего инфракрасного диапазона позволяет значительно усилить широкий класс v/c -слабых плазменных нелинейностей, связанных, в первую очередь, с индуцируемыми лазерным полем внутриплазменными токами. На этой основе удается реализовать лазерно-плазменные схемы эффективной генерации когерентного широкополосного электромагнитного излучения терагерцового (ТГц) и СВЧ-диапазонов – ТГц-СВЧ-суперконтинуума.

DOI: 10.31857/S1234567821050037

Нелинейно-оптические свойства плазмы, возникающей при взаимодействии мощного лазерного излучения с веществом, широко исследуются, начиная с самых ранних этапов лазерной физики и нелинейной оптики [1, 2]. Понимание оптических нелинейностей плазмы необходимо для выяснения ограничений на параметры световых импульсов в мощных лазерных системах [2, 3]. На основе нелинейно-оптического отклика плазмы удается реализовать эффективные схемы преобразования частоты мощного лазерного излучения [4, 5]. Плазма, формируемая в поле мощных сверхкоротких лазерных импульсов, позволяет наблюдать новые нелинейно-оптические явления и реализовать новые режимы нелинейной динамики сверхкоротких световых импульсов [6–15]. На основе оптических нелинейностей такой плазмы [5, 6, 16] удается обеспечить высокую эффективность гене-

рации гармоник высокого порядка [6, 9–13] и терагерцового (ТГц) излучения [17–24], а также осуществить уникальные режимы сверхширокополосных нелинейно-оптических взаимодействий [25, 26] и временного сжатия мощных световых импульсов [27].

Широкий класс нелинейно-оптических явлений в формируемой сверхкороткими лазерными импульсами плазме, обусловлен плазменными токами, вызываемыми продольным электрическим полем кильватерной волны лазерного импульса [28, 29]: $E_z \approx \pi^2 m c a_0^2 / (2 e \tau_p)$, где $a_0 = e E_0 / (m c \omega_0)$ – лазерный пондеромоторный потенциал, e , m – заряд и масса электрона, E_0 и ω_0 – амплитуда и центральная частота лазерного поля, τ_p – длительность лазерного импульса. Как следует из приведенного выражения, при $a_0 \ll 1$, т.е., при малом отношении скорости нерелятивистского электрона $v = e E_0 / (m \omega_0)$ к скорости света c поле E_z является слабым; v/c -малость поля E_z является отражением его пондеро-

¹⁾ e-mail: zheltikov@physics.msu.ru

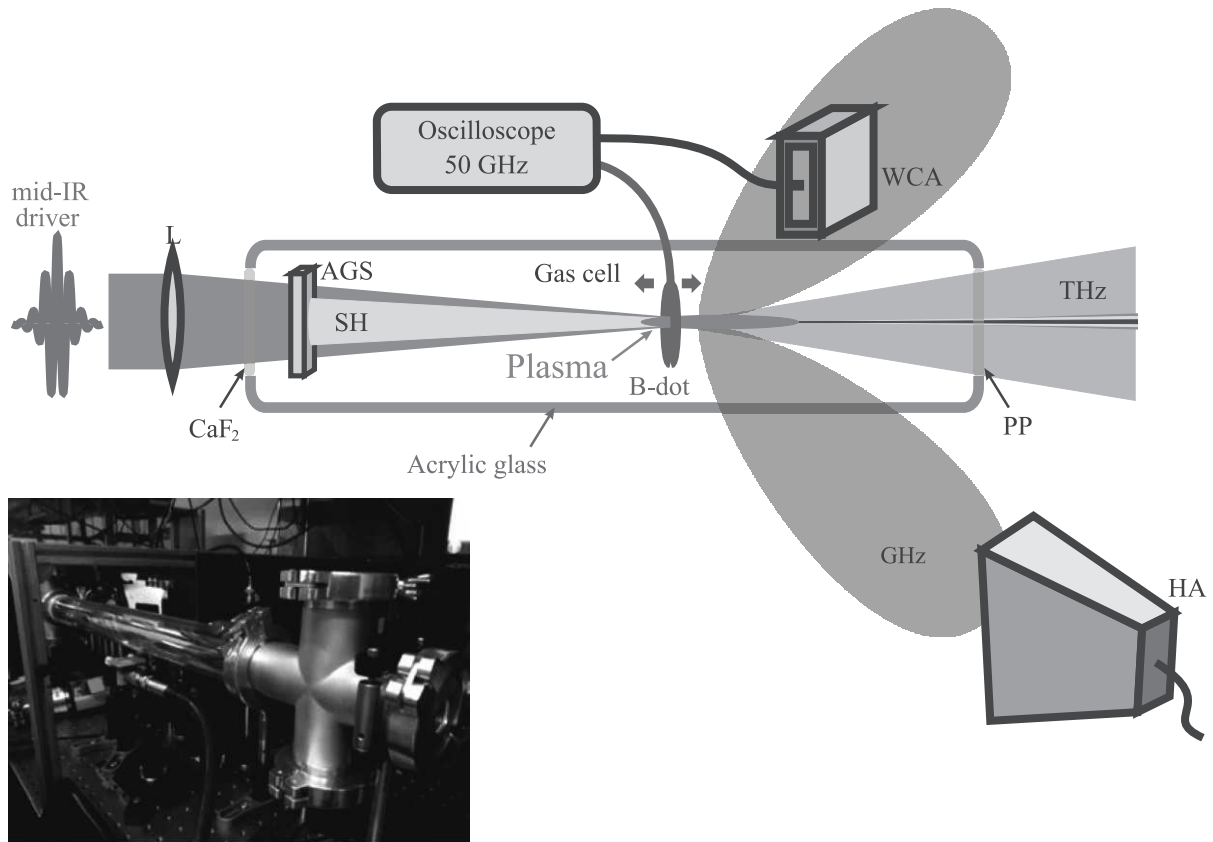


Рис. 1. (Цветной онлайн) Генерация ТГц-СВЧ-суперконтинуума в поле сверхкоротких импульсов среднего ИК-диапазона: НА – широкополосная рупорная антенна; WCA – коаксиально-волновой переход; B-dot – проволочный петлевой зонд; AGS – кристалл для генерации второй гармоники; SH – поле второй гармоники; L – фокусирующая линза; PP – набор ТГц-фильтров. На вставке – фото вакуумной камеры и ячейки с газом для генерации СВЧ-ТГц-суперконтинуума в поле сверхкоротких лазерных импульсов

моторной природы. Это поле, однако, увеличивается пропорционально квадрату длины волны лазерного излучения $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$. Такой закон масштабирования замечателен с физической точки зрения. Он показывает, что, несмотря на всю сложность нелинейных электродинамических явлений, обуславливающих формирование полей в кильватерной волне лазерного импульса, масштабирование $W_p \propto \lambda_0^2$, диктуемое уравнениями ньютоновой динамики для кинетической энергии электрона E_p в поле электромагнитного излучения с длиной волны λ_0 [30, 31], выполняется и для самосогласованного внутриплазменного поля E_z . Согласно закону масштабирования $E_z \propto \lambda_0^2$ [30, 32], увеличение длины волны лазерного излучения должно приводить к существенному увеличению эффективности нелинейно-оптических взаимодействий, обусловленных возникающими благодаря полю E_z продольными плазменными токами.

Для генерации мощных сверхкоротких импульсов среднего ИК-диапазона в наших экспериментах

используется лазерная система [33, 34] (рис. 1), состоящая из фемтосекундного Yb: CaF₂-лазера с регенеративным усилением, трехступенчатого оптического параметрического источника широкополосного поля затравки и трехступенчатого оптического параметрического усилителя chirпированных импульсов (ОПУЧИ). Импульсы, формируемые регенеративным усилителем Yb: CaF₂-системы, используются в качестве излучения накачки в схеме трехступенчатого оптического параметрического усиления (ОПУ), позволяющего получить импульсы излучения с центральной длиной волны 1460 нм и длительностью около 200 фс. Эти импульсы растягиваются во времени с помощью гризменного стретчера и используются в качестве сигнальной волны в схеме трехступенчатого ОПУЧИ, реализуемого в трех установленных последовательно кристаллах КТА. Поле накачки для этого процесса служат импульсы излучения Nd: YAG-лазера длительностью около 100 пс, передаваемые в трех пучках с энергия-

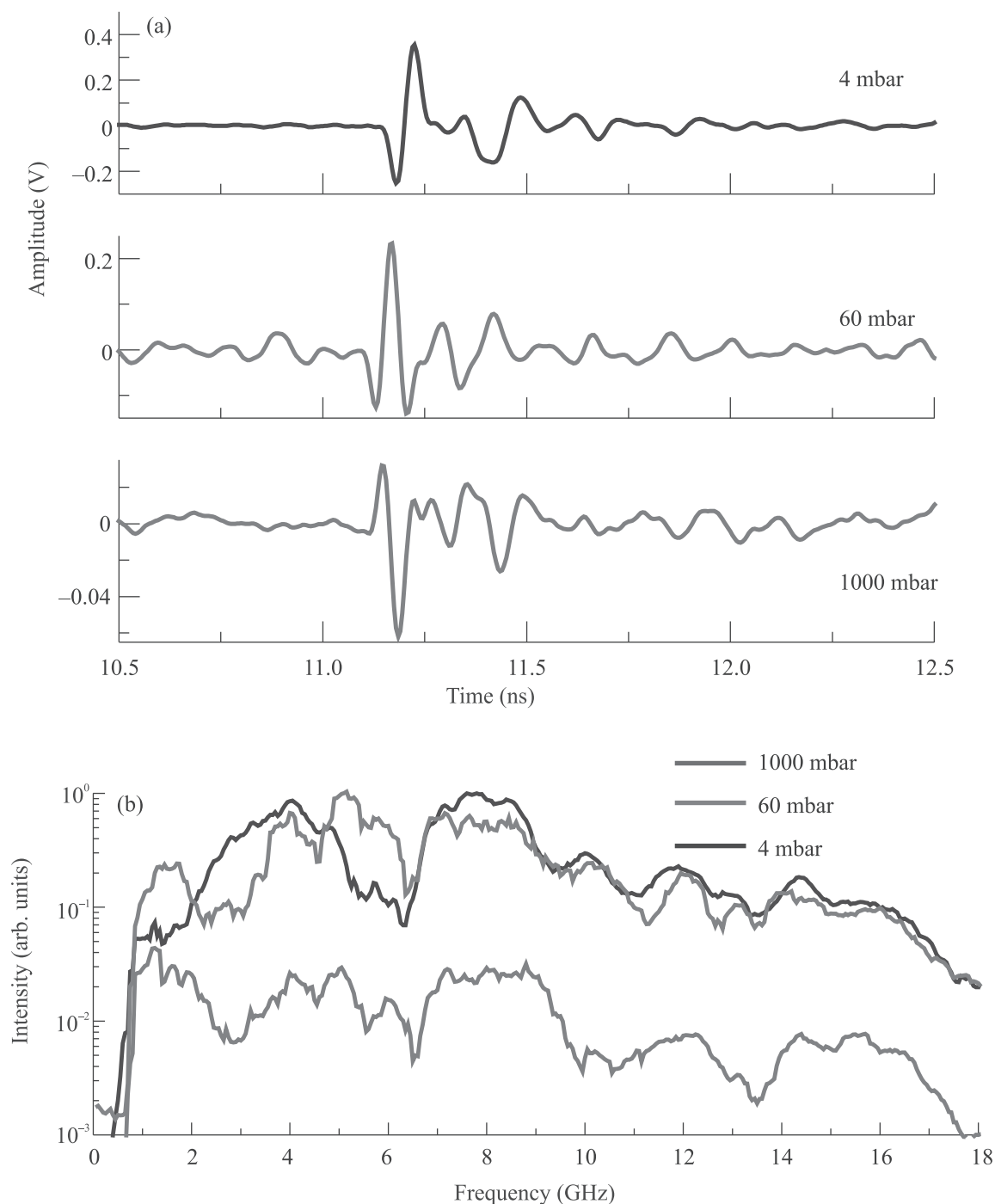


Рис. 2. (Цветной онлайн) Временные трейсы (а) и спектры (б) СВЧ-излучения плазмы, индуцируемой импульсами излучения среднего ИК-диапазона ($\lambda_0 \approx 3.9$ мкм, $\tau_0 \approx 80$ фс, $E_0 \approx 6$ мДж) в газовой камере, заполненной атмосферным воздухом при трех значениях давления p (указаны на рисунке)

ми 50, 250 и 700 мДж [33–35], обеспечивающими оптическую накачку трех кристаллов КТА в системе ОПУЧИ в условиях широкополосного синхронизма [36, 37]. Импульсы холостой волны, формирующиеся

в этой системе, характеризуются широким спектром с центральной длиной волны $\lambda_0 \approx 3.9$ мкм и имеют энергию до 50 мДж. Сжатие этих импульсов с помощью решеточного компрессора позволяет получить

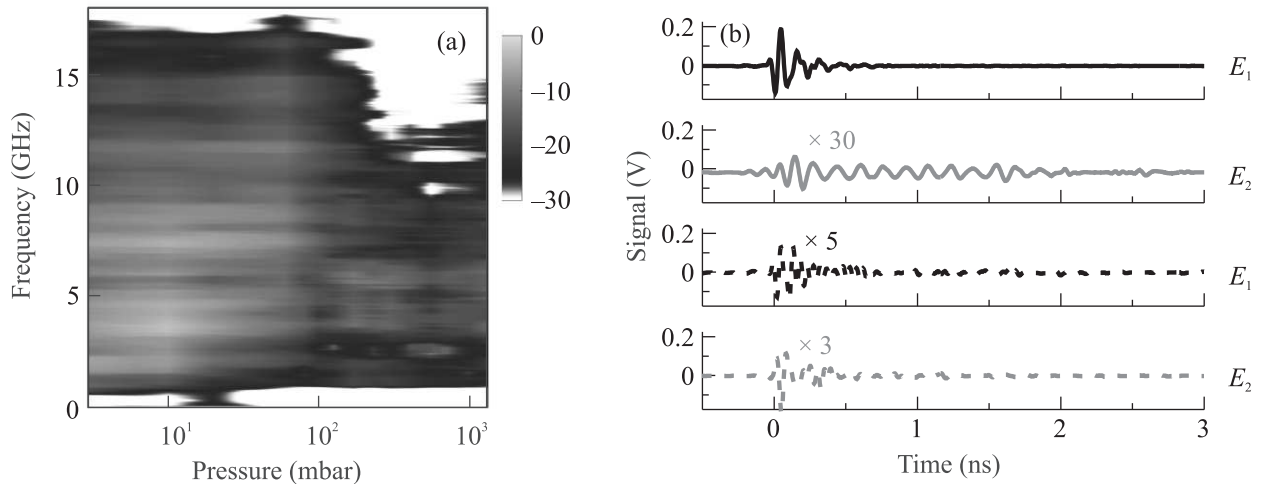


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Карта спектров СВЧ-излучения плазмы, индуцируемой импульсами излучения среднего ИК-диапазона ($\lambda_0 \approx 3.9$ мкм, $\tau_0 \approx 80$ фс, $E_0 \approx 10$ мДж) в газовой камере, заполненной атмосферным воздухом при давлении p , варьируемом от 1.0 мбар до 1.5 бар. Значения давления p отложены по оси абсцисс. (б) – Временные профили двух поляризационных составляющих E_1 (черные линии) и E_2 (красные линии) СВЧ-поля, излучаемого лазерной плазмой в экспериментах с одночастотным (сплошные линии) и двухчастотным (штриховые линии) полем накачки. Поле накачки имеет следующие параметры: (сплошные линии) $\lambda_0 \approx 3.9$ мкм, $E_0 \approx 3$ мДж, $\tau_0 \approx 80$ фс; (штриховые линии) $\lambda_0 \approx 3.9$ мкм, $E_0 \approx 2$ мДж, $\tau_0 \approx 80$ фс с примесью поля второй гармоники с центральной длиной волны $\lambda_{SH} \approx 1.95$ мкм, длительностью импульса $\tau_{SH} \approx 70$ фс и энергией импульса $E_{SH} \approx 1$ мДж

импульсы среднего ИК-диапазона с энергией E_0 до 35 мДж и длительностью τ_0 около 80 фс [35, 38], что соответствует пиковой мощности $P_0 \approx 0.44$ ТВт.

С помощью линзы с фокусным расстоянием 50 см лазерное излучение среднего ИК-диапазона фокусируется в вакуумную камеру (рис. 1). Давление газа p в вакуумной камере варьируется в диапазоне от 0.01 до 1.5 бар. Для генерации поля второй гармоники, используемого в схемах двухчастотной генерации СВЧ-ТГц-суперконтинуума, используется кристалл AgGaS_2 толщиной 500 мкм (AGS на рис. 1), устанавливаемый сразу за входным окном внутри вакуумной камеры. Лазерная плазма, формируемая в области фокуса лазерного пучка, служит источником широкополосного вторичного излучения. Для исследования спектральных, временных и поляризационных свойств этого излучения, а также для анализа его диаграммы направленности используется система регистрации (рис. 1), в состав которой входят детекторы на основе коаксиально-волновых переходов (КВП), широкополосных рупорных антенн (РА) и пироэлектрических приемников, работающие в различных областях ТГц- и СВЧ-диапазонов и обеспечивающие возможность регистрации вторичного излучения плазмы в диапазоне от 0.5 ГГц до 30 ТГц. Исследование состояния поляризации СВЧ-излучения и раздельное измерение поляризацион-

ных составляющих СВЧ-поля производится при помощи КВП-детектора путем изменения ориентации его коаксиального кабеля (рис. 1). Для исследования формы импульса ТГц-СВЧ-излучения используется петлевой проволочный зонд [17, 39], работающий по принципу пояса Роговского [40]. Сигналы, регистрируемые КВП- и РА-детекторами, а также петлевым зондом анализируются с помощью скоростного осциллографа с полосой пропускания не менее 50 ГГц.

Для исследования свойств ТГц-излучения на выходное окно вакуумной камеры устанавливался ТГц-фильтр из полипропилена или политетрафторэтилена (рис. 1), а также набор фильтров, необходимый для выделения требуемого частотного диапазона. С помощью пары параболических зеркал ТГц-излучение вначале коллимировалось, а затем фокусировалось либо на рабочую поверхность пироэлектрического измерителя мощности, либо на пироэлектрическую матрицу анализатора профиля пучка.

На рисунке 2а представлены измеренные с помощью РА-детектора характерные временные профили импульса СВЧ-ТГц-излучения лазерной плазмы, генерируемой импульсами излучения среднего ИК-диапазона ($\lambda_0 \approx 3.9$ мкм, $\tau_0 \approx 80$ фс) с энергией $E_0 \approx 6$ мДж в газовой камере, заполненной атмосферным воздухом при трех значениях давления p . Для анализа спектра СВЧ-ТГц-излучения осуществ-

ляется вейвлет-преобразование временных трейсов, регистрируемых с помощью КВП- и РА-детекторов, а также с помощью петлевого зонда.

Для устранения шумов и артефактов, включая шумы и артефакты, связанные с влиянием электрического контура осциллографа, вейвлет-преобразование временных трейсов СВЧ-ТГц-сигналов осуществляется с мягким многоуровневым порогом, устанавливаемым для надежного, воспроизводимого определения спектра СВЧ-ТГц-излучения. Выполненный на основе такой процедуры спектральный анализ показывает, что низкочастотное крыло спектра СВЧ-ТГц-излучения в выполненных экспериментах простирается вплоть до нижней границы регистрации используемого в экспериментах КВП-детектора, $\nu_c \approx 500$ (рис. 2b, 3a). Спектральная ширина излучаемого в этих условиях СВЧ-ТГц-суперконтинуума (рис. 3a, 4) значительно

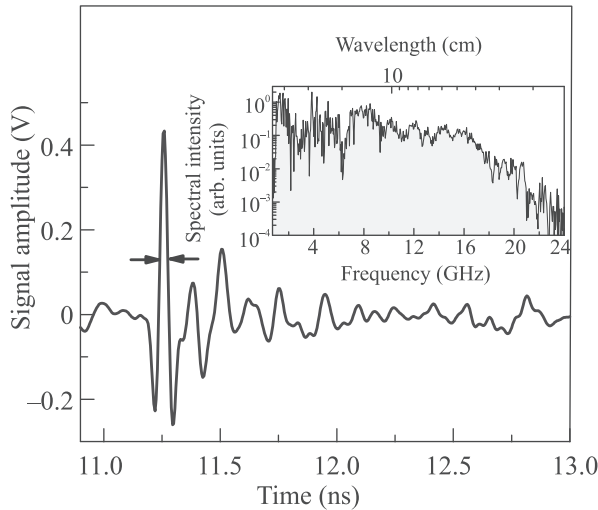


Рис. 4. (Цветной онлайн) Волновая форма СВЧ-импульса, регистрируемого широкополосной рупорной антенной, расположенной на расстоянии $L \approx 1.5$ м от плазменного источника излучения под углом около 47° относительно направления распространения лазерного пучка. На вставке представлен спектр, полученный путем преобразования Фурье волновой формы СВЧ-сигнала. Давление воздуха в газовой ячейке 60 мбар. Энергия импульса накачки – 10 мДж

превышает ширину спектра низкочастотного вторичного излучения, наблюдаемого в экспериментах, выполняемых с использованием сверхкоротких импульсов ближнего ИК-диапазона, причем как субтераваттного, так и тераваттного уровня пиковой мощности.

На рисунке 3а приведена карта, представляющая собой сводку спектров СВЧ-излучения плазмы,

измеренных в широком диапазоне давлений газа в вакуумной камере (от 1.0 мбар до 1.5 бар) при фиксированных параметрах импульсов лазерного излучения – $\lambda_0 \approx 3.9$ мкм, $\tau_0 \approx 80$ фс, $E_0 \approx 10$ мДж. Как видно из представленных на рис. 3а экспериментальных данных, понижение давления газа от ≈ 1.0 – 1.5 бар до ≈ 20 мбар позволяет значительно повысить интенсивность низкочастотного крыла СВЧ-ТГц-суперконтинуума. Такая тенденция находится в хорошем согласии со свойствами нелинейного отклика плазмы, обусловленного плазменными токами, вызываемыми продольным электрическим полем кильватерной волны E_z . В рамках такой физической картины усиление низкочастотного крыла СВЧ-излучения при понижении давления газа от ≈ 1.0 – 1.5 бар до ≈ 20 мбар связано с уменьшением частоты электронных столкновений в плазме, приводящим к понижению минимальной частоты излучаемых плазмой волн [41, 42]. Уменьшение интенсивности излучения при дальнейшем понижении давления обусловлено падением нелинейности за счет уменьшения плотности участвующих в формировании плазменного тока частиц.

На рисунке 3b представлены временные профили, измеренные для двух поляризационных составляющих СВЧ-поля, излучаемого лазерной плазмой в экспериментах с одночастотной и двухчастотной накачкой. В экспериментах с одноцветной накачкой преобладающей является продольная составляющая поля, E_1 , амплитуда которого для условий эксперимента, представленного на рис. 3b, в 50–60 раз больше амплитуды перпендикулярной составляющей поля E_2 . Такое состояние поляризации СВЧ-поля указывает на то, что генерация СВЧ-излучения в условиях описываемых экспериментов в основном обусловлена нелинейным откликом продольных плазменных токов. Этот результат находится в полном согласии с теоретическими предсказаниями, основанными на использовании детального анализа явления генерации ТГц- и суб-ТГц-излучения плазмой, индуцируемой сверхкороткими лазерными импульсами [28, 29, 43, 44].

Интенсивность электромагнитного излучения продольных плазменных токов имеет порядок величины $\mathcal{J} \sim cE_z^2/(8\pi)$ [28, 46]. Вследствие ponderomotorной природы поля кильватерной волны E_z мощность $\mathcal{J}$ оказывается $(v/c)^2$ -малой. Скорость нерелятивистских электронов, образующих продольные плазменные токи, однако, растет пропорционально длине волны лазерного излучения, $v = eE_0\lambda_0/(2\pi m)$. Увеличение длины волны лазерного поля, таким образом, позволяет достичь

значительного усиления генерации СВЧ-ТГц-суперконтинуума. Благодаря такому усилению СВЧ-излучение в условиях представляемых экспериментов надежно регистрировалось на расстоянии несколько метров от газовой ячейки. В качестве примера на рис. 4 представлен характерный временной профиль СВЧ-сигнала, регистрируемого в условиях наших экспериментов с помощью рупорной антенны (рис. 1), расположенной на расстоянии $L \approx 1.5$ м от плазменного источника излучения под углом около 47° относительно направления распространения лазерного пучка. Энергия импульса излучения среднего ИК-диапазона, используемого в этом эксперименте в качестве накачки, составляла $E_0 \approx 10$ мДж. Длительность импульса накачки составляла $\tau_0 \approx 80$ фс. Пиковая мощность импульсов накачки, таким образом, составляла $P_0 \approx 0.13$ ТВт. Полная энергия СВЧ-излучения в этих условиях оказывается на уровне $\mathcal{E} \approx 0.5$ нДж. Сигнал СВЧ-излучения надежно регистрируется при такой схеме измерений при энергиях импульса накачки $E_0 \geq E_q \sim 0.7$ мДж.

Полезно сравнить эти количественные параметры СВЧ-ТГц-суперконтинуума, излучаемого в условиях наших экспериментов, с характерной картиной генерации и регистрации суб-ТГц-излучения импульсами накачки ближнего ИК-диапазона. В частности, при использовании сверхкоротких импульсов накачки с центральной длиной волны $\lambda_0 \approx 0.8$ мкм [47, 48], суб-ТГц-излучение, как правило, регистрируется на расстояниях L от нескольких миллиметров до нескольких сантиметров. Сигнал суб-ТГц-излучения при этом надежно наблюдается при энергиях импульса накачки не менее нескольких миллиджоулей.

Сравнение параметров E_q и L , характерных для картины генерации ТГц-, суб-ТГц- и СВЧ-излучения в поле лазерных импульсов с центральной длиной волны 0.8 и 3.9 мкм, указывает на значительное увеличение эффективности генерации такого излучения в поле лазерной накачки среднего ИК-диапазона. Такой вывод полностью согласуется с ожиданиями, основанными на анализе излучения v/c -слабых токовых плазменных нелинейностей в функции длины волны поля накачки.

Таким образом, выполненные экспериментальные исследования показывают, что использование мощных сверхкоротких импульсов среднего ИК-диапазона позволяет значительно усилить широкий класс v/c -слабых плазменных нелинейностей, связанных, в первую очередь, с индуцируемыми лазерным полем внутривлазменными токами. На этой ос-

нове удастся реализовать лазерно-плазменные схемы эффективной генерации когерентного широкополосного электромагнитного излучения ТГц- и СВЧ-диапазонов – ТГц-СВЧ-суперконтинуума.

Исследования в области каскадных спектрально-временных преобразований сверхкоротких лазерных импульсов поддержаны грантом Российского научного фонда # 18-72-10109. Исследования в области широкополосной нелинейной оптики поддержаны грантом Российского научного фонда # 20-12-00088. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 20-21-00131, 20-21-00140, 18-29-20031, 19-02-00473), фонда Уелча (проект # А-1801-20180324) и Министерства науки и высшего образования РФ (проект # 075-15-2020-801). Исследования М. В. Рожко выполнены при поддержке гранта Президента РФ (МК-3820.2019.2), гранта РФФИ # 20-32-90228, # 18-02-40034, а также гранта фонда “Базис” # 18-2-6-157-1. Исследования П. Б. Глек выполнены при частичной поддержке фонда “Базис” (гранта # 20-2-10-2-1). Расчеты выполнены с использованием ресурсов вычислительного центра коллективного пользования МГУ им. М. В. Ломоносова. Исследования в области оптики сверхкоротких импульсов глубоко критической пиковой мощности выполнены при поддержке гранта Российского научного фонда # 19-72-10054.

1. В. Л. Гинзбург, *Распространение электромагнитных волн в плазме*, Физматгиз, М. (1970).
2. N. Blombergen and Y. R. Shen, *Phys. Rev.* **141**, 298 (1966).
3. Н. Г. Басов, В. Ю. Быченков, О. Н. Крохин, М. В. Осипов, А. А. Рупасов, В. П. Силин, Г. В. Склизков, А. Н. Стародуб, В. Т. Тихончук, А. С. Шиканов, *Квантовая электроника* **6**, 1829 (1979).
4. G. A. Mourou, T. Tajima, and S. V. Bulanov, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 309 (2006).
5. А. М. Желтиков, Н. И. Коротеев, *УФН* **169**, 385 (1999).
6. U. Teubner and P. Gibbon, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 445 (2009).
7. С. А. Ахманов, С. М. Гладков, Н. И. Коротеев, А. М. Желтиков, *Препринт # 5, Физический факультет МГУ, М.* (1988).
8. R. L. Carman, C. K. Rhodes, and R. F. Benjamin, *Phys. Rev. A* **24**, 2649 (1981).
9. T. Brabec and F. Krausz, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 545 (2000).
10. P. B. Corkum and F. Krausz, *Nature Phys.* **3**, 381 (2007).

11. С. М. Гладков, Н. И. Коротеев, А. М. Желтиков, А. Б. Федотов, Письма в ЖТФ **14**, 1399 (1988) [S. M. Gladkov, N. I. Koroteev, A. M. Zheltikov, and A. B. Fedotov, Sov. Tech. Phys. Lett. **19**, 610 (1988)].
12. A. B. Fedotov, S. M. Gladkov, N. I. Koroteev, and A. M. Zheltikov, J. Opt. Soc. Am. B **8**, 363 (1991).
13. A. B. Fedotov, A. N. Naumov, V. P. Silin, S. A. Uryupin, A. M. Zheltikov, A. P. Tarasevich, and D. von der Linde, Phys. Lett. A **271**, 407 (2000).
14. И. В. Федотов, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, Письма в ЖЭТФ **89**, 194 (2009).
15. А. М. Желтиков, Письма в ЖЭТФ **90**, 98 (2009).
16. А. М. Желтиков, О. С. Ильясов, Н. И. Коротеев, Письма в ЖЭТФ **54**, 143 (1991).
17. K. Y. Kim, A. J. Taylor, J. H. Glowina, and G. Rodriguez, Nature Photon. **2**, 605 (2008).
18. D. J. Cook and R. M. Hochstrasser, Opt. Lett. **25**, 1210 (2000).
19. S. Tzortzakis, G. Méchain, G. Patalano, Y.-B. André, B. Prade, M. Franco, A. Mysyrowicz, J.-M. Munier, M. Gheudin, G. Beaudin, and P. Encrenaz, Opt. Lett. **27**, 1944 (2002).
20. X. Xie, J. Dai, and X.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **96**, 075005 (2006).
21. M. D. Thomson, M. Kreß, T. Löffler, and H. G. Roskos, Laser Photonics Rev. **1**, 349 (2007).
22. T. Balčiūnas, D. Lorenc, M. Ivanov, O. Smirnova, A. M. Zheltikov, D. Dietze, K. Unterrainer, T. Rathje, G. G. Paulus, A. Baltuska, and S. Haessler, Opt. Express **23**, 15278 (2015).
23. D. Jang, R. M. Schwartz, D. Woodbury, J. Griff-McMahon, A. H. Younis, H. M. Milchberg, and K.-Y. Kim, Optica **6**, 1338 (2019).
24. A. D. Koulouklidis, C. Gollner, V. Shumakova, V. Yu. Fedorov, A. Pugzlys, A. Baltuska, and S. Tzortzakis, Nature Commun. **11**, 292 (2020).
25. A. V. Mitrofanov, D. A. Sidorov-Biryukov, M. M. Nazarov, A. A. Voronin, M. V. Rozhko, A. D. Shutov, S. V. Ryabchuk, E. E. Serebryannikov, A. B. Fedotov, and A. M. Zheltikov, Optica **7**, 15 (2020).
26. А. М. Желтиков, УФН **176**, 623 (2006) [A. M. Zheltikov, Phys.-Usp. **49**, 605 (2006)].
27. A. Couairon, M. Franco, A. Mysyrowicz, J. Biegert, and U. Keller, Opt. Lett. **30**, 2657 (2005).
28. P. Sprangle, J. Penano, B. Hafizi, and C. Kapetanakis, Phys. Rev. E **69**, 066415 (2004).
29. I. Thiele, R. Nuter, B. Bousquet, V. Tikhonchuk, S. Skupin, X. Davoine, L. Gremillet, and L. Bergé, Phys. Rev. E **94**, 063202 (2016).
30. P. Colosimo, G. Doumy, C. I. Blaga, J. Wheeler, C. Hauri, F. Catoire, J. Tate, R. Chirila, A. M. March, G. G. Paulus, H. G. Muller, P. Agostini, and L. F. DiMauro, Nature Phys. **4**, 386 (2008).
31. E. E. Serebryannikov and A. M. Zheltikov, Phys. Rev. Lett. **113**, 043901 (2014).
32. T. Popmintchev, M.-C. Chen, D. Popmintchev et al. (Collaboration), Science **336**, 1287 (2012).
33. A. V. Mitrofanov, A. A. Voronin, D. A. Sidorov-Biryukov, A. Pugzlys, E. A. Stepanov, G. Andriukaitis, T. Flöry, S. Alisauskas, A. B. Fedotov, A. Baltuska, and A. M. Zheltikov, Sci. Rep. **5**, 8368 (2015).
34. A. V. Mitrofanov, A. A. Voronin, D. A. Sidorov-Biryukov, S. I. Mitryukovsky, A. B. Fedotov, E. E. Serebryannikov, D. V. Meshchankin, V. Shumakova, S. Ališauskas, A. Pugžlys, V. Ya. Panchenko, A. Baltuska, and A. M. Zheltikov, Optica **3**, 299 (2016).
35. A. V. Mitrofanov, A. A. Voronin, M. V. Rozhko, D. A. Sidorov-Biryukov, A. B. Fedotov, A. Pugžlys, V. Shumakova, S. Ališauskas, A. Baltuska, and A. M. Zheltikov, Optica **4**, 1405 (2017).
36. G. Andriukaitis, T. Balčiūnas, S. Ališauskas, A. Pugžlys, A. Baltuska, T. Popmintchev, M.-C. Chen, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, Opt. Lett. **36**, 2755 (2011).
37. А. А. Ланин, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, Письма в ЖЭТФ **98**, 423 (2013).
38. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, Письма ЖЭТФ **112**, 22 (2020).
39. T. I. Oh, Y. S. You, N. Jhajj, E. W. Rosenthal, H. M. Milchberg, and K. Y. Kim, New J. Phys. **15**, 075002 (2013).
40. W. Rogowski and W. Steinhaus, Archiv Elektrotech. **1**, 141 (1912).
41. I. Babushkin, S. Skupin, A. Husakou, C. Köhler, E. Cabrera-Granado, L. Bergé, and J. Herrmann, New J. Phys. **13**, 123029 (2011).
42. A. A. Voronin and A. M. Zheltikov, Phys. Rev. A **101**, 043813 (2020).
43. C. D'Amico, A. Houard, M. Franco, B. Prade, A. Mysyrowicz, A. Couairon, and V. Tikhonchuk, Phys. Rev. Lett. **98**, 235002 (2007).
44. C. D'Amico, A. Houard, S. Akturk, Y. Liu, M. Franco, B. Prade, A. Couairon, V. Tikhonchuk, and A. Mysyrowicz, New J. Phys. **10**, 013015 (2007).
45. P. Sprangle, B. Hafizi, J. R. Penano, R. F. Hubbard, A. Ting, A. Zigler, and T. M. Antonsen, Phys. Rev. Lett. **85**, 5110 (2000).
46. P. Sprangle, B. Hafizi, J. R. Penano, R. F. Hubbard, A. Ting, C. I. Moore, D. F. Gordon, A. Zigler, D. Kaganovich, and T. M. Antonsen, Phys. Rev. E **63**, 056405 (2001).
47. A. Couairon and A. Mysyrowicz, Phys. Rep. **441**, 47 (2007).
48. L. Berge, S. Skupin, R. Nuter, J. Kasparian, and J.-P. Wolf, Rep. Prog. Phys. **70**, 1633 (2007).

Фемтосекундное лазерное воздействие на многослойную наноструктуру металл–металл

С. А. Ромашевский⁺¹⁾, В. А. Хохлов*, С. И. Ашитков⁺, В. В. Жаховский^{+×}, Н. А. Иногамов^{+*×},
П. С. Комаров⁺, А. Н. Паршиков^{+×}, Ю. В. Петров^{*°}, Е. В. Струлева⁺, П. А. Цыганков[∇]

⁺Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

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

[×]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 127055 Москва, Россия

[°]Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

[∇]Universidad Industrial de Santander, 680003 Bucaramanga, Colombia

Поступила в редакцию 26 ноября 2020 г.

После переработки 24 января 2021 г.

Принята к публикации 25 января 2021 г.

В работе исследуется селективная модификация верхних слоев многослойной наноструктуры Ni/Al при однократном воздействии фемтосекундного лазерного импульса. Из анализа топографии поверхности следует, что в зависимости от поглощенной энергии возможно, как частичное, так и полное удаление двух верхних слоев. Сканирование поверхности осуществлялось атомным силовым микроскопом. Численное моделирование явления с использованием двухтемпературного гидродинамического кода обнаруживает несинхронную динамику электронных подсистем Ni и Al и неоднородный прогрев ионных подсистем. В результате инициируется сложная комбинация волн сжатия и разрежения в многослойной мишени. Численно продемонстрировано, что с ростом поглощенной энергии первоначально имеет место разрыв первого слоя никеля вследствие локализации растягивающих напряжений. Экспериментальные и численные значения толщины оторванного слоя и порогового значения энергии согласуются. Следовательно, параметры двухтемпературных моделей никеля и алюминия подобраны правильно.

DOI: 10.31857/S1234567821050049

Введение. Многослойные структуры (наноламинаты) состоят из чередующихся слоев наноразмерной толщины из двух или более материалов. Наноламинаты находят широкое применение во многих областях современной техники: это микроэлектроника, зеркала для фокусировки монохроматического мягкого рентгена (современная фотолитография), устройства фотовольтаики для солнечной энергетики, плазмоники и магнитоплазмоники [1–5]. За последние годы был достигнут значительный прогресс в селективной модификации многослойных наноматериалов с помощью фемтосекундных лазерных импульсов (ФЛИ) в интересах такого рода приложений [6–9].

Нагрев металла ФЛИ умеренной интенсивности $\sim 10^{12}$ – 10^{13} Вт/см² переводит металл в двухтемпературное состояние с горячей электронной и холодной ионной подсистемами. Процессы электрон-ионной термализации, переноса тепла и плавления поверх-

ностного слоя сопровождаются акустическими явлениями: зарождением, распространением и интерференцией волн сжатия и разрежения с последующим формированием мощных растягивающих напряжений. При превышении порога прочности, растяжение приводит к отрыву тонкого поверхностного слоя и образованию абляционного кратера на поверхности [10–14]. Размеры зоны термического влияния минимальны, если использовать ФЛИ. Указанное обстоятельство имеет большое значение для развития технологий обработки перспективных пленочных наноматериалов.

В настоящее время проблемы селективной лазерной обработки наноламинатов изучены недостаточно (см. последний абзац введения). Это обусловлено разнообразием термодинамических и механических свойств соседних слоев, вариацией межслоевой адгезии и граничного термосопротивления. Все это существенно влияет на результаты микро/нанообработки, например, на возможность избирательного удаления требуемых слоев. Особенности транспорта и релак-

¹⁾e-mail: sa.romashevskiy@gmail.com

сации поглощенной энергии, а также интерференция отраженных от контактных границ акустических волн приводят к сложной морфологии модифицированных слоев.

При близких значениях акустических импедансов, как в структуре полупроводник–металл Si/Al [15], разрыв происходил на контактных границах, поскольку величина адгезии слоев меньше их объемной прочности. При различии импедансов и сильной адгезии (это специфика систем металл–металл) ситуация существенно усложняется. В данном случае важную роль играют как термодинамические и транспортные свойства слоев, так и последовательность их чередования [16–20]. В этих важных работах детально изучены системы Ti/Al, Ni/Ti и Ag/Cu.

В опытах [21] было продемонстрировано, что для пленок Ni (с толщиной несколько десятков нанометров) отрыву пленки от подложки предшествует откол внутри нее. По сути, именно для пленки толщиной 20 нм обнаружен частичный откол на глубине 7–10 нм (для объемной мишени из никеля минимальная глубина кратера составляет 20 нм).

Кроме перечисленных выше приложений (электроника, литография, фотовольтаика), интерес к лазерному воздействию на ламинат Ni/Al связан с экзотермическими реакциями при образовании интерметаллидов NiAl, NiAl₃, Ni₃Al [22, 23]. Поэтому такой ламинат может рассматриваться как энергетический материал. Реакция протекает при диффузионном смешивании на контактной границе никеля и алюминия в сплав на атомарном уровне. Сплав распадается на кристаллиты интерметаллидов. Тепловой эффект реакции значительный, но заметно меньше теплоты реагирования химических взрывчатых веществ. Тепловой эффект определяется энергией усиления металлической связи между атомами Ni и Al в интерметаллиде по сравнению с чистыми металлами Ni и Al.

В настоящей работе экспериментально и теоретически исследуется лазерная модификация многослойной структуры Ni/Al (чередующиеся слои никеля и алюминия, 1-й слой – никель). Продемонстрирована возможность частичного либо полного удаления верхних слоев структуры при варьировании энергии ФЛИ. Проведенное численное моделирование показало хорошее совпадение расчетных значений глубины и порога откола с полученными экспериментальными данными. В работе для моделирования абляционных процессов в многослойных структурах при воздействии ФЛИ впервые был применен двухтемпературный гидродинамический код, позволивший получить новые данные о распространении акустиче-

ских возмущений, аномальном поведении электронного теплового потока, фазовому составу слоев в момент разрыва, величине и локализации соответствующих растягивающих напряжений.

В перечисленных выше предыдущих исследованиях авторы обычно ограничивались экспериментом. Если же работа содержала расчеты, то для моделирования наноламинатов применялась либо молекулярная динамика [20, 24] (мишень состояла из одного или двух слоев), либо двухтемпературная модель в одномерной или двухмерной геометрии [17, 25, 26], но без учета гидродинамических явлений. Между тем, как будет видно ниже, гидродинамика играет определяющую роль при разрушении мишени (термомеханическая абляция).

Лазерный эксперимент. Исследуемым образцом служила многослойная структура Ni/Al общей толщиной 1.28 мкм, состоящее из двух верхних слоев Ni (1) толщиной ≈ 46 нм и Al (2) толщиной ≈ 50 нм, 28 чередующихся слоев Ni и Al толщиной 28 нм каждый и базового слоя Ni толщиной 400 нм. Эта структура была нанесена на кварцевую подложку толщиной 120 мкм. Модификация наноразмерных бислоев металл–металл была реализована с помощью локализованного воздействия излучения линейно поляризованных лазерных импульсов иттербиевого лазера длительностью 270 фс на длине волны 1028 нм. Лазерный луч фокусировался по нормали к поверхности образца в пятно с гауссовым пространственным распределением диаметром 3 мкм на уровне $1/e$ с помощью 20-кратного микрообъектива.

Таблица 1. Пороги абляции F_a^{in} по падающему флюенсу, глубины отколов h , и шероховатости R_a на границах разрыва

	F_a^{in} , Дж/см ²	h , нм	R_a , нм
F_{a1}^{in} внутри слоя Ni (1)	0.14	19 ± 3	8.6 ± 0.8
F_{a2}^{in} между слоями Ni(1) и Al(2)	0.73	46 ± 5	6.0 ± 0.2
F_{a3}^{in} внутри слоя Al (2)	1.83	71 ± 3	4
F_{a4}^{in} между слоями Al(2) и Ni(3)	3.11	96 ± 3	5

Поверхность образца облучалась через воздух одиночными лазерными импульсами в широком диапазоне плотностей энергии $F_0 = 0.4\text{--}21$ Дж/см² (где F_0 – плотность энергии падающего лазерно-

го излучения в центре фокального пятна). Модифицированные области мишени исследовались с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) марки Veeco Multimode 5 в контактном режиме и оптического микроскопа Olympus. Разрешение АСМ по глубине составляло 0.05 нм. Энергия падающих лазерных импульсов измерялась с погрешностью 2%. Эксперименты были выполнены на оборудовании центра коллективного пользования (ЦКП) “Фемтосекундный лазерный комплекс” Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

На рисунке 1 приведены результаты измерений морфологии модифицированной поверхности многослойной структуры Ni/Al после однократного воздействия ФЛИ с различной плотностью энергии F_0 . В правой колонке также приведены изображения кратеров на поверхности, полученные с помощью оптического микроскопа.

При плотности энергии лазерного излучения 0.42 Дж/см² происходит частичная абляция верхнего слоя Ni (1) в виде двухуровневого концентрического кратера глубиной 30 нм в центре и 19 нм на периферии (рис. 1а). Кратер окружен бортиком (rim), характерным для термомеханической абляции металлов, и является следствием кавитационного расширения расплава вблизи абляционного порога [27]. С ростом плотности энергии ФЛИ (рис. 1б) глубина центральной области кратера увеличивается до 46 нм, достигая границы раздела слоев Ni (1) и Al (2). При этом глубина внешнего кратера остается на уровне 19 нм.

При дальнейшем увеличении F_0 (рис. 1с) структура кратера становится трехуровневой. Глубина в центральной части кратера достигает примерно 71 нм, при этом его дно находится внутри слоя Al (2). Глубины же двух периферийных уровней остаются примерно теми же. На оптических изображениях (рис. 1а, б) светлая область в центральной части кратеров обусловлена высоким отражением алюминия на границе раздела слоев. Темная центральная область на рис. 1с, очевидно, связана с меньшей отражательной способностью наноструктурированной поверхности алюминия [28] после разрыва внутри слоя Al(2). Этим же объясняется темное внешнее кольцо на рис. 1а–с, являющееся следствием абляции внутри слоя Ni(1).

Исходная шероховатость поверхности образца по данным АСМ составляла $R_a = 4.6$ нм. Шероховатость на границе разрыва слоев Ni (1)/Al (2) всего на 30 % превышала исходное значение (табл. 1). Шероховатость на границе разрыва слоев Al(2)/Ni(3) была

примерно аналогичной, но ее точное измерение было затруднено из-за малой величины площади откола.

На рисунке 2 приведены зависимости поперечного размера многоуровневых кратеров от логарифма энергии ФЛИ. Эти зависимости используются для определения пороговых значений и параметров гауссова пучка по известной методике [29]. Квадратные маркеры соответствуют отколу внутри верхнего слоя Ni (1), круглые – на границе слоев Ni (1) и Al (2), треугольные – внутри слоя Al (2). Результаты измерений глубин и порогов при модификации многослойной структуры суммированы в табл. 1.

В таблице 1 пороги абляции даны по падающей плотности энергии (флюенсу). Согласно работам [30, 31], коэффициент отражения Ni при нормальном падении на длине волны 1028 нм равен $R = 0.73$. Соответственно, значение первого порога по поглощенной плотности энергии будет составлять $F_{a1}^{abs} = (1 - R)F_{a1}^{in} \approx 0.04$ Дж/см²; верхний индекс “in” в обозначении F_{a1}^{in} указывает на то, что это падающая на мишень энергия, F_{a1}^{abs} – это поглощенная в мишени энергия, чтобы различать падающую и поглощенную энергии, используем индексы “in” и “abs”. Отметим, что приведенное значение F_{a1} для нашего ламината в три раза меньше значения порога абляции для массивной мишени никеля, измеренного в работе [32]. Причина низкой величины первого порога откола внутри слоя Ni(1) будет рассмотрена ниже.

Численное моделирование. Быстрый лазерный нагрев металла с помощью ФЛИ ведет к резкому превышению электронной температуры T_e над ионной температурой T_i (двухтемпературность). Это в свою очередь ведет к значительному росту электронной теплопроводности (по сравнению с однотемпературными значениями из справочников) на временах, меньших характерного времени электрон-фононного теплообмена [33–35]. Кроме того, при описании явлений при высокой энергетике лазерного воздействия, вызывающего абляцию материала мишени, существенную роль начинают играть гидродинамические процессы смещения, сжатия и растяжения вещества.

В приведенных ниже расчетах лазерной модификации многослойной структуры Ni/Al используется разработанный нами ранее двухтемпературный гидродинамический (2Т-ГД) код; см., например, [36, 37]. Данная работа ограничивается расчетом первого порога F_{a1}^{abs} и соответствующей ему глубины кратера. В расчетах используется пластическое приближение. Сквозное описание твердой и жидкой фаз необходимо, поскольку имеет место плавление и кристаллизация вещества.

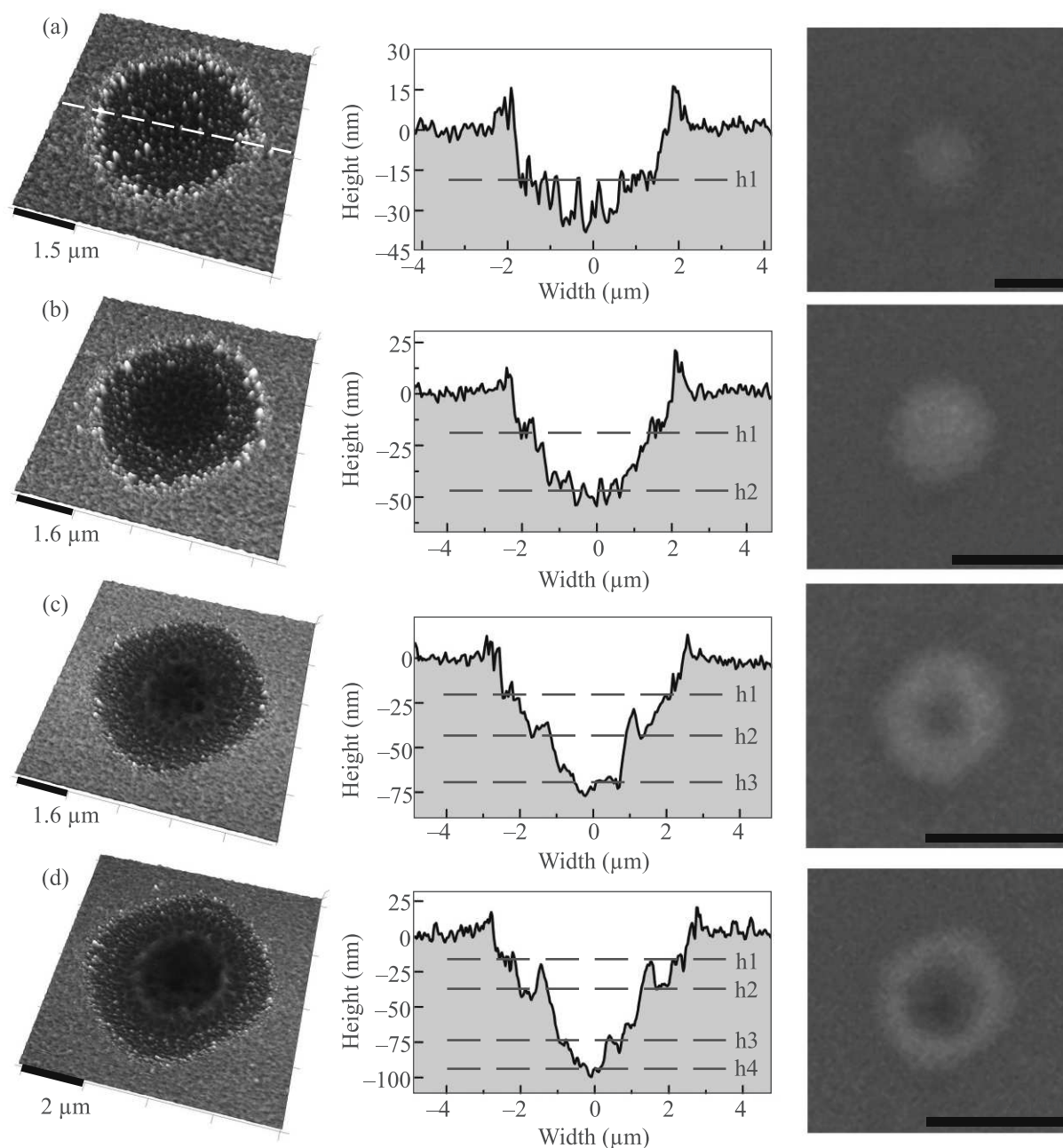


Рис. 1. (Цветной онлайн) Модификация многослойной структуры после однократного воздействия ФЛИ с различной плотностью энергии F_0 : (a) – 0.42 Дж/см^2 ; (b) – 1.07 Дж/см^2 ; (c) – 2.27 Дж/см^2 ; (d) – 3.12 Дж/см^2 . Слева приведены сканы АСМ, в центре – сечения кратеров, справа – их оптические изображения

Сравнение расчетов с результатами описанного выше эксперимента позволяет оценить адекватность применяемой физической модели. Для многослойной мишени подобные расчеты (с учетом гидродинамики) проводятся впервые. В будущем с применением такого проверенного подхода будет выполнено численное моделирование для определения второго порога F_{a2}^{abs} , а также силы адге-

зии на контакте между слоями никеля и алюминия.

Сопоставим характеристики никеля и алюминия, существенные для описания ультракороткого воздействия.

Во-первых, при нормальной плотности теплоемкость $C_e(T_e, \rho)$ электронной подсистемы никеля на порядок больше. Это связано со структурой элек-

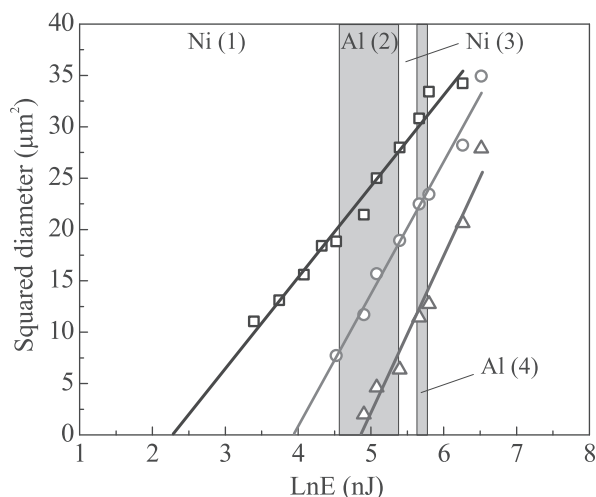


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости поперечного размера многоуровневых кратеров на поверхности Ni/Al структуры от энергии ФЛИ

тронного спектра никеля $3d^{8-9}4s^{2-1}$ по сравнению с алюминием $3s^23p^1$. У никеля имеется намного более густой спектр электронных состояний ниже и выше уровня Ферми по сравнению с алюминием. Из-за разницы в теплоемкости C_e электронная температура T_e никеля ниже, чем в алюминии, при равных плотностях электронной энергии на единицу объема.

Во-вторых, ионная теплоемкость никеля C_i на единицу объема в 1.5 раза выше, чем у алюминия. Если не учитывать процессы теплопроводности, то данное обстоятельство является причиной более высоких ионных температур T_i в алюминии при равных плотностях ионной энергии на единицу объема.

Наконец, в-третьих, никель существенно жестче довольно мягкого алюминия, акустический импеданс которого втрое меньше.

С отмеченной выше разностью теплоемкостей C_e связана аномалия профилей электронной температуры на ранней стадии (рис. 3). Видно, что привычный ход с убыванием температуры T_e вглубь мишени нарушен. А именно, появляется инверсный участок, на котором электронный тепловой поток $q_e = -\kappa \partial T_e / \partial x$ течет не в толщу мишени, а в обратном направлении – в сторону фронтальной (т.е. облучаемой) поверхности. Инверсия потока локализована в окрестности контакта, поскольку на контакте происходит скачок теплоемкости C_e . Кривая, показанная на рис. 3а, б малиновым цветом, представляет мгновенный (на момент $t = 0$) профиль потока q_e . Максимум обратного потока располагается на контактной границе. Синяя кривая соответствует мгновенному ($t = 0$) профилю плотности

электронной энергии в расчете на единицу объема. Красная кривая на рис. 3б – это электронная температура.

Время в расчетах отсчитывается от максимума интенсивности лазерного импульса $I(t) \propto \exp(-t^2/\tau_L^2)$, где ширина импульса по уровню $1/e$ равна $2\tau_L = 100$ фс. К моменту $t = 0$ в мишень введена половина поглощенной энергии ФЛИ F^{abs} . Излучение поглощается согласно закону Бугера с длиной затухания $\delta = 20$ нм: где $I(x, t) \propto \exp(-t^2/\tau_L^2) \exp(-x/\delta)$. На рисунке 3 показан вариант с поглощенной энергией $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см². На момент $t = 0$ немонотонность температуры T_e наблюдается во всей серии расчетов с $F^{\text{abs}} = 35, 40, 50$ и 60 мДж/см².

Начальная электронная энергия нанопластина $E_e(x, t = -\infty)$, находившегося при комнатной температуре, ничтожна по сравнению с приобретенной энергией $E_e(x, t = 0)$. Профили I/δ [Вт/см³] (малиновые точки) и E_e [Дж/см³] (синяя кривая) на рис. 3а совмещены искусственно. Понятно, что эти профили подобны $E_e(x, t) = \int_{-\infty}^t dt' I(x, t')/\delta$, если в среде несущественны перетоки энергии и объемное охлаждение. Значительное нарушение подобия между I/δ и E_e обусловлено перетоком поглощаемой энергии из алюминия в никель, хотя на границе тепловыделение I/δ непрерывно.

Отметим, что электронный тепловой поток q_e составляет единицы ГВт/см² (см. рис. 3), а поглощаемая интенсивность светового потока на два порядка больше. Таким образом, во время действия лазерного импульса, энергии в скин-слой δ прибывает в единицу времени на два порядка больше, чем отводится за счет электронной теплопроводности. Поэтому, во-первых, электронная температура нарастает во время импульса, и, во-вторых, отвод тепла из скин-слоя продолжается после окончания импульса. Но перенести за счет потока q_e заметное количество энергии из никеля в подстилающий слой алюминия при нашей толщине слоя никеля (это поглощающий свет 1-й слой) нельзя, см. профиль температуры T_e на рис. 4 в момент 2 пс.

Дело в том, что электрон-ионная релаксация протекает в никеле за время t_{eq} примерно 3–4 пс. После этого теплопроводность существенно снижается. Поэтому за время порядка длительности акустической стадии $t_s = d_f/c_s \approx 10$ пс нет заметного нагрева слоя алюминия Al(2) за счет тепла слоя Ni(1); здесь d_f и c_s – это толщина 1-го слоя никеля Ni(1) и скорость звука. На акустической стадии происходит механический разрыв (если энергия F^{abs} выше порога). После этого остывание наружных слоев за счет передачи в

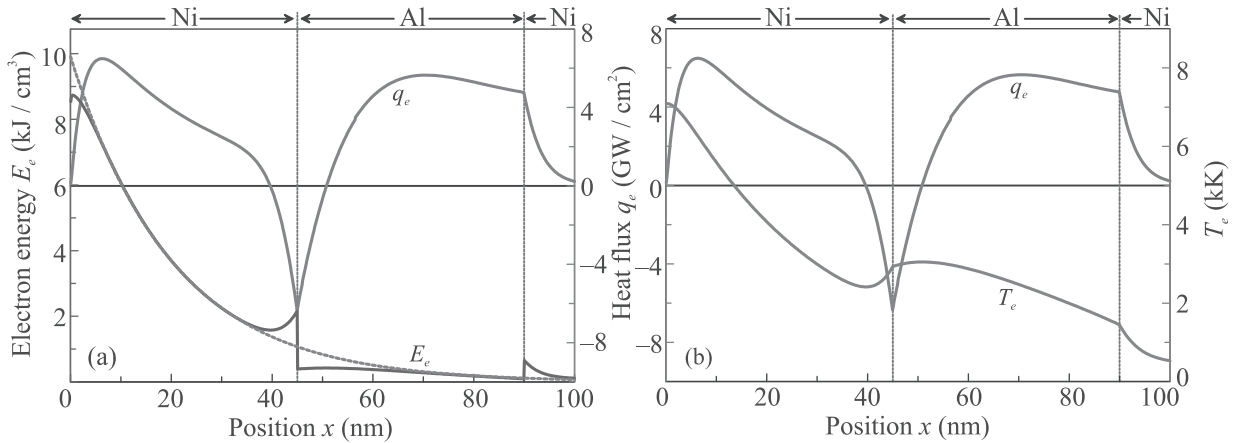


Рис. 3. (Цветной онлайн) Момент времени $t = 0$ – мишень поглотила половину от предназначенной ей энергии F^{abs} , равной 40 мДж/см². (а) – Красными точками показан мгновенный профиль мощности диссипации энергии лазерной электромагнитной волны $I/\delta \propto \exp(-t^2/\tau_L^2) \exp(-x/\delta)$ Вт/см³ с передачей мощности в энергию электронной подсистемы. Тепловой поток q_e показан малиновой кривой. Электронная энергия – это синяя кривая. (б) – Профиль T_e – красная кривая. Нарушение монотонного хода температуры T_e связано с инверсией потока q_e

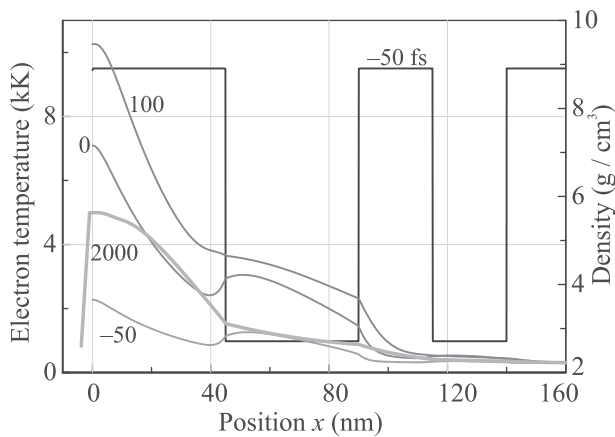


Рис. 4. (Цветной онлайн) Ступенчатая кривая дает профиль плотности на момент $t = -50$ фс; цифры у зависимостей – суть время в фс, $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см². Видим, как эволюционирует профиль электронной температуры $T_e(x, t)$. При эволюции немонотонность исчезает и небольшое дополнительное количество энергии передается за счет теплопроводности в слой алюминия Al(2)

толщю мишени не влияет на интересующую нас толщину h унесенного абляцией слоя.

На ранних временах степень немонотонности выше, см. рис. 4. Действительно, сравним отношение $\Delta T_e/T_e|_s$ на моменты времени -50 фс и 0 на рис. 4; здесь $T_e|_s$ – температура поверхности в соответствующий момент времени, ΔT_e – разность температур между локальным максимумом и локальным минимумом профиля T_e ; минимум и максимум находятся слева и справа в окрестности контакта никель-

алюминий. Видим, что это отношение равно 0.18 для момента $t = -50$ фс и 0.09 для $t = 0$. Цифры у профилей на рис. 4 указывают время в фемтосекундах. Аномальное поведение температуры T_e (нарушение монотонности) продолжается недолго. Это обусловлено малостью количества световой энергии, попадающей в алюминий через слой никеля. За счет теплопроводности в алюминий поступает больше энергии, чем пришло с электромагнитной волной. Уже к первой пикосекунде после ультракороткого лазерного воздействия профили электронной температуры и электронного потока энергии принимают обычный монотонный вид, см. рис. 4.

Определяющее гидродинамическое движение начинается на акустической стадии, на временах начиная с нескольких пикосекунд. Движение заключается в распространении волны сжатия и волны разрежения от границы с вакуумом в толщу ламината. Нас интересует процесс разрыва первого слоя никеля. Разрыв происходит при флюенсе F_{a1} (см. табл. 1), когда растягивающее напряжение начинает превосходить прочность никеля.

Для инициации процесса разрушения важное значение имеет фазовый состав вещества, поскольку прочность вещества на разрыв (термомеханическая абляция) при растяжении существенно уменьшается при плавлении [38, 39]. На рисунке 5 показано фазовое состояние слоев многослойной структуры на стадии, когда передача энергии из электронной подсистемы в ионную подсистему практически завершена. Буквой “s” обозначена граница конденсированной фазы. Левее этой границы находится испа-

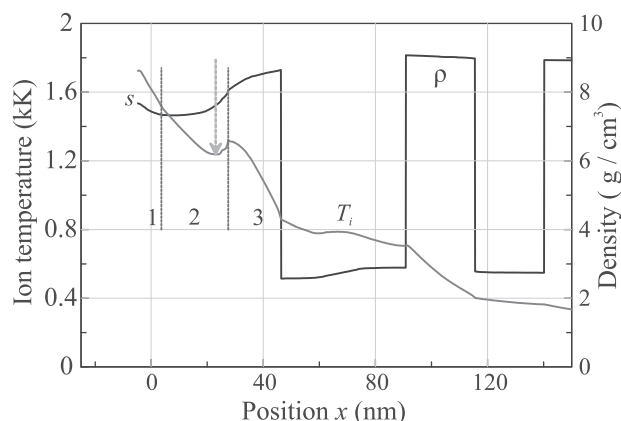


Рис. 5. (Цветной онлайн) Фазовые состояния слоев: 1 – расплав, 2 – двухфазная смесь жидкой и твердой фаз, кристаллическая фаза располагается правее вертикальной прямой, разделяющей слои 2 и 3. Показаны профили ионной температуры T_i (красная кривая) и плотности ρ (черная ступенчатая кривая); $t = 14$ пс, вариант расчета с $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см² и без возможности разрыва вещества

ренное вещество. В случае с поглощенной энергией $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см² пара мало, его массовая толщина составляет $0.9 \cdot 10^{-7}$ г/см² – это 0.02% от массы слоя 1-го слоя никеля. На момент, показанный на рис. 5, толщина парового слоя примерно 15 нм. Цифрами 1 и 2 отмечены соответственно слои жидкости и смеси жидкость–кристалл. Если энергию $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см² равномерно распределить по слою никеля с начальной толщиной 45 нм, то этой энергии хватит, чтобы расплавить слой и поднять его температуру на несколько сот градусов выше температуры плавления.

На рисунке 5 правая граница смеси (слой 2) движется направо со скоростью 450 м/с. Небольшое снижение температуры левее этой границы связано с расходами на плавление и с растяжением вещества (растяжение приводит к снижению температуры плавления $T_m(p)$ и, следовательно, облегчает плавление [40]). Минимум температуры, отмеченный голубой стрелкой на рис. 5, находится точно в минимуме давления на красной кривой на рис. 6 (красная кривая – это расчет без учета возможности разрыва вещества). Наше гидродинамическое моделирование с широкой зоной смеси (широкой на пикосекундных временах) хорошо согласуется с молекулярно-динамическими расчетами, явно учитывающими кинетику плавления [40, 41]. Приближение Стефана в такой ситуации неприменимо; в этом приближении смеси нет, фронт плавления тонкий, а разница градиентов температуры равна скорости движения фрон-

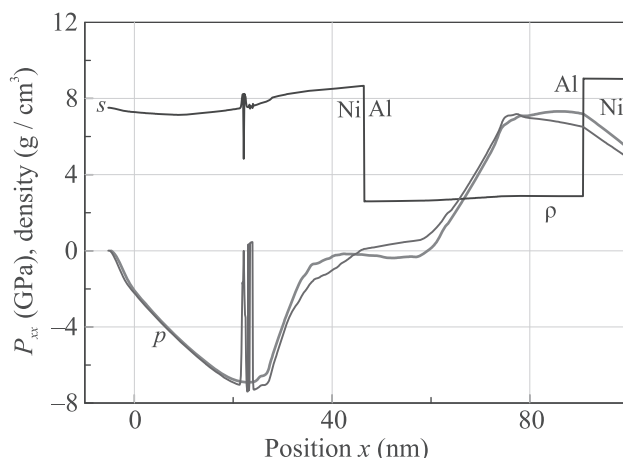


Рис. 6. (Цветной онлайн) Профили давления (красная и синяя кривые) и плотности (черная кривая) в момент $t = 14$ пс, при $F^{\text{abs}} = 40$ мДж/см². Плотность испытывает скачки на контактах между Ni и Al. Представлены результаты, полученные по версиям кода без учета (красная кривая) и с учетом разрыва (синяя и черная кривые). В зоне разрыва плотность начинает резко снижаться, растягивающее напряжение обращается в нуль (разгрузка при разрыве). Разрыв происходит там, где находится минимум красной кривой

та по веществу, помноженной на теплоту плавления в расчете на единицу объема. В нашем подходе используются широкодиапазонные уравнения состояния никеля и алюминия [42–44]. Это позволяет аккуратно и в сквозном режиме счета при фазовых превращениях учитывать теплоты испарения и плавления.

На рисунке 6 показаны профили плотности (черная кривая) и давления p (синяя и красная кривые). Профили p приведены для двух версий расчетов. В 1-й версии возможности разрыва нет – красная кривая на рис. 6. Во 2-й версии такая возможность добавлена. Для сравнения результатов необходимы рис. 5–7. Профили плотности для 2-х версий представлены на рис. 5 и 6 (черные кривые со ступеньками). Профили давления p для 2-х версий изображены на рис. 6 (красная и синяя кривые).

Как видим, имеется весьма впечатляющая особенность, различающая версии. Она связана с внутренним разрывом никеля. На момент 14 пс разрыв только зарождается. Поэтому зона разрыва является очень узкой. От разрыва направо и налево бегут скачки разгрузки – снятие растягивающего напряжения происходит “скачком” от конечной величины до нуля. В природе это связано с быстрым (субпикосекундным) развитием процесса нуклеации зародышей. В расчете разрыв происходит на одном шаге интегрирования по времени – по достижении крите-

рия разрыва. Скачки разгрузки называются также откольными импульсами. Вещество снаружи от скачков о разрыве “не знает”. Разрыв происходит в минимуме давления (красная кривая на рис. 6). С этим минимумом связан минимум температуры на рис. 5 – отмечен голубой стрелкой.

Согласно работе [38] прочность жидкой фазы σ убывает с ростом температуры и вблизи температуры плавления T_m при реализуемых скоростях растяжения $\sim 3 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ составляет около 8 ГПа. Данная величина в пределах 10 % погрешности согласуется с расчетным значением растягивающих напряжений на рис. 6. Для более точного определения прочности необходимы дополнительные молекулярно-динамические расчеты. Массовая толщина откольной пластины определена на рис. 7. За

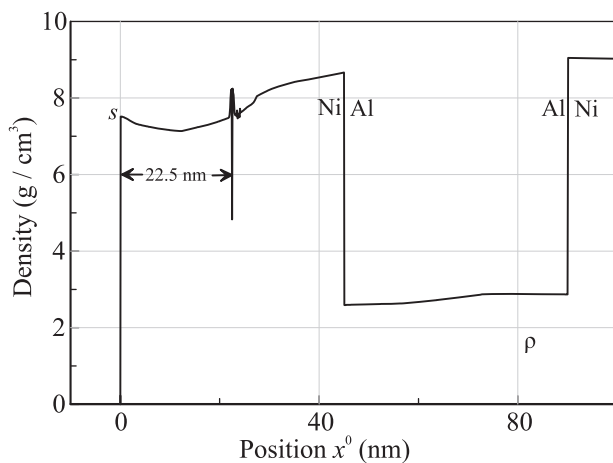


Рис. 7. Версия с учетом возможности разрыва. Начало формирования разрыва. Мгновенный ($t = 14 \text{ пс}$) профиль плотности, как функция лагранжевой координаты x^0 . На предыдущем рисунке этот же профиль дан в зависимости от эйлеровой координаты x . Координата x^0 позволяет точно определить массу оторвавшегося (аблировавшего) слоя $\rho_0 \times 22.5 \text{ нм}$, здесь ρ_0 – начальная плотность никеля

лагранжеву координату x^0 принята пространственная позиция материальных частиц относительно границы с вакуумом до воздействия лазера. Полученные численно данные о пороге разрыва по энергетике $F_{a1}^{\text{abs}} = 0.04 \text{ Дж/см}^2$ (при коэффициенте отражения R) и глубине $h = 22.5 \text{ нм}$ (рис. 7) хорошо согласуются с $h = 19 \pm 3 \text{ нм}$ из эксперимента, см. табл. 1.

Заключение. В работе исследованы особенности модификации многослойной структуры, состоящей из последовательности наноразмерных слоев никеля и алюминия. Модификация осуществляется с помощью фемтосекундных лазерных импульсов. Экспе-

риментально найдено, что первый разрыв происходит внутри верхнего слоя никеля, а не на контакте двух верхних слоев. Причиной этого является интерференция волн разрежения, движущихся навстречу друг другу от свободной поверхности образца и от границы никеля с алюминием. При этом, по данным моделирования, никель в области наибольшего растяжения находится в состоянии двухфазной смеси. Расчетная величина первого порога и глубины откола хорошо согласуется с экспериментальными значениями. Теоретически показано наличие инверсного поведения электронного теплового потока в области границы между верхними слоями на начальной двухтемпературной стадии. Это явление несколько ослабляет нагрев алюминия.

Авторы (С. А. Ромашевский, С. И. Ашитков, П. С. Комаров, Е. В. Струлева (экспериментальная часть) и В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, А. Н. Паршиков (теоретическая часть)) благодарят Российский научный фонд (грант # 19-19-00697) за поддержку. Работа В. А. Хохлова и Ю. В. Петрова (гидродинамическое моделирование) выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН # 075-15-2020-785).

1. J. A. Syed, S. Tang, and X. Meng, *Sci. Rep.* **7**, 4403 (2017).
2. S. J. Bull and A. M. Jones, *Surf. Coat. Technol.* **78**, 173 (1996).
3. М. М. Барышева, А. Е. Пестов, Н. Н. Салащенко, М. Н. Торопов, Н. И. Чхало, *УФН* **182**, 727 (2012).
4. V. V. Temnov, *Nature Photon.* **6**, 728 (2012).
5. V. V. Temnov, C. Klieber, K. A. Nelson, T. Thomay, V. Knittel, A. Leitenstorfer, D. Makarov, M. Albrecht, and R. Bratschitsch, *Nat. Commun.* **4**, 1468 (2013).
6. C.-Yu Chen and T.-Li Chang, *Microelectron. Eng. C* **143**, 41 (2015).
7. B. Gakovic, C. Radu, M. Zamfirescu, B. Radak, M. Trtica, S. Petrovic, P. Panjan, F. Zupanec, C. Ristoscu, and I. N. Mihailescu, *Surf. Coatings Technol.* **206**, 411 (2011).
8. M. Ulmeanu, M. Filipescu, N. D. Scarisoreanu, G. Georgescu, L. Rusen, and M. Zamfirescu, *Appl. Phys. A* **104**, 247 (2011).
9. N. L. LaHaye, J. Kurian, P. K. Diwakar, L. Alff, and S. S. Harilal, *Sci. Rep.* **5**, 13121 (2015).
10. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков, Ю. В. Петров, М. Б. Агранат, С. И. Анисимов, К. Нишихара, and В. Е. Фортов, *ЖЭТФ* **134**, 5 (2008).
11. М. Е. Povarnitsyn, T. E. Itina, M. Sentis, K. V. Khishchenko, and P. R. Levashov, *Phys. Rev. B* **75**, 235414 (2007).

12. П. А. Данилов, Д. А. Заярный, А. А. Ионин, С. И. Кудряшов, Ч. Т. Х. Нгуен, А. А. Руденко, И. Н. Сараева, А. А. Кучмижак, О. Б. Витрик, Ю. Н. Кульчин, Письма в ЖЭТФ **103**, 617 (2016).
13. Н. А. Смирнов, С. И. Кудряшов, П. А. Данилов, А. А. Руденко, А. А. Ионин, А. А. Настулявичус, Письма в ЖЭТФ **108**, 393 (2018).
14. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, Письма в ЖЭТФ **108**, 470 (2018).
15. S. A. Romashevskiy, P. A. Tsygankov, S. I. Ashitkov, and M. B. Agranat, Appl. Phys. A **124**, 376 (2018).
16. B. Gaković, S. Petrović, C. Albu, M. Zamfirescu, P. Panjan, D. Milovanović, G. Popescu-Pelin, and I. N. Mihailescu, Optics & Laser Technology **89**, 200 (2017).
17. B. Gaković, G. D. Tsibidis, E. Skoulas, S. M. Petrović, B. Vasić, and E. Stratakis, J. Appl. Phys. **122**, 223106 (2017).
18. S. I. Kudryashov, B. Gakovic, P. A. Danilov, S. M. Petrovic, D. Milovanovic, A. A. Rudenko, and A. A. Ionin, Appl. Phys. Lett. **112**, 023103 (2018).
19. S. Petrović, B. Gaković, M. Zamfirescu, C. Radu, D. Peruško, B. Radak, C. Ristoscu, S. Zdravković, C. L. Luculescu, and I. N. Mihailescu, Appl. Surf. Sci. **417**, 16 (2017).
20. A. Naghilou, M. He, J. S. Schubert, L. V. Zhigilei, and W. Kautek, Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 11846 (2019).
21. R. D. Murphy, B. Torralva, and S. M. Yalisove, Appl. Phys. Lett. **102**, 181602 (2013).
22. J. Roth, H.-R. Trebin, A. Kiselev, and D.-M. Rapp, Appl. Phys. A **122**, 500 (2016).
23. V. Turlo, O. Politano, and F. Baras, J. Appl. Phys. **121**, 055304 (2017).
24. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and K. P. Migdal, Nanoscale Res. Lett. **11**, 177 (2016).
25. S. Zhou, K. Zhao, and H. Shen, Optics & Laser Technology **132**, 106495 (2020).
26. V. V. Shepelev and N. A. Inogamov, J. Phys: Conf. Ser. **946**, 012010 (2018).
27. С. И. Ашитков, Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, Ю. Н. Эмиров, М. Б. Агранат, И. И. Олейник, С. И. Анисимов, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ **95**, 192 (2012).
28. С. И. Ашитков, С. А. Ромашевский, П. С. Комаров, А. А. Бурмистров, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, М. Б. Агранат, Квантовая электроника **45**, 547 (2015).
29. J. M. Liu, Opt. Lett. **7**, 196 (1982).
30. M. A. Ordal, R. J. Bell, R. W. Alexander, L. L. Long, and M. R. Querry, Appl. Opt. **2**, 744 (1987).
31. A. D. Rakić, A. B. Djurišić, J. M. Elazar, and M. L. Majewski, Appl. Opt. **37**, 5271 (1998).
32. Е. В. Струлева, П. С. Комаров, С. И. Ашитков, ТВТ **57**, 689 (2019).
33. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, V. V. Shepelev, P. S. Komarov, A. V. Ovchinnikov, D. S. Sitnikov, Yu. V. Petrov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, and V. E. Fortov, Contributions to Plasma Physics **51**, 367 (2011).
34. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, К. П. Мигдал, Письма в ЖЭТФ **97**, 24 (2013).
35. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **98**, 316 (2013).
36. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov, V. A. Khokhlov, V. V. Zhakhovskii, K. Nishihara, M. B. Agranat, S. I. Ashitkov, and P. S. Komarov, Appl. Phys. A **92**, 939 (2008).
37. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, ЖЭТФ **154**, 92 (2018).
38. A. E. Mayer and P. N. Mayer, J. Appl. Phys. **118**, 035903 (2015).
39. P. N. Mayer and A. E. Mayer, J. Appl. Phys. **124**, 035901 (2018).
40. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, Phys. Rev. B **87**, 054109 (2013).
41. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, P. S. Komarov, M. B. Agranat, S. I. Anisimov, and K. Nishihara, Appl. Surf. Sci. **255**, 9712 (2009).
42. A. V. Bushman, G. I. Kanel', A. L. Ni, and V. E. Fortov, *Intense dynamic loading of condensed matter*, Taylor & Francis, Washington, D.C. (1993).
43. K. V. Khishchenko, S. I. Tkachenko, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov, and V. S. Vorobev, Int. J. Thermophys. **23**, 1359 (2002).
44. I. V. Lomonosov, Laser Part. Beams **25**, 567 (2007).

О возможности наблюдения коллективного туннельного эффекта при ионизации атомов интенсивным лазерным полем

С. В. Попруженко^{+,*1)}, Т. А. Ломоносова[×]

⁺ Федеральный исследовательский центр “Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН” 119991 Москва, Россия

^{*} Воронежский государственный университет, 394018 Воронеж, Россия

[×] Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 января 2021 г.

После переработки 29 января 2021 г.

Принята к публикации 1 февраля 2021 г.

Обсуждается форма импульсного распределения двукратно заряженных ионов, возникающих при ионизации атомов в интенсивном низкочастотном циркулярно поляризованном лазерном поле. Показано, что два возможных канала ионизации – последовательное и коллективное туннелирование – приводят в этом случае к качественно различным импульсным распределениям ионов. Полученные результаты могут быть использованы для экспериментального поиска коллективного туннельного эффекта в атомах.

DOI: 10.31857/S1234567821050050

Исследования процессов нелинейной ионизации атомов и молекул относятся к числу наиболее динамично развивающихся областей физики взаимодействия интенсивного лазерного излучения с веществом. Благодаря развитию методов управления свойствами лазерного излучения и диагностики возникающих в процессе ионизации электронов, ионов и вторичного излучения, в последние десятилетия появились новые возможности исследования эффектов нелинейной атомной оптики в аттосекундном [1, 2] и релятивистском [3] режимах, а также в сверхкоротких лазерных импульсах [4, 5]. Описание современного состояния физики коротких интенсивных лазерных импульсов и различных примеров использования таких импульсов для исследования нелинейной ионизации и других многоквантовых процессов можно найти в работах [1, 2, 4, 6–11] и цитируемой в них литературе.

Многократная туннельная ионизация атомных систем в интенсивном лазерном поле наблюдается с середины 1970-х гг. Уже в первых экспериментах по двукратной ионизации атомов линейно поляризованным лазерным излучением высокой мощности [12, 13] было обнаружено, что вероятность такого процесса оказывается на много порядков выше, чем этого можно было бы ожидать, исходя из представления о последовательном независимом туннелировании электронов. Это аномальное увеличение веро-

ятности возникает вследствие электрон-электронной корреляции, физические сценарии реализации которой могут быть различными. Продолжающееся обсуждение этих сценариев, направленное на поиск условий, при которых вклады различных механизмов корреляции могут быть разделены и однозначно идентифицированы, определяет неослабевающий интерес к исследованиям эффекта многократной ионизации и, более широко, корреляционных эффектов в атомах в присутствии сильного электромагнитного поля. Современное состояние исследований в этой области отражено в обзоре [14], ряде более поздних работ, включая [15–18], и цитируемой в них литературе.

Применение техники COLTRIMS (Cold Target Recoil-Ion Momentum Spectroscopy) [19, 20] в экспериментах по атомной физике сильных полей дает возможность идентифицировать пары электронов, возникшие в результате ионизации одного и того же атома, и измерить импульсные распределения этих пар и двукратно заряженных ионов. Измерение таких импульсных распределений, форма которых оказывается, как правило, существенно зависящей от механизма корреляции, создает новые возможности для верификации теоретических моделей. В настоящее время считается твердо установленным, что при ионизации в линейно поляризованном поле доминирующим механизмом электрон-электронной корреляции является неупругое перераспределение первоначально ионизованного валентного электрона на

¹⁾ e-mail: sergey.popruzenko@gmail.com

атомном остове. Этот механизм был предложен для объяснения аномально высокого выхода двукратно заряженных ионов впервые в [21], затем в [22, 23], но только с появлением возможности измерения импульсных распределений ионов [24, 25] было доказано, что этот механизм является основным [26–28]. В настоящее время механизм перерассеяния хорошо изучен, идентифицированы его различные каналы, связанные с ударным возбуждением второго электрона в промежуточное связанное состояние, прямой ударной ионизацией, возможностью захвата одного из ионизованных электронов родительским ионом и др.

Другой механизм коррелированной двойной ионизации был предложен и теоретически исследован в работах [29, 30]. Он заключается в одновременном туннелировании двух электронов как квазичастицы. Коллективный туннельный эффект хорошо известен в физике конденсированного состояния, причем не только для электронов, но и для тяжелых частиц, однако при ионизации атомов и молекул во внешнем поле он до настоящего времени не наблюдался. Полученные в [29] квазиклассические формулы показывают, что вероятность одновременного туннелирования двух электронов может оказаться, в определенном диапазоне параметров, больше вероятности каскадной двойной ионизации. В частности, такая ситуация должна иметь место для некоторых атомов благородных газов, включая аргон, криптон и ксенон. Однако аналитические оценки [29] показывают, что вероятность коллективного туннелирования может превосходить вероятность каскадной ионизации всего в несколько раз, в то время как вероятность двойной ионизации через перерассеяние превышает их обе на несколько порядков. Кроме того, сильная антикорреляция в импульсном распределении электронных пар, $\mathbf{p}_{1m} = -\mathbf{p}_{2m}$, где $\mathbf{p}_m$ – наиболее вероятный импульс электрона, которая ожидается в случае коллективного туннелирования, наблюдается также в случае двойной ионизации через перерассеяние с возбуждением в промежуточное связанное состояние [14]. Приходится сделать вывод о том, что поиск эффекта коллективного туннелирования в линейно поляризованном лазерном поле имеет мало шансов на успех.

Эффект перерассеяния возникает в результате возвращения квазиклассически движущегося фотоэлектрона к родительскому атому [21, 22]. Как следствие, вклад перерассеяния в нелинейные эффекты лазер-атомного взаимодействия, включая двойную ионизацию [31], быстро падает с ростом эллиптич-

ности лазерной волны, а в циркулярно поляризованном поле перерассеяние полностью исчезает. Напротив, туннельный эффект, одночастичный или коллективный, мало чувствителен к поляризации вызывающего его поля. Поэтому естественным представляется поиск проявлений коллективного туннельного эффекта при ионизации в циркулярно поляризованной лазерной волне, где главный конкурирующий канал двойной ионизации полностью запрещен. В данной работе мы приводим качественный анализ импульсных распределений двукратно заряженных ионов, возникающих в процессах каскадного и коллективного туннельного эффектов и показываем, что эти распределения должны сильно отличаться друг от друга. В случае, если вероятности ионизации по конкурирующим каналам сопоставимы, эти различия должны быть достаточны для экспериментального обнаружения коллективного туннельного эффекта в атомах.

Рассмотрим туннельную ионизацию атома с потенциалами ионизации двух внешних электронов, равными I_1 и I_2 . Ионизацию можно считать туннельной при выполнении условия $\gamma \ll 1$, где

$$\gamma = \frac{\sqrt{2I}\omega}{E_0} \quad (1)$$

параметра Келдыша [32], а E_0 и ω – амплитуда и частота лазерной волны соответственно. Здесь и далее используем атомные единицы $e = m = \hbar = 1$. Будем считать, что это условие выполнено для обоих электронов, чего легко достичь при ионизации атомов лазерным излучением среднего инфракрасного диапазона с длиной волны $\lambda = 2\text{--}4\text{ мкм}$. С учетом кулоновских поправок к вероятности ионизации, величина этой вероятности в случае туннелирования одного электрона определяется формулой [33, 6]

$$W_s \simeq \left(\frac{2}{F}\right)^{2\nu} \exp\left\{-\frac{2}{3F}\right\}, \quad (2)$$

где

$$F = \frac{E_0}{(2I)^{3/2}}, \quad \nu = \frac{Z}{\sqrt{2I}} \quad (3)$$

соответственно приведенное электрическое поле волны и эффективное главное квантовое число уровня. Заряд атомного остатка Z равен 1 для нейтрального атома, 2 для однократно заряженного иона и т.д. В формуле (2) учтена главная, наиболее резкая зависимость вероятности от напряженности поля. Предэкспоненциальный фактор, слабо зависящий от F , опущен. Выражения для вероятности туннельной ионизации в единицу времени, учитывающие предэкспоненциальный фактор, зависящий от квантовых чисел уровня (l, m) , можно найти в обзорах [6, 33].

В случае ионизации атомов благородных газов лазерным полем интенсивностью $\approx 10^{15}$ Вт/см² вероятность отрыва первого электрона за один период лазерного поля будет близка к насыщению, а вероятность туннельной ионизации второго – оставаться малой. В этом случае, если доминирует каскадный механизм, малое количество двукратно заряженных ионов, образующихся в лазерном фокусе, будет пропорционально вероятности (2), вычисленной для второго потенциала ионизации I_2 . В случае одновременного туннелирования двух электронов вероятность такого процесса W_c дается той же формулой [29] с заменой

$$\nu \rightarrow \nu_* = \frac{\sqrt{2}Z}{\sqrt{I_*}}, \quad F \rightarrow F_* = \frac{\sqrt{2}E_0}{(2I_*)^{3/2}}, \quad (4)$$

где $I_* = I_1 + I_2$. Можно убедиться в том [29], что при интенсивности 10^{15} Вт/см² $W_c > W_s$ для атомов аргона и криптона. Тем не менее, даже кратное различие в вероятностях крайне сложно измерить в эксперименте из-за влияния усреднения по фокусу, неопределенности пикового значения интенсивности и влияния других трудно контролируемых эффектов. Поэтому выполнение условия $W_c > W_s$ само по себе недостаточно для достоверного наблюдения коллективного туннельного эффекта.

Рассмотрим теперь импульсные распределения двукратно заряженных ионов, возникающих в каждом из двух каналов ионизации. В нерелятивистском режиме взаимодействия, который для рассматриваемых параметров выполняется с большим запасом, импульсом поглощенных фотонов можно пренебречь, так что импульс двукратно заряженного иона

$$\mathbf{P} = -\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 \quad (5)$$

при любом механизме двойной ионизации. В случае одноэлектронного туннелирования при условии $\gamma \ll 1$ нормированное на единицу импульсное распределение в плоскости поляризации представляет собой узкий гауссов пик [33]:

$$dW_s(\mathbf{p}) = \frac{d^2p}{2\pi^{3/2}p_F\delta p} \exp\left\{-\frac{(p^2 - p_F^2)^2}{4p_F^2\delta p^2}\right\},$$

$$p_F = \frac{E_0}{\omega}, \quad \delta p = \sqrt{2IF}. \quad (6)$$

Значение наиболее вероятного импульса $p_m = p_F$ несложно получить, учитывая, что в момент выхода из-под барьера проекция скорости электрона на направление электрического поля равна нулю, а связь между зависящей от времени скоростью $\mathbf{v}(t)$ и сохраняющимся каноническим импульсом дается выражением:

$$\mathbf{p} = \mathbf{v}(t) + \mathbf{A}(t), \quad (7)$$

где $\mathbf{A}(t)$ – векторный потенциал лазерной волны, равный в нашем случае

$$\mathbf{A}(t) = p_F(\cos \omega t, \sin \omega t, 0). \quad (8)$$

Ширина распределения δp в (6) определяется малым разбросом по начальным поперечным скоростям, равным, в туннельном пределе, $\sqrt{2IF}$ [6, 33]. При одновременном туннелировании двух электронов кинематическая картина, определяющая вид импульсного распределения центра масс квазичастицы, остается той же, что и в случае одного электрона (рис. 1а). Удвоение заряда приводит к появлению множителя 2 перед векторным потенциалом. В результате, с учетом (5), для импульсного распределения $dW_c^{(2)}(\mathbf{P})$ двукратно заряженных ионов, образовавшихся в результате коллективного туннелирования, получим выражение (6) с заменой

$$p_F \rightarrow 2p_F, \quad \delta p \rightarrow \delta p_* = \sqrt{2I_*F_*}, \quad (9)$$

где величины I_* и F_* определены в (4). Таким образом, в случае коллективного туннельного эффекта распределение двукратно заряженных ионов по импульсам будет представлять собой узкий гауссиан с максимумом в точке $P_m = 2p_F$ (рис. 1с).

В случае последовательного независимого туннелирования двух электронов, кинематика которого иллюстрируется рис. 1b, распределение по импульсу двукратно заряженного иона определяется, с учетом (5), известной формулой теории вероятности

$$dW_s^{(2)}(\mathbf{P}) = d^2P \int \delta(\mathbf{P} + \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) dW_s(\mathbf{p}_1) dW_s(\mathbf{p}_2). \quad (10)$$

Отметим, что в этой формуле распределения, стоящие под знаком интеграла, вычисляются при значениях потенциалов ионизации I_1 и I_2 соответственно. Интегрирование по одному из импульсов выполняется элементарно, а оставшийся интеграл можно вычислить приближенно, учитывая, что распределение (6) по величине p_1^2 также близко к дельта-функционному, так что

$$\int dW_s(\mathbf{p}_1) F(\mathbf{P} + \mathbf{p}_1) \approx \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{n}_{p_1} F(\mathbf{P} + p_F \mathbf{n}_{p_1}). \quad (11)$$

Здесь единичный вектор $\mathbf{n}_{p_1}$ задает направление импульса $\mathbf{p}_1$. Вводя угол φ между направлением векторов $\mathbf{P}$ и $\mathbf{p}_1$, получим выражение для импульсного распределения двукратно заряженных ионов, образующихся в результате каскадного процесса:

$$dW_s^{(2)}(P) \sim PdP \int_0^\pi d\varphi \exp\left\{-\frac{P^2}{4p_F^2\delta p^2} \left(P + 2p_F \cos \varphi\right)^2\right\}, \quad (12)$$

где $\delta p_2 = \sqrt{2I_2 F}$. При сделанных нами предположениях о форме лазерного поля (8) и независимости двух актов туннелирования, распределение получается симметричным в плоскости поляризации.

Результат численного интегрирования выражения (12) показан на рис. 1с. Полученной форме распределения несложно дать качественное объяснение. При независимом туннелировании двух электронов импульс иона является векторной суммой двух импульсов, равных по величине p_F и равномерно распределенных по направлениям в плоскости поляризации (рис. 1b). В результате распределение получается слабо изменяющимся в интервале $P \in (0, 2p_F)$, внутри которого зависимость $dW_s^{(2)}(P)/dP$ определяется в основном эффектами фазового объема. При $P > 2p_F$ вероятность экспоненциально спадает в соответствии с распределением (6), так как при этом хотя бы один из импульсов двух электронов должен существенно отличаться от p_F .

Полученные результаты проиллюстрированы для случая двойной ионизации атома аргона с $I_1 = 15.76$ эВ и $I_2 = 27.63$ эВ циркулярно поляризованным лазерным излучением с интенсивностью 10^{15} Вт/см² и длиной волны 2 мкм. Этим параметрам отвечают значения $E_0 = 0.12$, $\omega = 0.022$, для которых ионизация происходит в туннельном режиме: $\gamma_1 = 0.20$, $\gamma_2 = 0.27$, $\gamma_* = 0.24$. Величина p_F , задающая наиболее вероятное значение импульса при одноэлектронном туннелировании, равна $p_F = 5.29$ ат. ед., что соответствует кинетической энергии однозарядного иона аргона, равной приблизительно 5.3 мэВ.

Распределения, представленные на рис. 1с, различаются качественно, и поэтому их измерение может быть использовано для идентификации механизма двойной ионизации. Резкий пик распределения, отвечающего коллективному туннельному эффекту, оказывается, для выбранных параметров, примерно в пять раз выше максимума пологого распределения, возникающего в случае каскадного эффекта. Отметим, что оба распределения нормированы на единичное значение полной вероятности. Это означает, что вклад коллективного туннельного эффекта может быть надежно идентифицирован, даже если его вероятность в несколько раз меньше вероятности каскадного процесса.

Следует отметить, что полученные результаты основаны на достаточно грубой модели, пренебрегающей несколькими существенными факторами. Во-первых, усреднение по пространственно-временному распределению интенсивности лазерного излучения в фокусированном импульсе, эквивалентное усреднению по величине p_F , приведет к уширению импульс-

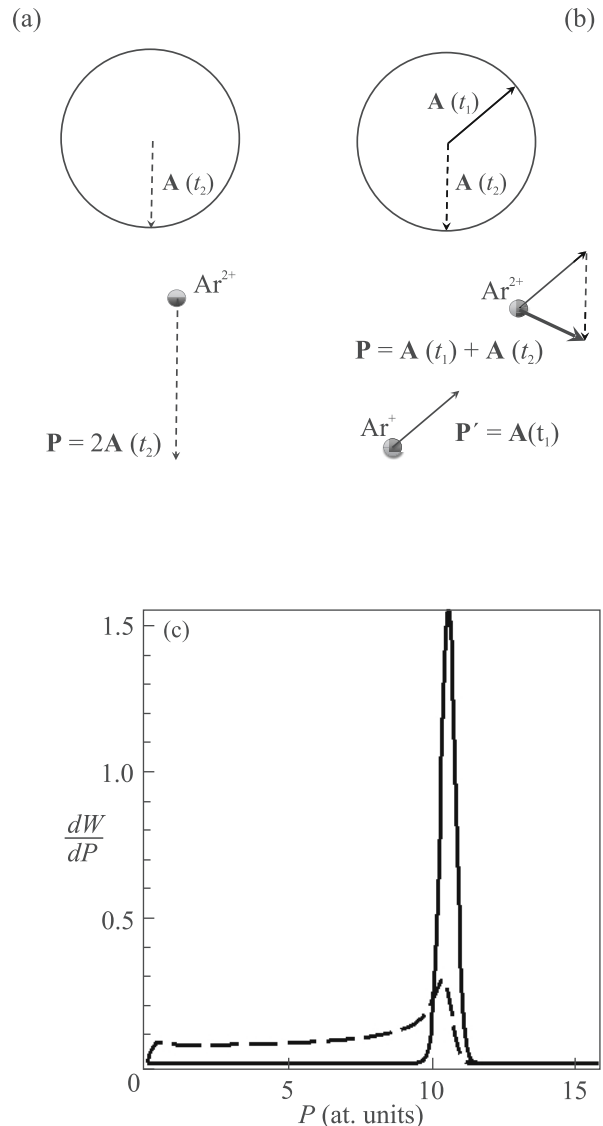


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема, иллюстрирующая формирование импульсного распределения в случае коллективного туннельного эффекта (a) и каскадной двойной ионизации (b). Распределение по абсолютному значению импульса двукратно заряженных ионов аргона (c) при коллективной (сплошная линия) и каскадной (пунктирная линия) двойной ионизации циркулярно поляризованным лазерным излучением с интенсивностью 10^{15} Вт/см² и длиной волны 2 мкм, нормированные на единичное значение полной вероятности

ного распределения. Однако в случае, когда полная вероятность двойной ионизации мала, как это и имеет место для выбранных параметров, подавляющее большинство событий будет происходить вблизи максимума поля, так что усреднение по фокусу лишь незначительно изменит ширину пика. Во-вторых, каскадное туннелирование электронов не является

последовательностью полностью независимых событий. Ионизация первого электрона будет происходить в основном при более низких значениях интенсивности, на фронте лазерного импульса, т.е. при меньших значениях p_F . Ионизация второго электрона будет, напротив, происходить в основном вблизи максимума поля. Таким образом, для количественно точного вычисления распределения, показанного штриховой линией на рис. 1с, требуется существенно более детальный расчет, включающий решение скоростных уравнений и учет эффекта истощения. Скорее всего, указанные эффекты, не учтенные в данной работе, приведут к еще большему выполаживанию распределения ионов, возникающих в результате каскадной ионизации. Наконец, следует отметить, что формулы для вероятности коллективного туннельного эффекта, полученные в [29], не учитывают отталкивания электронов, образующих туннелирующую квазичастицу. Учет отталкивания может существенно изменить величину вероятности, но не кинематику двукратно заряженного иона. Эти аргументы позволяют нам рассчитывать на то, что представленные здесь результаты верны на качественном уровне, а продемонстрированное различие импульсных распределений, возникающих в результате реализации двух механизмов, сохранится при переходе к более реалистическому расчету и будет вполне достаточным для того, чтобы экспериментально разделить вклады этих механизмов. Более точный анализ, учитывающий перечисленные выше факторы, а также эффекты электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействия в континууме и позволяющий рассчитать также импульсные распределения электронных пар, будет представлен в последующей более детальной работе.

Один из авторов (С.В. Попруженко) выражает признательность Р. Мосхаммеру (R. Moshhammer) за плодотворные обсуждения проблемы коллективного туннельного эффекта в атомах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект # FZGU-2020-0035).

1. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
2. F. Calegari, G. Sansone, S. Stagira, C. Vozzi, and M. Nisoli, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 062001 (2016).
3. A. Di Piazza, C. Müller, K. Z. Hatsagortsyan, and C. Keitel, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1177 (2012).
4. D. B. Milosevic, G. G. Paulus, D. Bauer, and W. Becker, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, R203 (2006).

5. Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, В. С. Попов, С. В. Попруженко, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 256 (2011).
6. S. V. Popruzhenko, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 204001 (2014).
7. Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, С. В. Попруженко, В. С. Попов, *УФН* **185**, 3 (2015).
8. W. Becker, S. P. Goreslavski, D. B. Milosevic, and G. G. Paulus, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51**, 162002 (2018).
9. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 9 (2019).
10. A. D. Koulouklidis, C. Gollner, V. Shumakova, V. Yu. Fedorov, A. Pugzlys, A. Baltuska, and S. Tzortzakis, *Nat. Commun.* **11**, 292 (2020).
11. В. А. Костин, И. Д. Ларюшин, Н. В. Введенский, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 81 (2020).
12. В. В. Суран, И. П. Запесочный, *Письма в ЖТФ* **1**, 973 (1975).
13. И. С. Алексахин, И. П. Запесочный, В. В. Суран, *Письма в ЖЭТФ* **26**, 14 (1977).
14. W. Becker, X. Liu, P. J. Ho, and J. H. Eberly, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1011 (2012).
15. C. A. Mancuso, K. M. Dorney, D. D. Hickstein, J. L. Chaloupka, J. L. Ellis, F. J. Dollar, R. Knut, P. Grychtol, D. Zusin, Ch. Gentry, M. Gopalakrishnan, H. C. Kapteyn, and M. M. Murnane, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 133201 (2016).
16. H. Kang, K. Henrichs, M. Kunitski, Y. Wang, X. Hao, K. Fehre, A. Czasch, S. Eckart, L. Ph. H. Schmidt, M. Schöffler, T. Jahnke, X. Liu, and R. Dörner, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 223204 (2018).
17. G. P. Katsoulis, A. Hadjipittas, B. Bergues, M. F. Kling, and A. Emmanouilidou, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 263203 (2018).
18. S. Li, D. Sierra-Costa, M. J. Michie, I. Ben-Itzhak, and M. Dantus, *Comm. Phys.* **3**, 35 (2020).
19. J. Ullrich, R. Moshhammer, R. Dörner, O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking, and L. Spielberger, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30**, 2917 (1997).
20. R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich, R. Moshhammer, and H. Schmidt-Böcking, *Phys. Rep.* **330**, 95 (2000).
21. М. Ю. Кучиев, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 319 (1987).
22. P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1994 (1993).
23. K. J. Schafer, B. Yang, L. F. DiMauro, and K. C. Kulander, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1599 (1993).
24. Th. Weber, M. Weckenbrock, A. Staudte, L. Spielberger, O. Jagutzki, V. Mergel, F. Afaneh, G. Urbasch, M. Vollmer, H. Giessen, and R. Dörner, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 443 (2000).
25. R. Moshhammer, B. Feuerstein, W. Schmitt, A. Dorn, C. D. Schröter, J. Ullrich, H. Rottke, C. Trump, M. Wittmann, G. Korn, K. Hoffmann, and W. Sandner, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 447 (2000).

26. A. Becker and F. H. M. Faisal, Phys. Rev. Lett. **84**, 3546 (2000).
27. R. Kopold, W. Becker, H. Rottke, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **85**, 3781 (2000).
28. M. Lein, E. K. U. Gross, and V. Engel, Phys. Rev. Lett. **85**, 4707 (2000).
29. Б. А. Зон, ЖЭТФ **116**, 410 (1999).
30. U. Eichmann, M. Dörr, H. Maeda, W. Becker, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **84**, 3550 (2000).
31. N. I. Shvetsov-Shilovski, S. P. Goreslavski, S. V. Popruzhenko, and W. Becker, Phys. Rev. A **77**, 063405 (2008).
32. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1945 (1964).
33. В. С. Попов, УФН **174**, 921 (2004).

Calculations of structural, elastic and magnetic properties of the novel full Heusler alloys Ru_2XY ($\text{X} = \text{Nb}, \text{Mn}$) and ($\text{Y} = \text{Te}, \text{Sb}$)

*R. M. Shabara^{+,*1)}, B. O. Alsobhi^{+ 1)}*

⁺*Physics Department, Faculty of Science, Taibah University, Al-Madinah al Munawarah, 41411 Saudi Arabia*

^{*}*Physics Department, Faculty of Science, Damietta University, 34511 New Damietta, Egypt*

Submitted 4 January 2021
Resubmitted 9 January 2021
Accepted 10 January 2021

DOI: 10.31857/S1234567821050062

Introduction. The interest in Heusler compounds family in the last years has a huge impact on the progress of their applications especially in shape memory effect, magneto-caloric effect, and giant magneto resistance [1–4]. Recently, the structural, electronic, elastic, thermal, and magnetic properties of a number of full Heusler alloys have been studied by many authors [5–9]. In this study we introduce a theoretical investigation on structural, electronic, elastic, and magnetic properties of new full Heusler Ru_2YZ alloys where $\text{Y} = \text{Mn}, \text{Nb}$ and $\text{Z} = \text{Sb}, \text{Te}$. The pressure effect on the total and partial magnetic moments is included in this study. Among other studies of Heusler alloys, it is worth mentioning [10] which considered the stability of intermetallic Heusler alloys containing transitions metals. Recently pressure effect on different properties of full Heusler alloys have been considered in [9]. The full Heusler X_2YZ compounds have two possible crystals structures. The first one is the Cu_2MnAl structure with the space group $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$: #216 and the other crystal structure is of the Hg_2CuTi -type with the space group $\text{F}\bar{4}3\text{m}$: #255. The theoretical values of the equilibrium lattice constant, magnetic moment, bulk modulus, and its pressure derivative are calculated using the full-potential non-orthogonal local-orbital minimum-basis method (FPLO) using the GGA approximation. The modified Birch–Murnaghan equation of state was used in investigation of the bulk modulus and its pressure derivative. To investigate some elastic properties as shear modulus, Young modulus, and Poisson ratio we have used WIEN2k electronic code.

Result and discussions. We have performed our calculations for both Cu_2MnAl and Hg_2CuTi structures and found that the Cu_2MnAl structure is the most sta-

ble structure for these compounds. Our data shows a good agreement with a theoretical study by I. Asfour [8], who has predicted that Cu_2MnAl structure is the stable for these alloys. The magnetic state is the preferred one in these compounds. We have calculated the lattice constant of Ru_2MnSb 6.25 Å, which shows a good agreement with theoretical and experimental data. The total magnetic moment of Ru_2MnSb is 4.017 μ_B . The calculated spin magnetic moment for Ru_2MnTe compound is high 4.835 μ_B . The magnetic moments of Ru_2NbSb and Ru_2NbTe alloys are 1.745 and 1.147 μ_B respectively. The high magnetic moment of these alloys makes them promising materials for different spintronics applications. We investigated the variation of the normalized unit cell volume (V/V_0) under different hydrostatic pressures. We also calculated the pressure effect on the total and partial moments of Ru_2MnSb compound. In Ru_2MnSb and Ru_2MnTe compounds, the main contribution to the total magnetic moment comes from the Mn-atom. The total magnetic moment of Ru_2NbSb shows strong dependence on pressure. We have calculated the bulk modulus B , shear modulus G , Young modulus Y , anisotropic factor A , shear constant (C^1), Cauchy pressure (C_{11}), Poisson ratio ν , and Pugh's ratio B/G for Ru_2MnZ and Ru_2NbZ ($\text{Z} = \text{Sb}, \text{Te}$).

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021050015

1. C. Salazar Meja, R. Küchler, A. K. Nayak, C. Felser, and M. Nicklas, Appl. Phys. Lett. **110**, 071901 (2017).
2. T. Gottschall, E. Stern-Taulats, L. Mañosa, A. Planes, K. P. Skokov, and O. Gutfleisch, Appl. Phys. Lett. **110**, 223904 (2017).
3. I. D. Rodionov, Yu. S. Koshkid'ko, J. Cwik, A. Quetz, S. Pandey, A. Aryal, I. S. Dubenko, S. Stadler, N. Ali,

¹⁾e-mail: rehamph@hotmail.com; sobhibo@yahoo.com

- I.S. Titov, M. Blinov, M.V. Prudnikova, V.N. Prudnikov, E. Lähderanta, and A.B. Granovskii, JETP Lett. **101**, 385 (2015).
4. S.Y. Yu, Z.H. Liu, G.D. Liu, J.L. Chen, Z.X. Cao, G.H. Wu, B. Zhang, and X.X. Zhang, Appl. Phys. Lett. **89**, 162503 (2006).
5. A. Zitouni, G. Remil, B. Bouadjemi, W. Benstaali, T. Lantri, M. Matougui, M. Houari, Z. Aziz, and S. Ben-tata, JETP Lett. **112**, 290 (2020).
6. M.G. Kostenko, A.V. Lukoyanov, and E.I. Shreder, JETP Lett. **107**, 126 (2018).
7. S. Benatmane and S. Cherid, JETP Lett. **111**, 694 (2020).
8. I. Asfour and J.J. Supercond, Nov. Magn. **33**, 2837 (2020).
9. S.H. Aly and R.M. Shabara, J. Magn. Magn. Mater **360**, 143 (2014).
10. S. Sanvito, C. Oses, J. Xue, A. Tiwari, M. Zic, T. Archer, P. Tozman, M. Venkatesan, M. Coey, and S. Curtarolo, Sci. Adv. **3**(4), e160224114 (2017).

Фотонно-стимулированный транспорт в квантовом точечном контакте (Миниобзор)

В. А. Ткаченко^{+,*}, З. Д. Квон^{+,*}, О. А. Ткаченко⁺, А. С. Ярошевич^{+,1)}, Е. Е. Родякина^{+,*},
Д. Г. Бакшеев^{*,}, А. В. Латышев^{+,*}

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

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

Поступила в редакцию 14 января 2021 г.

После переработки 18 января 2021 г.

Принята к публикации 18 января 2021 г.

Дан обзор работ по фотонно-стимулированному транспорту через квантовый точечный контакт, созданный на основе высокоподвижного двумерного электронного газа в GaAs квантовой яме. Он содержит краткое историческое введение, затем изложение результатов экспериментального исследования гигантского терагерцового и микроволнового фотоконтактанса квантового точечного контакта в туннельном режиме и анализ его поведения на основе разработанной теоретической модели фотонно-стимулированного туннелирования. В заключении обсуждаются перспективы дальнейших исследований и создания нового класса приемников терагерцового и микроволнового излучения.

DOI: 10.31857/S1234567821050074

Введение. Фотонно-стимулированный транспорт (ФСТ), через туннельные барьеры стал предметом исследования почти 60 лет назад в экспериментах по изучению влияния микроволнового излучения на туннелирование электрона через изолятор между сверхпроводниками [1]. Облучение структуры на частоте ω привело к появлению на нелинейной вольтамперной характеристике $V(I)$ фотонных ступеней при $V = V_0 \pm n\hbar\omega/e$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) дополнительно к основной ступени, наблюдаемой при V_0 . Без облучения она определяется резонансным туннелированием электрона при совпадении заполненного и пустого краев энергетических щелей в сверхпроводниках, разделенных изолятором. Обнаруженный эффект был объяснен в [1, 2] неупругим когерентным резонансным туннелированием в ситуации, когда края сверхпроводящих щелей разделены по энергии одним или несколькими квантами микроволнового поля. В 1990-х годах подобные резонансные эффекты на нелинейных вольтамперных характеристиках были найдены при последовательном туннелировании электронов через систему GaAs квантовых ям под действием терагерцового облучения [3–5]. Туннелирование через барьер в каждой элементарной ячейке системы рассматривалось в рамках подхода, развитого в [2].

Важной для построения теории ФСТ стала работа [6]. В ней было рассмотрено туннелирование частицы через высокий прямоугольный барьер слегка колеблющейся высоты и получено аналитическое решение нестационарного уравнения Шредингера в трехканальном приближении. По найденным парциальным коэффициентам прохождения $D_0, D_{\pm 1}$ определено время туннелирования τ и приведено условие низкой частоты $\omega\tau \ll 1$, когда задачу можно решать при любом t как статическую. Спустя несколько лет в работе [7] был предложен универсальный алгоритм расчета когерентного прохождения частицы через конечную область одномерного комбинированного потенциала, имеющего вид $U(x) + V(x) \cos(\omega t)$, где $U(x)$ – исходный статический потенциал, а $V(x)$ – амплитуда переменного потенциала. Алгоритм основан на решении нестационарного уравнения Шредингера для частицы с начальной энергией E_0 и $U(x), V(x)$ в виде кусочно-постоянных функций внутри области неоднородности потенциала. Решение в этом случае является суперпозицией прошедших и отраженных волн в каналах с энергиями $E_n = E_0 \pm n\hbar\omega$, где $n \neq 0$ – номер канала неупругого прохождения. Используя процедуру сшивки аналитически известных волновых функций в точках разрыва $U(x), V(x)$ и увеличивая число учитываемых каналов, можно получить практически точный результат.

В рамках разработанной теории ФСТ были пред-

¹⁾e-mail: jarosh@isp.nsc.ru

сказаны многие резонансные эффекты на зависимостях от энергии коэффициентов прохождения электрона через различные наноструктуры в высокочастотных (ВЧ) полях светового, ИК, терагерцового и микроволнового диапазонов [8–19]. Во всех этих случаях, как и в экспериментах [1–5], существенным было присутствие в статическом одномерном потенциале $U(x)$ особенностей по энергии с бесконечной или очень большой плотностью состояний, а также их совмещение с энергиями каналов E_0 и/или $E_0 \pm \pm n\hbar\omega$. Этими особенностями в $U(x)$ могли быть края энергетической щели в сверхпроводниках [1, 2], квазиуровни [3–5, 8, 10, 12, 13, 15, 16], дискретные уровни [9, 14], надбарьерные резонансы [11, 13] или дно одномерного континуума [17–19]. Следует отметить, что наиболее физически простой случай одиночного плавного барьера в перечисленных работах не рассматривался. Речь идет о потенциале, который был предложен еще в годы рождения квантовой механики Эккартом [20] и имеющем простой аналитический вид $U_0/\text{ch}^2(x/W)$. Как хорошо известно [21], в таком потенциале нет квазиуровней, надбарьерных резонансов и резонансных пиков в коэффициенте прохождения $D(E_0)$. Первые численные расчеты [22, 23] показали, что фотонно-стимулированное туннелирование через барьер Эккарта в силу его плавной формы и конечной высоты происходит иначе, чем в случае высокого прямоугольного барьера [6]. Исследование ФСТ в таком простом потенциале стало особенно интересным после создания квантового точечного контакта (КТК) на основе двумерного электронного газа (ДЭГ) и открытия в нем квантования кондактанса [24, 25]. Результаты численного моделирования электростатики КТК показывают, что форма барьера, через который летят электроны, близка к потенциалу Эккарта [26–29].

Экспериментально фотоотклик КТК при облучении в диапазоне частот 0.1–2.5 ТГц ранее исследовался в [30–35], но измерения ограничивались главным образом открытым $G \geq e^2/h$ и субпороговым $G \leq e^2/h$ режимами прохождения и ориентацией терагерцового поля поперек тока, чтобы наблюдать эффекты межподзонного возбуждения. Было обнаружено небольшое влияние терагерцовых полей на квантование кондактанса КТК, которое объяснялось либо эффектами выпрямления, либо нагревом ДЭГ при поглощении излучения. Ситуация изменилась принципиальным образом, когда был обнаружен гигантский микроволновый [36] и терагерцовый [37] фотокондактанс КТК в туннельном режиме, и экспериментальное и теоретическое исследование отклика КТК на микроволновое и терагерцовое излучение по-

лучило новый импульс. Данный обзор посвящен изложению основных, полученных к настоящему времени результатов.

1. Квантовые точечные контакты с расщепленным и сплошным затвором. Ниже дается описание технологии изготовления, топологии и транспортных характеристик изученных образцов КТК. Они создавались на основе высокоподвижного ДЭГ либо в одиночном гетеропереходе AlGaAs/GaAs, либо в GaAs квантовой яме толщиной 13 или 16 нм на основе двойного гетероперехода. В обоих случаях ДЭГ располагался в 100–109 нм от поверхности, но структуры, в которых он содержался, выращивались по-разному: одиночный гетеропереход (N1202) – в рамках технологии обычного селективного легирования однородного слоя AlGaAs, а квантовая яма (N562) – в рамках технологии, которая была предложена в [38] и широко используется в настоящее время [39–41]. В этой технологии ДЭГ получается в результате δ -легирования тонкого (несколько нанометров) слоя GaAs в короткопериодной сверхрешетке (СР) GaAs/AlAs. Параметры высокоподвижного ДЭГ из-за этого различались. При 4.2 К концентрация и подвижность электронов двумерного газа для N562 были $n_s \approx 7.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $\mu \approx 1.5 \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{Вс}$, что соответствует длине свободного пробега $l \approx 30 \text{ мкм}$. В случае одиночного гетероперехода N1202 параметры ДЭГ были такими: $n_s = 5.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $\mu \approx 4 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{Вс}$, $l \approx 4 \text{ мкм}$. На основе описанных структур изготавливались холловские мостики, а затем с помощью электронной литографии на поверхности гетероструктур создавались сплошной и расщепленный затворы, как показано на рис. 1. Транспортные измерения проводились с использованием стандартной схемы фазочувствительного детектирования на частотах 2–12 Гц и при величинах измерительного тока 0.001–10 нА. Отметим, что в открытом режиме КТК с расщепленным затвором демонстрировал первые 3–4 ступени квантования кондактанса, тогда как в КТК со сплошным затвором они не наблюдались. Подобный факт связан с тем, что в КТК со сплошным затвором не выполняется условие для наблюдения квантования КТК [26]. На рисунке 2 показаны типичные затворные и температурные зависимости кондактанса исследованных КТК уже в туннельном режиме ($G \ll 2e^2/h$). При этом затворные характеристики представляют собой зависимости от эффективного затворного напряжения, которое определялось как $V_g^{\text{eff}} = V_g - V_g(0.1G_0)$ ($G_0 = 2e^2/h$), т.е. как разность между поданным затворным напряжением и затворным напряжением, соответствующим величине кондактанса, равной од-

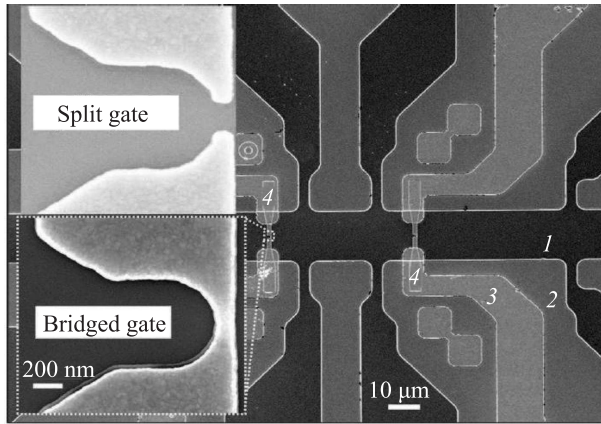


Рис. 1. Микрофотография холловского мостика и двух типов КТК: с расщепленным и со сплошным затвором. Цифрами отмечены: 1 – область, под которой находится ДЭГ; 2 – область травления; 3 – Au контакты к затвору; 4 – затворы, которые на вставке показаны в увеличенном масштабе

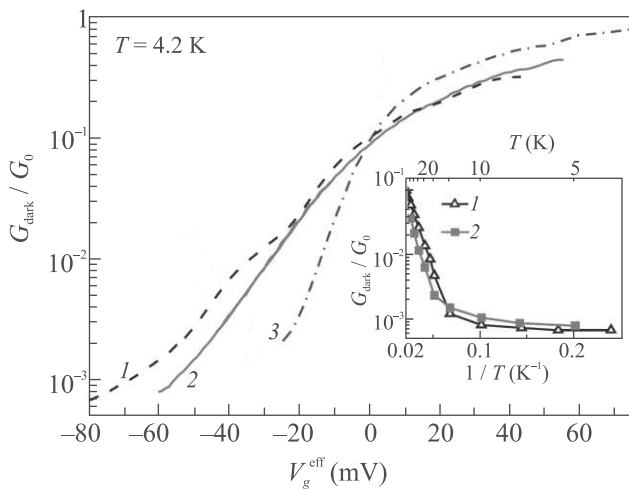


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости кондактанса КТК от эффективного затворного напряжения: номера 1, 2, 3 отвечают, соответственно, непрерывному затвору в структуре N562, расщепленному и непрерывному затворам в структуре N1202. Вставка – температурные зависимости темного кондактанса для случаев 1, 2

ной десятой кванта кондактанса. Как видно из рис. 2, в туннельном режиме для всех исследованных КТК наблюдается экспоненциально сильная зависимость кондактанса от затворного напряжения, наклон которой заметно уменьшается при $G = 0.1G_0$, т.е. по мере приближения к открытому режиму. Из рисунка 2 также видно, что для одной и той же разновидности затворов (точнее сплошной) КТК, изготовленных на основе по-разному выращенных гетеропереходов, зависимости $G(V_g^{\text{eff}})$ имеют разный наклон,

свидетельствующий об их различной электростатике. Как видно, температурные зависимости (вставка) КТК кондактансов имеют одинаковый характер: до $T = 20$ К наблюдается экспоненциальная зависимость с энергией активации около 5 мэВ, а при дальнейшем уменьшении температуры кондактанс не меняется, что говорит о переходе к туннельному режиму. Тогда при температуре измерений 4.2 К для кондактанса справедлива простая формула Ландауэра $G = G_0 \times D(E_F)$. Заметим, что коэффициенту прохождения электрона $D(E_F) = 0.002$ через плавный одномерный статический барьер обычного вида $U_0/ch^2(x/W)$ с $W = 100$ нм отвечает величина $U_0 - E_F \approx 3$ мэВ, которая соизмерима с энергией активации. Таким образом, кривые 1, 2 на вставке к рис. 2 позволяют дать оценку $U_0 - E_F$ при минимальной измеренной G_{dark} для обоих КТК и заключить, что форма барьера хорошо описывается выражением $U(x) = U_0/ch^2(x/W)$.

2. Эксперимент: гигантский терагерцовый и микроволновый фотокондактанс. В данном разделе излагаются основные экспериментальные результаты по исследованию терагерцового и микроволнового отклика КТК. Начнем с терагерцовых экспериментов. Их геометрия показана на рис. 3. На

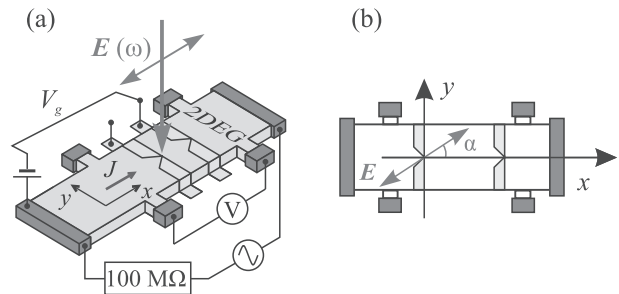


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а), (б) – Схема измерений фотокондактанса G_{ph}

структуру сверху по нормали к поверхности падало линейно поляризованное излучение терагерцового газового лазера с оптической накачкой CO_2 лазером [42–44] с частотой 0.69 и 1.63 ТГц. Для генерации излучения с частотой 0.69 ТГц (длина волны $\lambda = 432$ мкм) в качестве активной среды использовалась муравьиная кислота, а 1.63 ТГц ($\lambda = 184$ мкм) – диформетан. Мощность терагерцового излучения составляла порядка 200 мВт/см² при работе с линией 184 мкм и 50 мВт/см² – с линией 432 мкм. Полу-волновые пластинки, размещенные перед окном оптического криостата, позволяли управлять поляризацией падающего на образец излучения. Площадь лазерного пятна составляла около 10 мм², и, таким

образом, излучение падало на весь холловский мостик. Рисунок 4 представляет результаты измерения

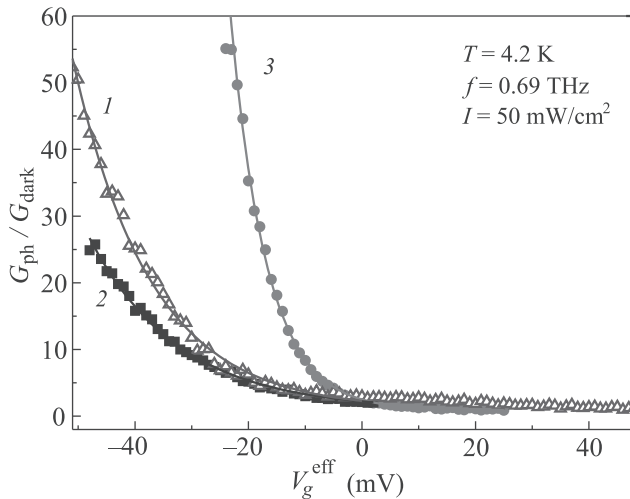


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости G_{ph}/G_{dark} от V_g^{eff} для трех КТК при облучении на длине волны 432 мкм. Номера 1, 2, 3 отвечают, соответственно, непрерывному затвору в структуре N562, расщепленному и непрерывному затворам в структуре N1202

при облучении на длине волны 432 мкм для трех различных КТК в виде зависимости отношения фотокондактанса к темновому кондактансу G_{ph}/G_{dark} от эффективного затворного напряжения при направлении вектора электрического поля $\mathbf{E}(\omega)$ излучения вдоль направления X , т.е. вдоль направления транспорта электронов через КТК. Видно, что G_{ph}/G_{dark} экспоненциально сильно нарастает по мере роста абсолютной величины V_g^{eff} , достигая значений порядка 10^2 . Также следует обратить внимание, что сравнение кривых для КТК с расщепленным и сплошным затвором демонстрирует заметно более сильный отклик для КТК со сплошным затвором. Результаты поляризационных экспериментов представляет рис. 5. Этот рисунок показывает зависимость величины G_{ph}/G_{dark} от угла направления $\mathbf{E}(\omega)$. Сплошной линией показана зависимость $(\cos \alpha)^2$. Видно, что угловая зависимость фотосигнала точно следует этой функции, прекрасно демонстрируя тот факт, что излучение влияет на КТК только, когда $\mathbf{E}(\omega)$ направлено вдоль направления туннелирования электронов, тем самым полностью исключая вклад, связанный с разогревом двумерных электронов. Заметим, что оценка степени разогрева ДЭГ средним по площади терагерцовым полем $|\mathbf{E}(\omega)| = 6 \text{ В/см}$, полученная из сравнения температурной зависимости сопротивления ДЭГ с его зависимостью от мощности излучения, подтверждают сделанный вывод, так

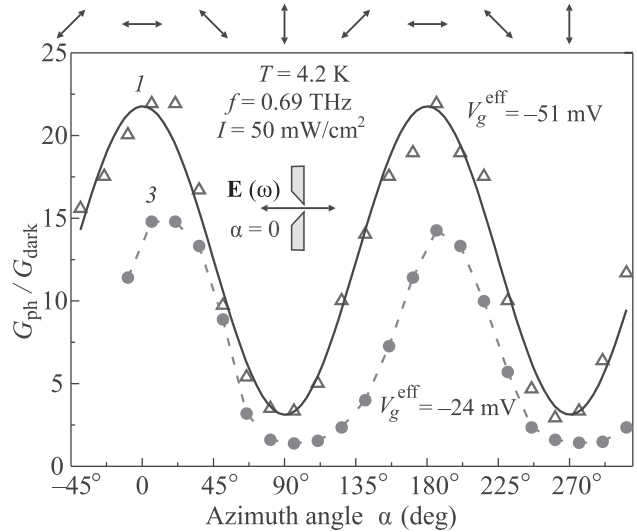


Рис. 5. (Цветной онлайн) Поляризационные измерения G_{ph} , номера кривых 1, 3 отвечают случаю $G_{dark} = 0.002G_0$ и тем же КТК со сплошным затвором для гетероструктур N562 и N1202

как она дает верхнюю оценку разогрева всего на величину порядка 1 К, что почти на два порядка ниже $U_0 - E_F$. Рисунок 6 представляет результаты эксперимента при изменении частоты излучения. На нем показаны зависимости $G_{ph}/G_{dark}(V_g)$ для частоты 0.69 и 1.63 ТГц. Видно, что увеличение частоты терагерцового излучения в 2.4 раза привело к полному отсутствию его влияния на кондактанс КТК.

Далее излагаются результаты микроволновых экспериментов. В этих экспериментах образец размещался на конце волновода, по которому от генератора подавалось излучение в диапазоне 110–170 ГГц. На рисунке 7 показаны результаты измерения затворных зависимостей кондактанса КТК $G(V_g)$ при различных значениях выходной мощности генератора. Хорошо видно, что когда величина темнового кондактанса равна $G < 0.02G_0$, то она под действием излучения растет на два порядка при максимальных в данном эксперименте мощностях, равных по порядку величины 10 мВт/см^2 . Сравнение поведения микроволнового отклика КТК с расщепленным и сплошным затвором представлено на рис. 8. Как и в терагерцовом диапазоне, видно, что отклик КТК со сплошным затвором на порядок выше. Данные на рис. 8 также демонстрируют, что сначала в зависимости фотокондактанса от мощности излучения наблюдается линейный участок, который затем переходит в степенной с показателем меньше единицы. Отметим, что в отличие от те-

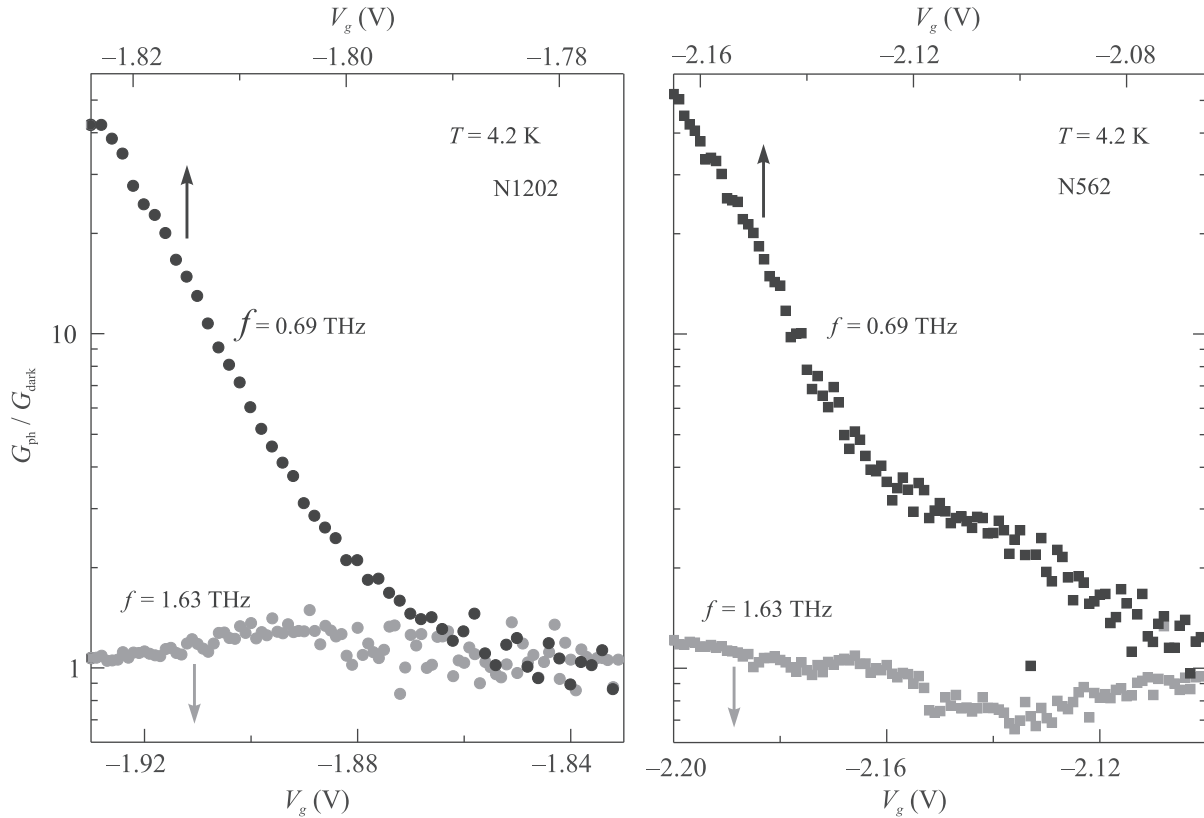


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимости $G_{\text{ph}}/G_{\text{dark}}(V_g)$ двух КТК (слева N1202, справа N562) для частот излучения 0.69 и 1.63 ТГц

рагерцовых частот в микроволновом диапазоне поляризацию падающего на образец излучения трудно контролировать, но основываясь на поляризационных экспериментах при терагерцовых частотах, а также на том факте, что мощности излучения, падающего на образец и в терагерцовом и в микроволновом экспериментах одинаковы по порядку величины, можно предположить, что наблюдаемый на рис. 7 и 8 гигантский микроволновый кондактанс также обусловлен воздействием проекции вектора электрического поля излучения, направленной вдоль направления туннелирования электронов.

Таким образом, приведенные экспериментальные данные показывают: 1) КТК в туннельном режиме ($G < 0.1G_0$) демонстрируют гигантские величины фотокондактанса, как при терагерцовых, так и при микроволновых частотах ($f = 0.1\text{--}1$ ТГц); 2) поляризационный эксперимент однозначно указывает, что эффект возникает, только если направление электрического поля излучения совпадает с направлением туннелирования электронов; 3) при повышении частоты излучения до 1.63 ТГц эффект исчезает.

3. Теоретическая модель: фотонно-сти-

мулированное туннелирование. Описанные в экспериментальном разделе результаты указывают, что наблюдаемые эффекты связаны с явлением фотонно-стимулированного транспорта, краткий обзор работ по которому был дан во введении. Было отмечено, что именно туннельный режим КТК, в котором барьер достаточно хорошо описывается потенциалом Эккарта, остался за пределами прошлых исследований. Поэтому данный раздел будет посвящен подробному изложению модели фотонно-стимулированного туннелирования именно через такой барьер. Напомним, что он дается простым выражением $U(x) = U_0/ch^2(x/W)$. Ранее его туннельная прозрачность изучалась в разных контекстах [22, 23, 26, 29]. В данной модели исходная полуширина барьера $W \approx 100$ нм соответствует геометрии металлического затвора в узком месте и глубине залегания ДЭГ в КТК структурах, описанных в разделе 1. Высота статического барьера U_0 в модели выбирается, как правило, равной 30 мэВ, отвечающей туннельному режиму $G_{\text{dark}} \approx 10^{-3}G_0$ при высокой плотности ДЭГ $7.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, как в одной из экспериментальных структур GaAs/AlGaAs [37]. Заметим, что при изменении затворного напряжения

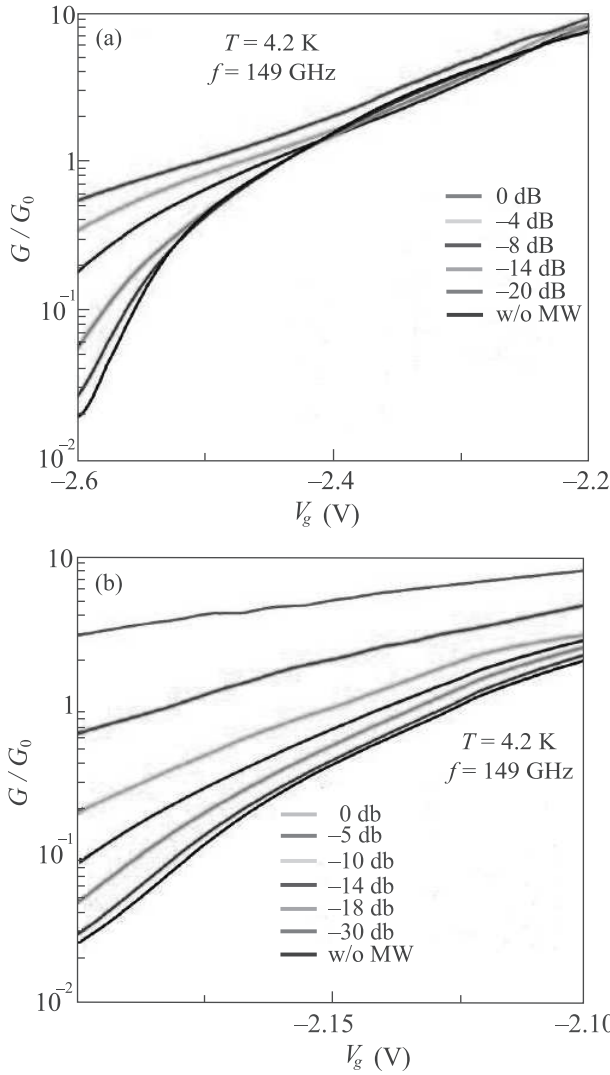


Рис. 7. (Цветной онлайн) Зависимости $G(V_g)/G_0$ при различных значениях мощности микроволнового излучения: (а) – КТК с расщепленным затвором; (б) – КТК со сплошным затвором

меняется высота барьера U_0 , а уровень Ферми в ДЭГ остается постоянным. Очевидно, что коэффициент прохождения определяется разностью $U_0 - E_F$. Предполагается, что $E_0 = E_F$ изменяется, а U_0 фиксируется (30 мэВ [37], 27 мэВ [45, 46]). Начальная энергия электрона E_0 менялась, как правило, в интервале $(U_0 - \Delta, U_0 + \Delta)$, в котором $\Delta = 3$ мэВ, что при $E_0 = U_0 - \Delta$ соответствует минимальному измеренному значению $G_{\text{dark}} \approx 10^{-3}G_0$.

ВЧ поле учитывалось в виде гармонической по t добавки к статическому потенциалу: $U(x, t) = U_0/ch^2(x/W) + V(x) \cos(\omega t)$. Для $V(x)$ рассмотрены два случая, поскольку ВЧ поле может возникать между морями ДЭГ [32] (рис. 9а, с, антисимметрич-

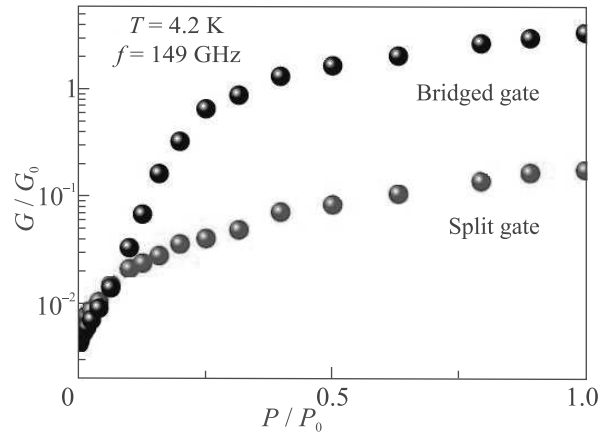


Рис. 8. (Цветной онлайн) Зависимости $G(V_g)/G_0$ от мощности для КТК с расщепленным затвором и значением темнового кондактанса $G = 0.005G_0$ ($V_g = -2.65$ В) и КТК со сплошным затвором с таким же значением G ($V_g = -2.2$ В)

ное ВЧ поле $dV(x)/dx$), а также между ДЭГ и затвором, создающим сужение [35] (рис. 9б, d, симметричная функция $V(x) \propto U(x)$). В антисимметричном случае $V(x)$ считается линейной функцией на интервале $|x| \leq 3W$, а вне этого интервала – постоянной (рис. 9а, с). Основное внимание при моделировании уделялось симметричному случаю, в котором $V(x) \propto U(x)$ (рис. 9б, d). Максимальная амплитуда колебаний высоты барьера $V_0 = 6$ мэВ бралась близкой к характерной активационной энергии 5 мэВ, которая была измерена в туннельном режиме по температурной зависимости темнового кондактанса при $T = 10\text{--}60$ К [37].

Согласно [6, 7] эффекты ФСТ получаются решением задачи одномерного рассеяния электрона в рамках нестационарного уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + [U(x) + V(x) \cos(\omega t)]\Psi. \quad (1)$$

Заметим, что для некоторых потенциалов вида $(U_0 + V_0 \cos(\omega t))/ch^2(x/W)$ эта задача уже решалась раньше [22, 23], но не в связи с КТК. В тех работах использовалось обычное численное интегрирование уравнения в частных производных (расчет движения волновых пакетов). Напротив, мы строим количественную модель экспериментально изученных в [36, 37] КТК. Барьер вида $U_0/ch^2(x/W)$ имеет параболическую вершину, поэтому для близких к ней $E_0 < U_0$ оценка в квазиклассическом приближении [6] дает время туннелирования через КТК $\tau = \pi W(m^*/2U_0)^{1/2} = 0.8 \cdot 10^{-12}$ с, где $m^* = 0.07m_e$ – эффективная масса электрона в GaAs, $U_0 = 30$ мэВ, $W = 100$ нм. Таким образом, условию $\omega\tau = 1$ отве-

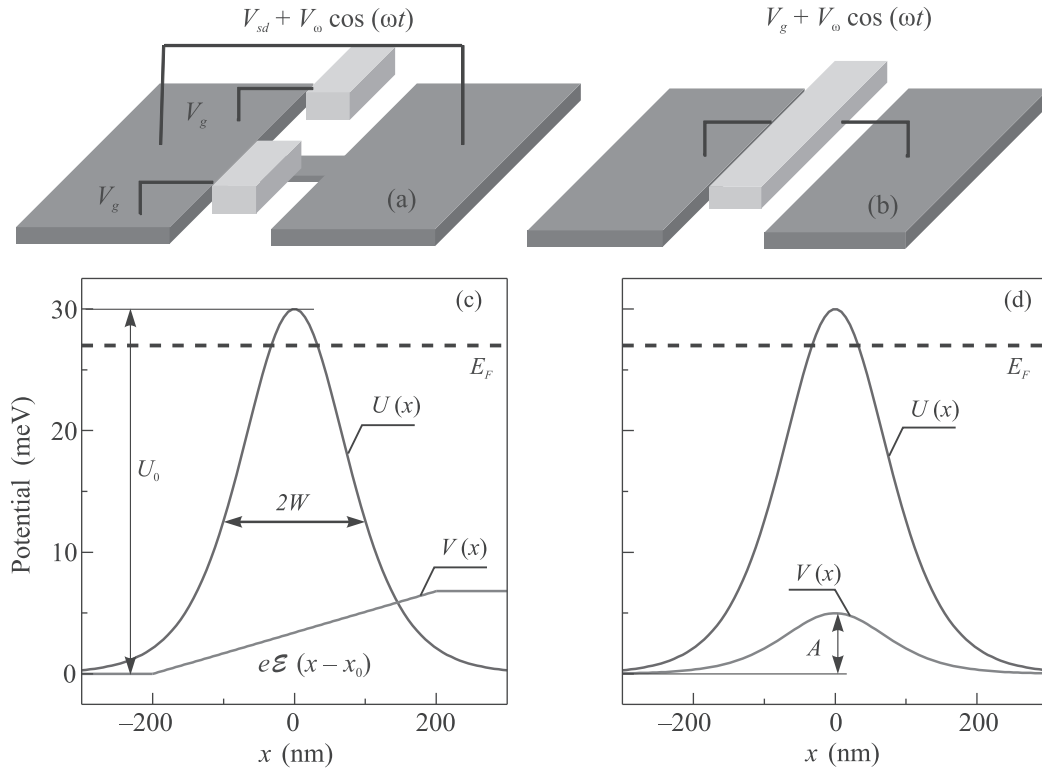


Рис. 9. (Цветной онлайн) (а), (б) – Схематическое изображение затворов над ДЭГ и вариантов приложенных напряжений с добавками от внешнего ВЧ поля. Тип затвора (расщепленный или сплошной) может быть связан с любым вариантом ВЧ добавки (к V_{sd} или к V_g). (с), (д) – Варианты потенциалов в КТК: антисимметричный $V(x)$ отвечает сумме статического и ВЧ тянущих напряжений (а); симметричный $V(x)$ отвечает сумме статического и ВЧ затворных напряжений (б)

чае $\hbar\omega = hf = 0.82$ мэВ, и, следовательно [6], весь экспериментально изученный диапазон $\hbar\omega$ от 0.6 до 7 мэВ в КТК далек от условия $\omega\tau \ll 1$, когда можно не решать (1).

Алгоритм решения нестационарного уравнения Шредингера [7], использованный в рассматриваемой нами модели, основан на аппроксимации потенциалов $U(x)$, $V(x)$ кусочно-постоянными функциями. Предполагается, что электрон с начальной энергией E_0 рассеивается на области неоднородности потенциала с поглощением и испусканием n фотонов. Вне этой области статический и динамический потенциалы не зависят от x . Мультиканальная волновая функция $\Psi(x, t)$ является суперпозицией плоских волн на интервалах постоянства потенциала, и амплитуды этих волн определяются из условий сшивки Ψ -функции и ее производной по x на границах соседних интервалов. В результате учитываются все распределенные по x когерентные переходы электрона из канала с E_0 в каналы с $E_n = E_0 + n\hbar\omega$ ($n = -n_{\min}, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, n_{\max}$). В итоге находятся парциальные коэффициенты прохождения $D_n(E_0)$ через область неоднородности $U(x)$, $V(x)$ и

коэффициенты отражения $R_n(E_0)$ от этой области. Они являются средними по времени, и по ним вычисляются полные коэффициенты прохождения D и отражения R . Число каналов, т.е. границы $-n_{\min}$, $n_{\max}$ определяются достижением требуемой точности равенства $D + R = 1$. Отметим, что данный метод решения уравнения (1) имеет формальное сходство с решением задачи двумерного квантового рассеяния частицы на области неоднородного статического потенциала $U(x, y)$ во многомодовом электронном волноводе [27–29, 47]. Смешивание мод этого волновода аналогично переходам с участием квантов $\hbar\omega$ между каналами одномерной волновой функции в теории ФСТ.

Алгоритм из работы [7] и созданная на его основе компьютерная программа [12] позволяют выполнять расчеты по теории ФСТ для разных профилей потенциалов $U(x)$, $V(x)$ [13–19, 37, 45, 46]. По точности и универсальности этот способ аналогичен простому методу решения стационарного уравнения Шредингера с кусочно-постоянными $U(x)$ [48–50]. В представленных расчетах $U(x)$, $V(x)$ задавались на отрезке $|x| \leq 3W$ с шагом 1 нм, а вне интервала за-

менялись нулем (или константой в случае антисимметричной функции $V(x)$).

Расчеты относятся к эксперименту, в котором измеренный кондактанс КТК был обычно меньше G_0 независимо от наличия или отсутствия облучения, и не было обнаружено температурной зависимости темнового кондактанса при $T < 10$ К. Квант поперечного финитного движения, определяющий расстояние между одномерными подзонами, в туннельном режиме узкого КТК обычно больше нескольких мэВ, так что прохождением по более высоким одномерным подзонам в туннельном режиме можно пренебречь. В таком случае можно считать справедливой простую формулу Ландауэра: $G = D(E_0)G_0$, где $E_0 = E_F$ и $D(E_0)$ относится к прохождению в нижней одномерной подзоне. Применение формулы Ландауэра при ФСТ с суммированием по нескольким 1D-подзонам коэффициентом прохождения обосновывалось и в общем случае двумерного транспорта в КТК в [51].

На рисунке 10 показан результат расчета в соответствии с описанной моделью зависимости кондак-

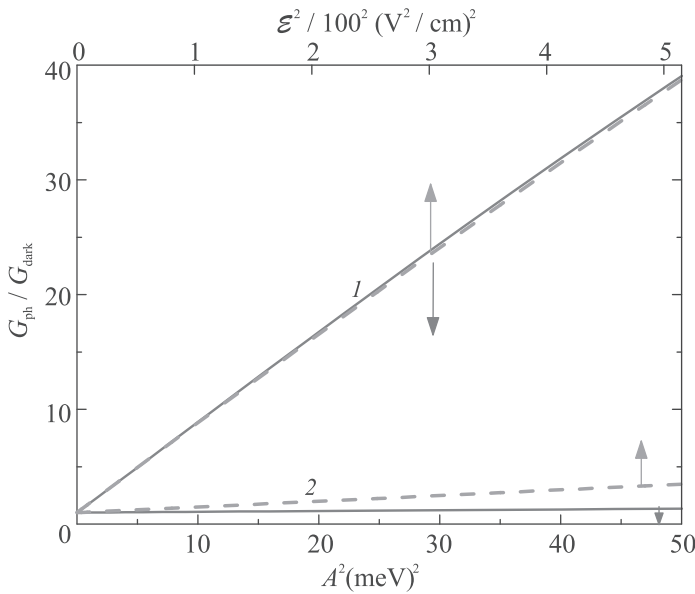


Рис. 10. (Цветной онлайн) Расчетная зависимость кондактанса от $\mathcal{E}^2$ и A^2 для антисимметричного $V(x)$ (зеленый пунктир) и симметричного $V(x)$ (красные линии) в случае $W = 100$ нм, $U_0 - E_F = 3$ мэВ. При $hf = 2.85$ мэВ ($f = 0.69$ ТГц) линии 1 совмещены подбором коэффициента пропорциональности между $\mathcal{E}^2$ и A^2 . Линии 2 отвечают случаю $hf = 6.74$ мэВ ($f = 1.63$ ТГц)

танса от параметров $\mathcal{E}^2$ и A^2 в случае действия ВЧ полей терагерцовых частот $f = 0.69$ и 1.63 ТГц, когда $U_0 - E_F = 3$ мэВ ($G_{\text{dark}} = 10^{-3}G_0$). Здесь также

был введен коэффициент пропорциональности между $\mathcal{E}^2$ и A^2 , который обеспечивает совпадение почти прямых линий для $f = 0.69$ ТГц. При этом вычисленная чувствительность кондактанса к $\mathcal{E}^2$ и A^2 при $f = 1.63$ ТГц оказалась слегка разной, но очень слабой. Таким образом, расчет, результаты которого приведены на рис. 10, дает радикальное различие отклика КТК в туннельном режиме на облучение с $f = 0.69$ и $f = 1.63$ ТГц (рис. 6).

Это различие можно понять из рассмотрения поведения плотности вероятности (см. рис. 11). На нем

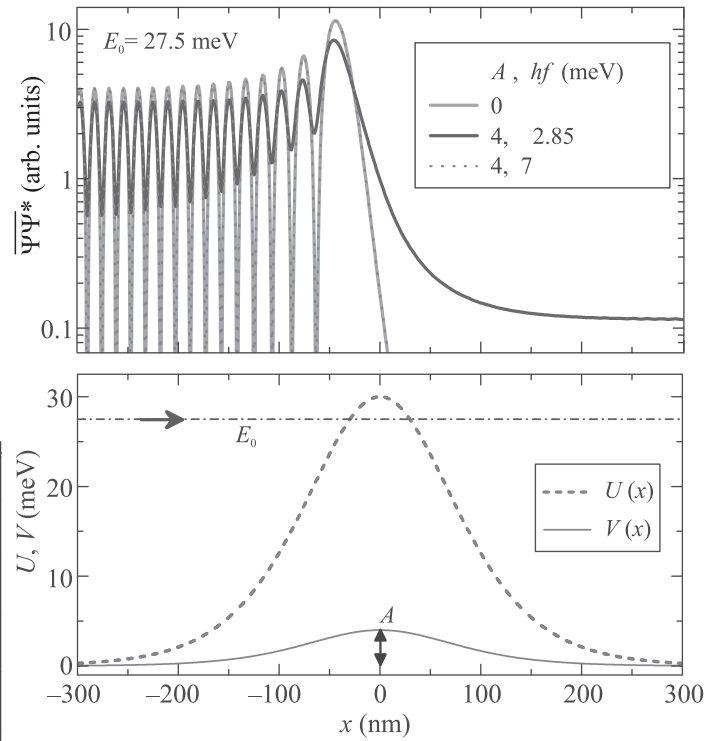


Рис. 11. (Цветной онлайн) Графики плотности вероятности (верхняя панель), для показанных $U(x)$, $V(x)$, $W = 100$ нм, $U_0 = 30$ мэВ, $E_0 = 27.5$ мэВ (нижняя панель); $|\Psi|^2$ означает усреднение по t при $A \neq 0$

показаны графики плотности вероятности, которые вычислены в статическом случае универсальной программой моделирования квантовых явлений в одномерных $U(x)$ [50], а в случае добавки $V(x) \cos(\omega t)$ универсальной программой моделирования ФСТ [12]. Отметим, что при $A \neq 0$ показаны усредненные по t плотности вероятности. Пусть начальная энергия электрона $E_0 = 27.5$ мэВ отвечает слабому прохождению через барьер ($D = 0.0022$) при $A = 0$. Из рисунка 11 видно, что электрон тормозится возле точки поворота и $|\Psi|^2$ здесь увеличивается в 3 раз по сравнению с локальными максимумами $|\Psi|^2 = 4$ в области отражения, где вол-

на является почти стоячей (в локальных минимумах $|\Psi|^2 \rightarrow 0$). Пусть $hf = 2.85$ мэВ ($f = 0.69$ ТГц), что отвечает возможному переходу электрона в канал $E_1 = E_0 + hf = 30.35$ мэВ, в котором достигается максимальная плотность состояний при прохождении через статический барьер $U(x)$ при $A = 0$. При $W = 100$ нм, $U_0 = 30$ мэВ максимальная плотность состояний в точке $x = 0$ (сумма плотностей вероятности при падении частиц на барьер с двух сторон [29]) достигается при $E_0 - U_0 = 0.35$ мэВ, когда $D(E_0) = 0.7$. Теория ФСТ при $A \sim e\mathcal{E} \cdot 2W \sim \hbar\omega$ дает в этом случае существенный рост $D(E_0)$ по сравнению с прохождением через статический барьер ($D = 0.0022$). Так, при $A = 4$ мэВ коэффициенты прохождения и отражения являются следующими: $R_{-1} = 0.32$, $R_0 = 0.45$, $R_1 = 0.06$, $D_1 = 0.07$, и полное D увеличивается почти в 55 раз ($D = 0.12$) по сравнению со случаем без ВЧ поля. Соответственно, на рис. 11 видны радикальные изменения в области отражения и прохождения при сравнении графиков плотности вероятности, отвечающих $A = 0$ и $A = 4$ мэВ при $hf = 2.85$ мэВ. Напротив, при $A = 4$ мэВ и $\hbar\omega = 7$ мэВ плотность вероятности и $D(E_0)$ не меняются по сравнению со случаем $A = 0$, т.е. переходы электрона из $E_0 = 27.5$ мэВ в дополнительные каналы почти полностью подавлены. Это подавление можно понять, исходя из принципа детального равновесия, по которому прямой и обратный переходы с участием фотона равновероятны. Так электрон, летящий навстречу фотовозбужденному и имеющий начальную энергию $E_0 = 35.5$ мэВ, т.е. выше вершины барьера, практически не чувствует неоднородного статического потенциала $U(x)$, поскольку с огромной точностью $D(E_0) = 1$. Поэтому нет необходимости такому электрону вместо почти свободного движения переходить в состояние ниже вершины барьера с испусканием фотона с $\hbar\omega = 7$ мэВ и существенным отражением от барьера. Следовательно, в теории ФСТ сильный рост кондактанса КТК при действии ВЧ поля с $f = 0.69$ ТГц объясняется эффективным однофотонным переходом к вершине барьера, а отсутствие отклика в случае $E_0 = 27.5$ мэВ и $f = 1.63$ ТГц – подавлением перехода в канал с более высоким $E_1 = E_0 + \hbar\omega = 35.5$ мэВ, где уже нет повышенной плотности состояний. Интересны результаты моделирования для такого же барьера с $W \approx 100$ нм в более глубоком туннельном режиме $U_0 - E_0 > 3$ мэВ. Они предсказывают появление фотонных ступеней на зависимостях $D(E_0)$, т.е. пики в dD/dE_0 [52, 53] (см. рис. 12). Из рисунка 12 видно, что при $hf \geq 2$ мэВ на зависимостях $D'(E_0)$ присутствуют пики, ширина которых совпадает с шири-

ной основного пика $\hbar/\tau$ при $U_0 - E_0 = 0$, остающегося в случае статического барьера (линия, обозначенная “ D_{st} ”). Положение этих фотонных реплик основного пика отвечает условию $U_0 - E_0 = n\hbar\omega$ независимо от формы и амплитуды $V(x)$, а также от небольших изменений W [52, 54]. При $hf = 1$ мэВ виден лишь дополнительный широкий максимум на графиках $D'(E)$, для которого не выполнено $U_0 - E_0 = n\hbar\omega$. Фотонные пики в этом максимуме не разделяются, поскольку должны следовать чаще, чем ширина основного пика $\hbar/\tau$. Отметим, что такой же результат получается для на порядок меньших энергий фотонов $hf = 0.6, 0.7$ мэВ.

4. Теория и эксперимент: сравнительный анализ. Анализ того, насколько предложенная и описанная в предыдущем разделе теоретическая модель ФСТ адекватно описывает экспериментальное поведение гигантского терагерцового и микроволнового кондактанса КТК в туннельном режиме дается в данном разделе. На рисунке 13а представлены экспериментальные и расчетные зависимости фотокондактанса G_{ph}/G_0 от величины темнового кондактанса $G_{dark}(V_g)/G_0$ для двух КТК со сплошным затвором и одного с расщепленным, изготовленных на основе двух различных гетероструктур (562 и 1202), параметры которых описаны в первом разделе. В расчетах подгоночными параметрами были величина W , характеризующая потенциал Экарта, и A , пропорциональная напряженности электрического поля падающей волны. Хорошо видно, что и экспериментальная и расчетная зависимости согласуются между собой не только качественно, но и количественно. Следует отметить, что на обеих зависимостях ясно видны области перегиба при $G_{dark} < 0.1G_0$, что, возможно, свидетельствует о появлении первой фотонной ступеньки. Также обратим внимание, характерная ширина W барьера близка к литографической, и, как следовало ожидать, она меньше для КТК с расщепленным затвором, чем со сплошным. Из полученных из подгонки данных о параметре A было найдено, что величина напряженности электрического поля терагерцового излучения в области КТК должна в несколько десятков раз превышать величину электрического поля падающего излучения. Подобное усиление в окрестности КТК можно объяснить эффектами ближнего поля, возникающими при дифракции излучения на металлических затворах, формирующих КТК. Экспериментальные и расчетные данные для двух частот 0.69 и 1.63 ТГц показаны на рис. 13б. Он также демонстрирует хорошее согласие теоретических расчетов и экспериментальных данных, причем эффект подавления влияния излуче-

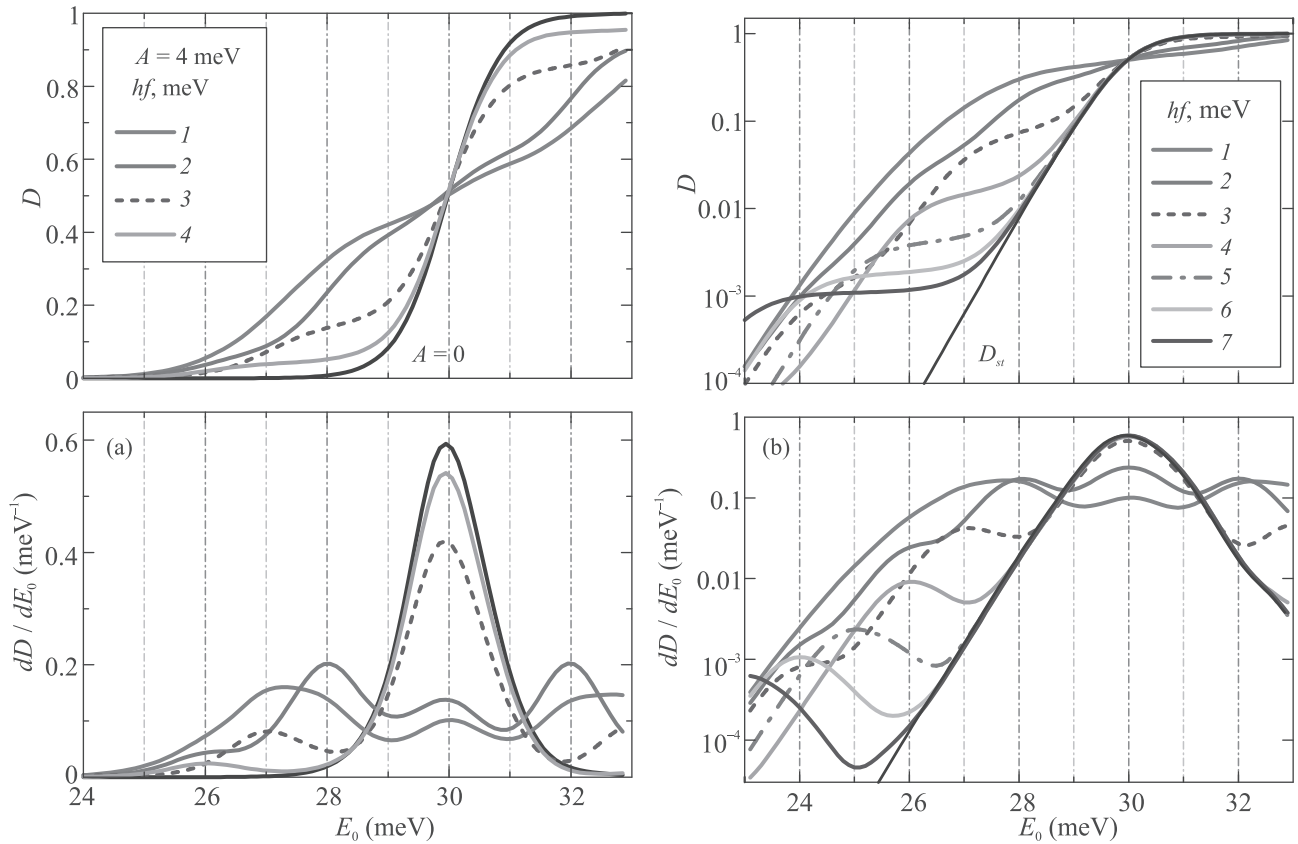


Рис. 12. (Цветной онлайн) Зависимость $D(E_0)$ и dD/dE_0 от энергии для симметричного (а) и антисимметричного (б) $V(x)$ при $W = 100$ нм, $U_0 = 30$ мэВ, $A = e\mathcal{E} \cdot 2W = 4$ мэВ и указанных $hf \geq 1$ мэВ в глубоком туннельном режиме

ния на кондактанс при повышении частоты в 2.4 раза прекрасно виден и в расчете, и в эксперименте. Полученное согласие эксперимента и теории позволяет построить следующую качественную картину. При облучении КТК в туннельном режиме излучением 0.69 ТГц возникает резкое фотонно-стимулированное увеличение туннельной прозрачности барьера, когда электрон на уровне Ферми, поглощая фотон, приобретает энергию, фактически соответствующую вершине барьера ($hf = U_0 - E_F$), и тем самым экспоненциально сильно увеличивает коэффициент прохождения через него. Но как только энергия фотона превышает величину расстояния между вершиной барьера и энергией Ферми ($hf > U_0 - E_F$), то есть когда его энергия соответствует надбарьерному прохождению, он отражается от него, что приводит к парадоксальному с точки зрения классического фотоэффекта результату – фотоэффект отсутствует.

Сравнение эксперимента и теории в микроволновой области частот представлено на рис. 14. На рисунке 14а показаны результаты для частоты 145 ГГц в виде экспериментальных (точки) и расчетных (линии) зависимостей G_{ph}/G_0 от мощности излучения

при различных значениях затворного напряжения (т.е. значениях G_{dark}), а на рис. 14б показана зависимость G_{ph}/G_0 от квадрата амплитуды электрического поля излучения. Из рисунка 14а видно, что G_{ph} пропорционально P^β , а с ростом G_{dark} показатель степени понижается. На вставке к рис. 14б показана зависимость туннельной прозрачности от числа поглощаемых фотонов, из которой можно сделать вывод, что при частоте 170 ГГц основной вклад в эффект дают трехфотонные процессы. Следует отметить, что, чтобы согласовать величины фотосигнала и при подгонке кривых, на рис. 14 необходимо было предположить, что в области КТК, также как и при терагерцах, возникает многократное, в десятки раз, усиление микроволнового излучения. Таким образом, сравнительный анализ развитой в работах [37, 45, 53] теоретической модели фотонно-стимулированного туннелирования электронов через одномерный потенциальный барьер КТК, описываемый простым выражением Экарта, и экспериментально измеренного гигантского терагерцового и микроволнового фотокондактанса КТК в туннельном режиме позволяет сделать вывод, что фотонно-

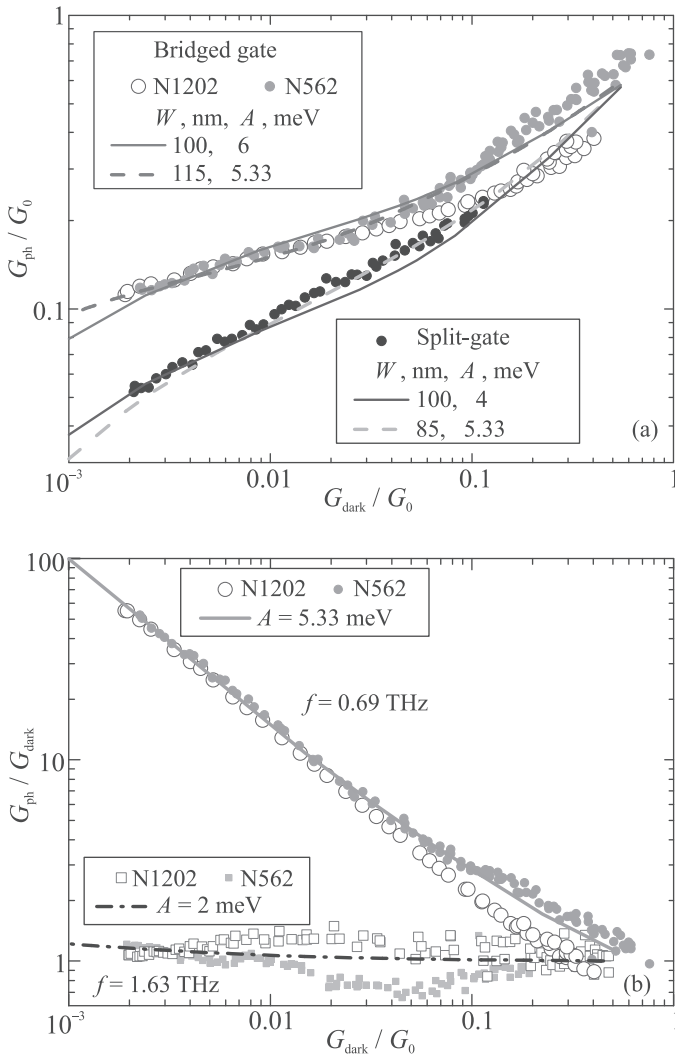


Рис. 13. (Цветной онлайн) (а) — Вычисленная зависимость кондактанса КТК $G_{ph}(G_{dark})$ (линии) на фоне экспериментальных точек при действии ВЧ поля с частотой $f = 0.69$ ТГц и симметричным $V(x)$ для указанных типов структур и пар параметров W, A . (б) — Экспериментальные в случае сплошного затвора и расчетные в случае $W = 115$ нм данные для двух частот 0.69 и 1.63 ТГц

стимулированное туннелирование является фундаментальным свойством КТК на основе высокоподвижного ДЭГ в гетероструктурах и квантовых ямах на основе системы AlGaAs/GaAs.

Заключение. В данном обзоре дано краткое изложение экспериментальных и теоретических работ по фотонно-стимулированному когерентному электронному транспорту в различных микро- и наноструктурах. Основное внимание уделено недавним исследованиям влияния терагерцового и микроволнового полей на квантовый точечный контакт в туннельном режиме. Показано, что его поведение под действием терагерцового и микроволнового излуче-

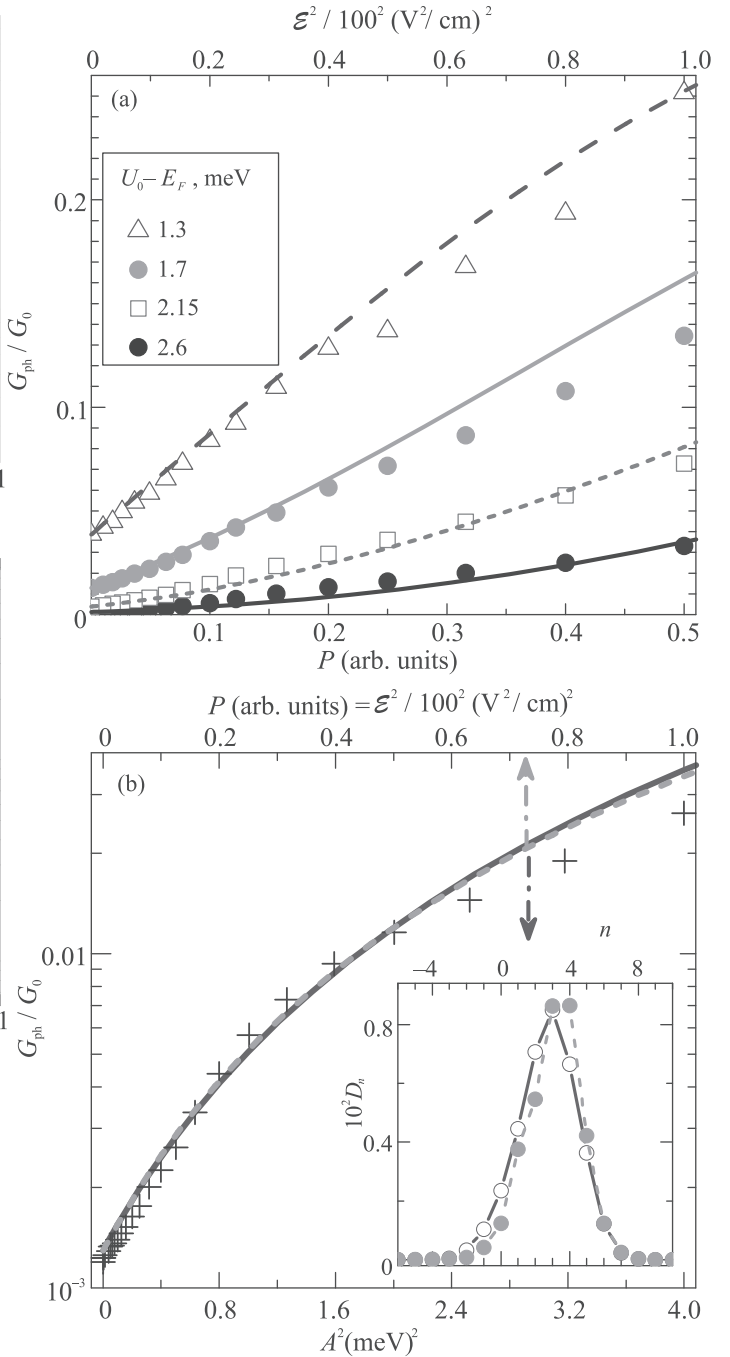


Рис. 14. (Цветной онлайн) Измеренные зависимости микроволнового фотокондактанса $G_{ph}(P)$ (точки) для некоторых G_{dark} и вычисленные зависимости $G_{ph}(P)$ (линии) для соответствующих им значений $U_0 - E_F$. (а) — Эксперимент при $f = 0.145$ ТГц и расчет для антисимметричного $V(x) \cos(\omega t)$ при $hf = 0.6$ мэВ. (б) — Эксперимент при $f = 0.17$ ТГц и расчет для случаев симметричного (сплошная линия) и антисимметричного (пунктир) $V(x) \cos(\omega t)$ при $hf = 0.7$ мэВ, $U_0 - E_F = 2.6$ мэВ. На вставке тем же цветом показан вклад каналов $E_n = E_F + nhf$ ($-6 \leq n \leq 10$) в полный коэффициент прохождения $D \approx 0.02$

ния демонстрирует новые, не исследованные ранее эффекты туннелирования электрона через одномерный потенциальный барьер в поле высокочастотной волны. Результаты расчетов в рамках теории фотонно-стимулированного транспорта через плавный одномерный барьер находятся в количественном согласии с результатами измерений кондактанса квантового точечного контакта в туннельном режиме и хорошо описывают экспериментальное поведение гигантского терагерцового и микроволнового фотокондактанса квантовых точечных контактов в туннельном режиме, изготовленных на основе высокоподвижного ДЭГ в GaAs гетероструктурах и квантовых ямах. Проведенные исследования показывают, что задача об одномерном плавном барьере, имеющая важное значение при изучении основ квантовой механики [21], имеет ряд интересных, новых и неожиданных обобщений при рассмотрении туннелирования в поле высокочастотной волны. Поэтому дальнейшее и экспериментальное и теоретическое развитие физики фотонно-стимулированного туннелирования через КТК является интересным и многообещающим. В частности, с точки зрения новых экспериментов актуальным является изучение более глубокого, чем ранее, туннельного режима с целью обнаружения предсказываемых расчетом фотонных ступеней. Не менее интересным является исследование эффекта в магнитном поле, в особенности, в условиях циклотронного резонанса туннелирующих электронов. Важным является расширение микроволнового диапазона в область низких частот, когда задача о фотонно-стимулированном туннелировании трансформируется в статическую, и выполняется условие $\omega\tau \ll 1$. Особого внимания заслуживает изучение перспективы создания на основе эффекта фотонно-стимулированного туннелирования нового класса приемников терагерцового и микроволнового излучения с необычно широким частотным диапазоном работы от 1 ГГц до 1 ТГц. Предварительные оценки вольт-ваттной чувствительности и пороговой мощности излучения дают значения, близкие к тем, которыми характеризуются приемники на барьерах Шоттки. С этой точки зрения интересной является задача исследования микроволнового и терагерцового отклика коротко-канальных кремниевых МОП-транзисторов в субпороговом режиме. Обнаружение предсказываемого для них гигантского фотокондактанса открывает реальную возможность создания матричных приемников на основе хорошо развитой и надежной технологии кремниевых МОП-интегральных схем.

Работа выполнена при поддержке Российско-

го фонда фундаментальных исследований (грант # 20-02-00385).

Авторы благодарят В. Л. Альперовича и А. Г. Погосова за обсуждения и полезные замечания.

1. A. H. Dayem and R. J. Martin, Phys. Rev. Lett. **8**, 246 (1962).
2. P. K. Tien and J. P. Gordon, Phys. Rev. **129**, 647 (1963).
3. V. A. Chitta, R. E. M. de Bekker, J. C. Maan, S. J. Hawkesworth, J. M. Chamberlain, M. Henini, and G. Hill, Semicond. Sci. Technol. **7**, 432 (1992).
4. P. S. S. Guimarães, B. J. Keay, J. P. Kaminski, S. J. Allen, Jr., P. F. Hopkins, A. C. Gossard, L. T. Florez, and J. P. Harbison, Phys. Rev. Lett. **70**, 3792 (1993).
5. H. Drexler, J. S. Scott, S. J. Allen, K. L. Campman, and A. C. Gossard, Appl. Phys. Lett. **67**, 2816 (1995).
6. M. Büttiker and R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739 (1982).
7. D. D. Coon and H. C. Liu, J. Appl. Phys. **58**, 2230 (1985).
8. D. Sokolovski, Phys. Rev. B **37**, 4201 (1988).
9. R. A. Sacks and A. Szoke, Phys. Rev. A **40**, 5614 (1989).
10. М. Ю. Сумецкий and М. Л. Фельштын, Письма в ЖЭТФ **53**, 24 (1991).
11. M. J. Hagmann, J. Appl. Phys. **78**, 25 (1995).
12. D. G. Baksheyev, O. A. Tkachenko, and V. A. Tkachenko, *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures*, ed. by V. E. Borisenko, A. B. Filonov, S. V. Gaponenko, and V. S. Gurin, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus (1995), p. 268.
13. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev, and H. Nejoh, *Quantum coherence and decoherence, Proceedings of the 5th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'95), Japan, August 21–24, 1995*, ed. by K. Fujikawa and Y. A. Ono, Elsevier, N.Y., North Holland (1996), p. 207.
14. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, and D. G. Baksheyev, *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures*, ed. by V. E. Borisenko, A. B. Filonov, S. V. Gaponenko, and V. S. Gurin, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus (1995), p. 126.
15. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev, and A. S. Jaroshevich, in *Proc. of the 22 Intern. Symp. on Compound Semiconductors, Cheju Island, Korea, 28 Aug. – 2 Sept., 1995. Inst. Phys. Conf. Ser. N145: Ch. 10*, ed. by J. C. Woo and Y. S. Park, Institute of Physics Publishing, Bristol, UK (1996), p. 1193.
16. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, and D. G. Baksheyev, J. Appl. Phys. **81**, 1771 (1997).

17. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, and D. G. Baksheyev, *Phys. Rev. B* **53**, 4672 (1995).
18. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, and D. G. Baksheyev, *Phys. Rev. B* **54**, 13452 (1996).
19. O. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev, V. A. Tkachenko, and M. B. Wojtsekhowski, *Physica B* **249–251**, 373 (1998).
20. C. Eckart, *Phys. Rev.* **35**, 1303 (1930).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, М. (1974), с. 105.
22. J.-Y. Ge and J. Z. H. Zhang, *J. Chem. Phys.* **105**, 8628 (1996).
23. K. Takahashi and K. S. Ikeda, *Phys. Rev. E* **86**, 056206 (2012).
24. 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).
25. D. 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).
26. M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **41**, 7906 (1990).
27. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev, K. S. Pyshkin, R. H. Harrell, E. H. Linfield, D. A. Ritchie, and C. J. B. Ford, *J. Appl. Phys.* **89**, 4993 (2001).
28. C.-T. Liang, O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev, M. Y. Simmons, D. A. Ritchie, and M. Pepper, *Phys. Rev. B* **70**, 195324 (2004).
29. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, *Письма в ЖЭТФ* **96**, 804 (2012).
30. C. Karadi, S. Jauhar, L. P. Kouwenhoven, K. Wald, J. Orenstein, P. L. McEuen, Y. Nagamune, and H. Sakaki, *J. Opt. Soc. Am. B* **11**, 2566 (1994).
31. R. A. Wyss, C. C. Eugster, J. A. del Alamo, and Q. Hu, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1522 (1993).
32. T. J. B. M. Janssen, J. C. Maan, J. Singleton, N. K. Patel, M. Pepper, J. E. F. Frost, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, *J. Phys.: Condens. Matter.* **6**, L163 (1994).
33. R. A. Wyss, C. C. Eugster, J. A. del Alamo, Q. Hu, M. J. Rooks, and M. R. Melloch, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 1144 (1995).
34. J. W. Song, G. R. Aizin, J. Mikalopas, Y. Kawano, K. Ishibashi, N. Aoki, J. L. Reno, Y. Ochiai, and J. P. Bird, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 083109 (2010).
35. J. W. Song, N. A. Kabir, Y. Kawano, K. Ishibashi, G. R. Aizin, L. Mourokh, J. L. Reno, A. G. Merkelz, and J. P. Bird, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 223115 (2008).
36. A. D. Levin, G. M. Gusev, Z. D. Kvon, A. K. Bakarov, N. A. Savostianova, S. A. Mikhailov, E. E. Rodyakina, and A. V. Latyshev, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 072112 (2015).
37. M. Otteneder, Z. D. Kvon, O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, A. S. Jaroshevich, E. E. Rodyakina, A. V. Latyshev, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. Appl.* **10**, 0140157 (2018).
38. K.-J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, R. Klann, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4616 (1996).
39. А. А. Быков, А. К. Бакаров, Л. В. Литвин, А. И. Торопов, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 300 (2000).
40. З. Д. Квон, Г. М. Гусев, А. Д. Левин, Д. А. Козлов, Е. Е. Родякина, А. В. Латышев, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 806 (2013).
41. А. А. Быков, И. С. Стрыгин, А. В. Горан, Д. В. Номоконов, А. К. Бакаров, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 475 (2020).
42. Z. D. Kvon, S. N. Danilov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and S. D. Ganichev, *Physica E* **40**, 1885 (2008).
43. М. Л. Савченко, З. Д. Квон, С. Кандуссио, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. Д. Ганичев, *Письма в ЖЭТФ* **108**, 253 (2018).
44. З. Д. Квон, М. Л. Савченко, Д. А. Козлов, Е. Б. Ольшанецкий, А. С. Ярошевич, Н. Н. Михайлов, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 174 (2020).
45. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, З. Д. Квон, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 417 (2015).
46. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, and Z. D. Kvon, *JETP Lett.* **103**, 555 (2016).
47. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, О. П. Сушков, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 196 (2020).
48. R. G. Gordon, *J. Chem. Phys.* **51**, 14 (1969).
49. Р. Гордон, *Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений*, Мир, М. (1974), с. 82.
50. V. A. Tkachenko, O. A. Tkachenko, G. L. Kotkin, and V. G. Tupitsin, *Physica B* **175**, 75 (1991).
51. F. A. Maao and L. Y. Gorelik, *Phys. Rev. B* **53**, 15885 (1996).
52. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, З. Д. Квон, *Письма в ЖЭТФ* **108**, 422 (2018).
53. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, *Сибирский физический журнал* **13**(4), 74 (2018).
54. O. A. Tkachenko, D. G. Baksheev, V. A. Tkachenko, Z. D. Kvon, A. S. Yaroshevich, E. E. Rodyakina, and A. V. Latyshev, *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing* **55**, 480 (2019).

К вопросу о механизме плавления простых металлов

Р. А. Кончаков⁺¹⁾, А. С. Макаров⁺, А. С. Аронин^{+*}, Н. П. Кобелев^{*}, В. А. Хоник⁺

⁺ Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

^{*} Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черногловка, Россия

Поступила в редакцию 21 января 2021 г.

После переработки 21 января 2021 г.

Принята к публикации 4 февраля 2021 г.

Молекулярно-динамическое моделирование алюминия показало значительный рост колебательной энтропии формирования межузельных дефектов в гантельной конфигурации вблизи температуры плавления T_m . На этой основе, совместно с оценкой концентрации дефектов такого типа в расплаве тремя независимыми методами, определена конфигурационная составляющая энтропии дефектной системы и сделан вывод о том, что около 70 % полной энтропии плавления (и, соответственно, теплоты плавления), наблюдаемой в эксперименте, может быть интерпретировано как результат генерации межузельных гантелей при $T = T_m$.

DOI: 10.31857/S1234567821050086

Введение. Микроскопический механизм плавления веществ является одной из фундаментальных проблем физики конденсированного состояния. История ее изучения начинается с работы Линдемана, опубликованной в 1910 г., в которой был предложен одноименный критерий плавления [1]. Однако, несмотря на многочисленные попытки решения этой проблемы в течение более ста лет, микроскопический механизм плавления даже элементарных веществ остается дискуссионным. Один из последних обзоров моделей плавления представлен в работе [2].

Важнейшим термодинамическим параметром плавления является энтропия плавления – разность энтропий жидкой и твердой фазы. Интересный факт состоит в том, что энтропия плавления элементов Периодической системы в расчете на атом близка к $1.2k_B$ (k_B – постоянная Больцмана) лишь с некоторыми относительно небольшими отклонениями [3]. Это соотношение известно как “правило Ричардса” [3, 4]. Оценка отдельных составляющих энтропии плавления ряда металлов (Au, Cu и др.) показала, что значительная часть скачка энтропии при плавлении обусловлена изменением колебательного спектра атомов [5]. Можно отметить, что еще модель Мотта–Френкеля (1934 г.) предполагала, что основная причина изменения энтропии в точке плавления имеет колебательную природу [6]. Известно также, что для многих металлов относительное изменение объема при плавлении пропорционально энтропии плавления [7].

Многие теоретические представления о плавлении строятся на предполагаемой связи плавления с дефектами кристаллической решетки. Так, Френкель еще в 1920-х гг. прошлого века предложил вакансионную модель плавления [8]. Слейтером было однако позднее показано [9], что если интерпретировать энтропию плавления как результат генерации вакансий, то их концентрация при температуре плавления T_m для меди должна быть около 50 %, что нереалистично. Существуют и другие возражения против такого подхода [10, 4].

Тем не менее, идея о связи плавления с дефектами кристаллической решетки развивалась во многих работах. При этом рассматривались пары Френкеля, отдельно межузельные атомы и их кластеры, комбинации различных дефектов и роль дефектов в спусковых механизмах, вызывающих плавление [10–16].

Среди всех представлений, связывающих плавление с дефектами, наиболее обоснованной нам представляется Межузельная теория (МТ) Гранато [17, 18]. Основным объектом МТ являются межузельные гантели – межузельные атомы в наиболее устойчивой гантельной конфигурации (два атома, стремящиеся занять один и тот же узел решетки), возникающей во всех основных кристаллических решетках. При этом одним из главных свойств этих дефектов является высокая энтропия формирования. Механизм плавления с точки зрения МТ состоит в лавинообразной генерации межузельных гантелей, концентрация c_i которых определяется энергией формирования Гиббса G_i^f и может быть описана стандартным соотношением

¹⁾ e-mail: konchakov.roman@gmail.com

$$c_i \approx \exp\left(-\frac{G_i^f}{k_B T}\right) = \exp\left(-\frac{H_i^f - TS_i^f}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где H_i^f и S_i^f – энтальпия и энтропия формирования межузельных гантелей соответственно. С ростом температуры T имеет место значительное уменьшение G_i^f , во-первых, за счет уменьшения энтальпии формирования H_i^f вследствие диаэластического эффекта (экспоненциального уменьшения модуля сдвига с ростом c_i) [17, 19]. Во-вторых, с ростом температуры колебательная часть энтропии формирования межузельных гантелей тоже растет, как будет показано ниже. Оба эффекта вызывают быстрый рост c_i . Гранато полагал, что практически вся энтропия плавления (т.е. $\approx 1.2k_B$ в расчете на атом) связана с межузельными гантелями [4]. МТ позволила термодинамически обосновать существование перегретого кристалла и переохлажденного расплава [17], количественно объяснить критерий Линдемана, одноименное эмпирическое правило плавления, корреляцию между температурой плавления и модулем сдвига [20], особенности высокотемпературной теплоемкости дефектных кристаллов [21], некоторые свойства переохлажденных и равновесных расплавов [4, 20], а также целый ряд релаксационных явлений в замороженных расплавах – металлических стеклах [22].

Между тем, оценки Гранато [4, 17, 18] носят в значительной степени качественный характер, а необходимые численные параметры были взяты в основном для меди. Поскольку МТ в целом дает ряд принципиально важных результатов как для простых металлов, так и для металлических стекол, ее базовые гипотезы и количественные оценки нуждаются в многосторонней проверке. Цель настоящей работы – показать посредством молекулярно-динамического моделирования алюминия, что значительный вклад в энтропию плавления действительно обусловлен межузельными гантелями. Это в первую очередь важно для понимания микроскопического механизма плавления простых металлов.

Методика моделирования. Молекулярно-динамические расчеты были выполнены в пакете LAMMPS [23] с межатомным потенциалом из работы [24], который ранее уже был использован нами при исследовании диаэластического эффекта в алюминии [19]. Размер модельной системы был выбран довольно малым – 4000 атомов ($10 \times 10 \times 10$ трансляций элементарной ячейки). Несмотря на то, что уменьшение размера модельной системы приводит к более грубой оценке ее колебательной энтропии [25], такой методический прием необходим

для того, чтобы избежать самопроизвольной генерации равновесных пар Френкеля до как можно более высоких температур. Температура плавления T_m для модели составила 898 К [19]. Максимальная температура, при которой удалось оценить энтропию формирования межузельных гантелей, оказалась равной 880 К.

Межузельные гантели вносились в систему при $T = 0$ К в случайные узлы решетки, но так, чтобы они не занимали соседние узлы. Затем выполнялся нагрев и уравнивание системы при заданной температуре и нулевом внешнем давлении. Для расчета колебательной энтропии при заданной температуре модельная система сначала уравнивалась в течение 0.2 нс (с шагом интегрирования по времени 2 фс), а затем вычислялась автокорреляционная функция скорости. Колебательная плотность состояний (VDoS) $g(\nu)$ вычислялась как квадрат модуля преобразования Фурье автокорреляционной функции скорости, а расчет колебательной энтропии выполнялся по формуле [25]

$$S_v/k_B = 3 \int_0^\infty g(\nu) [(n+1) \ln(n+1) - n \cdot \ln n] d\nu, \quad (2)$$

где $n(\nu) = 1/\exp(h\nu/k_B T - 1)$ и h – постоянная Планка. При расчете S_v для каждой конфигурации модельной системы проводилось усреднение 50-ти колебательных спектров VDoS.

Средняя колебательная энтропия системы с дефектами, определявшаяся по формуле (2), при малых c_i может быть представлена как

$$\langle S_v \rangle = S_v^0 + c_i S_i^f, \quad (3)$$

где S_v^0 – средняя колебательная энтропия атомов идеальной решетки и S_i^f – колебательная энтропия формирования межузельной гантели. Для определения S_i^f при заданной температуре достаточно построить зависимость средней энтропии на атом $\langle S_v \rangle$ от концентрации c_i и вычислить ее угловой коэффициент

$$S_i^f = \frac{d\langle S_v \rangle}{dc_i}, \quad (4)$$

представляющий собой колебательную энтропию формирования дефекта.

Согласно МТ [17, 18], энтропию расплава можно рассматривать как энтропию кристалла, содержащего достаточно большое количество межузельных гантелей. Если S_m – средняя колебательная энтропия на атом в расплаве, то изменение колебательной энтропии при плавлении ΔS_v^i в расчете на атом,

обусловленное только генерацией межузельных гантелей, можно представить как

$$\Delta S_v^i = S_m - S_v^0 = c_i S_i^f, \quad (5)$$

где c_i – концентрация межузельных гантелей в точке плавления.

Результаты моделирования и обсуждение.

На рисунке 1 в качестве примера показана зависи-

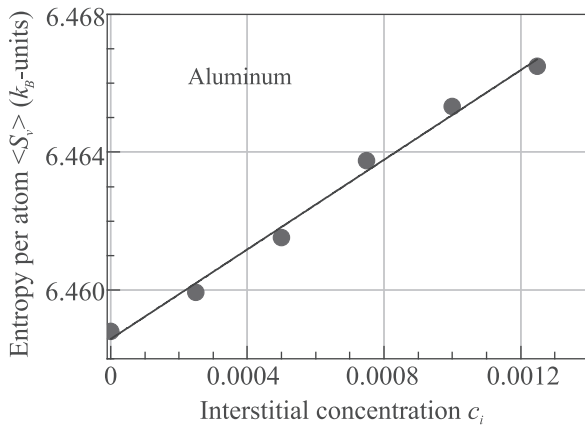


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость средней колебательной энтропии на атом $\langle S_v \rangle$ от концентрации межузельных гантелей c_i в алюминии при $T = 865$ К

мость колебательной энтропии $\langle S_v \rangle$ от концентрации межузельных гантелей при $T = 865$ К. Согласно уравнению (4), угловой коэффициент этой зависимости определяет колебательную энтропию формирования $S_i^f = (6.5 \pm 0.3)k_B$. Аналогичные вычисления были проделаны для других температур в интервале $0.67 \leq T/T_m \leq 0.98$.

На рисунке 2 показана рассчитанная колебательная энтропия идеальной решетки S_v^0 , а также полная энтропия кристалла, взятая по данным эксперимента [26]. Как и следовало ожидать, S_v^0 несколько меньше полной экспериментальной энтропии и хорошо воспроизводит ее температурную зависимость. Подчеркнем, что увеличение размеров модели этот результат не меняет. Колебательная энтропия формирования межузельных гантелей S_i^f/k_B составляет около 3.5 при низких температурах $T/T_m \approx 0.5$ и быстро увеличивается до ≈ 7 вблизи T_m .

Полученные результаты можно дополнить следующим анализом. В работе [19] были выполнены прецизионные измерения температурной зависимости модуля сдвига C_{44} монокристалла Al и независимо методом молекулярной динамики была рассчитана температурная зависимость концентрации межузельных гантелей c_i . Энтальпия их формирования определяется как $H_i^f = \alpha_1 \Omega C_{44}$, где Ω – объем на

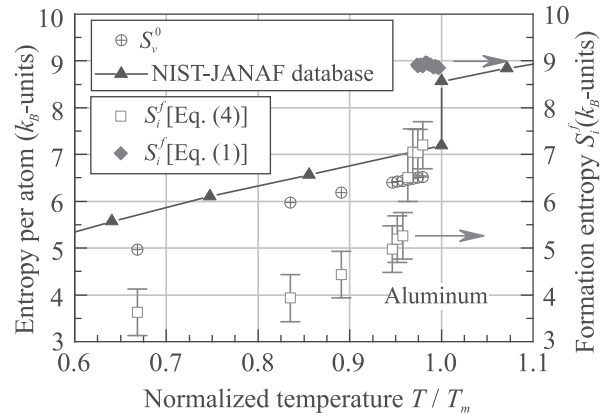


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурная зависимость колебательной энтропии S_v^0 атомов идеальной решетки (перечеркнутые кружки) и ее сравнение с полной энтропией по данным эксперимента [26] (темные треугольники) (левая ось), а также температурная зависимость энтропии формирования межузельной гантели S_i^f , рассчитанная с помощью уравнений (4) (светлые квадраты) и (1) (темные ромбы) (правая ось)

атом [19]. Тогда полную энтропию формирования межузельных гантелей можно определить по формуле (1), приняв рассчитанную для Al безразмерную константу $\alpha_1 = 0.78$ (см. ниже). Результат расчета показан темными ромбами на рис. 2. Видно, что в непосредственной близости к T_m полная энтропия формирования составляет $\approx 8.9k_B$.

С другой стороны, в той же работе [19] было получено значение полной энтропии формирования межузельных гантелей, равное $22k_B$ за несколько Кельвинов до T_m , что существенно больше значений, приведенных на рис. 2. Однако более поздний анализ [27] показал, что прямая оценка S_i^f по формуле (1), если не учитывать температурную зависимость энтальпии формирования (что и предполагалось в [19]), дает значительно завышенное значение энтропии формирования (как для межузельных атомов, так и для точечных дефектов вообще). Анализ литературных экспериментальных данных для Al с учетом этой температурной зависимости дал значение полной энтропии формирования $7.1k_B$ [27], что хорошо соответствует показанным на рис. 2 данным для предплавленных температур.

При низких температурах, когда миграция межузельных гантелей практически отсутствует, колебательную энтропию формирования можно оценить по положениям характерных пиков VDoS атомов, формирующих межузельную гантель. Рассчитанный нами для таких условий спектр VDoS для атомов межузельной гантели показан на рис. 3. Видны ха-

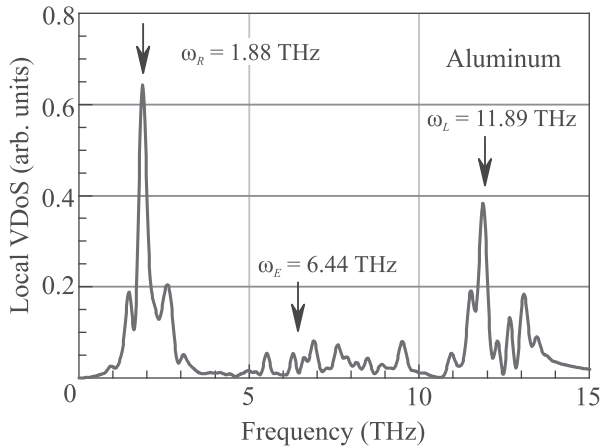


Рис. 3. (Цветной онлайн) Колебательная плотность состояний атомов межузельной гантели в алюминии при $T = 100$ К. Стрелками показаны резонансные и локальные частоты (ω_R и ω_L), а также частота Эйнштейна ω_E

рактерные большие резонансные и локальные пики, обусловленные синфазными и противофазными колебаниями атомов гантели на частотах ω_R и ω_L соответственно. Колебательную энтропию формирования можно тогда оценить по формуле [18]

$$S_i^f/k_B \approx 5 \ln \frac{\omega_E}{\omega_R} + 6 \ln \frac{\omega_E}{\omega_L}, \quad (6)$$

где ω_E – частота Эйнштейна, а коэффициенты 5 и 6 отражают число резонансных и локальных мод для межузельных гантелей в ГЦК решетке соответственно [28]. Подставляя значения частот ω_R , ω_L и ω_E (см. рис. 3), получаем колебательную энтропию формирования $S_i^f/k_B = 2.5$, что хорошо согласуется с результатами нашего модельного расчета S_i^f при низких температурах (рис. 2). Подчеркнем, что именно низкочастотные резонансные колебательные моды межузельных гантелей являются источником их высокой энтропии и это обстоятельство фактически составляет физическую основу МТ.

Помимо вышеизложенных данных по энтропии формирования межузельных гантелей в Al, в литературе нам известна только работа [29], где для довольно малой системы из 256 атомов методом молекулярной динамики показано, что при низких температурах $S_i^f/k_B = 5.9$, а вблизи T_m увеличивается до $S_i^f/k_B = 12.9$, что в принципе качественно согласуется с нашими результатами. Авторы [29] отмечают, что рост энтропии формирования может являться проявлением ангармонизма межатомного взаимодействия, хотя детали такого механизма непонятны.

Какие-либо другие данные об энтропии формирования межузельных гантелей в алюминии нам неизвестны, но для меди, имеющей ту же ГЦК решетку, в

литературе также указываются весьма большие значения S_i^f . Так, вышеуказанная работа [29] дает колебательную энтропию вблизи T_m , равную $17.6k_B$. Приведенные в работе [30] оценки разными методами для меди дают значения $S_i^f/k_B \approx 10 - 14$, что близко к значениям $S_i^f/k_B = 15 \pm 2$, представленным авторами [31]. Для сравнения отметим, что энтропию формирования вакансий S_{vac}^f в металлах оценивают в $(1-2)k_B$ [32]. Подчеркнем, однако, что соответствующие расчеты выполнялись в приближении постоянной энтальпии формирования H_{vac}^f (см., например, [33]). Анализ экспериментальных данных для Al с учетом температурной зависимости $H_{vac}^f = f(T)$ приводит к отрицательной энтропии формирования вакансии $S_{vac}^f/k_B \approx -1$ [27].

В целом, с учетом вышеизложенных результатов можно принять, что для Al колебательная энтропия формирования межузельных гантелей $S_i^f/k_B \approx 8$ вблизи T_m (рис. 2). Далее возникают вопросы о том, чему равна конфигурационная и полная энтропия системы межузельных гантелей, а также каков вклад полной энтропии в экспериментально наблюдаемую энтропию плавления. Для ответа на эти вопросы необходимо оценить концентрацию межузельных гантелей в расплаве. Отметим прежде всего, что по данным работы [34] межузельные гантели в результате плавления простого металла не теряют свою индивидуальность, а в рамках МТ дефектный кристалл и его расплав с энергетической точки зрения отличаются только концентрацией межузельных гантелей²⁾. Концентрацию межузельных гантелей в расплаве можно оценить следующими независимыми способами.

Во-первых, можно использовать основное уравнение МТ, связывающее модуль сдвига C_{44} расплава (или дефектного кристалла) с модулем сдвига материнского идеального кристалла C_{44}^{perf} и концентрацией межузельных гантелей c_i [17, 18]:

$$C_{44} = C_{44}^{perf} \exp(-\alpha\beta c_i), \quad (7)$$

где α – безразмерный параметр порядка единицы, связанный с полем деформации дефекта [35] и β – безразмерная сдвиговая восприимчивость. Для дальнейших расчетов можно с хорошей точностью считать, что модули сдвига идеального и дефектного кристалла вблизи T_m одинаковы. Значения модуля C_{44}^{perf} вблизи T_m , а также величину C_{44} непосредственно после плавления Al можно взять из рабо-

²⁾Подчеркнем, что эта точка зрения нашла довольно убедительные экспериментальные подтверждения для замороженных расплавов – металлических стекол [36, 37].

ты [38]. Результаты этой работы воспроизведены на рис. 4, где представлены результаты молекулярно-

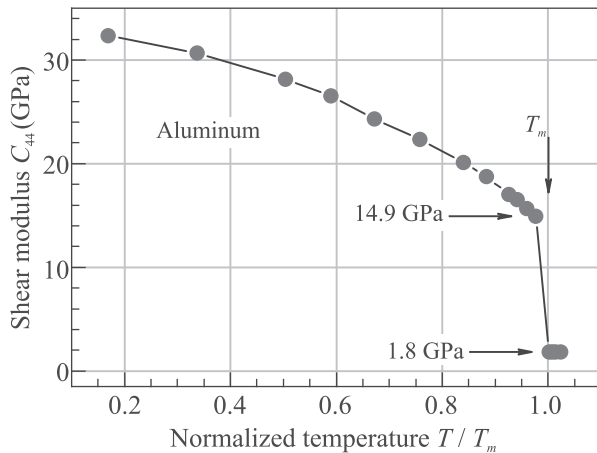


Рис. 4. (Цветной онлайн) Молекулярно-динамический расчет температурной зависимости модуля сдвига C_{44} алюминия в твердом и жидком состояниях по данным [38]. Отмечены значения C_{44} непосредственно до и после плавления

динамического расчета температурной зависимости модуля сдвига Al до и после плавления. Из рисунка 4 можно определить, что $C_{44}^{\text{perf}} = 14.9 \text{ ГПа}$ чуть ниже T_m и $C_{44} = 1.8 \text{ ГПа}$ чуть выше T_m . В полном согласии с МТ, модуль сдвига расплава является малым, но ненулевым. Тогда, принимая значение сдвиговой восприимчивости для алюминия $\beta = 27$ [19] (фактически в этой работе находилось произведение $\alpha\beta$, но предполагалось $\alpha = 1$), с помощью формулы (7) получаем искомую концентрацию межузельных гантелей в точке плавления расплава $c_i = \ln(14.9/1.8)/27 \approx 0.078$.

Второй способ оценки концентрации дефектов в расплаве состоял в воспроизведении расчета Гранато, который был исходно выполнен для меди [17]. Гранато записал трансцендентное уравнение, дающее изменение энергии Гиббса $\Delta\mathcal{G}$ в зависимости от концентрации межузельных гантелей и температуры. Полученное уравнение (не приводится здесь ввиду громоздкости) содержит в качестве параметров безразмерные величины α_1 и α_2 , характеризующие доли сдвиговой и дилатационной энергии в упругой энергии межузельного дефекта, сдвиговую восприимчивость β , модуль сдвига при нулевой температуре $C_{44}(0)$, параметр Грюнайзена γ , а также характерные частоты ω_R , ω_L и ω_E спектра колебательной плотности состояний межузельной гантели (см. выше). Для алюминия значение α_1 было рассчитано при нулевой температуре как $\alpha_1 = H_i^f/(\Omega C_{44}(0)) = 0.78$, где $H_i^f = 2.58 \text{ эВ}$ – энтальпия формирова-

ния дефекта и $C_{44}(0) = 31.7 \text{ ГПа}$ [39]. Величина $\alpha_2 = 0.03$ была взята такой же, как и для меди, параметр Грюнайзена $\gamma = 2.47$, объем на атом алюминия $\Omega = 1.66 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$. Значения частот ω_R , ω_L и ω_E приведены выше.

Результаты расчета $\Delta\mathcal{G}$ в относительных единицах по уравнению $f[\Delta\mathcal{G}, c_i, \alpha_1, \alpha_2, \omega_R, \omega_L, \omega_E, \beta, C_{44}(0), \gamma] = 0$ в зависимости от концентрации дефектов при различных температурах показаны на рис. 5. При относительно

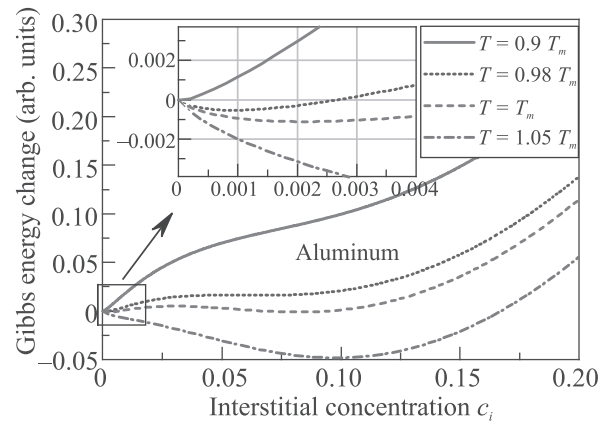


Рис. 5. (Цветной онлайн) Изменение энергии Гиббса $\Delta\mathcal{G}$ алюминия в зависимости от температуры и концентрации межузельных гантелей. На вставке показана та же зависимость вблизи начала координат в увеличенном масштабе

низкой температуре $T = 0.9T_m$ имеется только один минимум энергии Гиббса, соответствующий равновесной концентрации межузельных гантелей в кристалле. Чуть ниже температуры плавления ($T = 0.98T_m$) появляются два минимума $\Delta\mathcal{G}$, первый отвечает равновесной концентрации дефектов в кристалле ($c_i \approx 9 \cdot 10^{-4}$), а второй (менее глубокий) при концентрации $c_i = 0.066$ соответствует метастабильному равновесию переохлажденного расплава. При температуре плавления ($T = T_m$) сосуществуют два минимума одинаковой глубины, что можно интерпретировать как термодинамическое равновесие кристалла с концентрацией дефектов $c_i = 0.003$ и расплава с концентрацией дефектов $c_i = 0.081$. Выше температуры плавления ($T = 1.05T_m$) имеется только один минимум энергии Гиббса, отвечающий равновесному расплаву с концентрацией дефектов $c_i = 0.098$. Итак, этот расчет дает концентрацию дефектов в точке плавления $c_i \approx 0.08$, что вполне согласуется с расчетом Гранато для меди, который дал $c_i \approx 0.09$ [17].

Наконец, третий реализованный нами способ

оценки концентрации дефектов в расплаве состоял в следующем. Как отмечалось выше, с термодинамической точки зрения расплав, в рамках МТ, можно рассматривать как кристалл с большой концентрацией дефектов. Можно предположить поэтому, что основной рост объема при плавлении обусловлен генерацией межузельных гантелей. Как известно [7], относительное изменение объема при плавлении алюминия $\Delta V/V_s \approx 0.06$, где V_s – объем твердой фазы. С другой стороны, то же самое изменение объема можно рассчитать по формуле $\Delta V/V_s = (r_i - 1)c_i$, где r_i – так называемый релаксационный объем, характеризующий относительное изменение объема при формировании межузельной гантели и равный 1.76 для алюминия [40]. С учетом изложенного получаем концентрацию дефектов в расплаве $c_i = 0.06/0.76 \approx 0.079$, что хорошо согласуется с вышеприведенными оценками.

Таким образом, три независимые оценки дают практически одинаковую концентрацию межузельных гантелей в кристалле $c_i \approx 0.08$. Теперь можно оценить полный вклад этих дефектов в энтропию плавления как сумму колебательной ΔS_v^i и конфигурационной S_c^i составляющих:

$$\Delta S_m^i = \Delta S_v^i + S_c^i, \quad (8)$$

где колебательная компонента ΔS_v^i определяется соотношением (5), а конфигурационная составляющая S_c^i может быть оценена как $S_c^i/k_B = c_i(1 + \ln \frac{3}{c_i})$ (множитель 3 соответствует трем возможным ориентациям межузельной гантели в ГЦК решетке)[18]. Тогда подстановка в (8) значений $c_i = 0.08$ и $S_v^i/k_B = 8$ (см. выше) дает полное изменение энтропии в расчете на атом, связанное с генерацией межузельных гантелей при плавлении алюминия, равное $\Delta S_m^i \approx 1.0k_B$. Примерно две третьих этой величины составляет колебательная и одну треть – конфигурационная составляющая энтропии системы межузельных дефектов.

С другой стороны, как видно из рис. 2, эксперимент показывает рост полной энтропии на атом при плавлении на $\Delta S_m^{\text{exp}}/k_B = 8.57 - 7.19 = 1.38$. Можно заключить, таким образом, что около 70 % наблюдаемой в эксперименте энтропии плавления (и, соответственно, такая же часть теплоты плавления $Q_m = T_m \Delta S_m^{\text{exp}}$) может быть интерпретирована как результат генерации межузельных атомов в гантельной конфигурации при температуре плавления.

Проведенный расчет является, конечно, приближенным, но вполне очевидно показывает важнейшую роль межузельных дефектов в процессе плавления, в соответствии с Межузельной теорией. Можно

ожидать, что этот вывод будет справедлив для простых металлов в целом.

Заключение. Методом молекулярной динамики показано, что колебательная энтропия формирования межузельных гантелей в алюминии увеличивается с температурой от $S_v^f/k_B \approx 3.5$ при $T/T_m = 0.65$ (T_m – температура плавления) до примерно $S_v^f/k_B \approx 7$ непосредственно вблизи T_m . Три независимыми способами оценена концентрация этих дефектов в расплаве при $T = T_m$, которая составила $c_i \approx 0.08$. Это позволило рассчитать колебательную и конфигурационную составляющие энтропии формирования дефектов межузельного типа. Показано, что эта энтропия составляет около 70 % от полной энтропии плавления алюминия, наблюдаемой в эксперименте. Сделан вывод о том, что генерация межузельных дефектов играет важнейшую роль в процессе плавления.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 20-62-46003.

1. F. A. Lindemann, Phys. Z. **11**, 609 (1910).
2. Q. S. Mei and K. Lu, Prog. Mater. Sci. **52**, 1175 (2007).
3. M. de Podesta, *Understanding the Properties of Matter*, Taylor and Francis, London, N.Y. (2001).
4. A. V. Granato, J. Non-Cryst. Sol. **352**, 4821 (2006).
5. D. O. Nason and W. A. Tiller, Acta Metall. **21**, 747 (1973).
6. N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. A **146**, 465 (1934).
7. M. Lasocka, Phys. Lett. A **51**, 137 (1975).
8. J. Frenkel, Z. Phys. **35**, 652 (1926).
9. J. C. Slater, *Introduction to Chemical Physics*, McGraw-Hill Book Company, N.Y., NY, USA; Toronto, ON, Canada; London, UK (1963).
10. A. Kanigel, J. Adler, and E. Polturak, Int. J. Mod. Phys. C **12**, 727 (2001).
11. F. H. Stillinger and T. A. Weber, J. Chem. Phys. **81**, 5095 (1984).
12. G. C. S. Lee and J. C. M. Li, Phys. Rev. B **39**, 9302 (1989).
13. V. Sorkin, E. Polturak, and J. Adler, Phys. Rev. B **68**, 174102 (2003).
14. Y. Zhou and X. Jin, Phys. Rev. B **71**, 224113 (2005).
15. H. Zhang, M. Khalkhali, Q. Liu, and J. F. Douglas, J. Chem. Phys. **138**, 12A538 (2013).
16. A. Samanta, M. E. Tuckerman, T.-Q. Yu, and E. Weinan, Science **346**, 729 (2014).
17. A. V. Granato, Phys. Rev. Lett. **68**, 974 (1992).
18. A. V. Granato, Eur. Phys. J. B **87**, 18 (2014).
19. E. V. Safonova, Yu. P. Mitrofanov, R. A. Konchakov, A. Yu. Vinogradov, N. P. Kobelev, and V. A. Khonik, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 215401 (2016).
20. A. V. Granato, D. M. Joncich, and V. A. Khonik, Appl. Phys. Lett. **97**, 171911 (2010).

21. Е. В. Сафонова, Р. А. Кончаков, Ю. П. Митрофанов, Н. П. Кобелев, А. Ю. Виноградов, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **103**, 861 (2016).
22. V. Khonik and N. Kobelev, *Metals* **9**, 605 (2019).
23. J. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**, 1 (1995).
24. H. W. Sheng, M. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, and M. Chen, *Phys. Rev. B* **83**, 134118 (2011).
25. I. Kruglov, O. Sergeev, A. Yanilkin, and A. R. Oganov, *Sci. Rep.* **7**, 8512 (2017).
26. M. W. Chase, *NIST-JANAF thermochemical tables*, Part I: Al-Co, American Chemical Society and the American Institute of Physics for the National Institute of Standards and Technology, N.Y. (1998); <https://janaf.nist.gov/tables/Al-001.html>.
27. Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, ЖЭТФ **153**, 409 (2018).
28. P. H. Dederichs, C. Lehman, H. R. Schober, A. Scholz, and R. Zeller, *J. Nucl. Mater.* **69–70**, 176 (1978).
29. S. R. de Debiaggi, M. de Koning, and A. M. Monti, *Phys. Rev. B* **73**, 104103 (2006).
30. Y. Mishin, *Philos. Mag. A* **81**, 2591 (2001).
31. K. Nordlund and R. S. Averbach, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4201 (1998).
32. H. Numakura, *Defects in Metals*, in: *Physical Metallurgy*, fifth edition, ed. by D. E. Laughlin and K. Hono, Elsevier (2014), p. 561.
33. G. Neumann, V. Tölle, and C. Tuijn, *Physica B* **271**, 21 (1999).
34. K. Nordlund, Y. Ashkenazy, R. S. Averbach, and A. V. Granato, *Europhys. Lett.* **71**, 625 (2005).
35. N. P. Kobelev and V. A. Khonik, *J. Non-Cryst. Sol.* **427**, 184 (2015).
36. G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, W. H. Wang, and V. A. Khonik, *Acta Mater.* **115**, 204 (2016).
37. G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, N. P. Kobelev, M. W. da Silva Pinto, G. Wilde, and V. A. Khonik, *Scr. Mater.* **166**, 6 (2019).
38. M. Forsblom and G. Grimvall, *Nat. Mater* **4**, 388 (2005).
39. Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, Г. В. Афонин, М. А. Кротова, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **109**, 473 (2019).
40. R. A. Konchakov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, A. M. Glezer, G. Wilde, and V. A. Khonik, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 385703 (2019).

Фазовый переход в сегнетоэластике CsHSO_4 в магнитном поле

Е. Д. Якушкин¹⁾, В. А. Сандлер

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова,
Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника” РАН, 119333 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 декабря 2020 г.

После переработки 21 января 2021 г.

Принята к публикации 22 января 2021 г.

Обнаружено магнитоиндуцированное замедление начальной стадии изотермического фазового перехода сегнетоэластика-суперпротоника гидросульфата цезия. Эффект проявляется во временных зависимостях протонной проводимости во внешнем магнитном поле при переохлаждении высокотемпературной фазы монокристалла. При этом в однородной суперпротонной фазе выше температуры перехода магнитное поле на проводимость заметного влияния не оказывает. Наблюдаемое явление, по-видимому, связано с магнитной трансформацией центров пиннинга, уменьшающей подвижность межфазных границ.

DOI: 10.31857/S1234567821050098

Фазовый переход первого рода сопровождается появлением и ростом зародышей новой фазы и соответствующим движением межфазных границ. В монокристаллах подвижность этих межфазных границ связана с преодолением потенциальных барьеров. И в этом смысле она аналогична подвижности дислокаций. Исходя из этой аналогии и уже известных закономерностей магнитного воздействия на дислокации, представлялось актуальным исследовать воздействие магнитного поля на движение фазового фронта при фазовом переходе первого рода в диамагнитном монокристалле. Движение фазового фронта фиксировалось по изменению проводимости монокристалла. Из-за характерных гистерезисных явлений это удобнее делать в условиях изотермического фазового перехода при переохлаждении высокотемпературной фазы. Результаты именно такого эксперимента приводятся ниже. Фактически, это первое исследование *in-situ* кинетики структурного фазового перехода первого рода в магнитном поле.

Ранее исследовалось электрическое переключение сегнетоэлектрика-сегнетоэластика молибдата гадолиния при одновременном воздействии постоянно магнитного поля, и был обнаружен магнитоиндуцированный пиннинг сегнетоэластических доменных стенок [1]. Исследовались также сегнетоэлектрические свойства триглицинсульфата после его экспозиции в магнитном поле, и была продемонстрирована корреляция изменений электрических и механических свойств [2].

В данном случае, для эксперимента был выбран

монокристалл гидросульфат цезия CsHSO_4 (CHS). Этот кристалл испытывает сегнетоэластический фазовый переход первого рода из тетрагональной фазы в моноклинную ($4/mmm \leftrightarrow 2/m$) при температуре $T_c \approx 414$ К, и в точке фазового перехода наблюдаются все характерные для этого случая аномалии [3–5]. Примечательно, что наблюдавшийся в монокристалле CHS аномальный рост диэлектрических потерь при фазовом переходе изначально не вызывал удивления [3]. Но позднее было установлено, что эта аномалия означает рост объемной проводимости вследствие разупорядочения водородных связей, причем скачок проводимости в точке фазового перехода составляет 3–4 порядка и проводимость в высокотемпературной (суперпротонной) фазе достигает значения $10^{-2} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ [6]. С цитирования этой статьи теперь начинаются все многочисленные работы по суперпротонной тематике во всем мире, и сам термин “суперпротонная” проводимость стал обиходным (см., например, [7–10]). Кристалл CHS интересен и в отношении механических свойств – при фазовом переходе из высокотемпературной параэластической фазы РР в низкотемпературную сегнетоэластическую РР в монокристалле CHS возникает значительная спонтанная деформация ($\sim 10^{-2}$), образуются сегнетоэластические домены. В этой фазе наблюдается обратимая “суперпластичность”: при сдвиговом напряжении всего $\sim 10 \text{ кг/см}^2$ можно значительно деформировать образцы монокристалла и изменить их форму [4, 11].

В настоящей работе нами исследовалось изменение во времени проводимости, соответствующее движению фазового фронта при изотермическом фазо-

¹⁾e-mail: yakushkin@crys.ras.ru

вом переходе в монокристалле CHS во внешнем магнитном поле. При этом мы исходили из наблюдаемых магнитоиндуцированных эффектов в диамагнитных кристаллах и из соответствующих механических аналогий [12]. В связи с особенностями электрических свойств кристалла CHS, из-за своеобразия его протонной подсистемы, можно было ожидать влияния магнитного поля на миграцию протонов по водородным связям, на частоту перескока протонов по связям, например, посредством влияния на спиновое состояние возникающих парамагнитных дефектов. Тем более, что аналогичные спин-зависимые эффекты довольно ярко проявляются в магнитном влиянии на темновую проводимость полупроводников [13]. К сожалению, в нашем случае прямого магнитного влияния на суперпротонную проводимость исследуемого монокристалла в однородном состоянии выше точки перехода наблюдать не удастся, во всяком случае, с чувствительностью имеющихся вполне современных измерительных средств. Вместе с тем, при измерениях электрических свойств кристалла в смешанном состоянии, при переохлаждении его высокотемпературной фазы, ясно и воспроизводимо наблюдается магнитоиндуцированное изменение кинетических параметров изотермического фазового перехода. Ниже приводятся результаты этих измерений.

Исследуемые монокристаллы CHS выращивались из водного раствора и были номинально чистыми кристаллами. Образцы монокристаллов представляли собой прямоугольные пластины, вырезанные перпендикулярно моноклинной оси b с характерными размерами $L \sim 5\text{--}8\text{ мм}$ и толщиной $H \leq 1\text{ мм}$. На образцы наносились серебряные электроды. Образец монокристалла в ячейке-термостате помещался в зазор электромагнита с индукцией B 1.3 Тл. Это и максимальное значение индукции для используемого электромагнита, и типичное значение, при котором уже наблюдаются магнитоиндуцированные эффекты в диамагнитных веществах. Ячейка-термостат обеспечивала точность измерения и поддержания температуры не хуже 10^{-3} К . Измерялся комплексный импеданс образцов в диапазоне частот $10^2\text{--}5 \cdot 10^6\text{ Гц}$, из которого рассчитывалась статическая объемная проводимость σ . Измерения проведены при различной ориентации вектора индукции $\mathbf{B}$ и кристаллографической оси b и, соответственно, вектора плотности измерительного тока $\mathbf{j}$ в кристалле. Абсолютное значение $\mathbf{j}$, задаваемое и током проводимости, и током смещения, составляло даже в высокотемпературной фазе и на высоких частотах значение менее 10^{-3} А/см^2 , что исключает

любо сколько-нибудь значимое амперовское взаимодействие с внешним постоянным магнитным полем.

На рисунке 1 показано изменение статической объемной проводимости кристалла с изменением

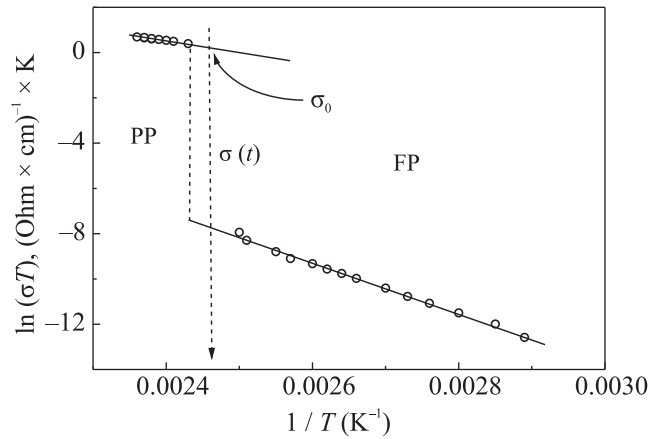


Рис. 1. Температурная зависимость и скачок статической объемной проводимости при фазовом переходе в монокристалле CHS. Показаны выбранная температура изотермического фазового перехода и значение σ_0 , экстраполированное к этой температуре и использованное для обработки временных зависимостей проводимости

температуры. Вблизи скачка проводимости исключена область специфических предпереходных явлений, связанных с адсорбцией атмосферной воды на поверхности кристалла, также ранее исследованных [14]. Экспериментальные точки получены при стабилизации температуры в каждом измерении и при стандартной обработке частотных зависимостей импеданса. Это типичная температурная зависимость, соответствующая соотношению $\sigma \sim (1/T) \times \exp(-U/kT)$, где U – энергия активации проводимости, k – постоянная Больцмана. Значения U составляют 0.9 и 0.3 эВ ($\pm 0.02\text{ эВ}$) для фаз FP и PP, соответственно. В данном случае, рис. 1 служит нескольким целям. Это и свидетельство качества образца (и качества измерений), и указание опорных значений в последующих измерениях. Пунктирная стрелка на рис. 1 показывает направление временного изменения значений $\sigma(t)$ и температуру изотермических измерений. Еще раз отметим, что включение магнитного поля в области суперпротонной высокотемпературной фазы никак не влияет на верхнюю часть экспериментальной кривой.

Изотермический фазовый переход происходит как зарождение и рост новой фазы при неизменной температуре, причем оба эти процесса не разделены во времени и идут параллельно. Если T_c – это равновесная температура, выше температуры T_0

потери устойчивости, характерной для фазового перехода первого рода, то при некоторой температуре T , $T_0 < T < T_c$, кристалл находится в метастабильном состоянии, при котором возникают и разрастаются зародыши новой фазы. Именно при такой температуре переохлаждения осуществлялось изотермическое фазовое превращение, и измерялись временные зависимости проводимости $\sigma(t)$. При этом падение проводимости со временем отвечает увеличению объема низкотемпературной сегнетоэластической фазы. Измерения проведены и без воздействия магнитного поля, и в условиях магнитного поля в реальном времени.

Кристалл нагревался до 420 К ($T > T_c$), затем приблизительно за 1 мин охлаждался до 406 К (именно эта температура отмечена на рис. 1), и измерялась временная зависимость проводимости. Изотермические измерения проведены на фиксированной частоте (10 кГц), выбранной из частотных зависимостей импеданса так, чтобы исключить влияние электродов и измеряемая проводимость максимально соответствовала статической объемной проводимости образца.

На рисунке 2а показано относительное изменение проводимости $\Delta\sigma/\sigma_0$ при изотермическом фазовом превращении в монокристалле CHS при его переохлаждении до 406 К, при этом $\Delta\sigma = \sigma_0 - \sigma(t)$, σ_0 – значение проводимости ($3.17 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$), экстраполированное из высокотемпературной фазы к температуре измерения (см. рис. 1), $\sigma(t)$ – текущее измеряемое значение проводимости. Максимальное время эксперимента составляло 250 мин. При этом проводимость изменялась приблизительно на порядок. В одном случае поле (1.3 Тл) было приложено постоянно, и продолжительность эксперимента составляла 40 мин, вследствие необходимости предотвратить нагрев образца непрерывно работающим электромагнитом. Во втором случае то же самое поле подавалось непосредственно во время измерения, фактически только на 15 с, и поскольку нагревом можно было пренебречь, время всего эксперимента также составляло 250 мин.

Видно, что при достаточно большой длительности эксперимента эволюция фазового превращения одинакова и для измерений без поля, и для измерений во внешнем магнитном поле. Причем, скорость превращения становится очень малой приблизительно через $1/2$ ч измерений, и соответствующие кривые становятся неразличимы. Магнитное поле заметно модифицирует только начальную стадию фазового превращения, причем эффект зависит от времени приложения поля. При постоянно подаваемом маг-

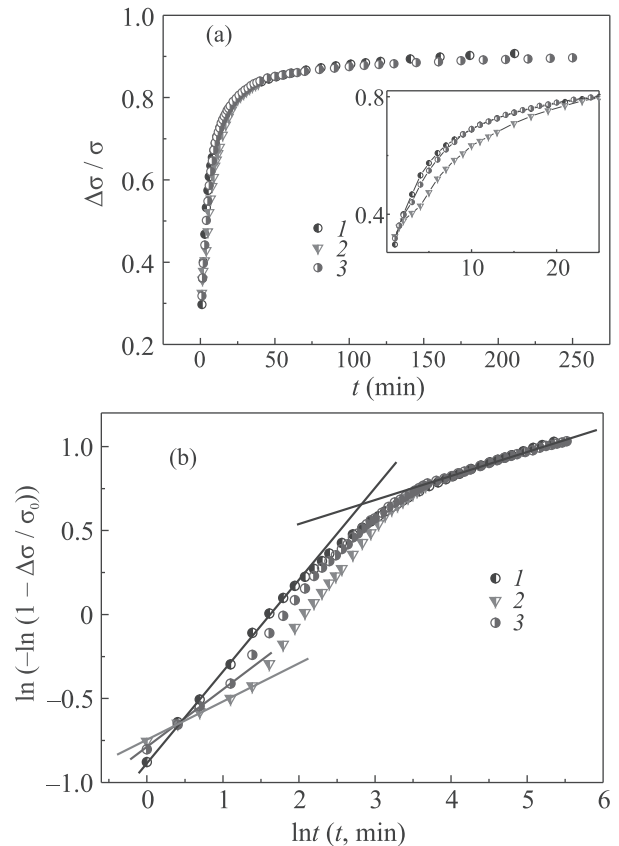


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Изменение относительной проводимости со временем при изотермическом фазовом переходе в монокристалле CHS без поля и во внешнем магнитном поле, причем на вставке показана начальная стадия превращения в увеличенном масштабе; (б) – те же зависимости, обработанные в соответствии с уравнением Колмогорова–Аврами. 1 – исходная зависимость без поля; 2 – с постоянно приложенным внешним магнитным полем с индукцией 1.3 Тл; 3 – с кратковременно (~ 15 с) приложенным внешним магнитным полем с индукцией 1.3 Тл

нитном поле наблюдается существенное замедление фазового превращения – скорость $d(\Delta\sigma)/dt$ изменения проводимости в первые 5 мин в магнитном поле оказывается в 2–2.5 раза ниже. На вставке к рис. 2а можно видеть, что магнитное поле, подаваемое в режиме реального времени измерения (~ 15 с), также приводит к замедлению превращения, хотя эффект выражен слабее.

Представлялось разумным эти же временные зависимости представить с использованием известного кинетического уравнения Колмогорова–Аврами [15, 16]. Это уравнение дает достаточно общее описание кинетики фазовых переходов первого рода независимо от особенностей зарождения и этапов роста новой фазы. Оно используется, например, при опи-

сании мартенситных фазовых переходов, для которых, так же, как и для сегнетоэластиков, характерны большие спонтанные деформации [17, 18]. Уравнение Колмогорова–Аврами устанавливает связь доли превращенного объема $\Delta V/V$ со временем t фазового превращения. В данном случае, для использованных пластинчатых образцов, $H/L \ll 1$, можно считать, что рост новой фазы происходит по всей толщине образца, и электрические свойства оказываются аддитивными. Тогда, для относительного изменения проводимости имеем $-\Delta\sigma/\sigma_0 \approx \Delta V/V$, и уравнение Колмогорова–Аврами можно записать в виде:

$$\Delta\sigma/\sigma_0 = 1 - \exp(-Kt^n), \quad (1)$$

где K и n – некоторые кинетические параметры, причем K отображает скорость зарождения и роста новой фазы, в частности, ее температурную зависимость, а n отображает детали механизма зародышеобразования. Уравнение (1) можно переписать в виде $\ln(-\ln(1 - \Delta\sigma/\sigma_0)) = \ln K + n \ln t$ и экспериментальные значения представить в координатах $\ln(-\ln(1 - \Delta\sigma/\sigma_0)) - \ln t$, что и показано на рис. 2b. И это типичные зависимости, отображающие временную эволюцию двухфазной системы. Аппроксимация экспериментальных точек прямыми линиями на рис. 2b свидетельствует и о применимости уравнения (1) в данном случае, и отображает различные значения параметра n (наклон прямых). Изломы прямых на рис. 2b соответствуют изменению кинетических параметров, т.е. в магнитном поле происходит смена режимов изотермического фазового превращения. Причем магнитное поле заметно воздействует на двухфазную систему только первые 5 мин. Фактически это означает замедление зародышеобразования (или замедленный рост) новой фазы на начальной стадии фазового превращения. На исходной зависимости без поля параметр n изменяется от 0.5 в начале превращения до 0.15 на второй стадии медленного роста новой фазы. В данном случае – это качественная характеристика. В простых модельных ситуациях он связан с размерностью системы [17]. Значения параметра $n < 1$ принято связывать с образованием доменов, зарождением на дислокациях, и т.п. Для режима с замедлением в магнитном поле имеем $n \approx 0.2$, но это значение может несколько различаться в зависимости от тепловой предыстории образца. В данном случае, основной обнаруженный эффект на качественном уровне – это излом на кинетических кривых, свидетельствующий о появлении в магнитном поле нового режима начальной эволюции системы. И он не зависит от тепловой предыстории и

воспроизводится в различных условиях эксперимента. При достаточно большой длительности система эволюционирует во всех трех случаях одинаково.

Обнаруженный эффект не зависит от взаимной ориентации векторов $\mathbf{B}$ и $\mathbf{j}$, а также не зависит от смены знака магнитного поля.

По аналогии с положительным эффектом магнитопластичности, на движение границ новой фазы, по-видимому, влияют модифицированные магнитным полем дефекты-стопоры. Действие поля здесь также не силовое, поле воздействует на спиновое состояние дефектов-стопоров, что приводит к снятию запрета на определенный электронный переход и к соответствующему изменению структуры стопоров, задающих потенциальный рельеф и, таким образом, скорость движения границ. В уравнении (1) это отображается коэффициентом K . Движение фазовых границ при изотермическом превращении представляет собой термически активируемый процесс, и если считать, что $K \sim \exp(-E/kT)$, то в магнитном поле энергетический барьер E , преодолеваемый фазовой границей, повышается, увеличивается время задержки границ на дефектах, что и приводит к замедлению движения границ. При этом общая ситуация, по-видимому, такова: барьеры на начальной стадии зародышеобразования повышаются в магнитном поле, процесс идет медленнее. А на последующих стадиях число тормозящих факторов увеличивается, причем значительная часть из них не чувствительна к магнитному полю (например, фазовые границы начинают мешать друг другу). Таким образом, повышение исходных барьеров для фазовых границ в магнитном поле перестает сказываться на их подвижности.

Как и в ранее проведенных экспериментах, условием наблюдения магнитоиндуцированных эффектов является термодинамически неравновесное состояние системы, на которую действует магнитное поле. Именно неравновесное состояние системы обеспечивает высокую чувствительность дефектов к внешнему магнитному полю.

Таким образом, из проведенного исследования ясно, что кинетика структурного фазового перехода первого рода изменяется во внешнем магнитном поле, во всяком случае, на начальной стадии зарождения и роста новой фазы. А именно – процесс замедляется. И, по-видимому, это замедление связано с изменением состояния дефектов-стопоров межфазных границ.

Насколько обнаруженный эффект является общим? В данном случае исследовался сегнетоэластический фазовый переход. Но, по-видимому, во всех

случаях, когда имеются фазовые границы, связанные с определенными структурными магниточувствительными дефектами-стопорами, будет и изменение их подвижности во внешнем магнитном поле.

Следует еще раз отметить, что измеряемое временное изменение проводимости связано именно с эволюцией неоднородного состояния переохлажденной высокотемпературной фазы кристалла. На собственно же суперпротонную проводимость кристалла CHS магнитное поле заметно не влияет. Априори можно было ожидать влияния магнитного поля на электронное и спиновое состояние анионной подрешетки, участвующей в формировании коллективной миграции протонов. Однако, выполненные эксперименты показали, что такое влияние не наблюдается. Во всяком случае, в поле с индукцией порядка 1 Тл при различной взаимной ориентации электрического и магнитного полей, изменения проводимости наблюдать не удастся. Фактически, это означает, что приведенная на рис. 1 и характерная для суперпротонов температурная зависимость проводимости никак не изменяется в таком магнитном поле.

Авторы благодарны В. И. Альшицу за предложение экспериментальной задачи и обсуждение результатов.

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

1. Е. Д. Якушкин, Письма в ЖЭТФ **106**, 523 (2017).
2. Е. А. Петржик, В. И. Альшиц, Е. С. Иванова, Известия РАН, серия Физическая **78**(10), 1305 (2014).

3. M. Komukae, T. Osaka, Y. Makita, T. Ozaki, B. K. Itoh, and E. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 3187 (1981).
4. T. Ozaki, B. K. Itoh, and E. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 213 (1982).
5. K. Kamazawa, M. Harada, T. Araki, Y. Matsuo, M. Tyagi, and J. Sugiyama, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 074604 (2014).
6. А. И. Баранов, Л. А. Шувалов, Н. М. Щагина, Письма в ЖЭТФ **36**, 381 (1982).
7. S. M. Haile, A. D. Boysen, C. R. I. Chisholm, and R. B. Merle, Nature **410**, 910 (2001).
8. M. G. Compton, K. C. Maynes, J. Pavelites, and D. B. Baker, Solid State Commun. **136**, 138 (2005).
9. B. C. Wood and N. Marzari, Phys. Rev. B **76**, 134301 (2007).
10. C. R. I. Chisholm, Y. H. Jang, S. M. Haile, and W. A. Goddard, Phys. Rev. B **72**, 134103 (2005).
11. Л. Ф. Кирпичникова, А. А. Урусовская, В. И. Мозговой, Письма в ЖЭТФ **62**, 616 (1995).
12. В. И. Альшиц, Е. В. Даринская, М. В. Колдаева, Р. К. Котовский, Е. А. Петржик, П. Трончик, УФН **187**, 327 (2017).
13. И. С. Волчков, В. М. Каневский, М. Д. Павлюк, Письма в ЖЭТФ **107**, 276 (2018).
14. А. И. Баранов, В. В. Синицын, Е. Г. Понятовский, Л. А. Шувалов, Письма в ЖЭТФ **44**, 186 (1986).
15. А. Н. Колмогоров, Известия АН СССР **1**, 355 (1937).
16. M. Avrami, J. Chem. Phys. **8**, 212 (1940).
17. J. W. Christian, *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*, Oxford, Pergamon Press (2002).
18. A. L. Roitburd, *Martensitic Transformation as a Typical Phase Transformation in Solids*, in *Solid State Physics*, ed. by H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turubull, Academic Press, N.Y. (1978), p. 317.

Обменное усиление магнитокалорического эффекта в ферромагнитных наноструктурах (Миниобзор)

А. А. Фраерман¹⁾

Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 15 января 2021 г.

После переработки 29 января 2021 г.

Принята к публикации 29 января 2021 г.

Предложен новый подход к проблеме магнитного охлаждения, основанный на эффекте близости ферромагнетиков с различными температурами Кюри. Проводится аналогия между транспортным и магнитокалорическим эффектами обменной природы в магнитных многослойных структурах. Теоретически показано, что эффективность магнитного охлаждения в этих системах может существенно превосходить значения, характерные для однородных магнетиков. Обсуждаются результаты экспериментального изучения магнитокалорического эффекта в наноструктурах и перспективы их использования для магнитного охлаждения.

DOI: 10.31857/S1234567821050104

I. Введение. Магнитокалорический эффект был открыт П. Вейссом и А. Пиккардом (P. Weiss & A. Piccard) в 1917 г. и, по предложению У. Джиока и П. Дебая (W. F. Giauque & P. Debye), использовался для получения сверхнизких температур при размагничивании парамагнитных солей (см., например, обзор [1]). В основе эффекта лежит изменение степени беспорядка (энтропии S) магнетика под действием магнитного поля (H). Если намагничивание (размагничивание) происходит в адиабатических условиях, т.е. без изменения суммарной энтропии, то эти процессы сопровождаются изменением температуры образца (T). Действительно, из равенства нулю полного изменения энтропии имеем [2]

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H dt + \left(\frac{\partial S}{\partial H} \right)_T dH = 0, \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dH} = - \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial H} \right)_T}{\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H} = - \frac{T}{C} \left(\frac{\partial S}{\partial H} \right)_T,$$

где C – теплоемкость. При этом предполагается, что время взаимодействия магнитной подсистемы с кристаллической решеткой и электронами проводимости меньше времени перемагничивания. Существует прямая связь между изотермическим изменением энтропии магнетика под действием магнитного поля и

изменением его намагниченности (M) с изменением температуры (соотношение Максвелла)

$$\left(\frac{\partial S}{\partial H} \right)_T = - \frac{\partial^2 F}{\partial H \partial T} = - \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial H} = \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H. \quad (2)$$

Это соотношение позволяет изучать магнитокалорический эффект по температурной зависимости кривой намагничивания [3]. Рассмотрим изменение энтропии при намагничивании парамагнетика. Вдали от насыщения намагничивание происходит по закону Кюри $M = \chi H$, где $\chi = c_K/T$ – восприимчивость парамагнетика, c_K – константа Кюри. Пользуясь соотношением Максвелла, получаем изменение энтропии при увеличении поля от нуля до H

$$\Delta S = - \frac{c_K H^2}{2T^2} = -M^2/2c_K. \quad (3)$$

Максимальное изменение энтропии достигается при намагничивании парамагнетика до насыщения $M = m_s$, что возможно в магнитном поле $\mu H \geq kT$, μ – магнитный момент на атом, k – постоянная Больцмана. Если для низких температур ($T \sim 1$ К) поле насыщения порядка 1 Тл, то насыщение парамагнетика при комнатной температуре требует приложения гигантского поля ~ 300 Тл. Ситуация несколько меняется при переходе от парамагнетика к ферромагнетику. При этом восприимчивость вблизи температуры Кюри (T_c) возрастает, подчиняясь закону Кюри–Вейсса $\chi = c_K(T - T_c)$. Это приводит к уменьшению поля насыщения, которое, тем не менее,

¹⁾e-mail: andr@ipmras.ru

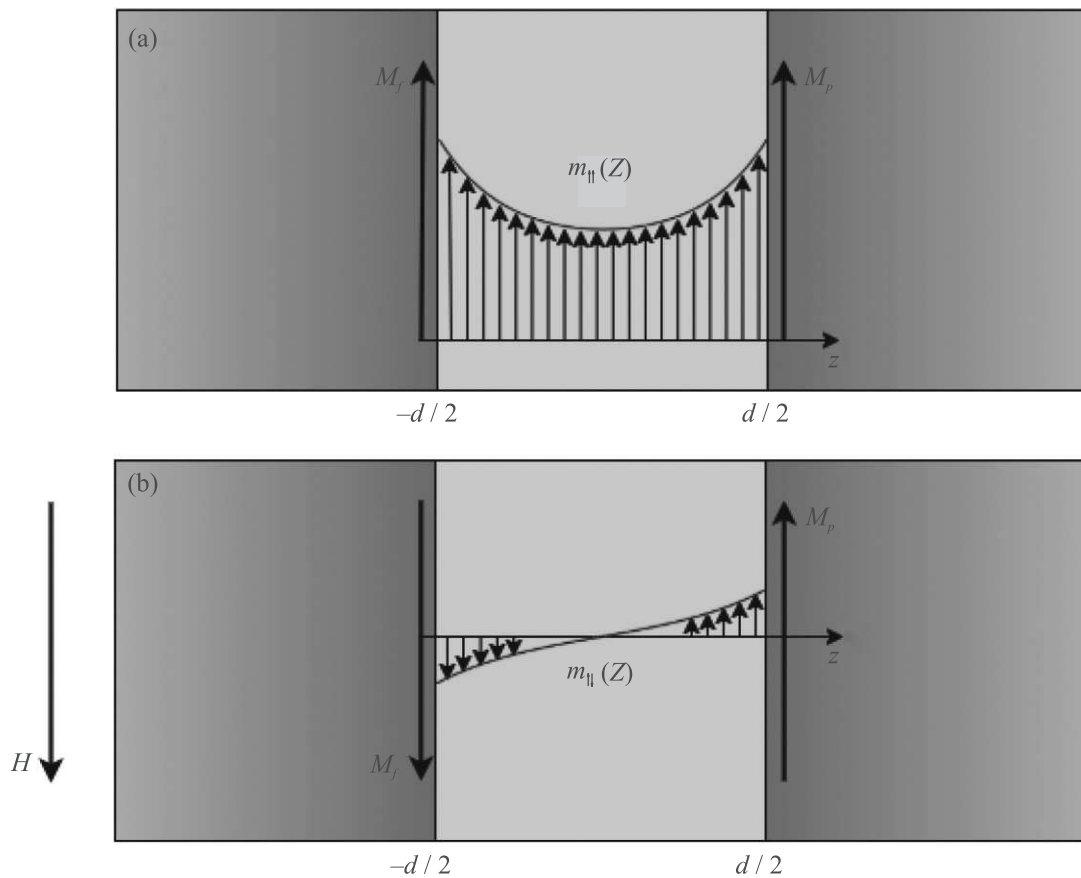


Рис. 1. Схематическое изображение распределения намагниченности в парамагнитной прослойке, расположенной между двумя ферромагнетиками при параллельной (а) и антипараллельной (б) ориентации магнитных моментов ферромагнетиков

остается очень большим (~ 10 Тл). Последнее обстоятельство связано с необходимостью намагничивания образца до насыщения в парапроцессе. Максимальное значение изменения энтропии достигается при $T = T_c$ и также описывается формулой вида (3) с заменой $M \rightarrow M(T = T_c, H)$ [4, 5]. Из этого следует, что большим магнитокалорическим эффектом обладают материалы с высоким значением магнитного момента на атом, к которым относится гадолиний и сплавы на его основе [6]. Но и для этих материалов рекордные значения эффективности охлаждения $\frac{dT}{dH}$ не превышают 10 К/Тл. Таким образом, необходимость использования больших магнитных полей (см., например, [7, 8]) и относительно низкая эффективность охлаждения сдерживает разработку и применение магнитных холодильников, работа которых основана на магнитокалорическом эффекте [9].

В работе [10] был предложен новый подход к проблеме повышения эффективности магнитного охлаждения. В качестве охладителя (“refrigerant”) пред-

лагается использовать многослойные структуры, состоящие из пленок с различными температурами Кюри. Тогда “сильный” ферромагнетик, имеющий большую температуру Кюри θ за счет эффекта магнитной близости [11], будет подмагничивать “слабый” ферромагнетик ($T_c, T_c < \theta$) даже в том случае, если последний находится в парамагнитной фазе, т.е. $T_c < T$. Более того, для многослойной структуры, в которой “слабый” ферромагнетик находится между слоями “сильного” ферромагнетика, размагничивание (намагничивание) этой прослойки зависит от взаимной ориентации магнитных моментов в берегах (рис. 1). Эффективность такого способа изменения энтропии “слабого” ферромагнетика возрастает с уменьшением его толщины и может достигать гигантских значений. Эффект носит “обменный” характер и увеличение эффективности охлаждения достигается за счет реконфигурации обменных полей на границах пленок. Имеется определенная аналогия между предлагаемым эффектом и транспорт-

ными эффектами обменной природы. Действительно, если для широко известного эффекта гигантского магнитосопротивления взаимная ориентация намагниченностей ферромагнитных берегов определяет электросопротивление образца, то в рассматриваемом случае взаимной ориентацией намагниченностей определяется его энтропия. В последние годы проведены теоретические [12] и экспериментальные [13–17] исследования обменного усиления магнитокалорического эффекта в многослойных структурах “сильный”/“слабый” ферромагнетик. Данный обзор посвящен анализу результатов этих исследований.

II. Теория. В рамках теории фазовых переходов Ландау, свободную энергию F , приходящуюся на единицу площади многослойной структуры, можно записать в виде

$$F[m] = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \left(\frac{l_0^2}{2} \left(\frac{dm}{dz} \right)^2 + \frac{\alpha\tau}{2} m^2 + \frac{\beta}{4m_s^2} m^4 \right) dz + \frac{l_J}{2} (m - \sigma m_s)^2 \Big|_{z=-\frac{d}{2}} + \frac{l_J}{2} (m - m_s)^2 \Big|_{z=\frac{d}{2}}, \quad (4)$$

где α , β , l_0 и l_J – феноменологические коэффициенты, d – толщина парамагнитной прослойки. Первое слагаемое в (4) описывает свободную энергию “слабого” ферромагнетика, находящегося в парамагнитной фазе $\tau = T - T_c > 0$. Последние два слагаемых описывают обменное взаимодействие парамагнитной прослойки с ферромагнитными берегами (рис. 1). Параметр σ определяется взаимной ориентацией ферромагнетиков и равен $\sigma = +1, -1$ для параллельной ($\uparrow\uparrow$) и антипараллельной ($\uparrow\downarrow$) конфигурации соответственно. Полагая, что внешнее поле мало и не способно существенно изменить намагниченность парамагнетика, мы пренебрегаем членом $-\mathbf{Hm}$ под знаком интеграла в формуле (4). Тогда роль внешнего поля сводится к изменению взаимной ориентации ферромагнитных берегов. Уравнение, отвечающее экстремуму функционала (4), и граничные условия имеют вид

$$\frac{d^2 m}{dz^2} - \frac{1}{l^2} m - \frac{\beta}{l_0^2 m_s^2} m^3 = 0, \quad (5)$$

$$\frac{dm}{dz} \Big|_{z=\frac{d}{2}} = -\frac{l_J}{l^2} (m - m_s) \Big|_{z=\frac{d}{2}}, \quad (6)$$

$$\frac{dm}{dz} \Big|_{z=-\frac{d}{2}} = \frac{l_J}{l^2} (m - \sigma m_s) \Big|_{z=-\frac{d}{2}}, \quad (7)$$

где введено обозначение $l = l_0/\sqrt{\alpha\tau}$. Решение этой задачи может быть представлено в виде эллиптических функций Якоби, что сделано в работе [12]. Здесь мы обсудим качественную сторону дела, опираясь на

результаты, полученные в этой работе. Для энтропии системы $S = -\partial F/\partial T$, при выполнении условий (5)–(7), справедлива формула

$$S = -\frac{\alpha}{2T_c} \cdot \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} m^2 dz = -\frac{\alpha \overline{m^2}}{2T_c}, \quad (8)$$

которая с точностью до обозначений ($\frac{T_c}{\alpha} = c_K$) и замены $M \rightarrow \overline{m^2}$ совпадает с формулой (3). Здесь $\overline{m^2}$ – средний квадрат намагниченности парамагнитной прослойки. Если магнитные моменты ферромагнитных берегов параллельны и толщина прослойки мала по сравнению с магнитным корреляционным радиусом, то из-за эффекта близости прослойка намагничивается почти до насыщения ($S_{\uparrow\uparrow} \approx -\frac{\alpha m_s^2}{2T_c}$). При антипараллельной ориентации среднее по толщине прослойки поле, создаваемое ферромагнетиками, близко к нулю и парамагнетик размагничен ($S_{\uparrow\downarrow} \approx 0$) (рис. 1). Полученные формулы характеризуют максимально возможный магнитокалорический потенциал, который для гадолиния равен $\Delta S_{\max} = S_{\uparrow\downarrow} - S_{\uparrow\uparrow} \sim 3 \cdot 10^6$ эрг $K^{-1} \text{ см}^{-3}$. Зная величину магнитокалорического потенциала, можно оценить адиабатическое изменение температуры ΔT всей структуры при смене взаимной ориентации намагниченностей ферромагнитных слоев

$$\Delta T = T_f - T = -\frac{Td}{(d + 2d_F)C} \Delta S. \quad (9)$$

Здесь T_f – конечная температура, d_F – толщины ферромагнетиков, которые предполагаются одинаковыми, C – удельная теплоемкость, которая, вообще говоря, включает в себя вклады от решеточной и магнитной подсистем. Можно показать, что вкладом магнитной подсистемы в теплоемкость можно пренебречь и для оценки теплоемкости использовать закон Дюлонга–Пти $C \approx 1.2 \cdot 10^7$ эрг $K^{-1} \text{ см}^{-3}$. Полагая, что $d \sim d_F$, а температура Кюри тонких пленок гадолиния ~ 200 К (см. ссылки в [12]), получаем $\Delta T \sim 10$ К. Принимая во внимание, что смена ориентации намагниченностей ферромагнитных берегов происходит в полях ~ 100 – 1000 Э, эффективность охлаждения, согласно этим оценкам, достигает гигантской величины $\sim 10^2$ – 10^3 К/Тл.

Однако проведенные нами расчеты указывают на то, что эта оценка завышена. Для реальных материалов при параллельной ориентации магнитных моментов ферромагнитных берегов парамагнитная прослойка не намагничивается до насыщения, а при антипараллельной ориентации не размагничивается до нуля. Основываясь на решении систе-

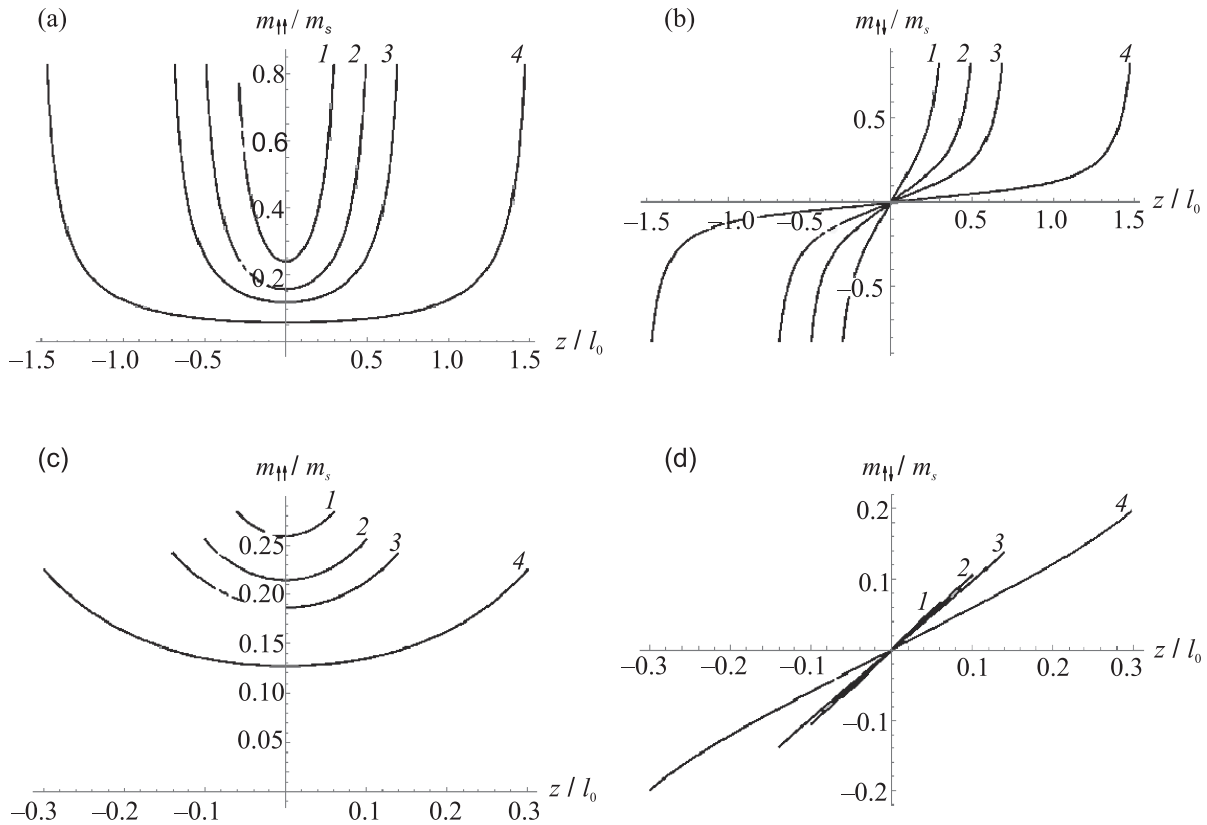


Рис. 2. Результаты расчета распределения намагниченности в пленке гадолиния, “зажатой” пленками железа (Fe/Gd/Fe) при параллельной (а) и антипараллельной (б) ориентации магнитных моментов пленок железа и различных толщинах прослойки гадолиния. На рисунке (с), (d) приведены аналогичные результаты для многослойной структуры $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}/\text{Ni}_{70}\text{Cu}_{30}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$. Здесь 1 – $d = 3$ нм; 2 – $d = 5$ нм; 3 – $d = 7$ нм; 4 – $d = 15$ нм

мы (5)–(7), мы рассчитали магнитокалорический потенциал для многослойных структур Fe/Gd/Fe и $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}/\text{Ni}_{70}\text{Cu}_{30}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$. Свойства парамагнитной прослойки для этих структур существенно различны (использованы данные, приведенные в [12]). В случае гадолиния, обменное взаимодействие на границе с ферромагнетиком велико ($l_J \approx 280$ нм), что приводит к намагничиванию прилегающего к границе слоя. Однако эта намагниченность быстро спадает вглубь пленки гадолиния, так как корреляционная длина мала ($l_0 \approx 5$ нм). На рисунке 2а, б представлены зависимости распределения магнитного момента по толщине пленки гадолиния при параллельной и антипараллельной ориентации магнитных моментов пленок железа, а на рис. 2а за зависимость магнитокалорического потенциала от температуры для различных толщин пленок гадолиния. Видно, что эта величина более чем на порядок меньше приведенного выше максимального значения. Несмотря на это, эффективность охлаждения для этой системы может достигать рекордного значения ~ 10 К/Тл и даже превосходить его. Про-

тивоположная ситуация реализуется в структурах с прослойкой $\text{Ni}_{0.7}\text{Cu}_{0.3}$. В этой системе масштаб спада намагниченности существенно (в пять раз) больше, чем в гадолинии ($l_0 = 25$ нм), но энергия обменного взаимодействия на границе с $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ ($l_J = 30$ нм) более, чем в девять раз меньше, чем для границы Fe/Gd. Таким образом, и для системы $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}/\text{Ni}_{70}\text{Cu}_{30}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ распределение намагниченности в прослойке существенно отличается от идеального (рис. 2с, d). Кроме того, для сплавов $\text{Ni}_{0.7}\text{Cu}_{0.3}$ магнитный момент насыщения относительно мал, что также сказывается на величине эффекта (рис. 3б).

Итак, согласно нашим расчетам, для наблюдения эффекта необходимо выполнение двух условий:

- существование сильной обменной связи на границе ферромагнетика и парамагнитной прослойки;
- наличие достаточно большой корреляционной длины в парамагнетике (по сравнению с толщиной пленки), что позволяет ферромагнитным берегам “чувствовать” друг друга.

Вопрос о справедливости соотношения Максвел-

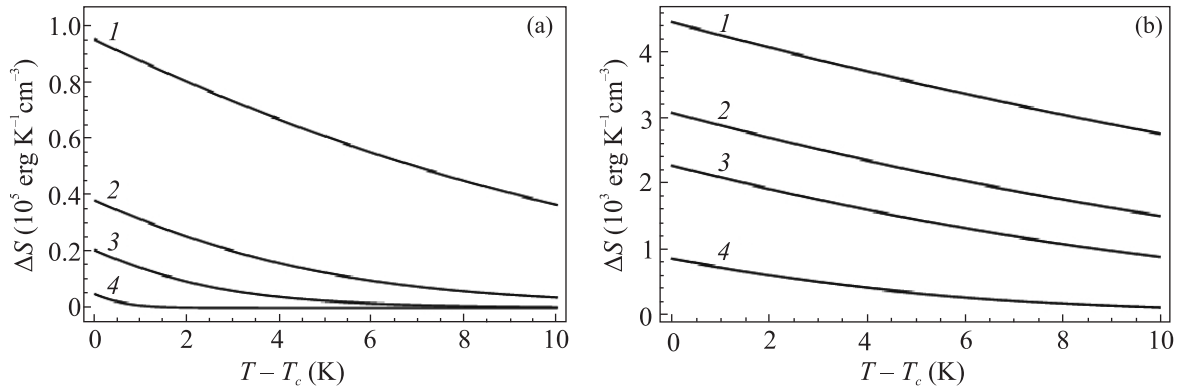


Рис. 3. Зависимость магнитокалорического потенциала от температуры для структур (a) Fe/Gd/Fe и (b) Co₉₀Fe₁₀/Ni₇₀Cu₃₀/Co₄₀Fe₄₀B₂₀ при различных толщинах парамагнитной прослойки. Здесь 1 – $d = 3$ нм; 2 – $d = 5$ нм; 3 – $d = 7$ нм; 4 – $d = 15$ нм

ла для рассматриваемой неоднородной системы является важным и нетривиальным. Действительно, выполнение соотношения Максвелла для однородных материалов очевидно. В неоднородных системах, к которым принадлежит рассмотренная трехслойная структура, намагниченность парамагнетика является функцией координат и не может непосредственно входить в соотношение Максвелла. В рамках теории среднего поля мы рассчитали $M(T, H)$ и $S(T, H)$ и показали, что соотношение $(dS/dH)_T = (dM/dT)_H$ выполняется с высокой точностью (рис. 4) в том случае, когда намагниченность и энтропия относятся ко всей системе

$$S = \frac{1}{d + 2d_F} \int_{-d/2}^{d/2} s dz,$$

$$\mathbf{M} = \frac{d_{Fe}(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) + \int_{-d/2}^{d/2} m dz}{d + 2d_{Fe}}, \quad (10)$$

где $\mathbf{M}_{1,2}$ – магнитные моменты ферромагнитных берегов. Доказательство справедливости соотношения Максвелла дает основание для использования косвенного магнитометрического метода изучения магнитокалорического эффекта. Учитывая обменную симметрию функционала (4), можно записать свободную энергию исследуемой системы в виде

$$F = F_0\{\mathbf{M}_1, \partial\mathbf{M}_1; \mathbf{M}_2, \partial\mathbf{M}_2; \mathbf{H} \dots\} + J(T, d, l_0, l_J \dots)(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2) + \dots, \quad (11)$$

$\partial\mathbf{M}$ – обозначение пространственных производных намагниченности. В этом выражении отброшены слагаемые, пропорциональные $(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2)^n$ ($n \geq 2$), вообще говоря, не запрещенные с симметрией точки

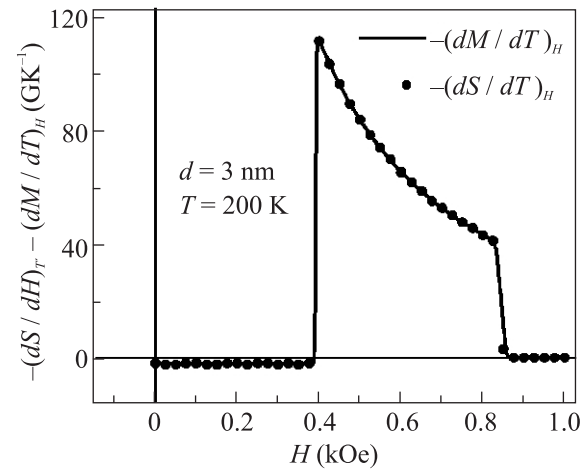


Рис. 4. Результаты проверки соотношения Максвелла для структуры Fe/Gd/Fe, выполненные в рамках приближения среднего поля [10]

зрения. Первое слагаемое описывает распределение намагниченности в ферромагнитных берегах и не зависит от температуры при условии, что температура Кюри ферромагнетиков много больше температуры образца. Второе слагаемое отвечает за обменное взаимодействие между ферромагнитными слоями через прослойку парамагнетика и существенно зависит от температуры при приближении последней к температуре Кюри материала прослойки. Отметим, что исследованию температурной зависимости межслойного взаимодействия в структурах ферромагнетик/парамагнетик посвящены работы [18–21]. Однако магнитокалорический эффект в этих работах не изучался. Энтропия системы прямо связана с производной межслойного обменного взаимодействия

$$S = -(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2)dJ/dT, \quad (12)$$

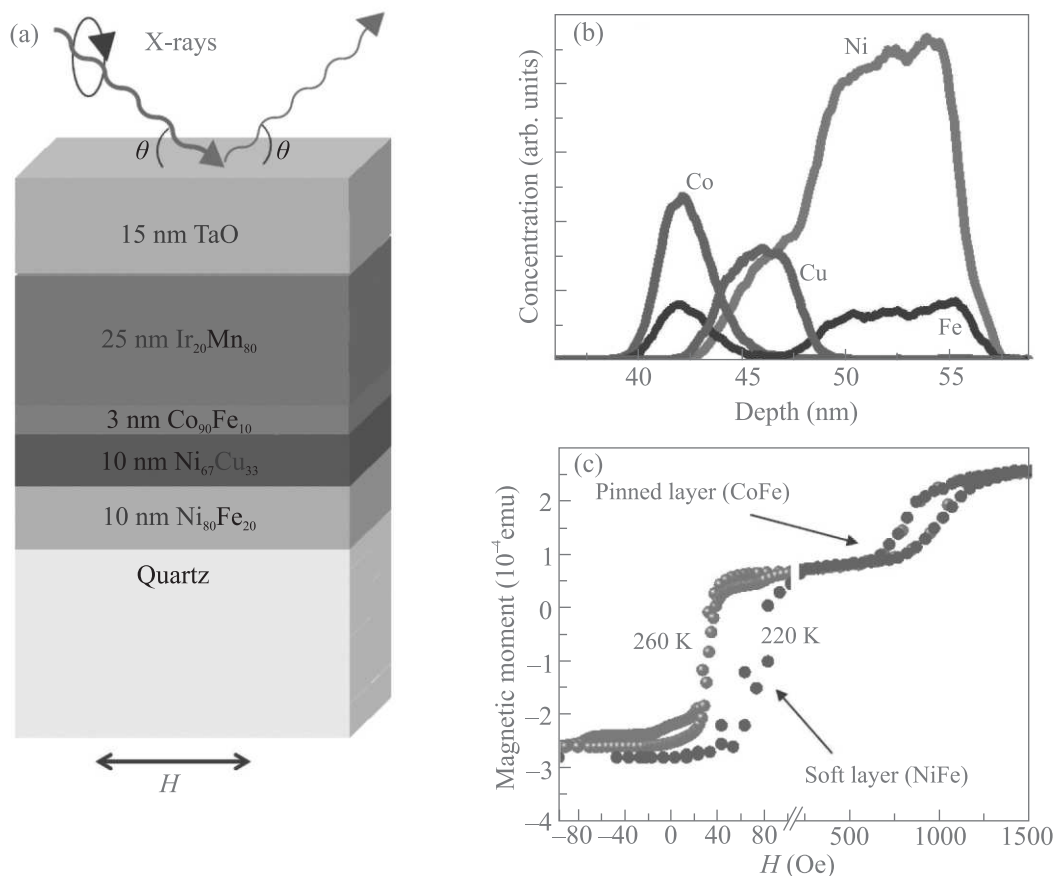


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Схема исследуемой многослойной структуры. (б) – Распределение элементов по глубине структуры, полученное методом вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС). (с) – Кривые намагничивания, снятые при различных температурах методом СКВИД-магнитометрии

что позволяет анализировать экспериментальные данные и определять магнитокалорический потенциал по измерениям намагниченности.

III. Эксперимент. Многослойные структуры ферромагнетик/парамагнетик были созданы методом магнетронного напыления с использованием многокамерной установки AJA 2200. Магнитный момент одного из ферромагнитных слоев был закреплен за счет контакта с антиферромагнетиком ($\text{Mn}_{80}\text{Ir}_{20}$), а другой слой оставался “свободным”, подобно тому, как это делается в структурах “спиновый клапан”. Между “закрепленным” и “свободным” ферромагнитными слоями помещалась парамагнитная прослойка твердого раствора $\text{Ni}_x\text{Cu}_{1-x}$ или Gd. Пленка $\text{Ni}_x\text{Cu}_{1-x}$ изготавливалась путем одновременного распыления мишеней никеля и меди. Детали получения структур описаны в работе [13]. На рисунке 5b в качестве примера представлено пространственное распределение компонент в многослойной структуре $\text{TaO}(15\text{нм})/\text{Ir}_{20}\text{Mn}_{80}(25\text{нм})/\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}(3\text{нм})/\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}$

$(10\text{нм})/\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}(10\text{нм})/\text{подложка (кварц)}$, полученное методом вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС). Магнитные свойства образцов измерялись методами вибро- и СКВИД-магнитометрии (Lake Shore 7400, MPMS-XL5 Quantum Design SQUID) в широком диапазоне температур. На рисунке 5с приведена зависимость полного магнитного момента указанной системы от внешнего магнитного поля. В области малых полей (< 100 Э) происходит перемагничивание “свободного” слоя (стрелка и надпись “soft layer” указывают на область полей, в которой перемагничивается NiFe). В области больших (~ 1000 Э) полей происходит перемагничивание “закрепленного” слоя (“pinned layer”, CoFe). Важно, что поле, при котором происходит перемагничивание пермаллоя, существенно зависит от температуры и изменяется от 70 Э при 220 К до 30 Э при 260 К. Это изменение связано с уменьшением величины эффективного межслойного взаимодействия (11) с ростом температуры. Детальное исследование температурного поведения системы и использо-

вание соотношения Максвелла позволило найти зависимость магнитокалорического потенциала от температуры при различных значениях толщины прослойки NiCu (рис. 6). Эти измерения показали,

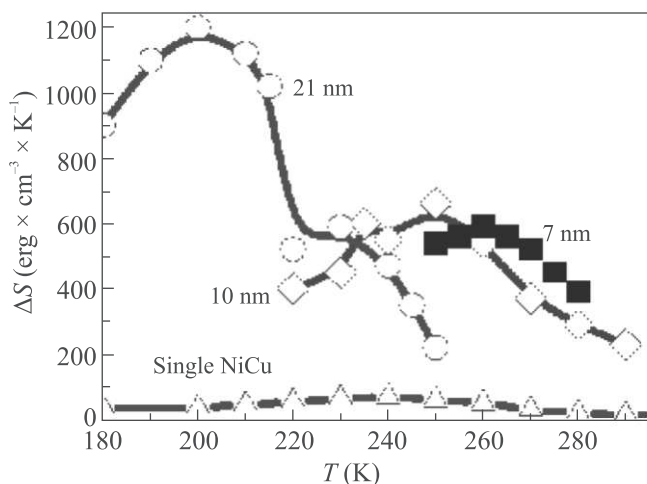


Рис. 6. (Цветной онлайн) Магнитокалорический потенциал исследуемой системы при различных толщинах парамагнитной прослойки, определенный из данных СКВИД-магнитометрии

что величина магнитокалорического потенциала (величина изменения энтропии при приложении магнитного поля) многослойной структуры почти на два порядка превышает потенциал изолированной пленки твердого раствора $\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}$ [22], что подтверждает гипотезу об усилении магнитокалорического эффекта в многослойных системах. С другой стороны, величина потенциала и возможное изменение температуры при адиабатическом размагничивании малы ($\Delta T \sim 0.01$ K). Экспериментальные данные хорошо совпадают с теоретическими расчетами [16]. Это означает, что для дальнейшего усиления эффекта необходимо переходить к другим материалам в многослойных структурах “сильный”/“слабый” ферромагнетик. Например, большего эффекта следует ожидать от систем с прослойкой гадолиния. Первые эксперименты показали [15], что для усиления эффекта толщина пленки гадолиния, в соответствии с нашим расчетом, должна быть меньше 5 нм.

Информативным методом изучения магнитного состояния парамагнитной прослойки и магнитокалорического эффекта в исследуемой системе является метод рентгеновского магнитного кругового дихроизма (ХМCD), позволяющий по отдельности измерять магнитные моменты элементов, составляющих гетероструктуру. В основе метода лежит зависимость поглощения рентгеновского излу-

чения от скалярного произведения магнитного момента данного элемента и направления циркулярной поляризации излучения. Мы провели подобные элементарно-селективные измерения, используя метод рентгеновской магнитной рефлектометрии (RXMR) [23–25]. Эти эксперименты были проведены на синхротроне BESSYII и заключались в измерении разности коэффициентов отражения лево- и правополяризованного излучения с длинами волн, соответствующими L_3 -линиям поглощения железа ($E = 708$ эВ) и никеля ($E = 852.8$ эВ) [17]. Измерения этой разности для различных температур и магнитных полей позволили определить кривые намагничивания для слоев, содержащих атомы железа и никеля по отдельности. Геометрия эксперимента схематически представлена на рис. 5 а. На рисунке 7 приводятся кривые намагничивания подсистем Fe (а) и Ni (b) в исследуемой многослойной структуре (рис. 5а). Как и для “интегрального” измерения кривой намагничивания (рис. 5b), для каждого из элементов наблюдаются две области, которые естественно связать с перемагничиванием “свободного” и “закрепленного” слоев. Для железа такое поведение очевидно в силу наличия атомов этого элемента как в “свободном” ($\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$), так и в “закрепленном” ($\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$) слое. Существование особенности в перемагничивании никеля при больших полях прямо свидетельствует об обменной связи прослойки $\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}$ с пленкой $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$, так как нет иной возможности для воздействия закрепления на границе с антиферромагнетиком на слои, содержащие никель. Обращает на себя внимание также факт увеличения амплитуды петли гистерезиса (*switching amplitude*) подсистемы Ni с увеличением температуры от 220 до 260 K в результате увеличения магнитного контраста на границе $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}/\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}$. Такое поведение подсистемы Ni указывает на близость температуры измерений (220–260 K) к температуре Кюри прослойки $\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}$.

IV. Заключение. Итак, проведенные расчеты указывают на возможность существенного увеличения эффективности магнитного охлаждения в гетеросистемах “сильный”/“слабый” ферромагнетик. Эксперименты по изучению магнитокалорического эффекта в многослойных структурах $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}/\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}/\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ подтверждают эти выводы. Однако тех значений эффективности охлаждения, которые позволяют говорить о возможности использования подобных структур, пока достичь не удалось. Для решения проблемы требуется продолжить поиск оптимальных материалов многослойной структуры. При этом наиболее очевидным решением представляется использование в качестве прослойки

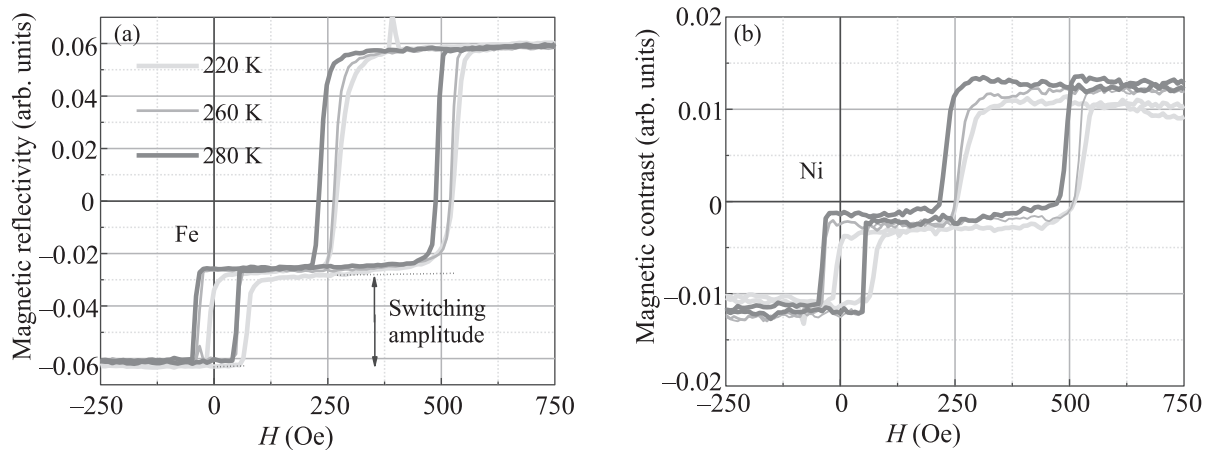


Рис. 7. Кривые намагничивания при различных температурах для (а) железа и (б) никеля, полученные методом рентгеновской магнитной рефлектометрии (RXMR)

“слабого” ферромагнетика пленок гадолиния. Представляет интерес переход на антиферромагнитные прослойки, что существенно расширяет возможный круг материалов [26, 27]. Обсуждая возможность использования тонкопленочных холодильников на основе многослойных структур, следует отметить возможность организации цикла охлаждения. Для реализации такого цикла требуется разработка термических ключей, которые позволят устанавливать (прерывать) тепловой контакт между тепловыми резервуарами и рабочим телом (магнитной многослойной структурой). В качестве таких ключей могут использоваться магнитные структуры, обладающие эффектом гигантского магнитосопротивления [28, 29]. Создание подобных устройств представляет отдельную проблему и ее обсуждение выходит далеко за рамки этого обзора [30].

Идея обменного усиления магнитокалорического эффекта допускает возможность перехода к трехмерным наноструктурированным материалам. Эти системы могут представлять собой наночастицы “сильного” ферромагнетика, внедренные в матрицу “слабого” ферромагнетика или парамагнетика. Высокая магнитная восприимчивость такой наносистемы будет достигаться за счет наночастиц “сильного” ферромагнетика, а роль рефрижеранта принадлежит матрице, которая связана с частицами за счет эффекта магнитной близости. Следует отметить, что магнитокалорический эффект в подобных системах, получивших название аморфных сплавов, изучался ранее [31–33]. Были получены сравнительно большие значения магнитокалорического потенциала, но еще уступающие рекордным значениям. Возможно, что состав и геометриче-

ские характеристики распределения частиц в этих работах не были оптимальными и исследования магнитокалорического эффекта в гранулированных сплавах следует продолжить.

Представленные в этом обзоре результаты получены в ходе выполнения проектов Российского фонда фундаментальных исследований (# 17-02-00620; # 20-02-00356) большим коллективом авторов из Института физики микроструктур РАН (С. Н. Вдовичев, М. Н. Дроздов, М. А. Кузнецов, И. Ю. Пашенькин, Н. И. Полушкин, М. В. Сапожников, Д. А. Татарский), МГУ им. М. В. Ломоносова (И. Д. Родионов, В. Н. Прудников), Института физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН (Е. А. Кравцов), Института физических проблем им. П. Л. Капицы (А. Б. Дровосеков), Корейского института науки и технологий (KIST, J. Chang), Лаппеенрантского технологического университета (LUT, Е. Fadeev, Е. Lahderanta), Берлинского центра материалов и энергии им. Гельмгольца (Е. Weschke).

1. A. Smith, Eur. Phys. J. H **38**, 507 (2013).
2. A. M. Tishin and Y. I. Spichkin, *The Magnetocaloric Effect and Its Application*, IOP Publishing Ltd., Bristol, Philadelphia (2003).
3. V. K. Pecharsky and A. Gschneidner, J. Appl. Phys. **86**, 565 (1999).
4. К. П. Белов, УФН **65**, 207 (1958).
5. H. Oestereicher and F. T. Parker, J. Appl. Phys. **55**, 4334 (1984).
6. A. Gschneidner, Jr., V. K. Pecharsky, and A. O. Tsokol, Rep. Prog. Phys. **68**, 1479 (2005).

7. И.Д. Родионов, Ю.С. Кошкидько, Я. Цвик, А. Кюйтц, С. Пандей, А. Арял, И.С. Дубенко, Ш. Стадлер, Н. Али, И.С. Титов, М. Блинов, М.В. Прудникова, В.Н. Прудников, Э. Ладеранта, А.Б. Грановский, Письма в ЖЭТФ **101**, 419 (2015).
8. К.Р. Belov, E.V. Talalaeva, L.A. Chernikova, V.I. Ivanovskii, and T.V. Kydryavtseva, JETP Lett. **9**, 416 (1969).
9. A. Kitanovski, Adv. Energy Mater. **10**(10), 1903741 (2020).
10. А.А. Фраерман, И.А. Шерешевский, Письма в ЖЭТФ **101**, 693 (2015).
11. D. Schwenk, F. Fishman, and F. Schwabl, Phys. Rev. B **38**, 11618 (1988).
12. М.А.Кузнецов, А. Дровосеков, А.А. Фраерман, ЖЭТФ **159**, 95 (2021).
13. S.N. Vdovichev, N.I. Polushkin, I.D. Rodionov, V.N. Prudnikov, J. Chang, and A.A. Fraerman, Phys. Rev. B **98**, 014428 (2018).
14. D.M. Polishchuk, Yu.O. Tykhonenko-Polishchuk, E. Holmgren, A.F. Kravets, A.I. Tovstolytkin, and V. Korenivski, Phys. Rev. Materials **2**, 114402 (2018).
15. N.I. Polushkin, I.Y. Pashenkin, E. Fadeev, E. Lahderanta, and A.A. Fraerman, J. Magn. Magn. Mater. **491**, 165601 (2019).
16. М.А. Kuznetsov, I.Y. Pashenkin, N.I. Polushkin, M.V. Sapozhnikov, and A.A. Fraerman, J. Appl. Phys. **127**, 183904 (2020).
17. N.I. Polushkin, E.A. Kravtsov, S.N. Vdovichev, D.A. Tatarskiy, M.N. Drozdov, E. Weschke, and A.A. Fraerman, J. Magn. Magn. Mater. **497**, 165930 (2020).
18. A.F. Kravets, A.N. Timoshevskii, B.Z. Yanchitsky, M.A. Bergmann, J. Buhler, S. Andersson, and V. Korenivski, Phys. Rev. B **86**, 214413 (2012).
19. A.F. Kravets, Y.I. Dzhezheriya, A.I. Tovstolytkin, I.M. Kozak, A. Gryshuk, Y.O. Savina, V.A. Paschenko, S.L. Gnatchenko, B. Koop, and V. Korenivski, Phys. Rev. B **90**, 104427 (2014).
20. A.F. Kravets, D.M. Polishchuk, Y.I. Dzhezheriya, A.I. Tovstolytkin, V.O. Golub, and V. Korenivski, Phys. Rev. B **94**, 064429 (2016).
21. A.F. Kravets, A.I. Tovstolytkin, Y.I. Dzhezheriya, D.M. Polishchuk, I.M. Kozak, and V. Korenivski, J. Phys. Condens. Matter **27**, 446003 (2015).
22. S. Michalski, R. Skomski, X.-Z. Li, D. Le Roy, T. Mukherjee, Ch. Binek, and D.J. Sellmyer, J. Appl. Phys. **111**, 07A930 (2012).
23. J.P. Hannon, G.T. Trammell, M. Blume, and D. Gibbs, Phys. Rev. Lett. **61**, 1245 (1988).
24. D. Haskel, G. Srajer, J.C. Lang, J. Pollmann, C.S. Nelson, J.S. Jiang, and S.D. Bader, Phys. Rev. Lett. **87**, 207201 (2001).
25. Y. Choi, D. Haskel, R.E. Camley, D.R. Lee, J.C. Lang, G. Srajer, J.S. Jiang, and S.D. Bader, Phys. Rev. B **70**, 134420 (2004).
26. D.M. Polishchuk, Yu.O. Tykhonenko-Polishchuk, O.V. Gomonay, and V. Korenivski, arXiv:2010.11134v1.
27. R. Cheng, D. Xiao, and J.-G. Zhu, Phys. Rev. Lett. **121**, 207202 (2018).
28. J. Kimling, R.B. Wilson, K. Rott, J. Kimling, G. Reiss, and D.G. Cahill, Phys. Rev. B **91**, 144405 (2015).
29. G. Wehmeyer, T. Yabuki, C. Monachon, J. Wu, and C. Dames, Appl. Phys. Rev. **4**, 041304 (2017).
30. T. Thanveer, R.V. Ramanujan, and S. Thomas, AIP Adv. **6**, 055322 (2016).
31. P. Didukh and A. Slawska-Waniewska, J. Magn. Magn. Mater. **254–255**, 407 (2003).
32. V. Franco, J.S. Blázquez, M. Millán, J.M. Borrego, C.F. Conde, and A. Conde, J. Appl. Phys. **101**, 09C503 (2007).
33. R. Zhu, X. Kan, X. Liu, M. Shezad, W. Wang, Ch. Liu, W. Yang, Zh. Wang, and Z. Chen, J. Magn. Magn. Mater. **484**, 253 (2019).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 113

Выпуск 6

25 марта 2021

*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>

Фемтосекундная лазерная ИК-спектроскопия характеристических молекулярных колебаний бактерий в области 6 мкм

В. О. Компанец⁺, С. И. Кудряшов^{*1)}, Э. Р. Толордава^{*×}, С. Н. Шелыгина^{*}, В. В. Соколова^{*°}, И. Н. Сараева^{*},
М. С. Ковалев[∇], А. А. Ионин^{*}, С. В. Чекалин⁺

⁺ Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Россия

^{*} Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

[×] Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии им. Н. Ф. Гамалеи, 123098 Москва, Россия

[°] Биологический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

[∇] Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 105005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 февраля 2021 г.

После переработки 4 февраля 2021 г.

Принята к публикации 17 февраля 2021 г.

Исследованы спектры пропускания фемтосекундных лазерных импульсов среднего ИК-диапазона (5–6.6 мкм) субмонослоем бактерий *Staphylococcus aureus* и *Pseudomonas aeruginosa* на кремниевой подложке в области характеристических полос поглощения белков и липидов, а также стационарные спектры после облучения. При облучении обнаружено обратимое “просветление” образцов в области характеристических полос поглощения бактерий и “синий” сдвиг этих полос, указывающий на разрыв водородных связей. Обсуждается возможность инактивации патогенных бактерий путем селективного ИК-лазерного денатурирования функциональных белков резонансным облучением низкой средней мощности.

DOI: 10.31857/S1234567821060021

1. Излучение среднего ИК-диапазона, традиционно используемое в методах термической и УФ обработки, рассматривается также в применении к инактивации патогенных бактерий [1, 2]. Одним из возможных путей ИК-инактивации бактерий является денатурирование функциональных белков (полипептидов) в результате разрушения водородных связей, придающих белкам вторичную и третичную структуру [2, 3]. Белки в клетках осуществляют важные метаболические функции, реализующиеся через активацию биокаталитических реакций, перенос электрона и конформационные превращения [4–7]. Поэтому миграция и релаксация энергии колебательно-го возбуждения в структуре белков определяют направления, скорости и эффективности вышеупомянутых процессов. Для их исследования в реальном масштабе времени методами сверхбыстрой спектроскопии [6, 7], а также для многофотонного колебательного возбуждения [5] используются субпикосекундные ($\sim 10^2$ фс)-лазерные импульсы.

Модификация спектра ИК-поглощения олигомеров аминокислот (пептидов) и простых подобных

им молекул в водных растворах под действием фемтосекундных лазерных импульсов среднего ИК-диапазона в контексте трансформации вторичной структуры исследовалась в работах [6, 7] (более широкие и общие обзоры см. в [4, 8–10]). В ИК-областях вблизи 3 и 6 мкм измерялись дифференциальное поглощение и скорость внутримолекулярной релаксации для колебаний О–Н, N–Н и С–Н, а также амидных колебаний С=О (тип I) и С–N (тип II), связанных с ангармонизмом высших колебательно-возбужденных состояний и вызванным им “красным” спектральным сдвигом полос поглощения [6]. Однако непосредственно в бактериях, где полосы амидных колебаний белков перекрываются с полосами аналогичных колебаний в липидах и других молекулах, оптические исследования до сих пор не проводились. Между тем, воздействие ИК излучения на такие сложные биологические системы, как бактерии, может иметь свою специфику из-за наличия в них системы водородных связей. Даже в простых молекулах воды отмечался “синий” спектральный сдвиг колебательных полос поглощения в результате изменения окружения О–Н фрагментов из-за разрыва водородных связей под воздействием фемтосекундного

¹⁾ e-mail: kudryashovsi@lebedev.ru

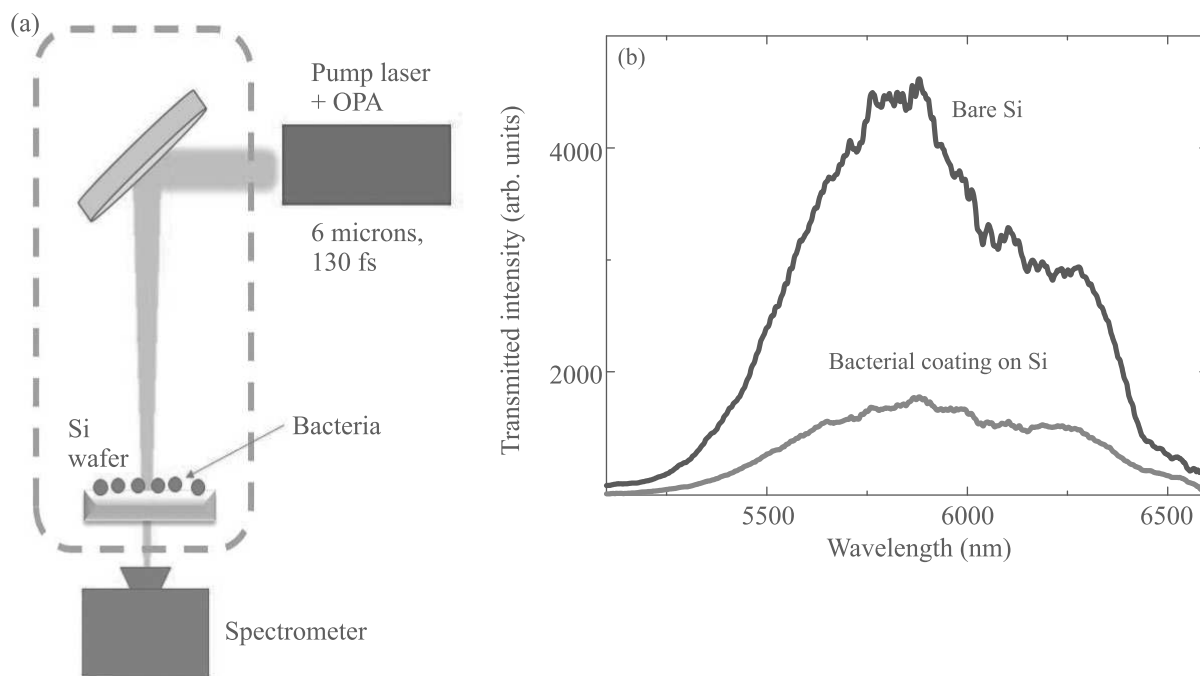


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схематичная экспериментальная измерительная схема: ОПА – параметрический усилитель; (б) – типичные спектры прошедшего излучения ИК-УКИ для чистой кремниевой пластины и пластины с бактериальным покрытием при пиковой интенсивности на поверхности пластины 5 ГВт/см^2 (режим “strong pump”)

ИК излучения [11]. Важно отметить, что в сложных белковых молекулах разрушение определенной критической доли водородных связей фактически означает их денатурацию, т.е. инактивацию их функций.

В настоящей работе для определения возможности инактивации бактерий по механизму селективного денатурирования белков экспериментально исследовано изменение ИК-поглощения образцов патогенных бактерий при их интенсивном колебательном возбуждении УКИ в области характеристических колебаний функциональных белков и липидов. Измерения проводились в ходе многоимпульсного воздействия при экспозиции в 20 с, а также в стационарном режиме после воздействия.

2. В наших экспериментах измерялись коэффициенты ИК-пропускания пластины кремния – чистой (контроль) и с нанесенными бактериями, установленными перед щелью ИК-спектрометра (рис. 1а). Бактерии изолятов культур золотистого стафилококка (*Staphylococcus aureus*, SA) и синегнойной палочки (*Pseudomonas aeruginosa*, PA), взятые из коллекции НИЦЭМ им. Н. Ф. Гамалеи, в планктонной форме высаживались на p -легированных (фосфор, 10^{17} см^{-3}) пластинах кремния толщиной 0.5 мм в неопасных следовых количествах в виде бактериального покрытия (субмонослоя) с известными спек-

трами оптической плотности в ИК-диапазоне и возбуждались в области колебаний C–N и C=O колебаний амидо-групп (≈ 1500 и 1750 см^{-1} , рис. 2).

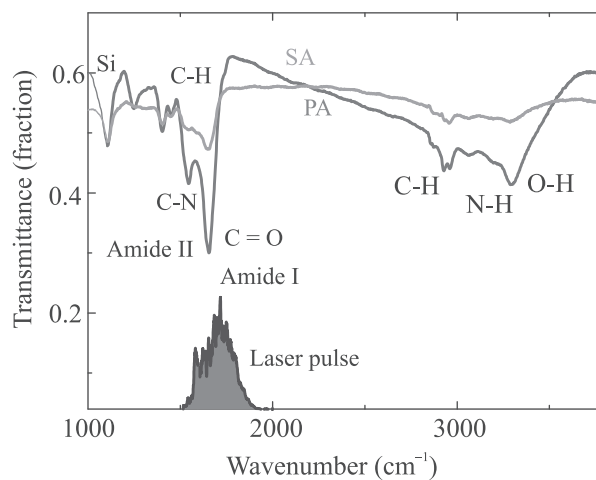


Рис. 2. (Цветной онлайн) Стационарные спектры пропускания бактериальных покрытий золотистого стафилококка (SA) и синегнойной палочки (PA). Для сравнения внизу показан спектр УКИ

Стационарные спектры оптической плотности бактериального покрытия в диапазоне 2.5–25 мкм ($400\text{--}4000 \text{ см}^{-1}$) – за вычетом оптической плотности чи-

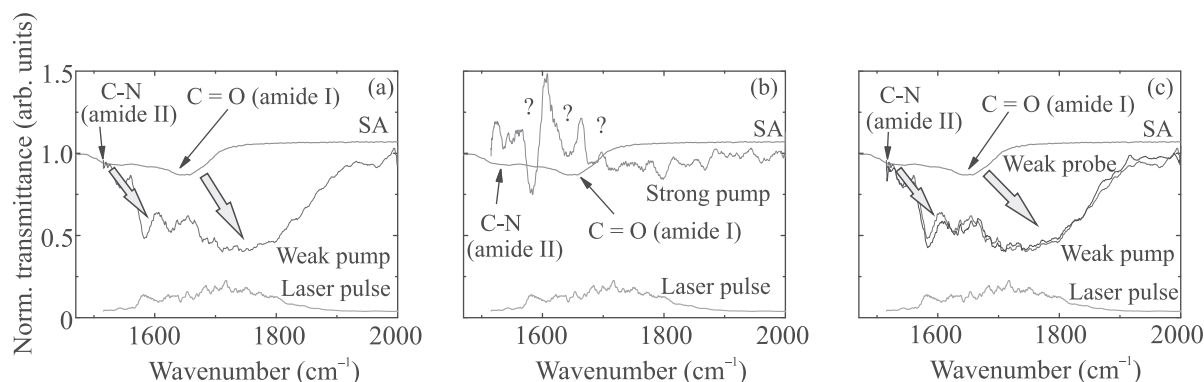


Рис. 3. (Цветной онлайн) Динамические спектры пропускания для бактериального покрытия золотистого стафилококка (SA) с характеристическими полосами (стационарный контрольный спектр для “нулевой интенсивности”) для различной пиковой интенсивности УКИ: (a) – 0.3 ГВт/см² (свежий участок, weak pump); (b) – 5 ГВт/см² (облучение участка в случае (a), strong pump), (c) – 0.3 ГВт/см² (случай (a), weak pump) и 0.3 ГВт/см² (зондирование участка в случае (b), weak probe). Для сравнения внизу показан спектр УКИ

стой кремниевой пластины – снимались с помощью фурье-ИК-спектрометра Vertex V-70 (Брукер).

При проведении экспериментов образец располагался перед входной щелью спектрометра по нормали к оптической оси излучения, сфокусированного на щель сферическим зеркалом с фокусным расстоянием 150 мм. Излучение лазерных импульсов среднего ИК-диапазона (центральная длина волны – 5.8 мкм, полуширина – 0.6 мкм) с длительностью 130 фс, энергией в импульсе до 2 мкДж и частотой следования 1 кГц получалось преобразованием излучения титан-сапфирового лазера (Spitfire HP, Spectra-Physics, центральная длина волны – 800 нм, частота следования – 1 кГц, длительность импульса на полувысоте – 50 фс) в параметрическом усилителе с генератором разностной частоты “OPA TOPAS-C + nDFG” (Light Conversion) [12]. Пиковая интенсивность УКИ на поверхности образца составляла 5 ГВт/см² без фильтров и 0.3 ГВт/см² после ослабления набором нейтральных металлизированных фильтров на подложках BaF₂. Полученные спектры прошедшего излучения УКИ для образцов с бактериями нормировались на спектр прошедшего излучения для контрольной чистой кремниевой пластины (рис. 1b), в итоге давая динамический спектр пропускания бактериального покрытия (рис. 3, 4).

3. Сравнение стационарных и динамических спектров пропускания бактериального покрытия золотистого стафилококка и синегнойной палочки для различных величин пиковой интенсивности падающих УКИ представлено на рис. 3, 4. На них видны характеристические полосы поглощения бактерий, связанные в области $\approx 1650\text{--}1750\text{ см}^{-1}$ с валентными C=O колебаниями эфирных и карбоксильных

групп жирных кислот липидного слоя мембраны бактерий, нуклеиновых кислот, амидных групп α -, β - и антипараллельных вторичных структур белков [13]. Соседняя полоса C-N колебаний амидных групп в области около $\approx 1520\text{--}1550\text{ см}^{-1}$ связана преимущественно с белками. Далее в “красной” области располагаются C-H колебания углеводородного скелета ($\approx 1450\text{ см}^{-1}$), а также симметричные валентные C=O колебания свободных карбоксильных групп [13].

В случае обоих типов бактерий 20-секундное воздействие низкоинтенсивных УКИ (“weak pump”, пиковая интенсивность – 0.3 ГВт/см²) приводит к усилению характеристического поглощения в диапазоне $1550\text{--}1900\text{ см}^{-1}$ и выраженному “синему” спектральному сдвигу его полос на $\approx 100\text{ см}^{-1}$ (рис. 3а, 4а), который может быть связан с разрушением водородных связей и в случае воды достигать 300 см^{-1} [11]. При более интенсивной 20-секундной накачке (пиковая интенсивность – 5 ГВт/см²) того же участка бактериального покрытия наблюдалась сильная модификация спектра (кривые “strong pump” рис. 3b, 4b), не нашедшая пока объяснения. Однако эта модификация имеет обратимый характер, так как при повторном 20-секундном облучении того же участка бактериального покрытия низкоинтенсивными УКИ (“weak probe”, рис. 3с, 4с, пиковая интенсивность – 0.3 ГВт/см²) хорошо воспроизводится спектр начальной низкоинтенсивной накачки на рис. 3а и 4а.

Последующая стационарная ИК-спектроскопия облученных образцов показывает заметную модификацию полос характеристического поглощения для покрытия золотистого стафилококка и практически отсутствие изменения для покрытия синегнойной па-

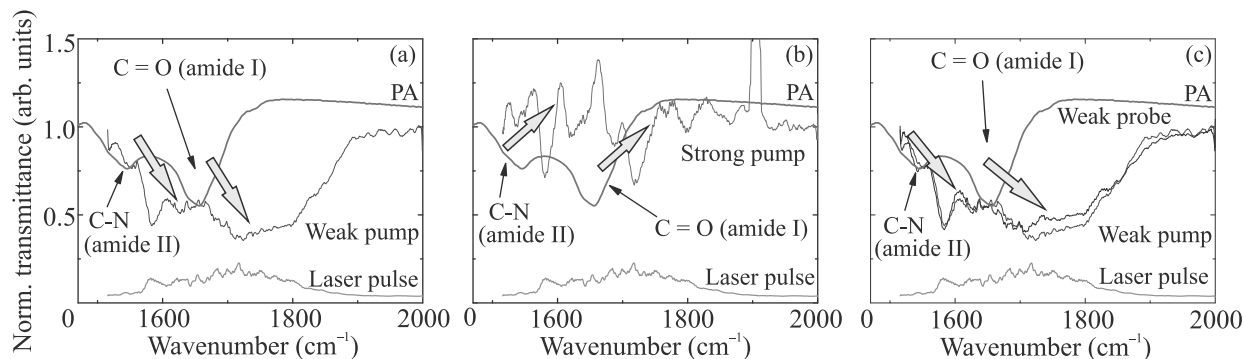


Рис. 4. (Цветной онлайн) Динамические спектры пропускания для бактериального покрытия синегнойной палочки (РА) с характеристическими полосами (стационарный контрольный спектр для “нулевой интенсивности”) для различной пиковой интенсивности УКИ: (а) – 0.3 ГВт/см^2 (свежий участок, weak pump); (б) – 5 ГВт/см^2 (после облучения в случае (а), strong pump), (с) – 0.3 ГВт/см^2 (случай (а), weak pump) и 0.3 ГВт/см^2 (после облучения в случае (б), weak probe). Для сравнения внизу показан спектр УКИ

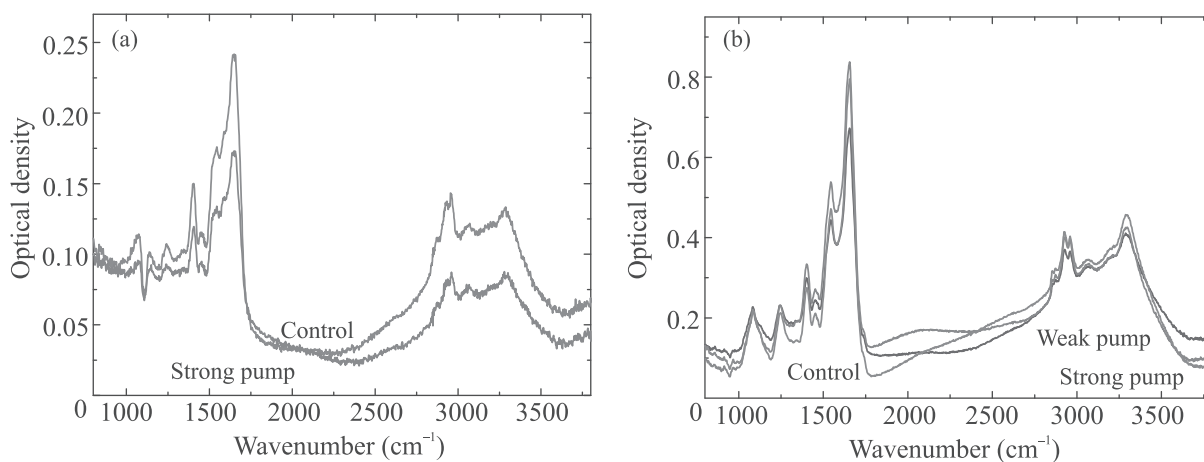


Рис. 5. (Цветной онлайн) Стационарные спектры оптической плотности для лазерно-облученных и необлученных (контрольных) бактериальных покрытий золотистого стафилококка ((а), SA) и синегнойной палочки ((б), РА) с характеристическими полосами поглощения в области $800\text{--}3800 \text{ см}^{-1}$

лочки, причем в первом случае изменения имеют место в более широком диапазоне $1000\text{--}3800 \text{ см}^{-1}$ (рис. 5), чем относительно узкий диапазон лазерного воздействия – $1500\text{--}1900 \text{ см}^{-1}$ (рис. 2). Это может указывать на ожидаемый внутримолекулярный перенос энергии [4–12], пространственно расширяющий область воздействия лазерного излучения вне амидных групп. Детальные исследования причин изменений в спектрах облученных образцов и жизнеспособности облученных бактерий будут представлены в последующих работах, однако уже сейчас можно отметить, что наблюдаемая итоговая модификация химической структуры может указывать на лазерную инактивацию бактерий. Заметим, что предшествующие исследования стационарной ИК-обработки бактерий также показали значительный эффект инак-

тивации только в области 6 мкм при его отсутствии в областях 3 и 4.5 мкм [2].

Оценим характерные уровни интенсивности и средней мощности УКИ для инактивации использованных культур бактерий. Поскольку использованный в работе спектр лазерных УКИ с центральной длиной волны около 5.8 мкм (волновое число – 1700 см^{-1} , рис. 1б) позволяет возбуждать только C=O (полоса B_1) и C–N (полоса B_2) колебания амидных групп белков, действующая интенсивность в каждом конкретном спектральном диапазоне отличается от пиковой интенсивности всего импульса $I_0 \approx 5 \text{ ГВт/см}^2$ (рис. 2). В частности, действующая интенсивность $I_{B_{1,2}}$ определяется интегрированием и нормировкой спектра УКИ в пределах соответствующих полос $B_{1,2}$

$$I_{Bi} \approx I_0 \frac{\int f(\lambda) d\lambda}{\oint f(\lambda) d\lambda}. \quad (1)$$

Согласно численным оценкам, величины $I_{B1,2}$ для золотистого стафилококка составляют 2.5 и 0.84 ГВт/см² – 50 и 17 %, соответственно, а для синегнойной палочки – 2.4 и 0.35 ГВт/см² (48 и 7 %, соответственно). Соответствующие средние мощности излучения при частоте следования импульсов 1 кГц лежат в диапазоне ~ 0.01 –1 мВт, что позволяет говорить о воздействии лазерного излучения низкой мощности.

4. В заключение, многоимпульсное облучение субмонослойного покрытия из бактерий *Staphylococcus aureus* и *Pseudomonas aeruginosa* на кремниевой подложке низкоинтенсивными (~ 0.1 –10 ГВт/см²) фемтосекундными лазерными импульсами среднего ИК-диапазона (5–6.6 мкм) демонстрирует обратимое относительное “просветление” образцов для спектральных интервалов в области характеристических полос поглощения белков, нуклеотидов и липидов бактерий и “синий” сдвиг этих полос поглощения, потенциально указывающий на разрыв водородных связей. Значительные изменения в спектрах стационарного пропускания облученных образцов в среднем ИК-диапазоне позволяют предположить возможность инактивации патогенных бактерий путем селективного ИК-лазерного разрыва критического количества водородных связей и связанного с этим необратимого денатурирования функциональных органелл резонансным облучением низкой мощности.

1. D. Hamanaka, T. Uchino, N. Furuse, W. Han, and S. I. Tanaka, *Int. J. Food Microbiol.* **108**(2), 281 (2006).
2. A. A. Oduola, R. Bowie, S. A. Wilson, Z. Mohammadi Shad, and G. G. Atungulu, *J. Food Saf.* **40**(2), e12764 (2020).
3. В. Эллиот, Д. Эллиот, *Биохимия и молекулярная биология*, МАИК, Наука/Интерпериодика, М. (2002).
4. D. Laage, T. Elsaesser, and J. T. Hynes, *Chem. Rev.* **117**(16), 10694 (2017).
5. C. Kolano, J. Helbing, M. Kozinski, W. Sander, and P. Hamm, *Nature* **444**(7118), 469 (2006).
6. L. P. DeFlores, Z. Ganim, S. F. Ackley, H. S. Chung, and A. Tokmakoff, *J. Phys. Chem. B* **110**(38), 18973 (2006).
7. E. H. Backus, P. H. Nguyen, V. Botan, R. Pfister, A. Moretto, M. Crisma, C. Toniolo, G. Stock, and P. Hamm, *J. Phys. Chem. B* **112**(30), 9091 (2008).
8. V. N. Bagratashvili, V. S. Letokhov, A. A. Makarov, and E. A. Ryabov, *Multiple Photon Infrared Laser Photophysics and Photochemistry*, Harwood Acad. Publ., Chur (1985).
9. A. A. Макаров, А. Л. Малиновский, and Е. А. Рябов, *УФН* **182**(10), 1047 (2012).
10. E. T. Nibbering, H. Fidler, and E. Pines, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **56**, 337 (2005).
11. H. K. Nienhuys, S. Woutersen, R. A. van Santen, and H. J. Bakker, *J. Chem. Phys.* **111**(4), 1494 (1999).
12. В. О. Компанец, В. Н. Лохман, Д. Г. Пойдашев, С. В. Чекалин, Е. А. Рябов, *ЖЭТФ* **149**(4), 723 (2016).
13. K. Maquelin, C. Kirschner, L. P. Choo-Smith, N. van den Braak, H. P. Endtz, D. Naumann, and G. J. Puppels, *Journal of Microbiological Methods* **51**(3), 255 (2002).

Компрессия потока убегających электронов в воздушном зазоре с неоднородным магнитным полем

М. А. Гашков⁺, Н. М. Зубарев⁺⁺¹⁾, О. В. Зубарева⁺, Г. А. Месяц^{++*}, К. А. Шарыпов⁺, В. Г. Шпак⁺,
С. А. Шунайлов⁺, М. И. Яландин^{++*}

⁺Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

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

Поступила в редакцию 15 января 2021 г.

После переработки 30 января 2021 г.

Принята к публикации 4 февраля 2021 г.

Представлены первые результаты исследования компрессии пикосекундного потока убегających электронов (УЭ) в воздушном электродном промежутке посредством импульсного ведущего магнитного поля, нарастающего вдоль траектории частиц в 10–20 раз. Основной целью являлось увеличение плотности и однородности тока УЭ, генерируемых у кромки трубчатого катода и ускоряющихся в неоднородном электрическом поле до коллектора внутри соленоида. Проведен анализ ограничений на интегральный ток УЭ, возникающих из-за отражения частиц с высокими поперечными скоростями от области сгущения силовых линий магнитного поля (магнитного зеркала). В “оптимальных” условиях (менялась величина магнитного поля, диаметр катода и его положение относительно соленоида) образуется (3–4)-хратно радиально сжатый трубчатый замагниченный поток УЭ с плотностью тока до 100 А/см².

DOI: 10.31857/S1234567821060033

1. Введение. Интерес к исследованиям непрерывного ускорения (убегания) электронов в газе и плазме [1–3], связан с многочисленными проявлениями этого эффекта в природных и лабораторных условиях (см., например, [4–12] и ссылки там). Согласно современным представлениям о потоках убегających электронов (УЭ) в газоразрядных промежутках, их формирование – это пикосекундный процесс [13], энергия определяется ускорением в динамическом электрическом поле [12–15], а пространственная структура из-за малой длительности представляет собой сравнительно тонкий слой, расширяющийся при движении к аноду [16, 17]. Этот слой неоднороден из-за дискретности центров автоэлектронной эмиссии (АЭЭ) на катоде, порождающих субмиллиметровые плазменные образования в прикатодной области [11, 18]. Если вблизи них электрическое поле (E) превысит критическое для убегания электронов значение (E_{cr}), то тепловые электроны на плазменной границе перейдут в режим убегания, т.е. будут получать от поля больше энергии, чем терять в неупругих столкновениях с молекулами газа. Ввиду хаотической локализации центров АЭЭ, распределение плотности тока УЭ неравномерно, а регистрируемый коллекторами ограниченного размера ток

УЭ нестабилен по амплитуде и длительности. Это осложняет применение источников ультракоротких потоков УЭ в задачах [19–21], где требуется стабильность, повышенная плотность и однородность тока на мишени.

Настоящее письмо открывает цикл работ, посвященных компрессии потока УЭ магнитным полем по аналогии с инжекторными и магнитными системами гирорезонансных вакуумных СВЧ приборов (рис. 1а) и процессами в открытых магнитных ловушках – пробкотронах (рис. 1б) [22, 23]. Этот подход, не применявшийся ранее к формированию потока УЭ в газовом промежутке, позволяет существенно увеличить его плотность и однородность.

2. Общие замечания. В прототипе на рис. 1а эмиссия электронов термокатодом в форме пояски происходит в скрещенных (почти ортогональных) электрическом и магнитном полях E и B . Вблизи эмиттера реализуются условия для циклотронных осцилляций электронов с большой орбитой. При движении вдоль линий магнитного поля в сторону увеличения их плотности, в силу адиабатической инвариантности магнитного момента частиц $\mu = mv_{\perp}^2/(2B)$, их поперечная скорость $v_{\perp}$ увеличивается (m – масса электрона). Подбором пробочного отношения $K \equiv B_{\max}/B_{\min}$ продольная скорость $v_{\parallel}$ снижается так, чтобы питч-фактор $g \equiv v_{\perp}/v_{\parallel}$ был

¹⁾e-mail: nick@iep.uran.ru

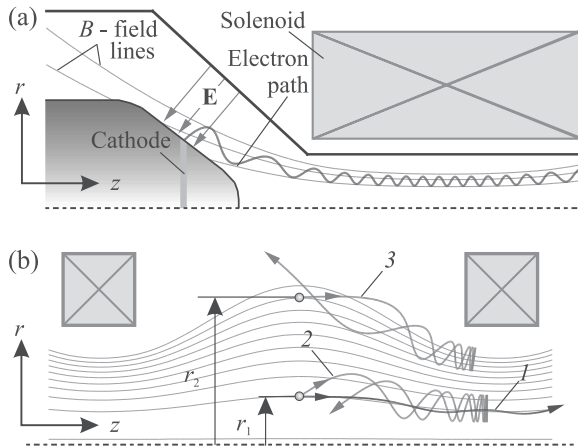


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схема микроволнового генератора – гиротрона – без детализации конструкции резонатора. (б) – Конфигурация плазменной ловушки с магнитными зеркалами. Показаны характерные траектории электронов при разных начальныхpitch-факторах

близок к единице на входе в СВЧ резонатор. Тогда аксиальное движение замагниченных электронов сохраняется, и они не отражаются магнитным зеркалом.

В пробочной магнитной ловушке (рис. 1б) присутствуют плазменные электроны с широким спектром энергий и значений g . При заданном K магнитную пробку преодолевают частицы с $(v_{\perp}/v)^2 < 1/K$ (они, как говорят, попадают в конус потерь). Остальные частицы оказываются запертыми в магнитной ловушке. Например, из модельных (см. [24]) расчетов траекторий электронов видно, что в параксиальной области (r_1) магнитное зеркало отражает частицы с $g > 0.56$ (ср. траектории 1 и 2). При этом с ростом радиуса “эмиссии” (r_2) движение вдоль силовой линии увеличенной кривизны через зеркало возможно лишь для частиц с $g < 0.025$, а остальные частицы отражаются (траектория 3).

Применительно к используемой нами экспериментальной конфигурации, показанной на рис. 2а, последний пример демонстрирует критичность прохождения УЭ через магнитное зеркало в зависимости от радиального и аксиального расположения области эмиссии УЭ (ср. размеры катодов и их положения 1 и 2). Отличие геометрии на рис. 2а от систем на рис. 1 состоит в иной структуре полей E и B у области эмиссии УЭ и, как следствие, ином режиме их ускорения. Ее особенностями являются резкая неоднородность поля E вблизи активной поверхности катода и сравнительно малый угол между направлениями полей E и B . Эти факторы определяют раскачку

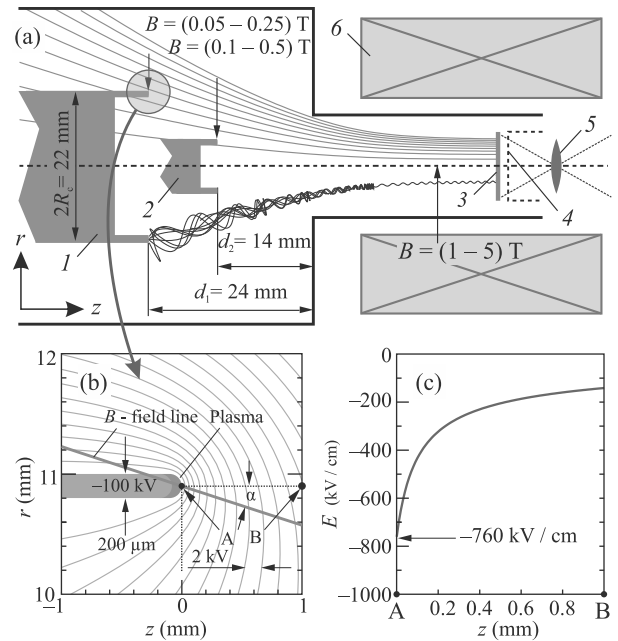


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Схема установки, поясняющая размеры и расположение катодов (варианты 1 и 2) и элементов диагностики. Для получения изображений использовался люминесцентный экран (3). Для регистрации потока УЭ коллекторным датчиком этот экран замещался экраном из алюминиевой фольги, установленным перед коллектором датчика (4). Другие обозначения: 5 – объектив фотокамеры; 6 – импульсный соленоид. (б) – Увеличенное изображение кромки катода. (с) – Распределение напряженности электрического поля в окрестности (1 мм) катода с потенциалом -100 кВ

циклотронных осцилляций частиц после начального этапа интенсивного набора энергии.

Задачами настоящего исследования являются: компрессия потока УЭ по радиусу, приводящая к увеличению плотности и однородности тока на коллекторе, и анализ ограничений на возможность использования трубчатых катодов увеличенного диаметра, обеспечивающих рост тока УЭ за счет увеличения площади их активной поверхности. Эти задачи носят компромиссный характер, так как компрессия не должна сопровождаться отражением значительной части электронов магнитным зеркалом.

3. Априорные оценки. Рассмотрим на уровне оценок, какое влияние окажет магнитное поле на динамику УЭ – какие основные режимы движения УЭ можно выделить в зависимости от величины и ориентации поля B .

На рисунке 2б представлена увеличенная в масштабе кромка тонкостенного трубчатого катода. С точки зрения генерации УЭ, роль эмиссионной кромки

ки играет граница субмиллиметрового полутороидального плазменного слоя, ионизованного иницирующими развитие пробоя автоэмиссионными электронами. Поле E наиболее велико на выступе полутора, ориентированном вдоль направления z (отмеченное штриховой линией направление А–В). При нарастающем (по модулю) напряжении на фронте импульса, здесь раньше всего достигается $E_{\text{сг}}$ и начинают убегать электроны. Условия убегания не только в окрестности эмиттера, но и на основном участке зазора, где $E < E_{\text{сг}}$, проанализированы в [25, 26] и выполняются для представленных ниже исследований.

Итак, УЭ, стартуя от катода, будут преимущественно двигаться по направлению z ортогонально эквипотенциальным поверхностям. Поле B наклонено относительно этого направления на угол α (см. рис. 2b); в терминах эффекта магнитного зеркала α имеет смысл питч-угла (угла между векторами магнитного поля и скорости частиц). Классифицируем возможные режимы движения УЭ. Введем масштаб h , на котором действующая на электрон электрическая сила eE (e – элементарный заряд) будет доминировать над магнитной $ev_{\perp}B$. Наличие такой области у катода обусловлено тем, что, во-первых, поле E здесь резко усилено по сравнению с основной частью зазора d (см. рис. 2с) и, во-вторых, УЭ еще не успевают набрать достаточно высокой скорости v . Границу области определим из условия равенства сил:

$$eE \approx evB_{\min} \sin \alpha, \quad (1)$$

где мы предположили, что $h \ll d$ (в противном случае поток УЭ не будет замагниченным) и, следовательно, можно использовать минимальное значение поля B , относящееся к точке А.

Будем использовать аппроксимацию $\varphi \approx U\sqrt{z/d}$ для распределения потенциала электрического поля в направлении А–В, где U – разность потенциалов между анодом и катодом (см. работы [25–27]). Абсолютное значение напряженности поля находится дифференцированием потенциала: $E \approx U/(2\sqrt{zd})$. В вакуумном приближении (т.е. в пренебрежении потерями энергии в неупругих столкновениях с молекулами газа; о его применимости – ниже), скорость УЭ оценивается из закона сохранения энергии как $v \approx \sqrt{2e\varphi/m}$. Подстановка E и v в условие (1) дает:

$$h^{3/4}d^{1/4}B_{\min} \sin \alpha \approx (mU/8e)^{1/2}. \quad (2)$$

Оценим h с помощью (2) для положения катода 1, когда $d = 24$ мм, $\alpha = 20^\circ$, а также можно взять $B_{\min} = 0.25$ Тл и $U = 110$ кВ (см. детали в разделах 4

и 5). Находим $h \approx 1.7$ мм, т.е., действительно, выполнено условие $h \ll d$, и, кроме того, масштаб h значительно превышает радиус эмитирующей УЭ кромки катода (на рис. 2b и с он принят равным 0.1 мм), что позволяет не учитывать эффекты, связанные с конечностью радиуса.

Поток УЭ в области $z \geq h$ можно считать замагниченным; электроны будут двигаться уже вдоль линий магнитного, а не электрического поля. Найдем условие отражения УЭ от магнитного зеркала вблизи коллектора, где магнитное поле максимально, $B = B_{\max}$. Закон сохранения энергии здесь дает $eU = mv_{\perp}^2/2$, где мы учли, что для запираемой частицы $v_{\parallel} = 0$. Воспользовавшись законом $\mu \approx \text{const}$ в области $z \geq h$, находим $eU = K \cdot (mv_{\perp}^2/2)|_{z=h}$. Подставляя сюда поперечную скорость УЭ $v_{\perp} = v \sin \alpha$ в начальной точке $z = h$, получим искомое условие:

$$mUK^5 \sin^4 \alpha \geq 8ed^2 B_{\max}^2. \quad (3)$$

Отсюда видно, что эффект магнитного зеркала усиливается с ростом питч-угла и приложенной разности потенциалов. Это связано с тем, что увеличение α и U приводит к росту начальной поперечной скорости УЭ. Кроме того, по очевидным причинам эффект усиливается при увеличении K . Напротив, эффект магнитного зеркала ослабляется при увеличении магнитного поля и ширины зазора. Это обусловлено тем, что рост B и d приводит к уменьшению масштаба h , в котором происходит первичное ускорение УЭ, и, как следствие, к падению $v_{\perp}$.

На рисунке 3 в параметрической плоскости $\{B_{\max}, \alpha\}$ показана определяемая выражением (3)

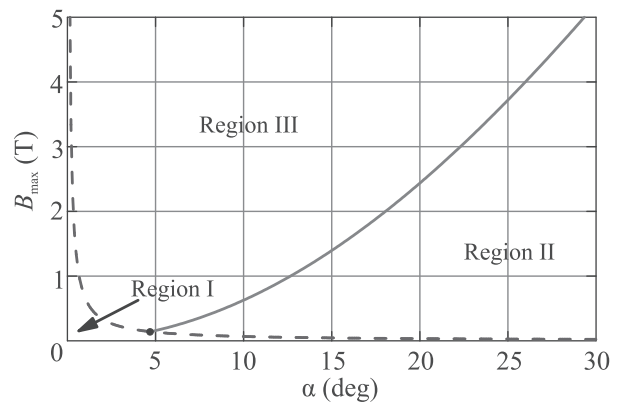


Рис. 3. (Цветной онлайн) В параметрической плоскости $\{B_{\max}, \alpha\}$ показаны области с различной динамикой УЭ. В области I магнитное поле не оказывает существенного влияния на УЭ; в областях II и III поток УЭ является замагниченным, причем в II УЭ отражаются от магнитной пробки, а в III достигают коллектора

граница (сплошная линия) областей, в которых замагниченный поток УЭ проходит, либо отражается от магнитного зеркала (области III и II соответственно). Бралось характерное значение разности потенциалов $U = 110$ кВ (раздел 4); принималось $d = 24$ мм и $K = 20$ (положение катода 1 на рис. 2а). Также на рис. 3 показана граница (штриховая линия) области I, в которой магнитное поле не оказывает существенного влияния на динамику УЭ (т.е. масштаб h , в котором магнитные силы меньше электрических, превышает d). Ее граница $mU \approx 8eB_{\max}^2 d^2 \sin^2 \alpha$ находится из (2) заменами $h \rightarrow d$ и $B_{\min} \rightarrow B_{\max}$ (последнее связано с тем, что поле B на удалении d от катода близко к максимальному в зазоре значению).

Как видно из рис. 3, для $\alpha > 4.7^\circ$ при изменении величины магнитного поля мы последовательно пройдем через три области с различной динамикой УЭ. В слабом поле (область I) поток УЭ не будет замагниченным и УЭ попадут на заземленный анод (т.е. режим изоляции анода магнитным полем не реализуется). При средних значениях поля (II) замагниченный поток будет отражаться от магнитной пробки, не достигая в итоге коллектора. Наконец, в сильном поле (III) поток УЭ попадет в конус потерь и пройдет через магнитное зеркало на коллектор.

Оценим пороговое для прохождения УЭ через магнитное зеркало значение магнитного поля для $\alpha = 20^\circ$ (см. раздел 5). Формула (3) дает: $B_{\max} \approx 2.4$ Тл. Понятно, что это не означает, что при снижении $B_{\max}$ ниже этого значения ток УЭ, регистрируемый на коллекторе, резко упадет до нуля. УЭ могут стартовать с кромки катода (рис. 2б) под самыми разными углами; направление z (или А–В) является лишь преимущественным, в котором будет двигаться большинство УЭ. Так что при заданной геометрии системы питч-углы для УЭ будут распределены в достаточно широком диапазоне с максимумом, соответствующем углу α на рис. 2б. Тогда можно ожидать, что ток УЭ будет достаточно плавно снижаться в околоритической области полей ~ 2.4 Тл. Еще одним фактором, приводящим к размытию границ областей на рис. 3, является то, что в реальной ситуации поток УЭ не будет моноэнергетическим. К дисперсии распределения УЭ приводит нестационарность поля E в зазоре, рассеяние на молекулах газа, взаимодействие с волной ионизации [12–14].

Изменение геометрии зазора, например, увеличение радиуса трубчатого катода при неизменном поле B будет, с одной стороны, способствовать росту тока УЭ за счет увеличения активной площади катода. Однако, с другой стороны, это же приведет к

увеличению α и, в силу (3), запираанию части электронов магнитной пробкой. При наличии таких разнонаправленных тенденций следует ожидать немонотонной зависимости тока УЭ от радиуса катода.

В заключение раздела обсудим применимость использованного вакуумного приближения при рассмотрении динамики УЭ. Оценим потери энергии УЭ в неупругих столкновениях с молекулами газа, используя данные [28] для функции потерь энергии $L(\varepsilon) \equiv -(1/n)d\varepsilon/dz$ для азота, где ε – кинетическая энергия электрона, n – концентрация газа, в нормальных условиях равная $2.7 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$. Сила трения электрона с энергией ε в газе есть $F(\varepsilon) = nL(\varepsilon)$. Потери энергии определяются как ее работа: $\Delta\varepsilon \approx \int F(\varepsilon(z)) dz$. Рассмотрим начальный участок движения электрона $0 < z < h$, на котором он, двигаясь в сильном электрическом поле практически прямолинейно, быстро набирает энергию. В нулевом приближении, пренебрегая потерями энергии, имеем $\varepsilon(z) \approx e\varphi(z)$. В следующем приближении, используя это соотношение при вычислении силы F вдоль траектории УЭ для положения катода 1, находим, что в области $0 < z < h$ УЭ теряет ≈ 2 кэВ при том, что $\varepsilon(h) \approx 29$ кэВ. Тогда справедливо неравенство $\Delta\varepsilon \ll \varepsilon$, дающее основание для использования вакуумного приближения при анализе динамики УЭ. Отметим также, что время пересечения электроном рассматриваемой области оценивается как $h\sqrt{8m/9\varepsilon(h)} \approx 22$ пс [26], т.е. оно на порядок меньше характерной длительности импульса напряжения (см. раздел 4). Это позволило нам рассматривать движение УЭ в стационарном электрическом поле.

4. Установка и измерительное оборудование. В эксперименте применялся 5-нс драйвер РАДАН [29] и блок компрессии энергии [30] с обостряющим и срезающим разрядниками. Импульс напряжения $U_{\text{in}}(t)$ подавался к катоду по коаксиальной передающей линии (ПЛ) с волновым сопротивлением ≈ 44 Ом. Он без отражений проходил через изолятор и газовую секцию ПЛ вплоть до кромки катода на конце центрального электрода диаметром 22 мм (положение катода 1 на рис. 2а). В этом случае напряжение на катоде точно определяется методом динамической рефлектометрии [31]. При транспортировке импульса $U_{\text{in}}(t)$ до катода уменьшенного диаметра (положение 2) возникают искажения. Тем не менее, поскольку хаотический сигнал после короткого импульса $U_{\text{in}}(t)$ спадал за время двойного пробега от датчика до катода (≈ 3.5 нс), то имелась возможность регистрации отраженного от катода сигнала $U_{\text{ref}}(t)$ (рис. 4). Согласно данным [12], напряжение

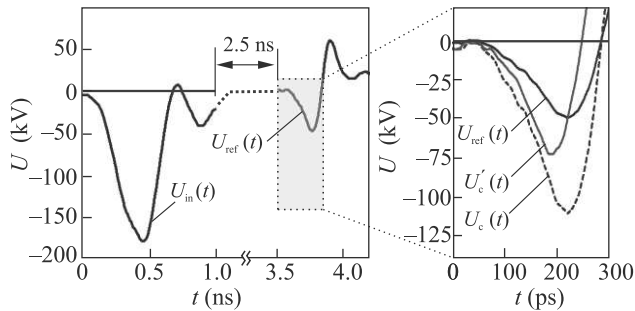


Рис. 4. (Цветной онлайн) $U_{in}(t)$ – исходный импульс высоковольтного генератора с амплитудой -180 кВ; $U_{ref}(t)$ – импульс, отраженный от воздушного зазора с катодом из нержавеющей стали (амплитуда -50 кВ); $U_c(t)$ и $U'_c(t)$ – импульсы напряжения на катодах из стали и графита с амплитудами -110 и -75 кВ соответственно. Диаметры катодов $2R_c = 8$ мм

на катоде составляет $U_c(t) \approx 2.2U_{ref}(t)$. Для стального катода диаметром $2R_c \approx 8$ мм это дает амплитуду -110 кВ (рис. 4). Когда использовался катод того же диаметра из графита, УЭ эмитировались при меньшем напряжении ($U'_c(t)$ на рис. 4) и несколько раньше, что связано с большей шероховатостью поверхности [12, 13, 32].

Импульсный соленоид с индукцией поля до 5 Тл, идентичный использованному в [33], располагался после скачка диаметра анодного электрода $46 \rightarrow 15$ мм (рис. 2а). При малом диаметре катода (положение 2) конфигурация разрядной камеры примерно соответствовала вакуумным диодам релятивистских СВЧ генераторов [34]. Внутри соленоида в сечении с максимальным магнитным полем $B \approx 5$ Тл посменно устанавливались элементы диагностики потока УЭ.

Ток УЭ регистрировался коллекторным датчиком с конструкцией, описанной в [13]. Коллектор диаметром 10 мм представлял собой торец центрального электрода ступенчатой коаксиальной линии, согласующей 6-омную входную секцию с 50-омным кабельным разъемом типа SMA. Перед коллектором на расстоянии ≈ 1 мм размещался экран из алюминиевой фольги толщиной 15 мкм, прозрачный для электронов с энергией более 40 кэВ [35]. Датчик регистрировал импульсы тока УЭ с фронтами от 20 пс.

Для визуализации поперечной структуры потока УЭ фотографировалось (в режиме открытого затвора) свечение люминесцентного экрана СРГ400 с люминофором $Gd_2O_2S:Tb$. Со стороны падающего потока электронов экран был закрыт тонкой черной бумагой, предотвращающей подсветку из объема разрядной камеры. В ряде случаев, при минимальной чувствительности фотокамеры (ISO-100) приме-

нялись нейтральные оптические светофильтры, позволявшие выявить зоны наибольшей интенсивности свечения экрана, облучаемого электронами.

5. Поперечная структура и ток замагниченного потока УЭ. Рассмотрим результат компрессии потока УЭ при эмиссии из окрестности кромки стального катода наибольшего диаметра $2R_c = 22$ мм (рис. 2а, положение 1), для которого характерен большой наклон силовой линии магнитного поля $\alpha \approx 20^\circ$. Так как катод установлен на достаточно большом расстоянии от анодного сужения ($d_1 = 24$ мм) и соленоида, то у его кромки снижено магнитное поле и, как следствие, относительно велико значение пробочного отношения: $K \approx 20$. На поверхности пластичного металла количество микронеровностей мало и потому с ростом электрического поля на фронте импульса напряжения на катодной кромке активируется небольшое число центров АЭЭ. В результате структура более чем четырехкратно сжатого по диаметру потока УЭ ($22 \rightarrow 5$ мм), показанная на рис. 5 – азимутально неоднородная.

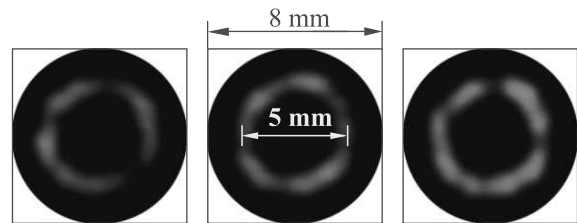


Рис. 5. (Цветной онлайн) Компрессия потока УЭ до среднего диаметра < 5 мм ($B = 5$ Тл в точке регистрации) при эмиссии из окрестности кромки катода с диаметром $2R_c = 22$ мм в поле $B = 0.25$ Тл. Свечение люминофора (три включения) показывает азимутальную дискретность потока УЭ

На рисунке 2а показаны траектории электронов, рассчитанные (см. [24]) в вакуумном приближении (о его применимости см. раздел 3). Как видно, из пяти электронов, запущенных под разными углами к оси z с дуги эмитирующего полутора, только один, двигающийся по приоритетному направлению А–В, попадает в конус потерь и, как следствие, проходит через магнитную пробку. Остальные электроны отражаются магнитным зеркалом в области больших магнитных полей аналогично представленным на рис. 1 случаям. Таким образом, потери тока из-за отражения части электронов по пути к коллектору достаточно велики. В результате пик интегрального тока УЭ на коллекторе не превышает 2.4 А (заряд ≈ 0.4 нКл) даже при максимальном реализованном в экспериментах значении магнитного поля $B_{max} = 5$ Тл (см.

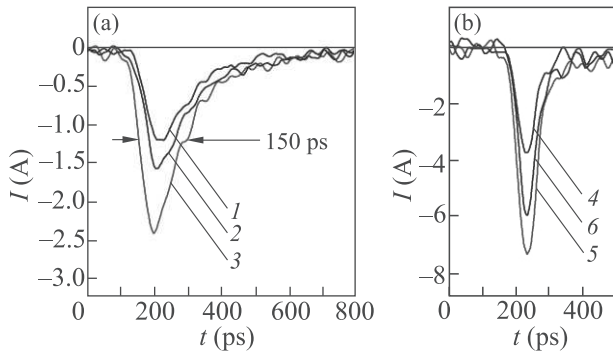


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – Импульсы тока УЭ с коллекторного датчика для катода диаметром $2R_c = 22$ мм, соответствующие разным магнитным полям: 1 – $B_{\max} = 1$ Тл ($I = 1.2$ А); 2 – $B_{\max} = 2$ Тл ($I = 1.6$ А); 3 – $B_{\max} = 5$ Тл ($I = 2.4$ А). (б) – Токи сжатого потока УЭ при $d_2 = 14$ мм и различных диаметрах катода: 4 – $2R_c = 4$ мм ($I = 3.7$ А); 5 – $2R_c = 8$ мм ($I = 7.3$ А); 6 – $2R_c = 12$ мм ($I = 6.1$ А). Магнитное поле составляло 5 Тл в точке регистрации и 0.5 ± 0.02 Тл у кромки различных катодов

рис. 6а). Импульс тока уширен до ≈ 150 пс на уровне 0.5 амплитуды, а задний фронт затянут, что обусловлено существенным снижением продольной скорости части УЭ с большими питч-факторами. Как следует из наших оценок в разделе 3, при уменьшении поля доля отраженных электронов будет расти, а ток УЭ на коллекторе соответственно, падать. Именно такая картина наблюдалась при снижении $B_{\max}$ до 1 и 2 Тл: амплитуда тока упала до 1.2 и 1.6 А, соответственно (рис. 6а). Таким образом, полученное нами условие (3) отражения УЭ от магнитного зеркала, дающее для $B_{\max}$ порог в ≈ 2.4 Тл (рис. 3), попадающий в экспериментальный диапазон 1–5 Тл, верно описывает наблюдаемую тенденцию.

Из рисунка 7а видно, что азимутальная дискретность сжатого потока УЭ остается выраженной при снижении диаметра катода до 12 мм (положение 1 на рис. 2а с $d_2 = 14$ мм и $K \approx 10$). Эффект дискретности усиливается (рис. 7е), когда магнитное поле соленоида снижается с 5 и 0.5 Тл до 2 и 0.2 Тл в зоне регистрации и у кромки катода соответственно. Для интерпретации этой тенденции уместна аналогия с эффектом подавления магнитным полем экранировки взрывоэмиссионных центров на кромке катода в вакууме [36]. В нашем случае генерирующие УЭ плазменные образования на катоде оказывают друг на друга экранирующее воздействие, а магнитное поле, достаточно сильное для замагничивания плазмы, будет сдерживать ее поперечное расширение, тем самым снижая эффект экранировки. Тогда с ростом B

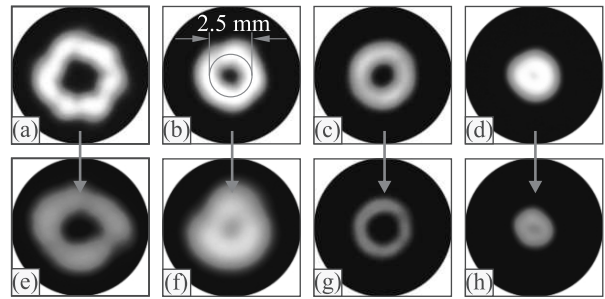


Рис. 7. (Цветной онлайн) Автографы трубчатых потоков УЭ, стартующих в окрестности катодов различного диаметра: (а), (е) – $2R_c = 12$ мм; (б), (с), (ф), (г) – $2R_c = 8$ мм; (д), (h) – $2R_c = 4$ мм. Материал катода: (с), (г) – графит; остальное – нержавеющая сталь. Перепад магнитного поля 0.5–5 Тл, кроме (е), (ф), где перепад составляет 0.2–2 Тл. В случаях (г), (h) применен нейтральный светофильтр. Диаметр изображений 8 мм

будет расти число мелких плазменных образований и, как следствие, уменьшаться азимутальный масштаб неоднородности потока УЭ.

Ток и заряд УЭ на коллекторе оказались наибольшими при $2R_c = 8$ мм и $B_{\max} = 5$ Тл: 7.3 А и 0.6 нКл соответственно (рис. 6б). В этом случае количество электронов, отраженных магнитным зеркалом, относительно невелико из-за меньшего угла ($\alpha \approx 9^\circ$) наклона силовых линий магнитного поля (ср. с траекторией 1 на рис. 1б) и пониженного по отношению к случаю $2R_c = 22$ мм перепада поля вдоль траектории частицы: $K \approx 10$ (см. профиль силовых линий поля B на рис. 2а). Плотность тока на коллекторе (до 100 А/см²) оценивается по автографу (рис. 7б) с учетом площади кольца с наибольшей яркостью свечения люминофора. Его средний диаметр составляет 2.5 мм, а радиальный размер ≈ 1 мм.

В разделе 3 мы указывали, что фактором, ограничивающим точность анализа условий отражения УЭ от магнитного зеркала, является то, что их поток не является моноэнергетическим. Действительно, при максимальном (по модулю) напряжении на катоде в 110 кВ (рис. 4) через алюминиевый фильтр с отсечкой по энергии ≈ 160 кэВ проходила значительная доля ($> 50\%$) тока УЭ (≈ 4 А); он снижался до ≈ 1 А при отсечке в ≈ 220 кэВ. Из этих данных также следует, что средняя энергия УЭ превышает использованное в расчетах значение eU . Отметим, что согласно (3) $B_{\max} \sim \sqrt{U}$ и рост эффективного (определяемого энергией УЭ) значения U на, например, 50% приведет к гораздо меньшему, на 22%, росту $B_{\max}$. В любом случае, с поправкой на все известные нам факторы, точка $B_{\max} = 5$ Тл и $\alpha \approx 9^\circ$ с запасом

попадает в область III на рис. 3, для которой реализуется транспортировка УЭ до коллектора.

В случае $2R_c = 8$ мм, как и в обсуждавшемся выше случае 12 мм, количество областей эмиссии визуально уменьшается при снижении магнитного поля до значений 0.2–2 Тл на участке “катод-коллектор”. При этом автограф УЭ становится более размытым (ср. рис. 7b и f), а его ток не превышает 3 А.

При использовании графитового катода ($2R_c = 8$ мм) вследствие значительно большей степени шероховатости его поверхности по сравнению со стальным катодом и потому активизации большего числа центров АЭЭ, поток УЭ оказывается значительно более однородным (ток на коллекторе имел амплитудную стабильность на уровне $\pm 10\%$) – см. рис. 7с. Это становится более явным при фоторегистрации автографа УЭ с использованием плотного нейтрального светофильтра (рис. 7g). Еще одной особенностью графитового катода, также связанной с его высокой шероховатостью, является уменьшение до 75 кВ (по модулю) амплитуды импульса $U'_c(t)$ (рис. 4) из-за более ранней эмиссии инициирующих пробой электронов (см., например, [37] и ссылки там). Это приводит к снижению тока УЭ по сравнению со стальным катодом. Так, в сильном поле B с перепадом 0.5–5 Тл ток УЭ едва достигает 3 А, в то время как для стального катода он составлял, напомним, 7.3 А.

Обратим внимание на немонотонный характер зависимости тока УЭ от диаметра катода – см. рис. 6b. Для стального трубчатого катода с $d_2 = 14$ мм и различными диаметрами $2R_c = 4, 8, 12$ мм амплитуды тока составляли 3.7, 7.3 и 6.1 А соответственно (перепад поля B в 0.5–5 Тл был одинаков для всех трех конфигураций). Уменьшение диаметра и, как следствие, угла α приводит к увеличению плотности тока УЭ за счет уменьшения доли отраженных от магнитного зеркала частиц. Однако при радикальном уменьшении размера катода из-за снижения его активной площади начнет падать интегральный ток. Действительно, для катода с минимальным использованным в экспериментах диаметром 4 мм ток УЭ уменьшается вдвое (с 7.3 до 3.7 А) по сравнению с катодом с $2R_c = 8$ мм, т.е. пропорционально длине кромки $2\pi R_c$. Кольцевая структура потока УЭ такого катода, плохо различимая на исходном автографе рис. 7d, становится отчетливо видна при использовании плотного нейтрального светофильтра (рис. 7h).

6. Заключение. С помощью неоднородного магнитного поля, нарастающего в 10–20 раз от области генерации УЭ вблизи кромки трубчатого катода до коллектора реализована (3–4)-х кратная радиальная компрессия (фокусировка) электронного потока,

ускоряемого в атмосферном электродном промежутке. Наибольший интегральный ток УЭ (с плотностью до 100 А/см²) получен, когда электроны не отражались магнитным зеркалом, т.е., по аналогии с открытыми плазменными ловушками, попадали в конус потерь. Аналитически (рис. 3), на основе численного моделирования траекторий УЭ (рис. 2a) и экспериментально (рис. 6, 7) определены условия реализации такого режима. Возможность формирования потоков УЭ с повышенной плотностью и однородностью открывает перспективы их применения для воздействия на различные мишени в экспериментах по радиационной физике, химии, биологии и пр.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты # 19-08-00292 (эксперимент) и 20-08-00172 (теория).

Авторы признательны Кафедре электрофизики УрФУ за возможность использования осциллографа Tektronix DPO73304D. Эксперименты проводились на оборудовании Центра коллективного пользования ИЭФ УрО РАН.

1. H. Dreicer, Phys. Rev. **117**(2), 329 (1960).
2. А. В. Гуревич, ЖЭТФ **39**, 1296 (1960).
3. Ю. Л. Станкевич, В. Г. Калинин, Докл. АН СССР **177**(1), 72 (1967).
4. А. В. Гуревич, К. П. Зыбин, УФН **171**, 1177 (2001).
5. P. Aleynikov and B. N. Breizman, Phys. Rev. Lett. **114**(15), 155001 (2015).
6. Л. П. Бабиц, Т. В. Лойко, В. А. Цукерман, УФН **160**(7), 49 (1990).
7. A. V. Gurevich, G. A. Mesyats, K. P. Zybin, M. I. Yalandin, A. G. Reutova, V. G. Shpak, and S. A. Shunailov, Phys. Rev. Lett. **109**(8), 085002 (2012).
8. V. Tarasenko, Plasma Sources Sci. Technol. **29**, 034001 (2020).
9. Д. В. Белоплотов, В. Ф. Тарасенко, В. А. Шкляев, Д. А. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **113**(2), 133 (2021).
10. S. Yatom, A. Shlapakovski, L. Beilin, E. Stambulchik, S. Tskhai, and Ya. E. Krasik, Plasma Sources Sci. Technol. **25**(6), 064001 (2016).
11. Н. М. Зубарев, Г. А. Месяц, Письма в ЖЭТФ **113**(4), 256 (2021).
12. N. M. Zubarev, V. Yu. Kozhevnikov, A. V. Kozyrev, G. A. Mesyats, N. S. Semeniuk, K. A. Sharypov, S. A. Shunailov, and M. I. Yalandin, Plasma Sources Sci. Technol. **29**(12), 125008 (2020).
13. G. A. Mesyats, M. I. Yalandin, N. M. Zubarev, A. G. Sadykova, K. A. Sharypov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, M. R. Ulmaskulov, O. V. Zubareva,

- A. V. Kozyrev, and N. S. Semeniuk, Appl. Phys. Lett. **116**(6), 063501 (2020).
14. Г. А. Аскарьян, Труды ФИАН **66**, 66 (1973).
15. В. Ю. Кожевников, А. В. Козырев, Н. С. Семенюк, Изв. вузов. Физика **60**(8), 148 (2017).
16. С. Я. Беломытцев, И. В. Романченко, В. В. Рыжов, В. А. Шкляев, Письма в ЖТФ **34**(9), 10 (2008).
17. D. Levko, S. Yatom, V. Vekselman, J. Z. Gleizer, V. T. Gurovich, and Ya. E. Krasik, J. Appl. Phys. **111**(1), 013303 (2012).
18. Г. А. Месяц, Письма в ЖЭТФ **85**(2), 119 (2007).
19. V. I. Solomonov, S. G. Michailov, A. I. Lipchak, V. V. Osipov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, M. I. Yalandin, and M. R. Ulmaskulov, Laser Physics **16**(1), 126 (2006).
20. К. В. Бережной, М. Б. Бочкарев, Г. Л. Даниелян, А. С. Насибов, А. Г. Реутова, С. А. Шунайлов, М. И. Яландин, Квантовая электроника **42**(1), 34 (2012).
21. L. P. Babich, T. V. Loiko, and A. V. Rodigin, IEEE Trans. Plasma Sci. **42**(4), 948 (2014).
22. V. A. Flyagin and G. S. Nusinovich, Proc. IEEE **76**(6), 644 (1988).
23. Г. И. Будкер, В. В. Мирнов, Д. Д. Рютов, Письма в ЖЭТФ **14**(5), 320 (1971).
24. М. А. Тиунов, Б. М. Фомель, В. П. Яковлев, Препринт ИЯФ # 89-159, Новосибирск, 1989.
25. Н. М. Зубарев, Г. А. Месяц, М. И. Яландин, Письма в ЖЭТФ **105**(8), 515 (2017).
26. N. M. Zubarev, M. I. Yalandin, G. A. Mesyats, S. A. Barengolts, A. G. Sadykova, K. A. Sharypov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, and O. V. Zubareva, J. Phys. D: Appl. Phys. **51**(28), 284003 (2018).
27. С. Я. Беломытцев, И. В. Романченко, В. В. Ростов, Изв. вузов. Физика **51**(3), 71 (2008).
28. L. R. Peterson and A. E. S. Green, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **1**(6), 1131 (1968).
29. V. G. Shpak, S. A. Shunailov, M. I. Yalandin, and A. N. Dyadkov, Instrum. Exp. Tech. **36**(1), 106 (1993).
30. M. I. Yalandin, S. K. Lyubutin, M. R. Oulmaskoulov, S. N. Rukin, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, and B. G. Slovikovskiy, IEEE Trans. Plasma Sci. **30**(5), 1700 (2002).
31. K. A. Sharypov, M. R. Ul'masculov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, M. I. Yalandin, G. A. Mesyats, V. V. Rostov, and M. D. Kolomiets, Rev. Sci. Instrum. **85**(12), 125104 (2014).
32. В. А. Шкляев, В. В. Рыжов, Письма в ЖТФ **37**(2), 46 (2011).
33. В. В. Ростов, А. А. Ельчанинов, И. В. Романченко, С. А. Шунайлов, М. Р. Ульмаскулов, К. А. Шарыпов, В. Г. Шпак, С. Н. Рукин, М. И. Яландин, Изв. вузов. Радиофизика **56**(8-9), 525 (2013).
34. N. S. Ginzburg, A. S. Sergeev, I. V. Zotova, Y. V. Novozhilova, N. Y. Peskov, I. V. Konoplev, A. D. R. Phelps, A. W. Cross, S. J. Cooke, P. Aitken, V. G. Shpak, M. I. Yalandin, S. A. Shunailov, and M. R. Ulmaskulov, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **393**(1-3), 352 (1997).
35. В. Ф. Баранов, Дозиметрия электронного излучения, Атомиздат, М. (1974).
36. С. Я. Беломытцев, С. Д. Коровин, Г. А. Месяц, Письма в ЖТФ **6**(18), 1089 (1980).
37. С. Д. Коровин, Е. А. Литвинов, Г. А. Месяц, А. М. Мурзакаев, В. В. Ростов, В. Г. Шпак, С. А. Шунайлов, М. И. Яландин, Письма в ЖТФ **30**(19), 30 (2004).

Кооперативный транспорт несмачивающей жидкости в случайной системе нанопор

В. Д. Борман¹⁾, А. А. Белогорлов, И. В. Тронин

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 декабря 2020 г.

После переработки 7 февраля 2021 г.

Принята к публикации 8 февраля 2021 г.

Предложен новый механизм кооперативного транспорта несмачивающей жидкости в нанопористой среде. Описание транспорта основывается на теории критической динамики многомасштабных явлений в атомных системах. Транспорт описывается как многомасштабный во времени процесс взаимодействия флуктуирующей моды заполнения-вытекания, макроскопической моды самопроизвольного заполнения и моды заполнения, вызванной критическим давлением сжатия динамического перколяционного перехода. Модель строится на основании решения системы кинетических уравнений для функции распределения доступных и заполненных пор, решение которых позволяет вычислить макроскопические величины, описывающие разномасштабные процессы. Рассмотрен случай, когда макроскопические моды транспорта развиваются одновременно в двух различных масштабах времени. Предложена “микроскопическая” (в наномасштабе) модель заполнения нанопор при развитии спонтанной моды с учетом сохранения объема суспензии при равенстве скоростей развития мод в разных масштабах времени. Предсказанные зависимости от времени потока и объема заполненных пор соответствуют бездиссипативному транспорту в системе нанопор. Теоретические зависимости описывают известные и новые экспериментальные данные. Необычные динамические свойства соответствуют свойствам систем с положительной обратной связью.

DOI: 10.31857/S1234567821060045

Проблемы описания транспорта в нанопористых средах остаются актуальным направлением исследований в силу сложностей необходимого учета изменения свойств частиц, взаимодействия частиц с конфайнментом [1–3], а также учета локальных и дальних перколяционных корреляций в различных по расположению элементах конфайнмента и кластеров частиц [4–8]. Транспорт жидкости в нанопористой среде в рамках существующих представлений описывается феноменологическим уравнением Дарси [1, 9]. Это уравнение связывает поток с градиентом давления. Уравнение Дарси позволяет учесть извилистость “транспортных каналов” из пор, пористость и скольжение жидкости по поверхности [9–11]. С учетом этих свойств оказывается возможным объяснить быстрый транспорт жидкости в каналах углеродных нанотрубок [10–12].

В случае несмачивающей жидкости поры могут быть заполнены лишь при повышенном давлении, при котором энергетический барьер флуктуаций заполнения близок к температуре [13–15]. Величину барьера можно оценить по формуле Лапласа. Однако

для поры в пористой среде энергетический барьер зависит от “взаимодействия” кластеров жидкости в соседних порах. Энергия этого “взаимодействия” отрицательна. Это уменьшение поверхностной энергии на величину энергии мениска, который исчезает при существовании кластера жидкости в соседней поре. В результате многочастичного “взаимодействия” со всеми соседями – кластерами заполненных пор, энергетический барьер флуктуации заполнения может быть меньше по сравнению с энергией выталкивания несмачивающей жидкости по формуле Лапласа. Как результат, при увеличении давления и степени заполнения возможно изменение знака энергии флуктуации заполнения, что позволяет объяснить возникновение смачивающего состояния несмачивающей жидкости [13, 14] и аномально медленную релаксацию этого состояния [15]. Другим следствием этого взаимодействия должно быть быстрое безбарьерное заполнение нанопор. В случае быстрого достижения критического давления без заполнения пор, при исчезновении барьера заполнения для всех пор, система оказывается в абсолютно неустойчивом состоянии. Транспорт жидкости при таких условиях исследуется в настоящей работе.

¹⁾e-mail: VDBorman@mephi.ru

В настоящей работе обсуждается предсказанный в работе [16] кооперативный экспоненциально ускоренный транспорт несмачивающей жидкости в случайной нанопористой среде. В [16] было установлено, что в спектре частот релаксации функции распределения по размерам кластеров, состоящих из различного числа пор, существует уединенная положительная низкая частота. Из этого следует, что при достижении нового критического давления P_c , большего, чем давление P_{c0} квазистатического заполнения, должен возникать самопроизвольный (спонтанный) транспорт несмачивающей жидкости в нанопористых частицах. Предложенная в работе [16] модель транспорта учитывает возникновение двух мод – растущей спонтанной моды заполнения, соответствующей уединенной положительной частоте, и релаксационной моды заполнения-вытекания, соответствующей остальным отрицательным частотам. Однако в работе [16] поток жидкости при новом критическом давлении не был вычислен. Кроме того, в работах [16–19], посвященных заполнению нанопористых частиц несмачивающей жидкостью при быстром ударном сжатии, явление самопроизвольного спонтанного транспорта не наблюдалось. Как показано ниже, причина этого заключается в том, что в работе [16] не была учтена мода заполнения, возникающая при внешнем воздействии – мода ударного сжатия. Это приводит к тому, что в рамках предложенной в работе [16] модели спонтанного транспорта описать возникающую в экспериментах [16–19] квадратичную зависимость заполненного объема $V(t)$ при постоянном давлении не представляется возможным.

В настоящей работе получены новые экспериментальные данные по одновременному измерению не только зависимости от времени объема и давления, как в работе [16], но и новой величины – потока жидкости в нанопорах $J(t)$ (см. рис. 1). Установленная линейная зависимость от времени $J(t)$ и квадратичная $V(t)$ соответствуют уменьшению потока при сжатии суспензии критическим давлением удара. Однако эти зависимости наблюдаются при $P = \text{const}$, что отвечает спонтанному заполнению. Такая картина соответствует самопроизвольному бездиссипативному транспорту невязкой жидкости. Задача описания этой, на первый взгляд противоречивой, картины, решается в настоящей работе.

Ниже предложен новый механизм кооперативного транспорта в условиях развития растущей спонтанной моды заполнения при одновременном быстром сжатии суспензии нанопористых частиц в несмачивающей жидкости. Как показано ниже, этот механизм следует из решения системы кинетических

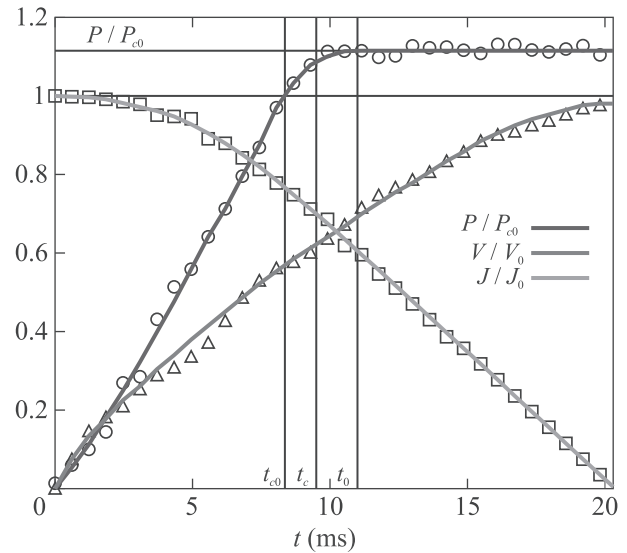


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости от времени безразмерных величин потока $\frac{J}{J_0}$ (зеленая кривая), объема заполненных пор $\frac{V}{V_0}$ (красная кривая) и давления $\frac{P}{P_{c0}}$ (синяя кривая), соответствующие обсуждаемой модели кооперативного транспорта ($J_0 = 0.285 \text{ см}^3/\text{мс}$, $V_0 = 2.53 \text{ см}^3$, $P_{c0} = 16 \text{ МПа}$). Точки – экспериментальные данные для системы либерсорб-вода (масса пористого тела 5 г, энергия удара 30 Дж). Характерные точки зависимостей: t_{c0} – время достижения давления P_{c0} . При P_{c0} должно начинаться заполнение в квазистатическом режиме; t_c – время достижения давления P_c , критического давления динамического перколяционного перехода – начало заполнения отдельных кластеров доступных пор; $t_0 - t_c$ – характерное время запаздывания начала развития неустойчивой моды спонтанного заполнения при P_0 . После $t = t_0$ зависимости $J(t)$ и $V(t)$ должны соответствовать медленной моде ударного сжатия (5), (6)

уравнений для пространственно-однородных функций распределения $f(n, t)$ кластеров из n доступных пор и кластеров из k заполненных пор $F(k, t)$ и описании транспорта как результат взаимодействия двух макроскопических мод транспорта, развивающихся на двух различных масштабах времени, τ_∞ – характерного времени самопроизвольного транспорта и τ_V – характерного времени заполнения пор ($\tau_V \gg \tau_\infty$), вызванного давлением при быстром сжатии.

Как показано в [16], в спектре собственных частот релаксации функции распределения $F(k, t)$ есть уединенная положительная низкая частота τ_∞^{-1} . Остальные высокие частоты $\omega_k \sim \tau_0^{-1}$ ($\tau_0 \ll \tau_\infty$ – характерное время заполнения кластера доступных пор) отрицательны и зависят от k заполненных пор в кластерах. С учетом этого обстоятельства,

из решения системы кинетических уравнений [16] следует:

$$\frac{\partial F(k, t)}{\partial t} = \frac{\theta_0 F(k, t)}{\tau_\infty} + B(k, t). \quad (1)$$

В этом уравнении θ_0 – определяемая давлением доля доступных пор, $B(k, t)$ – слагаемое, описывающее релаксацию функции распределения за счет устойчивых мод с отрицательными собственными частотами. Отрицательные частоты спектра отвечают релаксационным процессам заполнения-вытекания жидкости из кластеров, содержащих различное конечное число заполненных пор. В соответствии с методом исключения быстрых мод [20–22] в уравнении (1) можно опустить второй член в правой части $B(k, t)$, соответствующий высокочастотным процессам заполнения-вытекания и превращающий уравнение в стохастическое. Такой подход соответствует адиабатическому приближению [21]. Наконец, для получения уравнения переноса для макроскопической величины доли заполненных пор, представим функцию распределения $F(k, t)$ в виде $F(k, t) = x(t) A(t) \tilde{F}(k)$, где $x(t)$ – доля заполненных пор, $A(t)$ – амплитуда неустойчивой моды, $\tilde{F}(k)$ – не зависящая от времени функция распределения кластеров по числу пор в них. Такое представление функции распределения соответствует выделению в явном виде быстрой (величина $A(t)$ с характерным временем изменения τ_∞) и медленной моды (величина $x(t)$ с характерным временем изменения $\tau_V \gg \tau_\infty$). Тогда из (1) получим:

$$\left(\frac{\partial x(t)}{\partial t} A(t) + \frac{\partial A(t)}{\partial t} x(t) \right) \tilde{F}(k) = \frac{\theta_0}{\tau_\infty} x(t) A(t) \tilde{F}(k). \quad (2)$$

Масштаб времени изменения слагаемых в скобках существенно различен – первое слагаемое меняется на временах τ_V , тогда как характерное время изменения второго слагаемого $\tau_\infty \ll \tau_V$. Тогда, пренебрегая первым слагаемым, на временах $\sim \tau_\infty$ для величины $A(t)$ получим:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{A(t) \theta_0}{\tau_\infty}. \quad (3)$$

Уравнение (3) описывает рост амплитуды неустойчивой моды заполнения пор. При получении этого уравнения были опущены малые члены, учитывающие возможную зависимость от времени функции $F(k, t)$ через давление $P(t)$ на масштабе $t \sim \tau_\infty \ll \tau_V \ll \tau_P$ (τ_P – характерное время роста давления). При таком соотношении времен можно полагать, что $\dot{P} = 0$ и определяемая постоянным давлением доля

доступных пор $\theta_0 = \text{const}$. В соответствии с уравнением (3), скорость транспорта и степень заполнения жидкости должны описываться экспоненциально растущей зависимостью от времени²⁾.

При приближении к критическому давлению P_0 увеличивается доля доступных пор, уменьшается барьер локальных флуктуаций заполнения-вытекания и увеличивается число пор, вовлеченных в этот процесс. Как результат, возникает растущая мода быстрого коллективного заполнения. Положительная частота $\omega_\infty = \tau_\infty^{-1}$ неустойчивой развивающейся моды в перколяционном пределе больших размеров частиц $L \gg R$ (R – средний радиус пор) совпадает с найденной в работе [16]:

$$\tau_\infty = \frac{\tau_0}{z(\theta - \theta_c)^\zeta}, \quad (4)$$

где $z \approx 1$, $\zeta = 0.8$, θ – доля доступных пор, зависящая от давления. В формуле (4) θ_c – критическая доля доступных пор динамического перколяционного перехода. Вычисленная в [16] величина $\theta_c = \theta_{c0} + 0.1$, $\theta_{c0} = 0.18$ – критическая доля доступных пор в квазистатистическом режиме. При доле доступных пор $\theta < \theta_c$, в соответствии с (4), заполнение не должно наблюдаться. Поэтому при давлении $P < P_c$ (P_c – давление, при котором доля доступных пор равна θ_c) зависимость изменения объема суспензии от времени должна определяться упругим сжатием суспензии. При увеличении давления и, соответственно, увеличении доли доступных пор, частота τ_∞^{-1} увеличивается от 0 при $\theta = \theta_c$ до максимального значения масштаба τ_0^{-1} при $\theta = \theta_0$. Как результат, скорость развития неустойчивой моды увеличивается при росте давления от P_c до P_0 и с запаздыванием достигает максимального значения при давлении P_0 . В таком процессе при P_0 в окрестности нового критического давления P_c и новой критической доли доступных пор θ_0 , средний размер кластера доступных пор, близкий по величине к растущей корреляционной длине, становится порядка размера частиц. Тогда скорость развития неустойчивой моды становится близкой к скорости заполнения τ_0^{-1} кластера конечного размера. На масштабе времени $t \sim \tau_\infty \ll \tau_P$ скорость роста давления $\dot{P} = 0$ и при постоянном давлении P_0 доля доступных пор постоянна, $\theta = \theta_0$, независимо от величины объема пор, занятого жидкостью.

Уравнение (3) не сводится к уравнению Дарси, поскольку не содержит зависимости потока $J = V_0 \frac{dx}{dt}$

²⁾В работе [16] уравнение $\dot{A} \sim A(1 - A)$ было получено для противоположного случая малого времени роста давления, когда $\tau_P \ll \tau_V$.

(V_0 – объем пор всех частиц суспензии, $x(t)$ – доля заполненного объема пор, равная амплитуде неустойчивой моды $A(t)$) от давления на масштабе $t \sim \tau_\infty$. Время τ_∞ в (3), (4) пропорционально $(\theta_0 - \theta_c)^\zeta$ и является постоянным минимальным временем развития неустойчивости при $P = P_0 = \text{const}$. Транспорт жидкости, описываемый уравнением (3), является самопроизвольным – спонтанным. Такой результат соответствует кинетической теории, учитывающей в столкновительном интеграле в исходных кинетических уравнениях для функций распределения кластеров “взаимодействие” кластеров доступных пор и перколяционного кластера доступных пор с кластерами заполненных пор. Вероятность этого “взаимодействия” обратно пропорциональна времени заполнения жидкостью кластера доступных пор τ_0 и времени τ_∞ заполнения перколяционного кластера. Поскольку “взаимодействие” означает перетекание, то в результате образуются новые кластеры заполненных пор. Рост заполненного объема описывается как результат “взаимодействия” кластеров из заполненных пор с перколяционным кластером доступных пор – перетекание жидкости с поверхности частиц через кластеры заполненных пор в перколяционный кластер доступных пор. Характерное время (4) экспоненциального роста развивающейся моды не зависит от числа заполненных пор в таких кластерах. Поэтому “взаимодействие” означает заполнение перколяционного кластера доступных пор, а, значит, и всей системы пор одновременно через все различные кластеры заполненных пор. Такой спонтанный транспорт можно считать кооперативным.

Транспорт жидкости при $t \sim \tau_\infty \ll \tau_P$ описывается в приближении $\dot{P} = 0$ и, следовательно $P = P_0 = \text{const}$. Безразмерная скорость роста давления $\dot{P}$ связана в гидродинамическом пределе со безразмерной скоростью $\tilde{J}$ транспорта и безразмерной сжимаемостью $\tilde{\chi}$, $\tilde{J} = \tilde{\chi}\dot{P}$. Тогда, при конечной величине $\tilde{J}$, и $\dot{P} \rightarrow 0$ следует, что $\tilde{\chi} \rightarrow \infty$. В опытах [16–18] эффективная безразмерная сжимаемость суспензии без заполнения пор определялась сжимаемостью жидкости и для воды $\tilde{\chi}_{el} \sim 10^{-2}$. Как результат, в процессе роста давления в окрестности критического значения $P = P_c$ и перехода от упругого сжатия суспензии при $\tilde{\chi}_{el} \sim 10^{-2}$ к заполнению на малом интервале времени $t \sim \tau_0$ должен наблюдаться скачок $\dot{P}$.

Транспорт жидкости при развитии растущей коллективной моды исследовался в опытах [16, 19] методом ударного сжатия. При ударном сжатии в режиме

постоянного давления изменение объема суспензии происходит за счет заполнения пор без упругого сжатия. Заполнение пор в этом режиме является, в соответствии с (1), результатом двух различных процессов: спонтанного заполнения и заполнения, вызванного уменьшением объема пор при ударном сжатии суспензии в объеме камеры, полностью заполненной суспензией. Чтобы учесть изменение доли x заполненных пор при ударном сжатии при выводе уравнения для $x(t)$ в уравнении (1) необходимо, следуя [16], учесть зависимость функции $F(k, t, x(t))$ от скорости изменения макропараметра $x(t)$. Это позволило описать изменение функции распределения на большем, чем τ_∞ , масштабе времени, $t \sim \tau_V \gg \tau_\infty$, $\tau_V \ll \tau_P$. В этом случае, в соответствии с (1), для скорости изменения доли заполненных пор при ударном сжатии имеем:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\dot{V}(t)}{V_0}, \quad (5)$$

где $\dot{V}(t)$ – скорость изменения доли заполненных пор при ударном сжатии. В опытах [16–19] ударное сжатие суспензии исследовалось на ударном стенде. Груз массы M падал на шток, который входил в камеру, заполненную суспензией. В такой методике при $P = \text{const}$ уменьшение объема суспензии происходит лишь за счет заполнения пор. Тогда можно получить выражение для скорости изменения доли заполненных пор при ударном сжатии в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\dot{V}(t)}{V_0} = \frac{v_r(t)S}{V_0}, \\ \dot{v}_r &= -a = -\frac{PS}{M}, \\ v_r(t) &= v_r(0) - at, \end{aligned} \quad (6)$$

где $v_r(t)$ – скорость движения штока с грузом массы M , S – площадь штока, $x(t) = \frac{V(t)}{V_0}$, $V(t)$ – заполненный объем пор.

Из (5), (6) следует, что скорость транспорта за счет ударного сжатия уменьшается со временем вследствие торможения груза с ускорением a при постоянном давлении P_0 . Решения (3) и (6) получены для функции распределения кластеров заполненных пор в виде произведения $F(k, t) = x(t)A(t)F(k)$. В соответствии с уравнением (4) величина $A(t)$ изменяется на малом масштабе времени τ_∞ . Величина $x(t)$ определяет зависимость доли заполненных пор от времени на большем масштабе τ_V , $\tau_V \gg \tau_\infty$.

Из (3) и (6) следует, что поток жидкости можно представить как состоящий из двух потоков (мод) – спонтанного заполнения и заполнения, вызванного

ударным сжатием. Характерное время течения в первом потоке τ_∞ , во втором потоке $\tau_V \sim \left| \frac{v_r S}{V_0} \right|^{-1}$. Величина скорости транспорта тогда должна определяться двумя процессами, происходящими одновременно в двух различных масштабах времени. Эти времена могут быть близкими, в соответствии с (3), (6), при $x \ll 1$ и различаться на порядок при $x \sim 1$. Поэтому для описания нестационарного транспорта необходимо учесть взаимодействие мод. Следует отметить, что такой учет является принципиальным и приводит к качественному изменению модели по сравнению с моделью, предложенной в [16].

Взаимодействие мод и сохранение объема суспензии приводит к равенству скоростей развития мод в разных масштабах времени. В опытах [16–19] взаимодействие мод следует из условия сохранения гидравлического контакта штока с суспензией. Отсутствие постоянного гидравлического контакта и отсутствие взаимодействия между модами привело бы к образованию области вакуума между штоком и суспензией или сжатию суспензии и росту давления. Будем полагать, что характерное время развития быстрой моды спонтанного заполнения τ_∞ много меньше характерного времени заполнения при ударном сжатии τ_V . Тогда равенство скоростей изменения объема может быть записано как равенство за время τ_∞ приращения заполнения Δx , вызванного модой спонтанного заполнения и приращения скорости заполнения, вызванного ударным сжатием:

$$\frac{\Delta x \theta_0}{\tau_\infty} = \frac{\Delta v_r S}{V_0} = a \tau_\infty \frac{S}{V_0} = \frac{PS}{M} \frac{S}{V_0} \tau_\infty. \quad (7)$$

В соответствии с (7) на интервале времени от 0 до τ_∞ процесс заполнения описывается уравнением (3) и представляет собой процесс спонтанного заполнения. На большом интервале времени τ_V процесс заполнения описывается уравнением (6) для моды ударного сжатия. Соотношение (7) представляет собой начальные и конечные граничные условия для уравнения (3) и определяет изменение заполнения на каждом малом интервале τ_∞ . При уменьшении скорости заполнения при ударном сжатии должно уменьшаться изменение доли заполненных пор за время τ_∞ . Таким образом, быстрое спонтанное заполнение следует за медленным ударным сжатием, подстраиваясь на последовательности интервалов времени масштаба τ_∞ . Наблюдаемые в опытах зависимости от времени скорости транспорта жидкости, объема заполненных пор и давления, должны описываться медленной модой ударного сжатия и уравнением (6).

В соответствии с (6) скорость потока в опытах линейно зависит от времени (см. рис. 1). Тогда за-

полненный объем пор в соответствии с (6), (7) является квадратичной функцией времени на интервале до максимального заполнения пор. Это означает, что транспорт при $P = \text{const}$ эффективно является бездиссипативным, что соответствует наблюдаемой [16, 19] неизменности зависимостей от времени объема и давления при изменении температуры и вязкости жидкости. В силу ограниченности величины заполнения $x < 1$ в режиме $P = \text{const}$, в соответствии с (7), максимальная скорость заполнения $v_r S < \frac{V_0 \theta_0}{\tau_\infty}$. При выполнении этого ограничения транспорт жидкости при внешнем воздействии происходит в условиях развития неустойчивой моды. Характерная величина скорости заполнения определяется отношением объема доступных пор и времени τ_∞ . В соответствии с (6), (7) при изменении скорости ударного сжатия можно определить границы величины скорости спонтанного быстрого транспорта жидкости в неустойчивом состоянии системы в режиме постоянного давления. В этом режиме, в соответствии с обсуждаемой моделью транспорта, критическое давление определяется структурой пор и взаимодействием кластеров жидкости в порах и не должно зависеть от массы частиц и энергии ударного сжатия. С другой стороны, в силу равенства скоростей транспорта в двух модах (7) зависимость потока от времени должна определяться давлением P_0 .

В соответствии с (3)–(7) спонтанный транспорт следует на масштабе времени τ_∞ за быстрым ударным сжатием. При изменении (уменьшении) энергии ударного сжатия за время τ_∞ изменяется доля заполненных пор и, в соответствии с (3), изменяется скорость спонтанного транспорта. Поэтому можно сказать, что скорость спонтанного транспорта “подстраивается” под изменение скорости внешнего воздействия. При таком свойстве спонтанный транспорт изменяется так, что способствует изменению воздействия. Это соответствует отклику со свойством положительной обратной связи.

На рисунке 1 приведены новые экспериментальные данные по одновременному измерению зависимостей от времени трех величин – потока, заполненного объема и давления для системы нанопористая среда либерсорб 23-вода при энергии удара $E = 30$ Дж и массе пористого тела $m = 5$ мг. Измерения проводились с помощью экспериментального стенда и методики, описанной в [16]. Сплошные кривые соответствуют зависимостям, рассчитанным по формулам (3), (6). Видно, что теоретические кривые описывают экспериментальные данные в пределах погрешностей измерений. На интервале времени до достижения критического давления P_c зависимости

$J(t)$, $V(t)$ и $P(t)$ определяются процессами упругого сжатия суспензии без заполнения пор.

На интервале времени от t_c до t_0 давление изменяется до величины $P_0 = 180$ атм спонтанного заполнения пор. На этом интервале скорость заполнения меняется от нуля до максимальной скорости заполнения в соответствии с формулой (4). Заполнение происходит при одновременном изменении объема за счет ударного сжатия суспензии. При $t > t_0$ заполнение происходит при $P = P_0 = \text{const}$ и линейной зависимости потока $J(t)$ в соответствии с уравнениями (5), (6) для медленной моды и условием взаимодействия мод (7). В этом режиме наблюдается квадратичная зависимость объема $V(t) = \int_0^t J(t') dt'$ от времени. Процесс завершается в момент полного поглощения импульса удара τ_V . Отметим, что величина τ_∞ однозначно определяется интервалом времени от t_c до t_0 и, в соответствии с рис. 1 составляет $\tau_\infty = \frac{1}{2}(t_c - t_0) \approx 1$ мс. Таким образом, предлагаемая модель свободна от подгоночных параметров.

Процесс заполнения как результат взаимодействия быстрой и медленной мод представлен на рис. 2. В этом процессе, в соответствии с (7), медленная мода транспорта, вызванная ударным сжатием, определяет квадратичную зависимость $x(t)$. Быстрая мода с экспоненциальной зависимостью $A(t)$ подстраивается к медленной моде. Процесс заполнения на большом интервале времени от 0 до τ_V может быть представлен как последовательность множества подстроек заполнения на малых интервалах времени τ_∞ .

Таким образом, предлагаемая модель взаимодействия двух мод позволяет описать экспериментальные данные для системы либерсорб 23-вода и, тем самым, предложить механизм транспорта в условиях самопроизвольного заполнения нанопористого тела.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 20-08-01003.

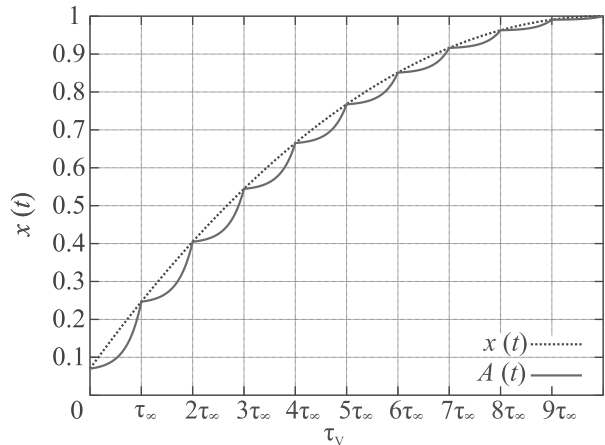


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости от времени доли заполненного объема (3) при ударном сжатии $x(t)$ и амплитуды $A(t)$ неустойчивой моды (5), (6) с учетом их взаимодействия (7). Для наглядности и различимости кривых показатель экспоненты при расчете кривой $A(t)$ был увеличен в 5 раз. На интервале от 0 до τ_∞ при скорости ударного сжатия, меньшей скорости спонтанного заполнения, быстрая мода спонтанного заполнения подстраивается, в соответствии с (7), к моде ударного сжатия. На каждом малом интервале времени $\tau_\infty \ll \tau_V$ заполнение изменяется по экспоненциальному закону, характерному для быстрой моды, для медленной моды на интервале времени $0 - \tau_V$ характерна квадратичная зависимость объема от времени, а процесс транспорта от 0 до τ_V представляет собой непрерывную подстройку быстрой моды под медленную на множестве малых интервалов τ_∞ .

1. X. Gao, G. Ji, S. Bhatia, and D. Nicholson, Processes **7**(1), 14 (2019).
2. G. Fraux, F. Coudert, A. Boutin, and A.H. Fuchs, Chem. Soc. Rev. **46**(23), 7421 (2017).
3. T.V. Nizkaya, E.S. Asmolov, and O.I. Vinogradova, Phys. Rev. E **96**(3), 033109 (2017).
4. В.В. Прудников, П.В. Прудников, Е.А. Поспелов, П.Н. Маляренко, Письма в ЖЭТФ **107**(9), 595 (2018).
5. В.А. Ткаченко, О.А. Ткаченко, Г.М. Миньков, А.А. Шерстобитов, Письма в ЖЭТФ **104**(7), 501 (2016).

6. Ф.Д. Иудин, Д.И. Иудин, В.Б. Казанцев, Письма в ЖЭТФ **101**(4), 289 (2015).
7. В.Д. Борман, В.В. Тепляков, В.Н. Тронин, И.В. Тронин, В.И. Троян, ЖЭТФ **117**(6), 1094 (2000).
8. В.Д. Борман, В.Н. Тронин, И.В. Тронин, В.И. Троян, ЖЭТФ **125**(1), 114 (2004).
9. F. Feuillebois, M. Z. Bazant, and O.I. Vinogradova, Phys. Rev. Lett. **102**(2), 026001 (2009).
10. M. Majumder, N. Chopra, R. Andrews, and B. J. Hinds, Nature **438**(7064), 44 (2005).
11. J.K. Holt, H.G. Park, Y. Wang, M. Stadermann, A.B. Artyukhin, C.P. Grigoropoulos, A. Noy, and O. Bakajin, Science **312**(5776), 1034 (2006).
12. B. Xu, Y. Qiao, and Xi Chen, J. Mechanics and Physics of Solids **62**, 194 (2014).
13. В.Д. Борман, А.А. Белогорлов, В.А. Быркин, В.Н. Тронин, В.И. Троян, Письма в ЖЭТФ **95**(10), 579 (2012).
14. V.D. Borman, A.A. Belogorlov, V.A. Byrkin, and V.N. Tronin, Phys. Rev. E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics **88**(5), 052116 (2013).

15. V. D. Borman, A. A. Belogorlov, and V. N. Tronin, Phys. Rev. E **93**(2), 022142 (2016).
16. В. Д. Борман, А. А. Белогорлов, Г. В. Лисичкин, В. Н. Тронин, В. И. Троян, ЖЭТФ **135**(3), 446 (2009).
17. Y. Sun, Z. Guo, J. Xu, X. Xu, Ch. Liu, and Y. Li, Mater. Des. **66**, 545 (2015).
18. M. Li and W. Lu, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**(26), 17167 (2017).
19. V. D. Borman, A. A. Belogorlov, and V. N. Tronin, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects **537**, 540 (2018).
20. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, М. (1980).
21. Г. Хакен, *Синергетика*, Мир, М. (1980).
22. H. A. Kramers, Physica **7**(4), 284 (1940).

Магнитное рассеяние нейтронов в восстановленном оксиде графена

В. В. Рунов⁺¹⁾, А. Н. Бугров^{*×}, Р. Ю. Смыслов^{+*}, Г. П. Копица⁺, Е. М. Иванькова^{*}, А. А. Павлова[°],
А. Феоктистов[▽]

⁺Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова,
Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 188300 Гатчина, Россия

^{*}Институт высокомолекулярных соединений РАН, 199004 С.-Петербург, Россия

[×]Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет “ЛЭТИ” им. В. И. Ульянова (Ленина),
197376 С.-Петербург, Россия

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

[▽]Юлихский центр нейтронных исследований GmbH, 85748 Гархинг, Германия

Поступила в редакцию 3 февраля 2021 г.

После переработки 9 февраля 2021 г.

Принята к публикации 9 февраля 2021 г.

Используя метод малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов, удалось, впервые, оценить масштаб магнитных корреляций в материалах на основе восстановленного оксида графена (ВОГ). Полученный результат является основной целью работы, поскольку такую информацию невозможно получить другими методами. Эксперименты показали наличие малоуглового магнитно-ядерного интерференционного рассеяния как для нативного ВОГ, так и для композита на его основе в магнитных полях H порядка 1 Тл, что однозначно свидетельствует о наличии в изучаемых материалах намагниченных областей масштаба 1000 Å.

DOI: 10.31857/S1234567821060057

Введение. В научной периодике магнетизму в углеродных структурах, таких как графен и его производные, уделяется большое внимание, как минимум, по двум причинам. Во-первых, это поиск новых магнитных материалов для спиновой электроники, во-вторых, интерес к физическим процессам в высокодефектных 2D углеродных наноструктурах, к которым относится восстановленный оксид графена (ВОГ) [1–5]. В ВОГ, согласно литературным данным, могут возникать магнитные и сверхпроводящие эффекты, которые наиболее явно прослеживаются в более дефектных образцах со значительным отклонением от стехиометрии, а также в углеродных композитных материалах на его основе [6, 7]. Предположительно, это происходит из-за деформационных напряжений, которым подвергаются графеновые слои в композитах, или при модификации их поверхности органическими соединениями. Теории магнетизма в этих системах пока не существуют. Наблюдаемые в экспериментах эффекты интерпретируются, исходя из многочисленных модельно-вычислительных расчетов, как следствие дефектов, вакансий, sd -гибридизации или, например, как топо-

логические изменения в многослойном графене [6, 8–10]. Магнитные эффекты в этих материалах априори малы, составляют доли $\text{Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$, и экспериментально изучаются объемными “bulk” методами, как правило, с помощью квантовых магнитометров. Наши исследования малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов (МУРПН) (SAPNS) с анализом магнитно-ядерного интерференционного рассеяния [11–14] показали высокую чувствительность метода к магнитным примесям и фазам. Например, в работе [14] была обнаружена и исследована магнитная фаза Fe_3P в соединении LiFePO_4 , магнитный момент которой в поле также составлял доли $\text{Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$. Поэтому можно было рассчитывать на положительный результат исследований и для материалов на основе ВОГ, которые имеют сопоставимый магнитный момент, но, что самое главное, не содержат примеси магнитных элементов, например, 3d металлов.

Метод МУРПН позволяет не только разделять ядерное и магнитное рассеяния, но и выделять интерференционное магнитно-ядерное рассеяние на контрастирующих областях, которые образуются в материалах с магнитными примесями или возникающими магнитными фазами. Магнитно-ядерное интерференционное рассеяние обладает высокой чув-

¹⁾e-mail: runov_vv@pnpi.nrcki.ru

ствительностью, которая определяется такими факторами, как: i) линейная зависимость рассеяния от магнитной и ядерной амплитуд; ii) выделение интерференционного рассеяния из общего малоуглового рассеяния, т.е. измерение на “нулевом” физическом фоне. Последнее достигается тем, что интенсивность интерференционного рассеяния, $\Delta(q)$, где q – переданный волновой вектор, измеряется как разница в рассеянии для двух спиновых состояний нейтронов, по и против приложенного к образцу магнитного поля (up/down) и пропорциональна произведению ядерной, A , и магнитной, b , амплитудам рассеяния:

$$\Delta(q) = I[q, P(\text{up})] - I[q, P(\text{down})] \sim Ab. \quad (1)$$

В разности интенсивностей рассеяния для двух спиновых состояний нейтронов, т.е. квадратов суммы ядерной и магнитной амплитуд рассеяния, остается только интерференционная часть, которая зависит от поляризации (up/down), поскольку магнитная амплитуда спин-зависимая. Чисто ядерное или магнитное рассеяния, как квадраты соответствующих амплитуд, в разности сокращаются. Детальная информация о рассеянии поляризованных нейтронов представлена в работах [11–14] и в обзоре [15]. Измерения рассеяния поляризованных нейтронов с поляризацией P на намагниченном материале во внешнем магнитном поле H , как правило, проводят в геометрии $P \parallel H \parallel B$, ориентируя P по (up) и против (down) внешнего магнитного поля H на образце флиппером, B – индукция в образце. Обнаружение интерференционного магнитно-ядерного рассеяния, т.е. при $\Delta(q) \neq 0$, свидетельствует однозначно, что в изучаемой системе есть магнитно-ядерные коррелированные области соответствующего масштаба.

Экспериментальная часть. Из природного кристаллического графита (марка ГСМ-1, Тайгинского месторождения) с помощью усовершенствованного метода Хаммера получали коллоидные суспензии многослойных листов оксида графена (ОГ) по методике, подробно описанной в работе [16]. Восстановление оксида графена проводилось в атмосфере аргона при 250 °С. Для получения дефектных структур ВОГ перфорировали с помощью УФ облучения [17]. Функционализация поверхности как нативных, так и перфорированных ВОГ винильными группами проводилась за счет остаточных ОН и СООН групп с помощью 3-метоксипропил метакрилата (ТМСМ) [18]. Далее двумерные углеродные структуры с реакционноспособными $\text{CH}_2 = \text{CH}$ -группами сополимеризовали со стиролом в условиях, приведенных в [19]. В расчете на массу

полимера количество вводимого ВОГ составляло 3 мас.%. Исследования двумерных углеродных наполнителей со сплошными и перфорированными базальными плоскостями как в нативном виде, так и в составе композитов на основе полистирола осуществляли методом сканирующей электронной микроскопии на микроскопе Supra 55VP (Carl Zeiss, Германия). Элементный анализ проводился методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии с помощью приставки Oxford INCA Wave (Oxford Instruments, Великобритания) для косвенного подтверждения наличия на поверхности ВОГ молекул модификатора по содержанию кремния, а также для подтверждения отсутствия в образцах примесей 3d-металлов.

Измерения МУРПН с длиной волны $\lambda = 5 \text{ \AA}$ выполнялись при комнатной температуре на реакторе FRM-2 в г. Мюнхен (Германия) на установке KWS-1 [20, 21] с целью анализа магнитно-ядерного интерференционного рассеяния от синтезированных материалов на основе ВОГ.

Результаты и обсуждения. На рисунке 1 приведены значения интенсивностей малоуглового рассеяния в измеренных образцах ВОГ до и после его

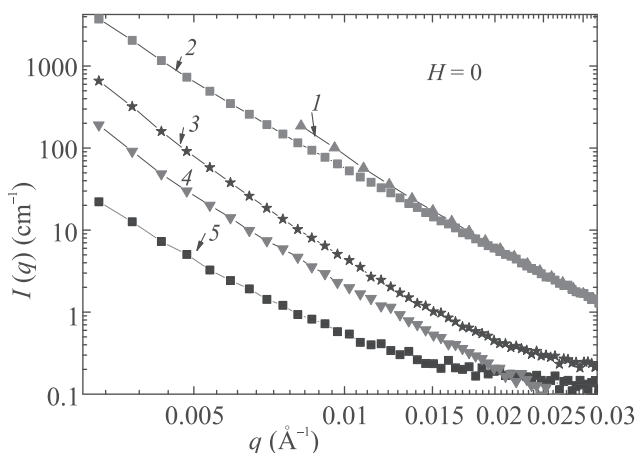


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость интенсивности от вектора рассеяния при $H = 0$ в образцах: ВОГ (1), ВОГ@ТМСМ (2), (ВОГ + УФ)@ТМСМ (3), ПС/(ВОГ + УФ)@ТМСМ (4), ПС/ВОГ@ТМСМ (5)

обработки УФ излучением, поверхностной функционализации с помощью ТМСМ и ковалентного присоединения к макромолекулам полистирола. Данные зависимости интенсивности рассеяния от переданного импульса $I(q)$ характеризуют мезоскопическую структуру исследуемых образцов, определяемую дефектностью ВОГ. Экспериментальные значения интенсивностей азимутально усреднены в плоскости

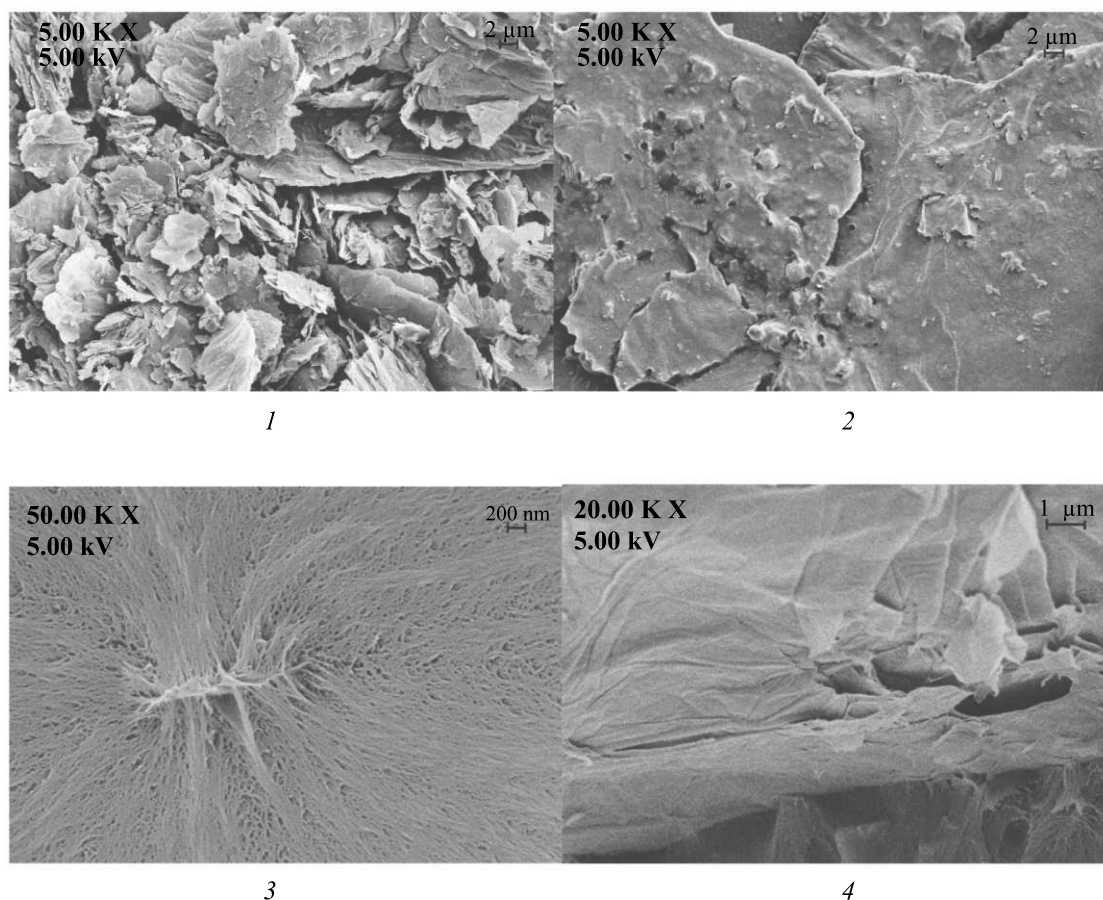


Рис. 2. Микрофотографии сканирующей электронной микроскопии двумерных углеродных наполнителей и поперечных сколов композитов на их основе: BOG@TMSPM (1), BOG + UF@TMSPM (2), PS/BOG@TMSPM (3), PS/(BOG + UF)@TMSPM (4)

2D детектора. Приведенные интенсивности рассеяния определяются ядерным контрастом в образцах, вклад магнитного рассеяния в этом масштабе незаметен, это будет показано ниже. Согласно зависимостям $I(q)$ в отсутствии магнитного поля, $H = 0$, дефектность образцов разная, отличается на порядки по рассеянию (рис. 1). Особенно выделяются образцы нативного и поверхностно функционализированного винильными группами BOG (рис. 1, кривые 1 и 2). По данным СЭМ длина и ширина поверхностно функционализированных $\text{CH}_2 = \text{CH}$ -группами пачек BOG составляет в среднем от 2 до 10 мкм (рис. 2, снимок 1), тогда как размеры аналогичных двумерных структур, перфорированных с помощью УФ излучения после модификации TMSPM заметно выше, порядка нескольких десятков микрон (рис. 2, снимок 2). После сополимеризации обоих типов BOG со стиролом их размеры в объеме полимерной матрицы существенно не изменяются. При этом в композите практически на всей границе раздела фаз наблюда-

ется хорошая адгезия между BOG@TMSPM и полистиролом (рис. 2, снимок 3), а в случае УФ перфорированного наполнителя такое взаимодействие фиксируется преимущественно на краях, сформированных в процессе облучения дефектов (рис. 2, снимок 4).

Анализ мезоскопической структуры нативного, поверхностно функционализированного и сополимеризованного со стиролом BOG по результатам МУРН, МУРР, а также других методов физико-химического анализа будет дан в отдельной работе. В данном исследовании внимание акцентируется на наблюдении магнитного рассеяния в вышеперечисленных образцах. Чтобы убедиться в отсутствии занесенных извне магнитных примесей в объектах исследования проводился энергодисперсионный микро-рентгеноспектральный анализ до и после эксперимента. По результатам элементного анализа в пробах BOG, модифицированного TMSPM и композитах на его основе, присутствовали только углерод, кислород, сера и кремний. Присутствие последнего

обусловлено наличием кремнийорганического модификатора на поверхности углеродного наполнителя и внутри композитов (табл. 1).

Таблица 1. Элементный анализ ВОГ и композитов на его основе

Образец	C	O	S	Si
	ат. %			
ВОГ@ТМСПМ	81.37	18.22	0.10	0.31
ВОГ + УФ@ТМСПМ	72.58	24.11	3.04	0.27
ПС/ВОГ@ТМСПМ	100	—	—	—
ПС/(ВОГ + УФ)@ТМСПМ	99.16	0.84	—	—

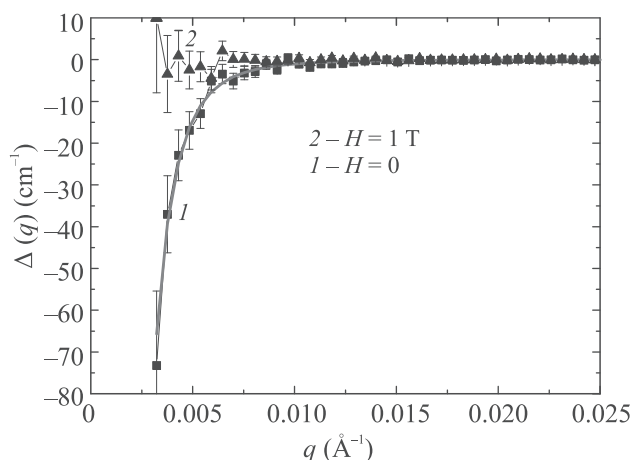


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость от вектора рассеяния интенсивности интерференционного рассеяния в поверхностно модифицированном ТМСПМ ВОГ во внешнем магнитном поле $H = 1$ Тл (1) и при $H = 0$ (2). Сплошной линией показана аппроксимация экспериментальных данных по формуле (2) с корреляционным радиусом $R_C = 640$ (220) Å

На рисунках 3 и 4 приведены наиболее значимые результаты измерений малоуглового магнитно-ядерного интерференционного рассеяния на синтезированных композитах, усредненные в плоскости детектора. Интерференционное рассеяние хорошо описывается квадрированным лоренцианом с характерным радиусом корреляции R_C :

$$\Delta(q) = a / (q^2 + (1/R_C)^2)^2, \quad (2)$$

где a – свободный параметр, R_C – корреляционный радиус магнитно-ядерной контрастирующей и, соответственно, рассеивающей области. В координатном представлении распределение соответствует экспоненциально спадающему с расстоянием r коррелятору $\exp(-r/R_C)$ с асимптотикой Порода $\propto q^{-4}$ при больших q ($qR_C \gg 1$), которое характерно для описа-

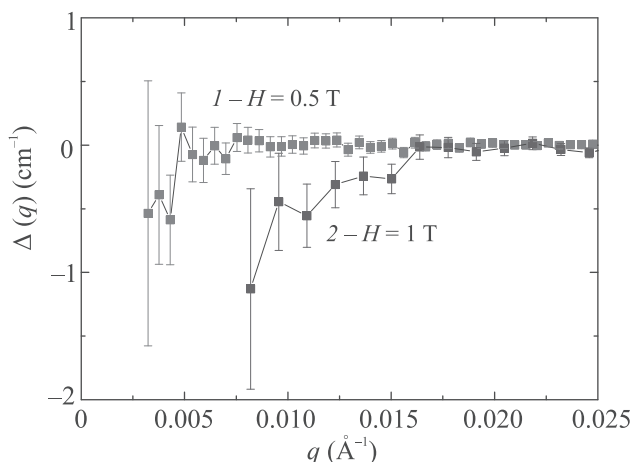


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость от вектора рассеяния интенсивности интерференционного рассеяния в композитах: 1 – ВОГ/ПС@ТМСПМ (образец 5 на рис. 1) в поле $H = 0.5$ Тл; 2 – ВОГ (образец 1 на рис. 1) в поле $H = 1$ Тл

ния рассеяния на объектах с хорошо выраженными границами.

Интерференционное рассеяние заметно и на других образцах, например, ПС/ВОГ@ТМСПМ (1) и ВОГ (2) (рис. 4). К сожалению, эти измерения проведены не в оптимальных экспериментальных условиях, прежде всего по статистике.

Рассеяние на нативном ВОГ измерено в диапазоне $0.008 < q < 0.03$ Å⁻¹ и с плохой статистикой (рис. 1, кривая 1). Возможно, что при $q < 0.008$ Å⁻¹ как ядерное, так и интерференционное рассеяние для ВОГ было бы больше, чем в случае его поверхностно модифицированного ТМСПМ варианта, представленного на рис. 3. В свою очередь, перфорация слоев ВОГ с помощью УФ излучения способствует снижению интенсивности рассеяния на исследуемых углеродных структурах (рис. 1, кривая 3), вероятно, вследствие образования в них сквозных отверстий диаметром около 1 мкм (рис. 2). Наиболее слабое рассеяние наблюдается от композитов полистирол/ВОГ, поскольку содержание как нативного, так и перфорированного углеродного наполнителя в полимерной матрице составляет 3 мас. % (рис. 1, кривые 4, 5). Скорее всего, интерференционное рассеяние есть на всех образцах, однако для его наблюдения необходимо оптимизировать экспериментальные условия: по концентрации рассеивающих центров, по q -диапазону, возможно, по величине магнитного поля и, конечно, по статистике. В оправдание следует отметить, что это пилотные МУРПН измерения, выполненные при жестком временном графике на образцах, нейтронные измерения на которых ранее не проводились.

Выводы. Эксперименты по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов на ВОГ и его композитах показали наличие магнитно-ядерного интерференционного рассеяния в сравнительно слабых магнитных полях. Эксперимент свидетельствует о наличии в изучаемых системах намагниченных областей масштаба ~ 1000 Å. Для выяснения природы намагниченных областей, как и вообще магнетизма в ВОГ материалах, необходимы дальнейшие исследования не только “bulk” методами, таких работ много, но и дифференциальными методами, например, методом МУРПН, который позволяет определять характерные параметры областей намагничивания в диапазоне 30–3000 Å. Пока о таких работах не сообщалось.

А. Н. Бугров, Р. Ю. Смыслов и В. В. Рунов благодарят Российский фонд фундаментальных исследований (грант # 20-02-00918 А) за финансовую поддержку проводимых в настоящей работе научных исследований. Эта работа основывается на экспериментах, проведенных на приборе KWS-1, Юлихского центра нейтронных исследований при MLZ, Гархинг, Германия.

1. А. Л. Ивановский, УФН **177**(10), 1083 (2007); DOI: 10.3367/UFN.0177.200710b.1083.
2. Т. Л. Макарова, Физика и техника полупроводников **38**(6), 641 (2004).
3. B. Sanyal and O. Eriksson, *Advanced Functional Materials: A Perspective from Theory and Experiment*, Elsevier (2012), p. 260.
4. A. Diamantopoulou, S. Glenis, G. Zolnierkiwicz, N. Guskos, and V. Likodimos, J. Appl. Phys. **121**, 043906 (2017); DOI: 10.1063/1.4974364.
5. S. Yang, M. Tan, T. Yu, X. Li, X. Wang, and J. Zhang, Nano-Micro Lett. **12**, 69 (2020); DOI: 10.1007/s40820-020-0403-9.
6. Y. F. Wang, S. B. Singh, M. V. Limaye et al. (Collaboration), Sci. Rep. **5**, 15439 (2015); DOI: 10.1038/srep15439.
7. А. Н. Ионов, М. П. Волков, М. Н. Николаева, Письма в ЖЭТФ **109**(3), 162 (2019); DOI: 10.1134/S0370274X19030044.
8. T. Huang, L. Zhang, and T. Ma, Sci. Bull. **64**, 310 (2019); DOI: 10.1016/j.scib.2019.01.026.
9. T. Miyata, S. Gohda, T. Fujii, H. Ono, H. Itoh, Y. Nishina, and K. Kashimura, Carbon **171**, 10 (2021); DOI: 10.1016/j.carbon.2020.08.044.
10. O. V. Yazyev and M. I. Katsnelson, Adv. Funct. Mater. **2**, 71 (2012); DOI: 10.1016/B978-0-44-453681-5.00004-2.
11. В. В. Рунов, Д. С. Ильин, М. К. Рунова, А. К. Раджабов, Письма в ЖЭТФ **95**(9), 530 (2012).
12. В. В. Рунов, В. Н. Скоробогатов, М. К. Рунова, И. В. Сумин, ФТТ **56**(1), 68 (2014).
13. В. В. Рунов, А. Н. Бугров, Р. Ю. Смыслов, Г. П. Копица, М. К. Рунова, Б. В. Васильев, Е. Н. Попова, С. А. Кириллова, А. Феоктистов, В. Пилич, Журнал неорганической химии **66**(2), 229 (2021); DOI: 10.31857/S0044457X21020173.
14. E. Ershenko, A. Bobyl, M. Boiko, Y. Zubavichus, V. Runov, M. Trenikhin, and M. Sharkov, Ionics **23**, 2293 (2017); DOI: 10.1007/s11581-017-2068-z.
15. С. В. Малеев, УФН **192**(6), 617 (2002); DOI: 10.1070/PU2002v045n06ABEH001017.
16. A. Dideykin, A. E. Aleksenskiy, D. Kirilenko, P. Brunkov, V. Goncharov, M. Baidakova, D. Sakseev, and A. Ya. Vul', Diam. Relat. Mater. **20**(2), 105 (2011); DOI: 10.1016/j.diamond.2010.10.007.
17. M. N. Nikolaeva, A. N. Bugrov, T. D. Anan'eva, A. T. Dideikin, M. K. Rabchinskii, and A. N. Ionov, Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics **9**(6), 793 (2018); DOI: 10.17586/2220-8054-2018-9-6-793-797.
18. M. N. Nikolaeva, T. D. Anan'eva, A. N. Bugrov, A. T. Dideikin, and E. M. Ivankova, Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics **8**(2), 266 (2017); DOI: 10.17586/2220-8054-2017-8-2-266-271.
19. М. Н. Николаева, А. Н. Бугров, Т. Д. Ананьева, А. Т. Дидейкин, Журнал прикладной химии **87**(8), 1172 (2014); DOI: 10.1134/S1070427214080230.
20. A. V. Feoktystov, H. Frielinghaus, Z. Di, S. Jaksch, V. Pipich, M.-S. Appavou, E. Babcock, R. Hanslik, R. Engels, G. Kemmerling, H. Kleines, A. Ioffe, D. Richter and T. Brückel, J. Appl. Crystallogr. **48**, 61 (2015); DOI: 10.1107/S1600576714025977.
21. H. Frielinghaus, A. Feoktystov, I. Berts, and G. Mangiapia, Journal of large-scale research facilities **1**, A28 (2015); DOI: 10.17815/jlsrf-1-26.

Evidence of the ferroelectric polarization in charge transport through WTe₂ Weyl semimetal surface

N. N. Orlova¹⁾, N. S. Ryshkov, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, E. V. Deviatov

Institute of Solid State Physics of the Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 19 February 2021

Resubmitted 20 February 2021

Accepted 20 February 2021

DOI: 10.31857/S1234567821060069

Recently, three-dimensional WTe₂ single crystals were found to demonstrate coexistence of metallic conductivity and ferroelectricity at room temperature [1]. The latter usually belongs to the insulators [2–6], but it occurs in WTe₂ due to the strong anisotropy of the non-centrosymmetric crystal structure. The spontaneous polarization of ferroelectric domains is found to be bistable, it can be affected by high external electric field [1]. Scattering of the charge carriers on the domain walls is known to provide noticeable contribution to the sample resistance [7]. Thus, coexistence of metallic and ferroelectric properties should produce new physical effects [8] for electron transport in TMDCs, and, therefore, it should be important for nanoelectronic applications.

The single-crystal flakes of WTe₂ are obtained by regular mechanical exfoliation, also known as scotch-tape technique. Next, the exfoliated samples were transferred on the insulating SiO₂ substrate. While we need thick three-dimensional flakes to preserve WTe₂ semimetal properties, we use two different techniques for Ohmic contacts fabrication for the flakes of different thickness.

For the thinnest, 300–600 nm flakes, the Au leads are defined over the flake surface by standard photolithography and lift-off technique after thermal evaporation of 70 nm Au, see the AFM image in Fig. 1. As usual, thin flakes are about 10–30 μm in the lateral size, so only two or three Au leads can be placed over the flake to form Ohmic contacts with 5 μm distance. These samples are mostly suitable for the two-point transport measurements.

The thicker (1–3 μm) flakes are about 100 μm in lateral size, which allows different multiple contact geometries. However, standard 70–100 nm thick Au leads can not be formed across the 1–3 μm step, so we use different contact technique. Thick flakes are transferred to SiO₂

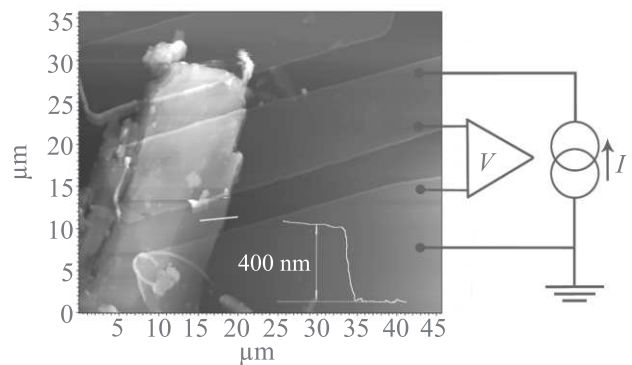


Fig. 1. (Color online) AFM image of the 400 nm thick sample with Au leads, evaporated over the WTe₂ flake. The leads are separated by 5 μm intervals. Inset demonstrates the AFM scan of the flake profile between the contact leads, along the white line in the image. Schematic diagram of the measurement circuit is also shown for the two-point connection scheme. For correct measurement of the low-resistance samples, we apply current I between the leads and measure the resulting voltage drop V . These measurements can be carried out in external electric field by applying gate voltage to the silicon wafer, separated from the flake by 300 nm SiO₂ layer. The measurements are performed at room temperature for WTe₂ samples of different thicknesses and lateral sizes, since ferroelectric domains have been previously observed in WTe₂ semimetal at room temperature [1]

substrate with pre-defined Au leads pattern, the flake is slightly pressed to the leads by another oxidized silicon substrate. This procedure has been verified to provide electrically stable contacts with high quality interfaces. Also, WTe₂ surface with Au contacts is protected from any contamination by SiO₂ substrate in this case.

To our surprise, we observe small but noticeable hysteresis in the experimental dV/dI with current sweep direction, so WTe₂ differential resistance is affected by the sign of the current change. Differential resistance $dV/dI(I)$ is a maximum at zero bias, it falls symmetri-

¹⁾e-mail: honna@issp.ac.ru

cally at positive and negative currents by about 20 % in a full current range.

The hysteresis reflects some slow relaxation process in charge transport through WTe₂. To demonstrate the relaxation directly, we show $dV/dI(t)$ time-dependent curves, which are found to depend on the sign of the current change. We can estimate relaxation time as about 300 s. This behavior well correlates with the hysteresis in $dV/dI(I)$ curves. These effects are intrinsic to bulk WTe₂, which can be confirmed by measurements in a standard four-point connection scheme, where the Au-WTe₂ interfaces are excluded.

We can also study effect of the normal-to-the-plane electric field on $dV/dI(I)$ curves by using silicon substrate as a gate electrode. Increasing the gate voltage value shifts $dV/dI(I)$ curves down irrespective of the gate voltage sign, so the dV/dI level is in a maximum at zero gate voltage and falls symmetrically both to positive and negative gate voltage values, in contrast to the standard asymmetric accumulation/depletion field-effect transistor behavior.

The hysteresis amplitude can be demonstrated directly by subtracting two $dV/dI(I)$ curves for opposite current sweep directions at fixed gate voltage. The resulting $\Delta dV/dI(I)$ shows a maximum at the -1 mA negative current and a minimum at the +1 mA positive one. These results can be reproduced for samples of different thicknesses and lateral sizes, and, therefore, of different contact preparation techniques.

Even well-conducting WTe₂ single crystals demonstrate ferroelectricity at room temperature, which has been shown by direct visualization of ferroelectric domains [1]. The spontaneous polarization of these domains is normal to the WTe₂ layers, it can be affected by external electric field [1]. Due to the presence of the metallic conduction, there are two possible directions of the external electric fields in our setup: (i) gate field, $E_{\text{gate}} = V_g/d$, where $d = 300$ nm is the SiO₂ oxide thickness, E_g is directed normally to the WTe₂ surface; (ii) source-drain field $E_{sd} = \rho j$, which is connected with the flowing current, E_{sd} is parallel to the WTe₂ surface. The achievable values of the fields ($\sim 10^4$ – 10^6 V/m)

are too small to align polarization of the whole WTe₂ flake, so they mostly affect the domain wall regions. Due to the field direction, E_{gate} moves the position of the wall, while E_{sd} changes the wall region width. Thus, any variation of electric fields leads to the additional polarization current. The latter we observe as slow relaxation in dV/dI , since polarization current is connected with lattice deformation in ferroelectrics. The possibility to induce polarization current by source-drain field variation is unique for WTe₂, since it is a direct consequence of ferroelectricity and metallic conductivity co-existence [1].

The authors are grateful to V.T. Dolgoplov for fruitful discussions and S.S. Khasanov for XPS, and x-ray tungsten ditelluride characterization. We gratefully acknowledge financial support by RF State task.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021060011

1. P. Sharma, F.-X. Xiang, D.-F. Shao, D. Zhang, E. Y. Tsymbal, A. R. Hamilton, and J. Seide, *Sci. Adv.* **5**(7), eaax5080 (2019).
2. A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, G. I. Dovbeshko, M. D. Glinchuk, Y. Kim, and S. V. Kalinin, *Phys. Rev. B* **102**, 075417 (2020).
3. A. Urru, F. Ricci, A. Filippetti, J. Íñiguez, and V. Fiorentini, *Nat. Commun.* **11**, 4922 (2020); <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18664-6>.
4. C. Ferreyra, M. Rengifo, M. J. Sánchez, A. S. Everhard, B. Noheda, and D. Rubi, *Phys. Rev. Appl.* **14**, 044045 (2020); 10.1103/PhysRevApplied.14.044045.
5. M. V. Stern, Y. Waschitz, W. Cao, I. Nevo, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Sela, M. Urbakh, O. Hod, and M. Ben Shalom, *arXiv:2010.05182* (2020).
6. K. Yasuda, X. Wang, K. Watanabe, T. Taniguchi, and P. Jarillo-Herrero, *arXiv:2010.06600* (2020).
7. T. Hou, Ya. Ren, Yu. Quan, J. Jung, W. Ren, and Zh. Qiao, *Phys. Rev. B* **101**, 201403(R) (2020).
8. W. X. Zhou, H. J. Wu, J. Zhou et al. (Collaboration), *Commun. Phys.* **2**, 125 (2019); <https://doi.org/10.1038/s42005-019-0227-4>.

Диссоциация экситонных состояний в разогретом плотном водороде

И. Д. Федоров⁺, В. В. Стегайлов^{+,*×1)}

⁺Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

^{*}Московский физико-технический институт (НИУ), 141701 Долгопрудный, Россия

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

Поступила в редакцию 31 декабря 2020 г.

После переработки 22 февраля 2021 г.

Принята к публикации 25 февраля 2021 г.

Переход из молекулярного в атомарное состояние в разогретом плотном флюиде водорода является предметом активных научных исследований в последние несколько десятилетий. Использование различных экспериментальных методик до сих пор не привело к получению надежных согласующихся между собой результатов. Несмотря на многочисленные попытки, теоретические методы пока не смогли объяснить имеющиеся расхождения в экспериментальных данных и микроскопическую природу механизма перехода флюида водорода в проводящее состояние. В работе [I. D. Fedorov, N. D. Orekhov, V. V. Stegailov, Phys. Rev. B **101**, 100101(R) (2020)] была показана важность учета неравновесных неадиабатических процессов при анализе механизмов рассматриваемого перехода. В данной работе представлены результаты расчетов свойств экситонных состояний, образующихся в результате спонтанных вибронных возбуждений. Показано, что диссоциация подобных экситонов при высоких температурах может объяснить экспериментально детектируемые характеристики рассматриваемого перехода.

DOI: 10.31857/S1234567821060070

Природа перехода из молекулярного в атомарное состояние во флюидном водороде и дейтерии – одна из тех фундаментальных проблем [1–3], которые притягивают к себе много внимания на протяжении последних двух десятилетий, начиная с первого детального эксперимента по изучению электрической проводимости флюида H_2/D_2 при ударном сжатии [4]. В последующих динамических и статических экспериментах было собрано большое количество экспериментальных данных (например, см. [5–14]). Однако до настоящего времени не существует теории этого перехода, с единых позиций описывающей динамические и статические эксперименты и объясняющей отличия в их результатах.

Первые теоретические подходы к описанию перехода из молекулярного в атомарное состояние в разогретом плотном водороде были основаны на химических моделях [15–28]. Возможность плазменного фазового перехода была предсказана в работах [15, 29] и, получив поддержку недавних результатов первопринципных расчетов, рассматривается как возможный механизм данного перехода [30, 31]. Позже концепция перехода металл-диэлектрик получила широкое распространение для интерпретации результатов *ab initio* расчетов [32]. Квантовая

молекулярная динамика (МД), основанная на теории функционала плотности, и методы квантового Монте-Карло, считаются наиболее точными теоретическими инструментами для исследования данного перехода в плотном флюиде водорода (например, см. [31, 33–48]). Эти методы могут учитывать корреляции электронов и ядер в квантовом Монте-Карло [39], ядерные квантовые эффекты [35], дисперсионные взаимодействия [35, 36], влияние выбора обменного-корреляционного функционала в теории функционала плотности [37, 38] и зависимость обменно-корреляционного функционала от электронной температуры [49]. Однако учет этих эффектов в рамках квантовой МД до сих пор не дал возможность описать совокупность экспериментальных данных, характеризующих данный переход.

Двумя общими чертами для указанных методов являются предположение о термодинамическом равновесии ядерной и электронной подсистем и адиабатическое Борн-Оппенгеймеровское приближение. В методе квантового Монте-Карло основное состояние многоэлектронной системы рассчитывается для независимых ядерных конфигураций, составляющих канонический ансамбль [39]. Квантовая МД основана на конечно-температурной формулировке теории функционала плотности, предполагающей распреде-

¹⁾e-mail: stegailov.vv@phystech.edu

ление Ферми–Дирака чисел заполнения электронных состояний [50, 51]. Важным следствием этих предположений является то, что эксперименты по рассматриваемому переходу из молекулярного в атомарное состояние во флюидном водороде интерпретируются в рамках предположения о термодинамическом равновесии.

В работе [52] мы обратили внимание на неравновесные неадиабатические процессы, сопровождающие данный переход при нагреве в динамических и статических экспериментах. Было показано, что при быстром нагреве плотного флюида молекулярного водорода возникают вибранные возбуждения электронной подсистемы при неизменном молекулярном составе. Использование полуклассического метода переключений Тулли для описания перескоков между поверхностями основного состояния и первого возбужденного синглетного состояния позволило показать существование экситонных состояний со значительными временами жизни, что говорит о недостаточности равновесного описания данного перехода. Неадиабатическая природа перехода позволяет объяснить, во-первых, достаточно большой изотопический эффект [13] и, во-вторых, большую наблюдаемую удельную теплоту перехода [53, 54]. Подчеркнем, что речь идет о моделировании неравновесного процесса, который может затруднять интерпретацию импульсных экспериментов в рамках равновесных представлений об уравнивании состояния вещества, использующихся, например, в моделях планет-гигантов [3].

Таким образом, вибранный механизм образования экситонов в разогретом плотном молекулярном флюиде водорода является принципиально новым подходом к описанию результатов импульсных экспериментов, в которых исследуется переход из молекулярного в атомарное состояние во флюидном водороде. Целью данной работы является применение квантовой МД для расчета свойств, выявленных в [52], экситонных состояний, их количественная характеристика и определение их роли в механизме данного перехода при нагреве молекулярной фазы.

Описание возбужденного состояния электронной подсистемы. Для описания первого возбужденного состояния в данной работе используется ограниченный метод открытых оболочек Кона–Шэма (*Restricted Open-shell Kohn-Sham* – ROKS) [55] – один из наименее вычислительно затратных методов описания возбужденных состояний в рамках теории функционала плотности, позволяющий проводить расчеты квантовой МД для многоатомных систем [56, 57].

В методе ROKS рассматривается система $2N$ электронов, основное состояние S_0 которой соответствует N двукратно заполненным оболочкам (молекулярным орбиталям).

При переходе электрона из верхней полностью заполненной молекулярной орбитали (*Highest Occupied Molecular Orbital* – HOMO) на нижнюю незаполненную молекулярную орбиталь (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital* – LUMO) возможно 4 комбинации спинов электрона на двух однократно заполненных орбиталях (*Singly Occupied Molecular Orbital* – SOMO) (рис. 1). Первые два вырожденных состояния

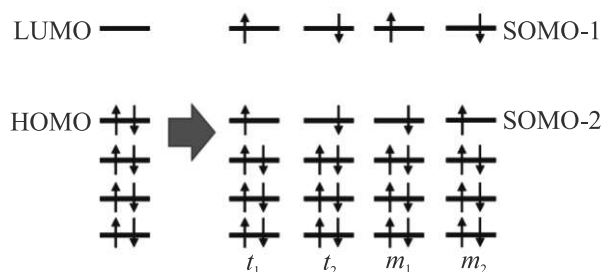


Рис. 1. (Цветной онлайн) Различные варианты состояний при переходе электрона с верхней заполненной молекулярной орбитали (HOMO) на нижнюю незаполненную молекулярную орбиталь (LUMO): t_1 , t_2 – триплетные состояния, m_1 , m_2 – смешанные состояния

формируют триплетное состояние, а два оставшиеся не являются собственными состояниями оператора полного спина, но из них при помощи разложения Клебша–Гордона можно выделить одно синглетное и одно триплетное состояние

$$t_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(m_1 - m_2), \quad (1)$$

$$s_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(m_1 + m_2). \quad (2)$$

При этом энергия такого синглетного состояния рассчитывается как разница между энергией смешанного состояния и энергией триплетного состояния:

$$E(s) = 2E(m) - E(t). \quad (3)$$

Таким образом, в рамках ROKS можно проводить квантовую МД на поверхности потенциальной энергии первого синглетного состояния S_1 , на каждом шаге рассчитывая электронную структуру S_1 , энергию $E(s)$ и соответствующие градиенты. Подобные расчеты дают возможность проанализировать отклик многоатомной и многоэлектронной системы

на электронное возбуждение. При этом мы не рассматриваем более высоколежащие возбужденные состояния электронов и полностью делокализованные электронные состояния в непрерывном спектре. Использование более универсальных методов расчета возбужденных состояний в рамках теории функционала плотности сопряжено с существенно большими вычислительными затратами (например, расчеты в рамках зависящей от времени формулировки данной теории TDDFT требуют в 100–1000 раз больших времен расчета на один шаг квантовой МД, кроме того, метод ROKS основан на орбитальном представлении волновой функции системы, что облегчает анализ структуры экситона).

Анализ структуры экситона. Следующим шагом в описании экситонного состояния в модели плотного водородного флюида является анализ пространственного распределения орбиталей с целью выявления пространственных корреляций между дыркой (SOMO-1, h) и электроном (SOMO-2, e). Для этого в работе используется метод максимально локализованных орбиталей Ванье. (Менее строгим с теоретической точки зрения аналогом локализации электронов с помощью орбиталей Ванье может считаться метод электронных волновых пакетов, который используется для описания плотного водорода при высоких температурах и давлениях [58–60].)

В данной работе интерес представляют центры орбиталей SOMO-1/2, которые (для случая замены сумм по зоне Бриллюэна значениями в Γ -точке) записываются в следующем виде [61, 57]:

$$\langle \mathbf{r} \rangle_i^\alpha = - \sum_\beta \frac{h_{\beta\alpha}}{2\pi} \text{Im} \ln \left(Z_{ii}^\beta \right), \quad (4)$$

где $h_{\alpha,\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y, z$) – матричные элементы $\mathbf{h} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]$, где $\mathbf{a}_i$ – вектора расчетной ячейки. Матричный элемент Z_{ij} определяется следующим образом по орбиталям Кона–Шэма $|\phi_i\rangle$:

$$Z_{ij}^\alpha = \int_\Omega d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{g}_\alpha \cdot \mathbf{r}) \tilde{\phi}_i^*(\mathbf{r}) \tilde{\phi}_j(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где $\mathbf{g}_\alpha$ – вектора трансляции обратной решетке.

На рисунке 2 проиллюстрирована форма орбиталей SOMO-1 и SOMO-2 и показаны их центры Ванье в рассматриваемой модели плотного водородного флюида.

Детали вычислений. В данной работе для изучения динамики экситона рассматривается модель 480 атомов водорода в периодических граничных условиях при плотности в 0.6 г/см^3 в диапазоне тем-

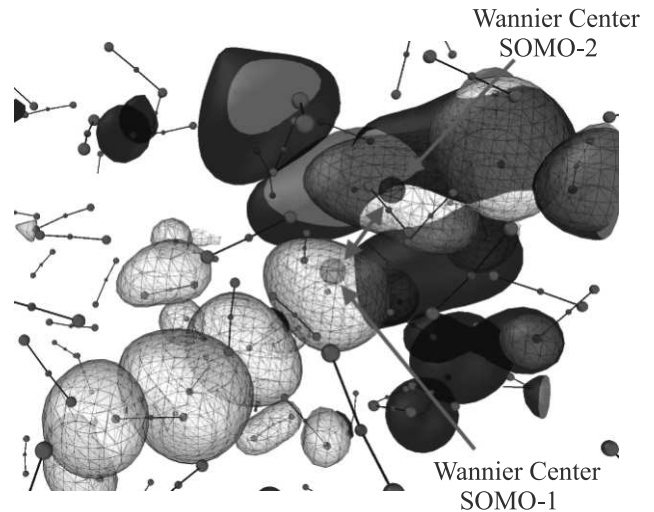


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределение электронной плотности последних двух однократно заполненных орбиталей SOMO-1 (серый цвет) и SOMO-2 (черный цвет), построенное для одной из конфигураций квантовой МД системы из 480 атомов водорода при плотности 0.6 г/см^3 и температуре 1700 К. Показаны изоповерхности электронной плотности $0.001 a_0^{-3}$ (a_0 – радиус Бора). Красной стрелкой обозначено расстояние между соответствующими центрами Ванье. Для выделения молекул H_2 центры атомов представлены в виде красных шаров, соединенных черными линиями с синими шарами, показывающими центры Ванье электронов на двукратно заполненных орбиталях

ператур от 1000 до 2800 К, что соответствует давлениям порядка 70–80 ГПа [62]. Расчеты проведены в программном пакете CPMD [63]. Использовался обменно-корреляционный функционал BLYP. Для моделирования первого синглетного возбужденного состояния использовался метод ROKS. Шаг квантовой МД составлял 0.1 фс. Использовался базис плоских волн с обрезкой в 70 Ry. Суммирование по зоне Бриллюэна заменялось значениями в Γ -точке.

Для каждой из температур предварительно производилась квантовая МД с использованием термостата Нозе–Гувера для вывода на равновесие в основном состоянии S_0 электронной подсистемы. Затем производилось моделирование в S_1 без термостата с выводом Ванье центров на каждом шаге квантовой МД. Для каждой температуры длительность МД траектории составляла 1 пс. Для расчета средней энергии вертикального возбуждения проводились расчеты квантовой МД на поверхности потенциальной энергии S_0 с расчетом энергии S_1 на каждом шаге.

Результаты и обсуждение. Анализ пространственного распределения между центрами Ванье для

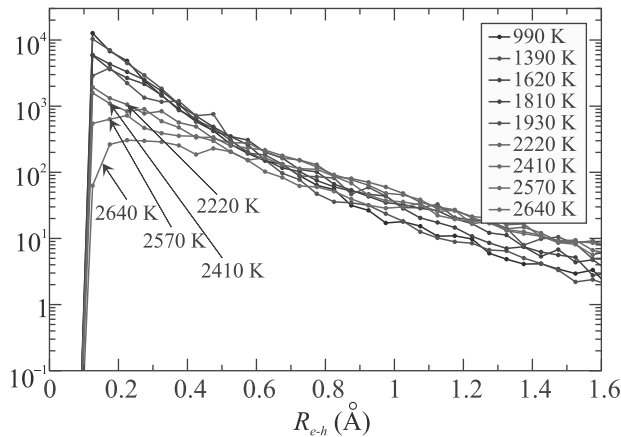


Рис. 3. (Цветной онлайн) Радиальная функция распределения электрон-дырочной пары, построенная для центров Ванье однократно заполненных орбиталей для системы из 480 атомов водорода при плотности 0.6 г/см^3 и диапазоне температур 1000–2800 K

электрона (SOMO-1) и дырки (SOMO-2) (рис. 3) показывает, что в диапазоне температур от 1000 K до примерно 2000 K вид радиальной функции распределения меняется незначительно. При этих температурах расстояние между электроном и дыркой сильно локализовано на $0.1\text{--}0.2 \text{ Å}$, что соответствует экситону Френкелевского типа. При этом, однако, центры Ванье SOMO-1/2 могут перескакивать с молекулы на молекулу и геометрический центр $e-h$ пары временно может не быть локализован между парой центров атомов (что имеет место для центров Ванье, соответствующих двукратно заполненным орбиталям). Если бы расчеты квантовой МД включали в себя возможность безызлучательной релаксации возбужденного состояния в основное состояние, то подобное близкое расположение электрона и дырки обуславливало бы быструю безызлучательную рекомбинацию экситона. Поэтому согласно расчетам экситонные состояния, образующиеся в результате вибронных возбуждений, переносящих тепловую энергию колебаний молекул водорода в энергию электронного возбуждения, не оказывают влияния на свойства флюида водорода плотности 0.6 г/см^3 при $T < 2000 \text{ K}$.

Пара электрона и дырки в среде с конечной диэлектрической проницаемостью всегда будет связана кулоновской энергией притяжения. В то же время тепловые флуктуации могут разрушать возникающую пространственную корреляцию. Поэтому для достаточно большой температуры мы можем говорить о “диссоциации экситона”, т.е. о состоянии, в котором тепловые флуктуации полностью разрушают кулоновскую корреляцию электрона и дырки.

При температурах выше 2000 K наблюдается быстрое уменьшение числа конфигураций с малым расстоянием в электрон-дырочной паре. Характерное межчастичное расстояние в $e-h$ паре становится больше размера молекулы H_2 , и можно сказать, что динамика $e-h$ пары приобретает черты экситона Ванье–Мотта. Подобная диссоциация экситонных состояний должна уменьшать вероятность безызлучательной релаксации $S1 \rightarrow S0$ возбужденного состояния, появившегося в результате спонтанного вибронного возбуждения $S0 \rightarrow S1$.

Анализ радиальной функции распределения для центров атомов водорода (рис. 4) показывает, что во

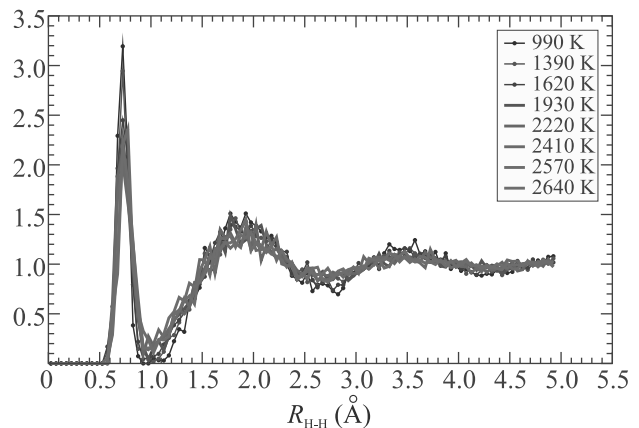


Рис. 4. (Цветной онлайн) Радиальная функция распределения ионов для системы из 480 атомов водорода при плотности 0.6 г/см^3 . Видно сохранение молекулярного состава во всем диапазоне температур от 1000 до 2800 K

всем рассмотренном диапазоне температур система соответствует молекулярной фазе. При этом вскоре после перехода из основного состояния в возбужденное в системе образуется пара атомных центров H, которые движутся на расстоянии нескольких размеров молекулы H_2 . Вместе с e/h центрами подобную пару атомов в разные моменты времени можно охарактеризовать как возбужденную молекулу водорода или же как почти диссоциировавшую молекулу. Подобные типы короткоживущих связанных возбужденных электрон-ионных состояний были описаны и в МД расчетах классической неидеальной плазмы [64].

Очевидной количественной мерой скоррелированности пространственного расположения электрона и дырки служит высота максимума радиальной функции распределения g_{max} (рис. 3). Если построить зависимость этой величины от температуры системы, то (см. рис. 5) с ростом температуры наблюдается заметное ослабление пространственной корреляции между электроном и дыркой.

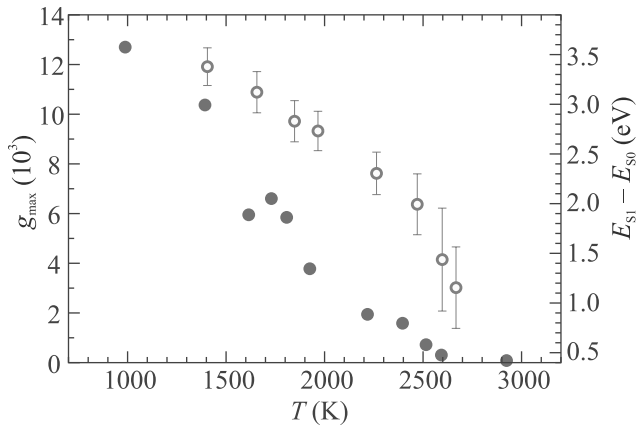


Рис. 5. (Цветной онлайн) Красные точки (левая ось ординат) – зависимость от температуры максимальной величины радиальной функции распределения между центрами Ванье для электрона (SOMO-1) и дырки (SOMO-2). Синие точки (правая ось ординат) – разница между энергией первого возбужденного состояния S_1 и энергией основного состояния S_0 , усредненная вдоль траектории КМД системы в основном состоянии S_0 (“усами” показаны значения дисперсии величины щели $E_{S1} - E_{S0}$). Оба графика представлены для системы из 480 атомов водорода при плотности 0.6 г/см^3

Таким образом, с одной стороны, как было показано в [52], с ростом температуры возрастает вероятность возникновения неадиабатических вибронных возбуждений в плотном флюиде водорода. С другой стороны, как показывает данная работа, с ростом температуры увеличивается вероятность быстрой диссоциации образующихся экситонов. В результате подобной диссоциации в молекулярном флюиде возникают относительно слабо связанные комплексы из электрона, дырки и двух протонов.

Образование подобных комплексов в результате спонтанного вибронного возбуждения $S_0 \rightarrow S_1$ переносит из колебательных степеней свободы в электронные энергии порядка 1–2 эВ на один экситон (на рис. 5 показана средняя энергия вертикального возбуждения при различных температурах для 0.6 г/см^3). Подобным переносом энергии можно объяснить большую величину удельной теплоты перехода, детектируемую в экспериментах с алмазными наковальнями как “плато температуры” [54]. Возникновение подобных комплексов может объяснить и рост поглощения пробного излучения.

Последующее объединение подобных комплексов в кластеры с размером в несколько сот нанометров может объяснить детектируемый рост коэффициента отражения плотного водорода в процессе перехода из молекулярного в атомарное состояние. А различие в кинетике подобной кластеризации может

объяснить различия в моментах начала поглощения и начала отражения в экспериментах (см., например, [13, 8]).

На основе проведенных расчетов можно определить температуру полной диссоциации экситона при 0.6 г/см^3 , используя в качестве критерия условие $g_{\max} = 1$. Полученная температура порядка 2700 К и давление порядка 70–80 ГПа хорошо соответствуют экспериментально детектируемым температурам и давлениям, при которых фиксируется “плато температуры” при нагреве плотного водорода [11, 13, 8].

Заметим, что полученные результаты могут свидетельствовать о возможности формирования экситонов и в твердом водороде [65–71]. Например, поглощение черной фазы, обнаруженной в экспериментах [67], может быть связано с образованием экситонов.

Выводы. Предложен метод анализа экситонных состояний в разогретом плотном водороде на основе 1) квантовой молекулярной динамики многоатомной системы в периодических граничных условиях на поверхности потенциальной энергии первого синглетного возбужденного состояния и 2) анализа пространственной корреляции электрон-дырочной пары на основе расчета центров Ванье двух верхних однократно заполненных Кон–Шэмовских орбиталей.

Охарактеризовано влияние температуры на устойчивость экситонных состояний в разогретом плотном водороде. Показано, что диссоциация экситонов происходит до начала термической диссоциации молекулярной фазы разогретого плотного водородного флюида. Результаты расчетов свидетельствуют, что диссоциация экситонов приводит к образованию слабосвязанных комплексов двух протонов и двух электронов, возникновением которых в молекулярной фазе можно объяснить начало поглощения пробного излучения. Полученная для одной плотности флюида температура перехода хорошо соответствует экспериментальным данным по началу поглощения пробного излучения в плотном флюиде водорода [11, 13, 8].

Авторы благодарят профессора Г. Э. Нормана за интерес к данной работе и профессора Н. Долгитица за советы по использованию орбиталей Ванье для анализа электронной структуры.

Исследование выполнено с использованием суперкомпьютерного центра ОИВТ РАН. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН #075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

1. J. M. McMahon, M. A. Morales, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **84**(4), 1607 (2012).
2. A. N. Utyuzh and A. V. Mikheyenkov, *Physics-Uspekhi* **60**(9), 886 (2017).
3. R. Helled, G. Mazzola, and R. Redmer, *Nature Reviews Physics* **2**(10), 562 (2020).
4. S. T. Weir, A. C. Mitchell, and W. J. Nellis, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1860 (1996).
5. V. E. Fortov, R. I. Ilkaev, V. A. Arinin, V. V. Burtzev, V. A. Golubev, I. L. Iosilevskiy, V. V. Khrustalev, A. L. Mikhailov, M. A. Mochalov, V. Ya. Ternovoi, and M. V. Zhernokletov, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 185001 (2007).
6. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, A. Becker, R. W. Lemke, K. R. Cochrane, M. E. Savage, D. E. Bliss, T. R. Mattsson, and R. Redmer, *Science* **348**(6242), 1455 (2015).
7. M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, V. E. Fortov, A. L. Mikhailov, A. O. Blikov, V. A. Ogorodnikov, V. K. Gryaznov, and I. L. Iosilevskii, *JETP* **124**(3), 505 (2017).
8. P. M. Celliers, M. Millot, S. Brygoo, R. S. McWilliams, D. E. Fratanduono, J. R. Rygg, A. F. Goncharov, P. Loubeyre, J. H. Eggert, J. L. Peterson, N. B. Meezan, S. Le Pape, G. W. Collins, R. Jeanloz, and R. J. Hemley, *Science* **361**(6403), 677 (2018).
9. P. Loubeyre, P. M. Celliers, D. G. Hicks et al. (Collaboration), *High Pressure Research* **24**(1), 25 (2004).
10. V. Dzyabura, M. Zaghoo, and I. F. Silvera, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **110**(20), 8040 (2013).
11. K. Ohta, K. Ichimaru, M. Einaga, S. Kawaguchi, K. Shimizu, T. Matsuoka, N. Hirao, and Y. Ohishi, *Sci. Rep.* **5**, 16560 (2015).
12. R. S. McWilliams, D. A. Dalton, M. F. Mahmood, and A. F. Goncharov, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 255501 (2016).
13. M. Zaghoo, R. J. Husband, and I. F. Silvera, *Phys. Rev. B* **98**, 104102 (2018).
14. S. Jiang, N. Holtgrewe, Z. M. Geballe, S. S. Lobanov, M. F. Mahmood, R. S. McWilliams, and A. F. Goncharov, *Adv. Sci.* **7**(2), 1901668 (2020).
15. G. E. Norman and A. N. Starostin, *High Temp.* **6**, 394 (1968).
16. L. M. Biberman and G. E. Norman, *High Temp.* **7**(5), 822 (1969).
17. J. L. Lebowitz and E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 631 (1969).
18. G. É. Norman and A. N. Starostin, *J. Appl. Spectrosc.* **13**, 965 (1970).
19. G. E. Norman and A. N. Starostin, *High Temp.* **8**(2), 381 (1970).
20. W. Ebeling, *Phys. Stat. Sol. B* **46**, 243 (1971).
21. W. Kraeft, D. Kremp, W. Ebeling, and G. Röpke, *Quantum statistics of charged particle systems*, Akademie-Verlag, Berlin (1986).
22. D. Saumon and G. Chabrier, *Phys. Rev. A* **44**, 5122 (1991).
23. H. Reinholz, R. Redmer, and S. Nagel, *Phys. Rev. E* **52**, 5368 (1995).
24. W. Ebeling and G. Norman, *J. Stat. Phys.* **110**, 861 (2003).
25. G. E. Norman, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 4579 (2006).
26. A. L. Khomkin and A. S. Shumikhin, *Plasma Phys. Rep.* **39**, 857 (2013).
27. A. N. Starostin, V. K. Gryaznov, and A. V. Filippov, *JETP Lett.* **104**, 696 (2016).
28. W. Ebeling, V. Fortov, and V. Filinov, *Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas*, Springer, Cham (2017).
29. V. S. Filinov and G. E. Norman, *Phys. Lett. A* **55**(4), 219 (1975).
30. G. E. Norman and I. M. Saitov, *Contributions to Plasma Physics* **59**(6), e201800182 (2019).
31. H. Y. Geng, Q. Wu, M. Marqués, and G. J. Ackland, *Phys. Rev. B* **100**, 134109 (2019).
32. R. Redmer and B. Holst, *Metal-to-Nonmetal Transitions*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (2010), p. 63.
33. S. Scandolo, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **100**(6), 3051 (2003).
34. I. Tamblyn and S. A. Bonev, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 065702 (2010).
35. M. A. Morales, J. M. McMahon, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 065702 (2013).
36. G. Mazzola and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 015703 (2017).
37. M. D. Knudson and M. P. Desjarlais, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 035501 (2017).
38. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, M. Preising, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **98**, 174110 (2018).
39. K. T. Delaney, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 235702 (2006).
40. N. M. Tubman, E. Liberatore, C. Pierleoni, M. Holzmann, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 045301 (2015).
41. G. Mazzola and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 105701 (2015).
42. G. Mazzola, R. Helled, and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 025701 (2018).
43. G. Rillo, M. A. Morales, D. M. Ceperley, and C. Pierleoni, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **116**, 9770 (2019).
44. V. Gorelov, D. M. Ceperley, M. Holzmann, and C. Pierleoni, *Phys. Rev. B* **102**, 195133 (2020).
45. Ch. Tian, F. Liu, H. Yuan, H. Chen, and Y. Gan, *J. Phys. Condens. Matter* **33**(1), 015401 (2020).
46. K. Ramakrishna, T. Dornheim, and J. Vorberger, *Phys. Rev. B* **101**, 195129 (2020).

47. M. Ruggeri, M. Holzmann, D.M. Ceperley, and C. Pierleoni, *Phys. Rev. B* **102**, 144108 (2020).
48. S. van de Bund, H. Wiebe, and G.J. Ackland, arXiv preprint arXiv:2009.05491 (2020).
49. V.V. Karasiev, J.W. Dufty, and S.B. Trickey, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 076401 (2018).
50. N.D. Mermin, *Phys. Rev.* **137**, A1441 (1965).
51. V.V. Stegailov and P.A. Zhilyaev, *Mol. Phys.* **114**(3–4), 509 (2016).
52. I.D. Fedorov, N.D. Orekhov, and V.V. Stegailov, *Phys. Rev. B* **101**(10), 100101 (2020).
53. N.C. Holmes, M. Ross, and W.J. Nellis, *Phys. Rev. B* **52**, 15835 (1995).
54. M. Houtput, J. Tempere, and I.F. Silvera, *Phys. Rev. B* **100**, 134106 (2019).
55. I. Frank, J. Hutter, D. Marx, and M. Parrinello, *J. Chem. Phys.* **108**(10), 4060 (1998).
56. N.L. Doltsinis and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 166402 (2002).
57. Ch. Schwermann and N.L. Doltsinis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**(19), 10526 (2020).
58. B. Jakob, P.-G. Reinhard, C. Toepffer, and G. Zwicknagel, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **42**(21), 214055 (2009).
59. J.T. Su and W.A. Goddard, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 185003 (2007).
60. Y.S. Lavrinenko, I.V. Morozov, and I.A. Valuev, *Contributions to Plasma Physics* **59**(4–5), e201800179 (2019).
61. P.L. Silvestrelli, *Phys. Rev. B* **59**(15), 9703 (1999).
62. W. Lorenzen, B. Holst, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **82**(19), 195107 (2010).
63. CPMD, version 3.17, <http://www.cpmc.org>.
64. A.V. Lankin and G.E. Norman, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **42**(21), 214032 (2009).
65. Ch.J. Pickard and R.J. Needs, *Nat. Phys.* **3**(7), 473 (2007).
66. J.M. McMahon and D.M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 165302 (2011).
67. R.P. Dias and I.F. Silvera, *Science* **355**(6326), 715 (2017).
68. N.N. Degtyarenko, E.A. Mazur, and K.S. Grishakov, *JETP Lett.* **105**(10), 664 (2017).
69. N.A. Kudryashov, A.A. Kutukov, and E.A. Mazur, *JETP Lett.* **105**(7), 430 (2017).
70. I.M. Saitov, *JETP Lett.* **110**(3), 206 (2019).
71. G.E. Norman and I.M. Saitov, *JETP Lett.* **111**, 162 (2020).

Фототермическая ионизационная спектроскопия вакансий ртути в эпитаксиальных пленках HgCdTe

Д. В. Козлов^{†*}, Т. А. Уаман Светикова[×], А. В. Иконников[×], В. В. Румянцев^{†*1)}, А. А. Разова^{†*},
М. С. Жолудев^{†*}, Н. Н. Михайлов^{°▽}, С. А. Дворецкий[°], В. И. Гавриленко^{†*}, С. В. Морозов^{†*}

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

^{*}ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия

[×]Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

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

[▽]Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 8 октября 2020 г.

После переработки 1 марта 2021 г.

Принята к публикации 1 марта 2021 г.

Исследована терагерцовая фотопроводимость узкозонных твердых растворов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, обусловленная вакансиями ртути – мелкими двухзарядными акцепторами. Выполнены расчеты дискретного спектра вакансий ртути и матричных элементов оптических переходов с основного на возбужденные состояния в модели, учитывающей влияние зоны проводимости и модельный потенциал центральной ячейки. Обнаружены возбужденные состояния с малой энергией ионизации, сформированные преимущественно состояниями легких дырок, которым соответствуют большие значения матричных элементов оптических переходов из основных состояний, и показано, что наблюдаемые линии в спектре фотопроводимости обусловлены переходами на такие состояния как для нейтрального, так и для однократно ионизованного акцептора, а не переходами в континуум валентной зоны.

DOI: 10.31857/S1234567821060100

1. Введение. Твердые растворы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (кадмий–ртуть–теллур, КРТ) исследуются уже свыше пяти десятилетий [1]. Одной из главных особенностей данного материала является возможность, варьируя состав, изменять величину запрещенной зоны в широких пределах: от 1.6 эВ в чистом CdTe вплоть до нуля при доле Cd меньше 16.5 %. Это делает структуры на основе HgCdTe перспективным материалом для создания детекторов и источников излучения среднего и дальнего инфракрасного диапазона. Одной из главных проблем при создании упомянутых приборов является существенное влияние примесно-дефектных центров на времена жизни носителей (рекомбинация по механизму Шокли–Рида–Холла). Среди наиболее распространенных точечных дефектов в КРТ следует в первую очередь упомянуть вакансию ртути, которая возникает в данном материале из-за слабой химической связи ртуть–теллур. Вакансия ртути описывается как двухвалентный или двойной акцептор, который может находиться в следующих зарядовых состояниях: ней-

тральный A_2^0 -центр (с акцептором связаны две дырки), частично ионизованный A_2^{-1} -центр (с акцептором связана одна дырка) и полностью ионизованный A_2^{-2} -центр (нет связанных дырок).

Изучение энергетических состояний, так или иначе связываемых с вакансиями ртути, началось достаточно давно. Исследования выполнялись как транспортными (см., например, [2]), так и оптическими методами. В работе [3] для вакансий катионов был найден уровень с энергией ионизации 10–12 мэВ, практически не зависящей от доли кадмия в диапазоне от 0.2 до 0.4. В то же время в работе [4] в схожих образцах отмечалось возрастание энергии ионизации акцепторов при увеличении x . Недавно в работах [5–7] был сделан систематический анализ проявлений мелких акцепторов в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) вблизи межзонного перехода в структурах, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Были обнаружены акцепторы с энергиями ионизации 14, 18 и 27 мэВ, концентрация которых сложным образом изменялась при отжиге структур. В некоторых работах на основе результатов транспортных измерений и исследований ФЛ рассматривалась воз-

¹⁾rumyantsev@ipmras.ru

возможность “инвертированного” расположения состояний вакансий ртути: состояния дырки на A_2^{-1} -центре с энергией связи 10.7 мэВ оказывались мельче состояний на A_2^0 -центре, которым приписывалась энергия ионизации дырки 27.3 мэВ [8]. Однако в последующей работе авторы показали, что для состава с долей кадмия 45 % такой порядок состояний уже не имеет места [9].

Из представленного краткого обзора видно, что состояния вакансии ртути в основном изучались косвенными методами, и, несмотря на большой массив данных о вакансии ртути как о двойном акцепторе, спектр состояний этого акцептора требует дальнейшего изучения. В данной работе для этой цели был использован метод фурье-спектроскопии фотопроводимости (ФП) в терагерцовом диапазоне, который успешно применялся для исследования примесных состояний в различных полупроводниках (см., например, [10, 11]) и уже использовался в наших работах, посвященных исследованиям твердых растворов и гетероструктур на основе КРТ [12–15].

В работе [13] на основе анализа достаточно большой выборки объемных эпитаксиальных слоев $Hg_{1-x}Cd_xTe$ с проводимостью p -типа в спектрах ФП были идентифицированы особенности, связываемые с вакансиями ртути. В отличие от полосы межзонных переходов, данные особенности не смещались в коротковолновую область с ростом ширины запрещенной зоны из-за повышения температуры [12, 14]. Наблюдаемые особенности описывались в модели эффективной массы с использованием гамильтониана Латтинджера, однако для согласования теории с экспериментом требовалось ввести дополнительный потенциал центральной ячейки (ПЦЯ). При этом положение переходов, связываемых как с ионизацией нейтральных (A_2^0), так и однократно ионизованных (A_2^{-1}) вакансий ртути удалось описать с помощью одного набора параметров указанного потенциала.

Недавно в структурах с квантовыми ямами (КЯ) $HgTe/CdHgTe$ наличие именно двух зарядовых состояний у наблюдаемого в спектрах ФП мелкого акцептора было непосредственно продемонстрировано с помощью техники “оптического затвора” [15]. Однако полосы ФП, обусловленные акцепторами, в КЯ имеют большую ширину из-за дисперсии энергии связи дырок, возникающей из-за различной удаленности акцепторных центров от центра ямы. В этой связи интересным представляется исследование поведения акцепторов при изменении внешних параметров в более простом случае объемного материала, чему и посвящена настоящая работа. Поскольку использовавшийся в работе [15] и часто имеющий место

в различных гетероструктурах с КЯ эффект остаточной ФП [16–18] не наблюдается в объемных эпитаксиальных пленках КРТ, в данной работе в качестве изменяемого внешнего параметра была выбрана температура измерений.

Для более точного описания экспериментальных данных в настоящей работе расчеты основных и возбужденных состояний A_2^0 - и A_2^{-1} -центров, а также матричные элементы переходов на возбужденные состояния с основного уровня акцептора были выполнены в рамках модели Кейна, а не Латтинджера, как в работах [12, 13]. Заселенности различных состояний этих центров и состояний континуума валентной зоны при различных температурах определялись с помощью решения уравнения электронейтральности [14]. Анализ экспериментальных данных и результатов расчета показывает, что особенности спектров ФП связаны с переходами носителей на мелкие возбужденные состояния с последующей термической ионизацией, а не непосредственной фотоионизацией в континуум. Последнее объясняет как “нетипичную” для примесной ФП спектральную форму фотоотклика, так и его зависимость от температуры.

2. Методика эксперимента. Исследовалась эпитаксиальная пленка $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$, полученная методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке $GaAs(013)$ с буферными слоями из $ZnTe$ (толщиной 50 нм) и $CdTe$ (толщиной 5 мкм) [19]. Активный слой структуры окружен варизонными слоями КРТ и расположен на буфере из $CdTe$. Намеренного легирования не проводилось, после роста пленка обладала электронным типом проводимости. Выращенная структура была затем подвергнута отжигу в атмосфере аргона [20]. В результате такого отжига за счет выхода ртути из структуры была создана избыточная концентрация акцепторов (вакансий ртути) над остаточными донорами, и в структуре возникла проводимость p -типа.

Так как после отжига в спектрах ФП возникают несколько полос, обусловленных возбуждением акцепторов (см. [13]), для исследований в данной работе была выбрана структура, в которой наиболее сильно выражены спектральные особенности, связываемые именно с состояниями вакансий ртути (рис. 1): линия 1 в окрестности 10 мэВ и линия 2 в окрестности 20 мэВ. Строго говоря, точное определение энергий переходов, соответствующих линиям 1 и 2, требует электродинамического расчета нормировочной функции, так как они находятся в спектральной области, характеризующейся сильным изменением диэлектрической проницаемости из-за близости к частотам оптических фононов. Однако, как

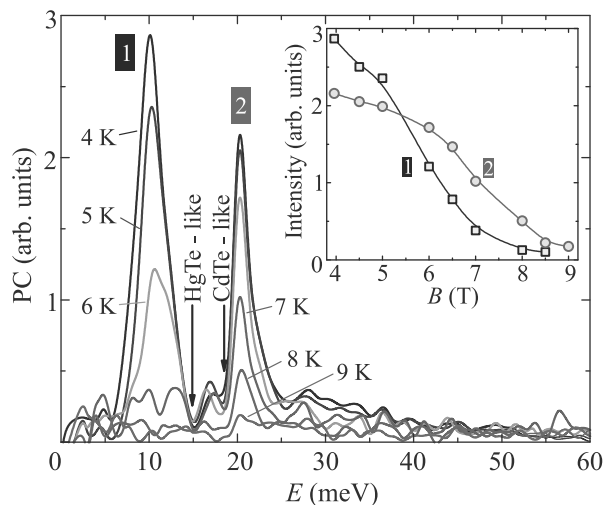


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры ФП эпитаксиальной пленки $\text{Hg}_{0.78}\text{Cd}_{0.22}\text{Te}$ при различных температурах. Область межзонного поглощения находится за пределами рисунка, ее красная граница составляет 91 мэВ. Стрелками показаны провалы в спектре, обусловленные поглощением на HgTe- и CdTe-подобных оптических фонах [32]. На вставке: зависимости интенсивностей линий 1 и 2 от температуры

будет видно из дальнейшего, интерпретация линий и зависимостей их интенсивностей от температуры не требует высокой точности в определении их положений. Толщина исследуемой эпитаксиальной пленки составляет 4 мкм, что сравнимо с глубиной проникновения излучения во всем исследуемом спектральном диапазоне, за исключением области 13–18 мэВ, непосредственно примыкающей к линии поглощения на HgTe-подобном поперечном оптическом фоне.

Дополнительным критерием выбора исследуемой структуры было хорошее совпадение значений оптической и термической ширины запрещенной зоны. Оптическая ширина определялась из красной границы межзонного поглощения в спектрах ФП, она составила 91 мэВ. Термическая ширина запрещенной зоны, определенная по температурной зависимости сопротивления, составила 98 мэВ. Близость этих величин указывает на высокое структурное совершенство образца и относительно слабую роль флуктуаций потенциала.

Спектры фотопроводимости измерялись при низких температурах в диапазоне от 3.9 до 10 K с помощью фурье-спектрометра Bruker Vertex 70v. В качестве источника излучения использовался глобар, в качестве светоделиителя – Mylar Multilayer. Образцы размером 5×4 мм размещались в проточном криостате Oxford Instruments OptistatCF, который устанавливался в спектрометр так, чтобы образец находился

в фокусе пучка излучения. Подробно схема измерений описана в [14].

3. Методика расчета. Расчет как одночастичных (для однократно ионизованного A_2^{-1} -центра), так и двухчастичных состояний (последние реализуются на нейтральном A_2^0 -центре) дырок, связанных на акцепторе, проводился в приближении огибающих функций с гамильтонианом Кейна [23]. Гамильтониан представляет собой сумму кинетической энергии дырки и энергии взаимодействия с заряженным центром $V(r)$. Влияние спин-отщепленной зоны не учитывалось из-за ее удаленности по энергии. Потенциальная энергия, помимо кулоновского потенциала, включала в себя модельный деформационный ПЦЯ. Он был выбран, как и во многих работах (см., например, [21, 22]), в виде экранированного кулоновского потенциала точечного заряда. Таким образом, энергия взаимодействия с центром имела следующий вид:

$$V(r) = -\frac{e^2}{kr} [Z - Z_1 \exp(-r/\lambda)], \quad (1)$$

где k – низкочастотная диэлектрическая проницаемость, $Z = 2$ – заряд акцепторного центра, а Z_1 – эффективный заряд и λ – длина экранирования (см. далее).

В полярных материалах использование при расчетах кулоновских центров простой модели с низкочастотной диэлектрической проницаемостью не является очевидным. Ранее в литературе обсуждалось влияние взаимодействия носителей заряда с ЛО-фононами на энергию связи основного и возбужденных состояний центров (см., например, [24–26] и ссылки в них). В большинстве случаев эти эффекты приводили к малым поправкам к энергиям связи состояний, которые игнорировались при обсуждении спектров возбуждения примесных состояний в реальных полупроводниках (см., например, [10]). В частности, в работе [22] были выполнены расчеты состояний акцепторов в GaAs, ZnSe и CdTe с использованием низкочастотной диэлектрической проницаемости решетки показавшие очень хорошее согласие экспериментом, как для материала, в котором энергия связи акцептора меньше энергии ЛО-фонона (GaAs), так для полупроводников, в которых имеет место обратное соотношение (ZnTe и CdTe). По-видимому, взаимодействие центров с оптическими фононами в полярных материалах – достаточно тонкий эффект, не проявляющийся при существующих уровнях остаточного легирования и соответственно уширения линий примесных переходов.

При расчете состояний акцептора в растворе КРТ, как и в работах [21, 22], использовалось сфери-

ческое приближение, т. е. закон дисперсии дырок предполагался изотропным. Значения параметров гамильтониана Кейна и диэлектрической проницаемости в твердом растворе вычислялись с помощью линейной интерполяции между соответствующими значениями параметров в HgTe и CdTe [23].

Подробно метод решения уравнения Шредингера с гамильтонианом Кейна 6×6 для одночастичных состояний и для основного двухчастичного состояния описан в [27]. Для расчета двухчастичных состояний, в котором одна дырка находится на основном уровне энергии, а вторая – на возбужденном, был использован метод самосогласованного поля Хартри [28]. Рассматривались состояния двух частиц, находящихся в поле кулоновского центра и в ПЦЯ. При этом решались одночастичные уравнения Шредингера для каждой из двух дырок:

$$\left[H_K(\nabla_1) - \left(E_1 + \frac{e^2 (Z - Z_1 \exp(-\frac{r_1}{\lambda}))}{\kappa r_1} \right) - \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{|\Phi_2(r_2)|^2 d^3 r_2}{|r_1 - r_2|} \right] \Phi_1(r_1) = 0, \quad (2)$$

$$\left[H_K(\nabla_2) - \left(E_2 + \frac{e^2 (Z - Z_1 \exp(-\frac{r_2}{\lambda}))}{\kappa r_2} \right) - \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{|\Phi_1(r_1)|^2 d^3 r_1}{|r_2 - r_1|} \right] \Phi_2(r_2) = 0,$$

где $E_{1,2}$ и $\Phi_{1,2}(r_{1,2})$ – энергии и волновые вектор-функции первой и второй дырок соответственно. Полная энергия системы двух частиц равна сумме E_1 и E_2 .

Система интегральных нелинейных уравнений (2) решалась методом последовательных приближений, где в качестве первого шага в уравнениях системы были опущены интегральные слагаемые, что позволило найти энергии и волновые функции дырок без учета взаимодействия между носителями. Матричные элементы оптических переходов между состояниями были рассчитаны с помощью золотого правила Ферми.

На рисунке 2 приведены рассчитанные зависимости энергий ионизации A_2^0 - и A_2^{-1} -центров от доли кадмия в КРТ в различных моделях расчета. Видно, что при уменьшении x (и уменьшении ширины запрещенной зоны) наклон зависимостей увеличивается, т.е. акцепторные состояния “отталкиваются” от зоны проводимости в отличие от результатов расчетов в модели Латтинжера, не учитывающей влияния зоны проводимости [13]. Однако даже при учете влияния зоны проводимости расчет дает существенно за-

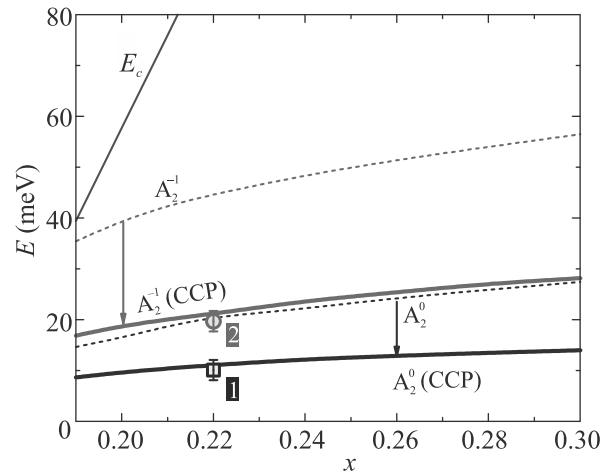


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости от доли Cd x в твердом растворе КРТ энергий ионизации A_2^0 - и A_2^{-1} -центров, рассчитанных с учетом (сплошные линии) и без учета (штриховые линии) ПЦЯ в модели Кейна. E_c – зависимость энергии края зоны проводимости от состава. Энергии отсчитываются от вершины валентной зоны. Стрелками показано влияние учета ПЦЯ, приводящего к понижению энергий. Символы – положения особенностей 1 и 2 в спектрах ФП (рис. 1), в качестве погрешностей указана ширина линий на полувысоте

вышенные значения по сравнению с экспериментальными данными. По аналогии со введением химического сдвига (поправки к энергии примесного состояния, обусловленной ПЦЯ) при рассмотрении мелких примесей в полупроводниках [21] в нашем случае, очевидно, также необходимо учитывать ПЦЯ. В большинстве случаев химический сдвиг приводит к увеличению энергии ионизации примесного состояния по сравнению с энергией, рассчитанной в приближении эффективной массы, что связано с тем, что ион примеси “расталкивает” окружающие атомы кристаллической решетки. В случае же вакансии, очевидно, что решетка будет сжиматься вокруг дефекта, создавая дополнительную плотность положительного заряда, отталкивающего дырки [13]. Это будет уменьшать энергию связи (рис. 2).

В таблице 1 приведены рассчитанные энергии ионизации возбужденных состояний E_i , энергии переходов на такие состояния с основного акцепторного уровня $E_{\text{опт}}$ и квадраты матричных элементов этих переходов для A_2^0 - и A_2^{-1} -центров. Расчет приведен для подгоночных параметров $Z_1 = 1.4$, $\lambda = 25 \text{ \AA}$. Следует обратить внимание, что как для A_2^0 -, так и для A_2^{-1} -центров расчет предсказывает наличие мелких возбужденных состояний (с энергиями 0.42 и 1.1 мэВ соответственно), переходы в которых с основных состояний имеют большие матричные элементы.

Таблица 1. Рассчитанные энергии нечетных p -подобных (на которые разрешен переход с основного четного s -подобного состояния) состояний A_2^0 - и A_2^{-1} -центров вакансий ртути в твердом растворе $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ и квадраты матричных элементов переходов ($|M|^2$) на такие состояния с основных уровней центров. Энергия ионизации (минимальная энергия перехода в континуум) основного уровня A_2^0 -центра – 11 мэВ, A_2^{-1} -центра – 21 мэВ. E_i – энергия ионизации состояния, E_{opt} – энергия перехода с основного уровня на конкретное состояние, p_{lh} – вклад подзоны легких дырок в разложении волновой функции состояния

A_2^0 -центр				A_2^{-1} -центр			
E_i , мэВ	E_{opt} , мэВ	$ M ^2$, произв. ед.	p_{lh} , %	E_i , мэВ	E_{opt} , мэВ	$ M ^2$, произв. ед.	p_{lh} , %
7.01	3.99	15	3	15.47	5.53	21	4.75
3.9	7.1	26	2	9.8	11.2	33	4
3.07	7.93	134	1	7.72	13.28	125	3
1.7	9.3	3	2	4.61	16.39	30	4
0.84	10.16	2	0.3	3	18.0	7	1
0.7	10.3	6	0.01	2.12	18.88	1	0.5
0.55	10.45	15	5	2.01	18.99	6	0.5
0.42	10.58	43	47.5	1.28	19.72	10	9.5
0.38	10.62	3	0.02	1.1	19.9	40	50
0.2	10.8	5	0.003	1.02	19.98	3	1
				0.85	20.15	5	0.5
				0.6	20.4	8	0.3

4. Результаты и обсуждение. Как уже отмечалось, в спектрах ФП эпитаксиальной пленки исследуемого образца $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ присутствуют две линии при 10 и 20 мэВ (рис. 1). Как и в работе [13], они связываются с фотовозбуждением соответственно нейтральных (A_2^0 -центры) и однократно ионизованных (A_2^{-1} -центры) вакансий ртути. С ростом температуры наблюдается быстрое гашение обеих линий ФП, которое связано с резким ростом концентрации дырок в валентной зоне, что приводит к падению сигнала примесной ФП из-за уменьшения сопротивления образца (ср. [29]). Как видно на вставке на рис. 1, интенсивность линии 2 с ростом температуры падает заметно “медленнее”, чем интенсивность линии 1. Такое поведение можно было бы объяснить ростом концентрации однократно ионизованных центров при ионизации нейтральных центров (“отрыве” первой дырки) с увеличением температуры, однако расчет не подтверждает такое предположение. На рисунке 3 показаны зависимости относительных концентраций нейтральных и однократно ионизованных вакансий ртути от температуры, рассчитанные с помощью уравнения электронейтральности [14]. При температурах до 15 К эти концентрации заметно не меняются, поэтому указанный механизм “превращения” A_2^0 -центров в A_2^{-1} -центры с ростом температуры не должен оказывать какого-либо влияния на изменение соотношения интенсивностей линий 1 и 2 в рассматриваемом диапазоне температур.

Как уже отмечалось, из табл. 1 видно, что переходы на мелкие уровни с энергией ионизации 0.42 мэВ

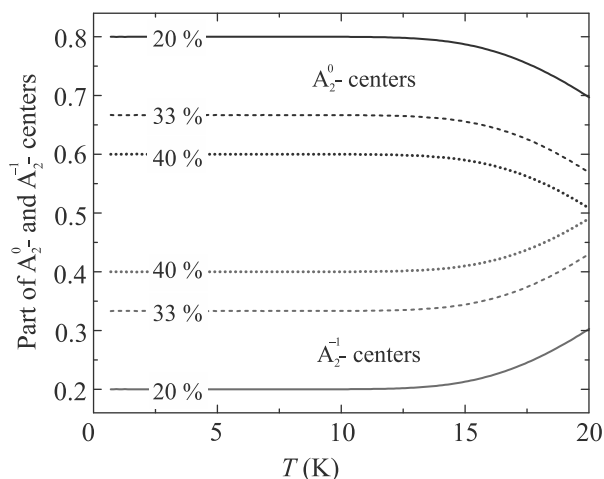


Рис. 3. (Цветной онлайн) Рассчитанные температурные зависимости относительных концентраций A_2^0 - и A_2^{-1} -центров вакансий ртути в твердом растворе $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ p -типа при различных степенях компенсации (указаны в процентах)

для A_2^0 -центра и 1.1 мэВ для A_2^{-1} -центра и обладают в несколько раз большим квадратом матричного элемента, чем переходы на соседние возбужденные состояния. Насколько известно авторам, существование таких интенсивных переходов вблизи энергии ионизации акцепторов ранее в литературе не обсуждалось. Как показывают расчеты структуры волновых функций возбужденных состояний, для этих уровней доля подзоны легких дырок в разложении составляет около 50 %, в то время как для других

уровней она оказывается не более 10 % (табл. 1). Таким образом, при качественном анализе эти уровни можно рассматривать как одни из нижних уровней акцепторов (т.е. состояний с большим матричным элементом перехода с основного состояния – см. табл. 1), связанных с подзоной легких дырок (при всей условности такого рассмотрения акцептора в вырожденной валентной зоне). Существование таких мелких уровней акцептора с большим матричным элементом оптического перехода из основного состояния не является уникальным свойством твердых растворов КРТ. Проведенные нами расчеты показали наличие такого уровня в спектре акцептора в GaAs с энергией ионизации 0.8 мэВ. Как оказалось, соответствующая линия ранее наблюдалась в спектре ФП высококачественной эпитаксиальной пленки GaAs:Zn на частоте 240 см^{-1} , что соответствует 30 мэВ (см. рис. 1 в [30]). Энергия связи примеси Zn GaAs составляет 30.8 мэВ [31]; таким образом, расстояние этой линии (не получившей интерпретации в работе [30]) от энергии континуума находится в хорошем согласии с расчетом.

Проведенные расчеты позволили объяснить нетипичную для “примесной” фотопроводимости форму спектра фотоотклика. Даже с учетом провалов сигнала около 15 и 19 мэВ, обусловленных поглощением HgTe-подобными и CdTe-подобными фононами соответственно [32], в спектрах ФП доминируют узкие линии, спадающие на масштабе 2 мэВ. В то же время полосы примесной ФП таких полупроводников, как Ge, Si и GaAs, связанные с переходами в непрерывный спектр, обычно имеют пологий коротковолновый фронт [33–37]. Вместе с тем в спектрах примесной ФП часто наблюдаются узкие линии, связанные с термической активацией носителей [28, 32, 38, 39], перешедших на возбужденные уровни под действием возбуждающего излучения, в зону. Как правило, такие линии значительно уже 1 мэВ, однако в случае твердого раствора КРТ естественно ожидать уширения таких особенностей за счет флуктуаций состава.

Таким образом, можно заключить, что линии 1 и 2 в спектрах ФП (рис. 1) связаны с переходами на мелкие уровни вакансии ртути (с энергиями связи 0.42 и 1.1 мэВ) с последующей термической активацией, а не с переходами непосредственно в континуум. Уже отмеченное выше изменение соотношения интенсивностей линий 1 и 2 с ростом температуры (см. вставку на рис. 1) объясняется разной энергией связи возбужденных состояний, с которых происходит активация. Выражение, описывающее вероятность фототермической ионизации мелких “примесных” состояний хорошо известно и в пределе низких

температур сводится к экспоненциальной зависимости $\sim \exp(-E_i/kT)$, где E_i – энергия ионизации возбужденного состояния [29]. Энергия ионизации рассматриваемых возбужденных состояний составляет 0.42 и 1.1 мэВ A_2^{-1} - и A_2^{-1} -центров, что соответствует 5 и 13 К, что и объясняет изменение соотношения интенсивностей линий 1 и 2 в интервале температур измерений от 4 до 9 К.

Из таблицы 1 также можно заметить, что некоторые переходы на более глубокие возбужденные состояния обладают еще большим матричным элементом по сравнению с рассмотренными выше: в частности, переходы на третье по энергии состояние с энергией связи 3.07 мэВ для A_2^0 -центра и 7.72 мэВ для A_2^{-1} -центра. Однако в диапазоне температур до 10 К вероятность термической активации с таких состояний очень низка, поэтому указанные переходы не проявляют себя в спектрах ФП.

5. Заключение. Расчеты энергетических спектров вакансий ртути – двойных акцепторов в твердых растворах КРТ позволили выявить как для нейтральных, так и для однократно ионизованных центров возбужденные состояния с малой энергией ионизации, сформированные преимущественно состояниями легких дырок. Оптическим переходам в такие состояния с основных состояний акцепторов соответствуют большие (по сравнению с переходами в соседние возбужденные состояния) значения матричных элементов, что позволяет связать с ними, а не с переходами в континуум, обнаруженные линии терагерцовой фотопроводимости твердых растворов КРТ. Последнее согласуется с относительно малой шириной наблюдаемых линий ФП и зависимостью их интенсивности от температуры. Необходимо отметить, что переходы в возбужденные состояния мелких центров редко удается наблюдать в твердых растворах, по-видимому, из-за сильного их “размытия”, связанного с неоднородностью материала (см., например, [40]). Полученные в данной работе результаты создают предпосылки для развития дополнительного метода исследования вакансий ртути в структурах на основе HgCdTe с помощью фототермической ионизационной спектроскопии, которая обладает известными преимуществами как метод характеристики слабелегированных полупроводников [33].

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования #075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. A. Rogalski, Opto-Electronics Review **20**, 279 (2012).
2. D.L. Polla and C.E. Jones, J. Appl. Phys. **51**, 6233 (1980).

3. B. Li, Y. Gui, Z. Chen, H. Ye, J. Chu, S. Wang, R. Ji, and L. He, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1538 (1998).
4. S. H. Shin, M. Chu, A. H. B. Vanderwyck, M. Lanir, and C. C. Wang, *J. Appl. Phys.* **51**, 3772 (1980).
5. I. I. Izhnin, A. I. Izhnin, H. V. Savitskiy, O. I. Fitsych, N. N. Mikhailov, V. S. Varavin, S. A. Dvoretzky, Y. G. Sidorov, and K. D. Mynbaev, *Opto-Electronics Review* **20**, 375 (2012).
6. И. И. Ижнин, А. И. Ижнин, К. Д. Мынбаев, Н. Л. Баженов, Е. И. Фицыч, М. В. Якушев, Н. Н. Михайлов, В. С. Варавин, С. А. Дворецкий, *ФТП* **48**, 207 (2014).
7. К. Д. Мынбаев, А. В. Шиляев, Н. Л. Баженов, А. И. Ижнин, И. И. Ижнин, Н. Н. Михайлов, В. С. Варавин, С. А. Дворецкий, *ФТП* **49**, 379 (2015).
8. F. Gemain, I. C. Robin, M. De Vita, S. Brochen, and A. Lussan, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 131901 (2011).
9. F. Gemain, I. C. Robin, and G. Feuillet, *J. Appl. Phys.* **114**, 213706 (2013).
10. A. K. Ramdas and S. Rodriguez, *Rep. Prog. Phys.* **44**, 1297 (1981).
11. R. F. Kirkman, R. A. Stradling, and P. J. Lin-Chung, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 419 (1978).
12. Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, А. М. Кадыков, В. С. Варавин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, В. И. Гавриленко, *ФТП* **49**, 1654 (2015).
13. V. V. Rumyantsev, 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. Dvoretzky, and V. I. Gavrilenko, *Semicond. Sci. Technol.* **32**, 095007 (2017).
14. Т. А. Уаман Светикова, А. В. Иконников, В. В. Румянцев, Д. В. Козлов, В. И. Черничкин, А. В. Галеева, В. С. Варавин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. В. Морозов, В. И. Гавриленко, *ФТП* **53**, 1297 (2019).
15. И. Д. Николаев, Т. А. Уаман Светикова, В. В. Румянцев, М. С. Жолудев, Д. В. Козлов, С. В. Морозов, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, В. И. Гавриленко, А. В. Иконников, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 682 (2020).
16. A. Kastalsky and J. C. M. Hwang, *Solid State Commun.* **51**, 317 (1984).
17. В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, Д. М. Гапонова, А. В. Иконников, К. В. Маремьянин, С. В. Морозов, Ю. Г. Садофьев, S. R. Johnson, and Y.-H. Zhang, *ФТП* **39**, 30 (2005).
18. К. Е. Спирин, Д. М. Гапонова, К. В. Маремьянин, В. В. Румянцев, В. И. Гавриленко, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, *ФТП* **52**, 1482 (2018).
19. V. S. Varavin, V. V. Vasiliev, S. A. Dvoretzky, N. N. Mikhailov, V. N. Ovsyuk, Yu. G. Sidorov, A. O. Suslyakov, M. V. Yakushev, and A. L. Aseev, *Proc. SPIE 5136, Solid State Crystals 2002: Crystalline Materials for Optoelectronics* (2003).
20. П. А. Бахтин, С. А. Дворецкий, В. С. Варавин, А. П. Коробкин, Н. Н. Михайлов, И. В. Сабина, Ю. Г. Сидоров, *ФТП* **38**, 1207 (2004).
21. N. O. Lipary, A. Baldereschi, and M. L. W. Thewalt, *Solid State Commun.* **33**, 277 (1980).
22. M. Said and M. A. Kanehisa, *Phys. Stat. Sol. (b)* **157**, 311 (1990).
23. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **72**, 035321 (2005).
24. J. Sak, *Phys. Stat. Sol.* **27**, 521 (1968).
25. M. H. Engineer and N. Tzoar, *Phys. Rev. B* **5**, 3029 (1972).
26. B. Hönelage, U. Rössler, and U. Schöder, *Phys. Rev. B* **12**, 2355 (1975).
27. Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, А. М. Кадыков, М. А. Фадеев, Н.-W. Hubers, В. И. Гавриленко, *ФТП* **52**, 1257 (2018).
28. Г. Бере, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, М. (1960).
29. H. W. H. M. Jongbloets, M. J. H. van de Steeg, J. H. M. Stoelinga, and P. Wyder, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13**, 2139 (1980).
30. В. Я. Алешкин, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко, Л. В. Гавриленко, Б. Н. Звонков, *ЖЭТФ* **136**, 543 (2009).
31. D. E. Hill, *J. Appl. Phys.* **41**, 1815 (1970).
32. D. N. Talwar and M. Vandevyver, *J. Appl. Phys.* **56**, 1601 (1984).
33. E. E. Haller and W. L. Hansen, *Solid State Commun.* **15**, 687 (1974).
34. C. Jagannath, Z. W. Grabowski, and A. K. Ramdas, *Phys. Rev. B* **23**, 2082 (1981).
35. В. Н. Мурзин, *Субмиллиметровая спектроскопия коллективных и связанных состояний носителей тока в полупроводниках*, Наука, М. (1985).
36. В. В. Румянцев, С. В. Морозов, К. Е. Кудрявцев, В. И. Гавриленко, Д. В. Козлов, *ФТП* **46**, 1414 (2012).
37. В. Н. Шастин, Р. Х. Жукавин, К. А. Ковалевский, В. В. Цыпленков, В. В. Румянцев, Д. В. Шенгуров, С. Г. Павлов, В. Б. Шуман, Л. М. Порцель, А. Н. Лодыгин, Ю. А. Астров, Н. В. Абросимов, J. M. Klopff, H.-W. Hubers, *ФТП* **53**, 1263 (2019).
38. Sh. M. Kogan and T. M. Lifshits, *Phys. Stat. Sol. (a)* **39**, 11 (1977).
39. H. W. H. M. Jongbloets, J. H. M. Stoelinga, M. J. H. van de Steeg, and P. Wyder, *Phys. Rev. B* **20**, 3328 (1979).
40. M. Franz, K. Pressel, and P. Gaworzewski, *J. Appl. Phys.* **84**, 709 (1998).

О нелокальном преобразовании Дарбу для стационарных аксиально-симметричных уравнений Шредингера и Гельмгольца

А. Г. Кудрявцев¹⁾

Институт прикладной механики РАН, 125040 Москва, Россия

Поступила в редакцию 27 января 2021 г.

После переработки 27 января 2021 г.

Принята к публикации 17 февраля 2021 г.

Рассматривается нелокальное преобразование Дарбу для стационарных аксиально-симметричных уравнений Шредингера и Гельмгольца. На основе формул нелокального преобразования Дарбу и обобщенного преобразования Мутара получены новые примеры двумерных потенциалов и точных решений для стационарных аксиально-симметричных уравнений Шредингера и Гельмгольца.

DOI: 10.31857/S1234567821060082

В работе [1] на основе обобщенного преобразования Мутара получены примеры двумерных потенциалов и точных решений стационарного уравнения Шредингера в случае аксиальной симметрии. В работе [2] показано, что обобщенное преобразование Мутара является частным случаем двумерного нелокального преобразования Дарбу. Целью настоящей работы является получение новых примеров двумерных потенциалов и точных решений для стационарных аксиально-симметричных уравнений Шредингера и Гельмгольца на основе применения нелокального преобразования Дарбу.

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера в виде $(\Delta - u(x, y, z))Y(x, y, z) = 0$. В случае $u = -E + V(x, y, z)$ это уравнение описывает нерелятивистскую квантовую систему с энергией E [3]. В случае $u = -\omega^2/c^2(x, y, z)^2$ уравнение описывает распространение акустических волн, имеющих частоту ω , в неоднородной среде со скоростью звука c и под именем уравнения Гельмгольца используется в теории волн [4]. Случай фиксированной частоты ω интересен при моделировании в акустической томографии [5]. Случай фиксированной энергии E для двумерного уравнения представляет интерес в теории интегрируемых нелинейных систем [6].

При аксиальной симметрии стационарное уравнение Шредингера в цилиндрических координатах имеет вид

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - u(r, z)\right)Y(r, z) = 0. \quad (1)$$

Это линейное дифференциальное уравнение с постоянным коэффициентом u . Для анализа таких

уравнений оказались полезны преобразования Дарбу. Авторы книги [7] отмечают, что важность преобразования Дарбу заключается в возможности получения новых решаемых уравнений из исходного решаемого уравнения. Изменение решения исходного уравнения в формуле преобразования Дарбу дает решение нового уравнения. Если набор выбранных специальных функций позволяет представлять аналитически все решения исходного уравнения, можно сказать, что исходное уравнение точно разрешимо. Если исходное уравнение разрешимо, можно получить все решения нового уравнения с использованием преобразования Дарбу. Преобразование Дарбу может быть повторно применено к новым уравнениям. Таким образом, можно сказать, что уравнение решаемое, если оно может быть получено из другого решаемого уравнения конечным числом преобразований Дарбу. Например, если исходным уравнением является стационарное уравнение Шредингера в одномерной квантовой механике, естественно называть решаемыми уравнения, описывающие свободное движение частиц, гармонический осциллятор, кулоновский потенциал и потенциалы Морса. В этой статье мы говорим, что стационарные уравнения Шредингера и Гельмгольца в двумерном случае решаемые, если они могут быть получены из уравнения с постоянным (в том числе нулевым) потенциалом с помощью конечного числа преобразований Дарбу.

Приложения классического преобразования Дарбу для одномерного уравнения Шредингера можно найти в книге [7]. Обзор классического преобразования Мутара для двумерного уравнения Шредингера в декартовых координатах и связь преобразования Мутара с преобразованием Дарбу приведены в работе [8]. Были исследованы различные обобщения

¹⁾e-mail: kudryavtsev_a_g@mail.ru

классических преобразований Дарбу и их приложения к двумерным системам (см. обзор [9], недавнюю публикацию [10] и ссылки в них). В статьях [11, 12] в преобразование Дарбу была включена нелокальная переменная. Было получено нелокальное преобразование Дарбу двумерного стационарного уравнения Шредингера в декартовых координатах и установлена его связь с преобразованием Мутара. Основная идея этих работ была вдохновлена подходом к нелокальным симметриям в анализе групп симметрий дифференциальных уравнений [13, 14] (для варианта, основанного на теории накрытий, см. книгу [15] и ссылки в ней). В данной статье рассматривается нелокальное преобразование Дарбу для стационарного уравнения в цилиндрических координатах (1), используя подход статей [11, 12].

Используется связь уравнения Шредингера с уравнением Фоккера–Планка [16]. Подстановка

$$Y(r, z) = P(r, z) e^{h(r, z)} \quad (2)$$

в уравнение (1) приводит к уравнению типа Фоккера–Планка

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(P_r + 2h_r P + \frac{1}{r} P \right) + \frac{\partial}{\partial z} (P_z + 2h_z P) = 0, \quad (3)$$

если u и h удовлетворяют условию

$$u = -h_{rr} + h_r^2 + \frac{1}{r} h_r + \frac{1}{r^2} - h_{zz} + h_z^2. \quad (4)$$

Уравнение (3) имеет вид закона сохранения, что позволяет получить следующую систему уравнений:

$$P_r + 2h_r P + \frac{1}{r} P - Q_z = 0, \quad (5)$$

$$P_z + 2h_z P + Q_r = 0. \quad (6)$$

Переменная Q является нелокальной переменной относительно уравнения (3) и связанного с ним уравнения (1). Преобразование Дарбу уравнений (5), (6), включающее Q , приводит к нелокальному преобразованию уравнения (1).

Рассматривается линейный оператор, соответствующий системе уравнений (5), (6)

$$\hat{L}(h(r, z)) \mathbf{f} = \begin{pmatrix} 2h_r + \frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} & -\frac{\partial}{\partial z} \\ 2h_z + \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}.$$

Преобразование Дарбу ищется в виде

$$\begin{aligned} & \hat{L}_D \mathbf{f} = \\ & = \begin{pmatrix} g_{11} - a_{11} \frac{\partial}{\partial r} - b_{11} \frac{\partial}{\partial z} & g_{12} - a_{12} \frac{\partial}{\partial r} - b_{12} \frac{\partial}{\partial z} \\ g_{21} - a_{21} \frac{\partial}{\partial r} - b_{21} \frac{\partial}{\partial z} & g_{22} - a_{22} \frac{\partial}{\partial r} - b_{22} \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Если линейные операторы $\hat{L}$ и $\hat{L}_D$ удовлетворяют сплетающему соотношению

$$\left(\hat{L}(h(r, z) + s(r, z)) \hat{L}_D - \hat{L}_D \hat{L}(h(r, z)) \right) \mathbf{f} = 0 \quad (7)$$

для любой функции $\mathbf{f} \in \mathcal{F} \supset \text{Ker}(\hat{L}(h))$, где $\text{Ker}(\hat{L}(h)) = \{\mathbf{f} : \hat{L}(h) \mathbf{f} = 0\}$, то для любой функции $\mathbf{f}_s \in \text{Ker}(\hat{L}(h))$ функция $\tilde{\mathbf{f}}(r, z) = \hat{L}_D \mathbf{f}_s(r, z)$ является решением уравнения $\hat{L}(\tilde{h}) \tilde{\mathbf{f}} = 0$ с новым потенциалом $\tilde{h} = h + s$.

Уравнения для $s, g_{ij}, a_{ij}, b_{ij}$ получаются из сплетающих соотношений (7). При этом возникает следующее выражение:

$$V(r, z) = s(r, z) + 2h(r, z) + \ln(r). \quad (8)$$

Случай $V(r, z) = 0$ приводит к обобщенному преобразованию Мутара, как важному частному случаю нелокального преобразования Дарбу [2]. Приложения обобщенного преобразования Мутара рассмотрены в работе [1].

В общем случае, когда V не обращается в нуль, сплетающие соотношения (7) приводят к следующему виду оператора преобразования Дарбу:

$$\hat{L}_D = e^{-s(r, z)} \begin{pmatrix} R_1 + \frac{\partial}{\partial z} & R_2 \\ s_r - R_2 & s_z + R_1 + \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где

$$R_1 = \frac{1}{2} (V_z - 2s_z + (V_z H + V_r T) / G),$$

$$R_2 = \frac{1}{2} (s_r + (s_r H - s_z T) / G),$$

$$G = s_r V_r + s_z V_z, H = V_{zz} - s_{rr}, T = V_{rz} + s_{rz}$$

и s удовлетворяет системе двух нелинейных уравнений в частных производных [2]. Эти уравнения решить в общем виде не получается и они здесь для краткости не приводятся.

В соответствии с (9) имеем

$$\tilde{P} = e^{-s} \left(R_1 P + \frac{\partial}{\partial z} P + R_2 Q \right),$$

и, учитывая соотношение $\tilde{Y}(r, z) = \tilde{P}(r, z) e^{\tilde{h}(r, z)}$, получаем формулу нелокального преобразования Дарбу

$$\tilde{Y} = \frac{\partial}{\partial z} Y + (R_1 - h_z) Y + e^h R_2 Q. \quad (10)$$

Используя соотношение (2), уравнения (5), (6) для Q принимают вид

$$e^{-h} \left(Y_r + h_r Y + \frac{1}{r} Y \right) - Q_z = 0, \quad (11)$$

$$e^{-h} (Y_z + h_z Y) + Q_r = 0. \quad (12)$$

При выборе конкретного вида h система уравнений на s может заметно упрощаться. Функция h связана с исходным потенциалом u формулой (4). Нетрудно проверить, что $h_u = -\ln(rf(r, z))$, где f является произвольным решением уравнения (1) с исходным потенциалом u , удовлетворяет уравнению (4). Рассмотрим, например, $u = 0$, $f = \frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}}$. Имеем, соответственно, $h_0 = -\ln(r) + \frac{1}{2} \ln(r^2 + z^2)$. При $h = h_0$ система уравнений на s имеет частное решение

$$s_0 = -1/2 \ln(r^2 + z^2) + \ln\left((r^2 + z^2)^{C_1} + C\right) - \ln\left((1 - 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + (1 + 2C_1)C\right), \quad (13)$$

где C, C_1 – произвольные константы. По формуле (4) при $\tilde{h} = h_0 + s_0$ получаем новый потенциал

$$\tilde{u}(r, z) = -8 \frac{CC_1^2 (r^2 + z^2)^{C_1 - 1}}{\left((r^2 + z^2)^{C_1} + C\right)^2}. \quad (14)$$

Этот потенциал удовлетворяет условию $\tilde{u} < 0$ и не имеет особенностей при $C > 0, C_1 \geq 1$. Таким образом, мы получили двухпараметрическое семейство решаемых потенциалов Гельмгольца.

В соответствии с (10) мы имеем следующую формулу для решений уравнения (1) с потенциалом (14)

$$\tilde{Y} = \frac{\partial}{\partial z} Y - M \left(zY - \sqrt{r^2 + z^2} Q \right), \quad (15)$$

где

$$M = \frac{\left((1 + 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + C(1 - 2C_1)\right)}{2(r^2 + z^2)\left((r^2 + z^2)^{C_1} + C\right)}.$$

Функция Q определяется из системы уравнений

$$\left(Y_r + \frac{rY}{r^2 + z^2}\right) \frac{r}{\sqrt{r^2 + z^2}} - Q_z = 0, \quad (16)$$

$$\left(Y_z + \frac{zY}{r^2 + z^2}\right) \frac{r}{\sqrt{r^2 + z^2}} + Q_r = 0, \quad (17)$$

где функция Y – любое решение уравнения (1) с исходным потенциалом $u = 0$.

Для примера рассмотрим следующие простые решения уравнения (1): $1, z, r^2 - 2z^2, 3zr^2 - 2z^3, \frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}}$. Подставляя эти решения в формулы (15)–(17), получаем соответствующие решения уравнения (1) с потенциалом (14):

$$\tilde{Y}_1 = \frac{(1 + 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + (1 - 2C_1)C}{\sqrt{r^2 + z^2}\left((r^2 + z^2)^{C_1} + C\right)},$$

$$\tilde{Y}_2 = \frac{(1 - 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + (1 + 2C_1)C}{(r^2 + z^2)^{C_1} + C},$$

$$\tilde{Y}_3 = \frac{z\left((3 - 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + (3 + 2C_1)C\right)}{(r^2 + z^2)^{C_1} + C},$$

$$\tilde{Y}_4 = \frac{(r^2 - 2z^2)\left((5 - 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + (5 + 2C_1)C\right)}{(r^2 + z^2)^{C_1} + C},$$

$$\tilde{Y}_5 = \frac{z\left((3 + 2C_1)(r^2 + z^2)^{C_1} + (3 - 2C_1)C\right)}{(r^2 + z^2)^{3/2}\left((r^2 + z^2)^{C_1} + C\right)}.$$

В свою очередь потенциал (14) может быть использован в качестве исходного потенциала для новых преобразований. Для двумерного уравнения Шредингера в декартовых координатах в работе [17] было показано, что для получения несингулярных потенциалов эффективным является двукратное применение классического преобразования Мутара. Аналогично, в случае цилиндрических координат для получения несингулярных потенциалов эффективно двукратное обобщенное преобразование Мутара [1], которое имеет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= u - 2 \frac{\partial^2 \ln(F)}{\partial r^2} - 2 \frac{\partial^2 \ln(F)}{\partial z^2} = \\ &= u + 2 \left(\frac{\partial Y_2}{\partial z} \right) \left(2r \frac{\partial Y_1}{\partial r} + Y_1 \right) F^{-1} - \\ &\quad - 2 \left(\frac{\partial Y_1}{\partial z} \right) \left(2r \frac{\partial Y_2}{\partial r} + Y_2 \right) F^{-1} + \\ &\quad + 2r^2 \left(\frac{\partial Y_2}{\partial r} Y_1 - Y_2 \frac{\partial Y_1}{\partial r} \right)^2 F^{-2} + \\ &\quad + 2r^2 \left(\frac{\partial Y_2}{\partial z} Y_1 - Y_2 \frac{\partial Y_1}{\partial z} \right)^2 F^{-2}, \end{aligned} \quad (18)$$

где F удовлетворяет совместной системе уравнений

$$\frac{\partial}{\partial z} F = r \left(\frac{\partial Y_2}{\partial r} Y_1 - Y_2 \frac{\partial Y_1}{\partial r} \right), \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} F = -r \left(\frac{\partial Y_2}{\partial z} Y_1 - Y_2 \frac{\partial Y_1}{\partial z} \right), \quad (20)$$

функции Y_1 и Y_2 являются решениями уравнения (1) с исходным потенциалом u .

Чтобы избежать громоздких формул, рассмотрим простой случай $C_1 = 1$. В этом случае исходный потенциал (14) имеет вид

$$u = -\frac{8C}{(r^2 + z^2 + C)^2}. \quad (21)$$

Для примера рассмотрим $\tilde{Y}_1$ и $\tilde{Y}_2$ при $C_1 = 1$ в качестве решений исходного уравнения:

$$Y_1 = \frac{3(r^2 + z^2) - C}{\sqrt{r^2 + z^2}(r^2 + z^2 + C)}, Y_2 = \frac{r^2 + z^2 - 3C}{r^2 + z^2 + C}.$$

Из уравнений (19)–(20) получаем

$$F = \frac{z}{\sqrt{r^2 + z^2}} + K,$$

где K – произвольная константа. Затем по формуле (18) получаем новый решаемый потенциал

$$\begin{aligned} \tilde{u} = & -\frac{8C}{(r^2 + z^2 + C)^2} + \\ & + \frac{2(Kz + \sqrt{r^2 + z^2})}{(z + \sqrt{r^2 + z^2}K)^2 \sqrt{r^2 + z^2}}. \end{aligned} \quad (22)$$

Для второго примера в качестве решений исходного уравнения рассмотрим $\tilde{Y}_2$ и $\tilde{Y}_3$ при $C_1 = 1$:

$$Y_1 = \frac{r^2 + z^2 - 3C}{r^2 + z^2 + C}, Y_2 = \frac{z(r^2 + z^2 + 5C)}{r^2 + z^2 + C}.$$

Из уравнений (19)–(20) получаем

$$F = \frac{r^4 + (z^2 - 15C)r^2}{r^2 + z^2 + C} + K,$$

где K – произвольная константа. По формуле (18) получаем еще один новый решаемый потенциал

$$\begin{aligned} \tilde{u} = & 4N / (r^4 + (z^2 + K - 15C)r^2 + K(z^2 + C))^2, \\ N = & (r^2 - K)(r^2 + z^2)^2 - \\ & - C(30z^2 + 22K - 225C)r^2 + \\ & + KC(14z^2 - 2K + 15C). \end{aligned} \quad (23)$$

Этот потенциал не имеет сингулярностей при $C > 0$, $K \geq 15C$.

Рассмотренные примеры показывают, что, комбинируя нелокальное преобразование Дарбу и обобщенное преобразование Мутара, можно получать новые примеры решаемых потенциалов для стационарных аксиально-симметричных уравнений Шредингера и Гельмгольца. При этом для нелокального пре-

образования Дарбу нетривиальным шагом является поиск частных решений системы нелинейных уравнений, в то время как обобщенное преобразование Мутара требует лишь выбора точного решения исходного уравнения.

1. A. G. Kudryavtsev, JETP Lett. **111**, 126 (2020).
2. A. G. Kudryavtsev, arXiv:2101.10654 (2021).
3. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford (1977).
4. M. B. Vinogradova, O. V. Rudenko, and A. P. Sukhorukov, *The Wave Theory*, Nauka Publishers, Moscow (1990).
5. A. C. Kak and M. Slaney, *Principles of Computerized Tomographic Imaging*, Society of Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (2001).
6. P. G. Grinevich, A. E. Mironov, and S. P. Novikov, Russ. Math. Surv. **65**, 580 (2010).
7. V. B. Matveev and M. A. Salle, *Darboux Transformations and Solitons*, Springer, Berlin (1991).
8. C. Athorne and J. J. C. Nimmo, Inverse Probl. **7**, 809 (1991).
9. A. A. Andrianov and M. V. Ioffe, J. Phys. A: Math. Theor. **45**, 503001 (2012).
10. M. V. Ioffe and D. N. Nishnianidze, EPL **129**, 61001 (2020).
11. A. G. Kudryavtsev, Phys. Lett. A **377**, 2477 (2013).
12. A. G. Kudryavtsev, Theor. Math. Phys. **187**, 455 (2016).
13. I. S. Akhatov, R. K. Gazizov, and N. H. Ibragimov, J. Sov. Math. **55**, 1401 (1991).
14. G. W. Bluman, A. F. Cheviakov, and S. C. Anco, *Applications of Symmetry Methods to Partial Differential Equations*, Springer, N.Y. (2010).
15. *Symmetries and Conservation Laws for Differential Equations of Mathematical Physics* [in Russian], ed. by A. M. Vinogradov and I. S. Krasil'shchik, Faktorial, Moscow (1997) [English translation: Trans. Math. Monogr., Amer. Math. Soc., Providence, R.I. (1999), v. 182].
16. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Springer, Berlin (1989).
17. I. A. Taimanov and S. P. Tsarev, Theor. Math. Phys. **157**, 1525 (2008).

Метод Фока–Швингера в случае неравных масс

А. А. Осипов¹⁾

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 10 февраля 2021 г.

После переработки 10 февраля 2021 г.

Принята к публикации 19 февраля 2021 г.

Результат устранения из спектра теории тяжелых частиц неравной массы может быть описан при низких энергиях эффективным действием, представляющим собой асимптотический ряд по обратным степеням массы. Мы показываем, каким образом можно вычислить первые члены асимптотического ряда на основе формализма собственного времени: метода Фока–Швингера. Для иллюстрации подхода рассматривается теория с нарушенной $U(3) \times U(3)$ киральной симметрией. Показано, что невырожденность масс порождает множество вершин, описывающих следствия явного нарушения ароматической симметрии, которые, как правило, не возникают при менее строгом рассмотрении проблемы. Результат может использоваться при изучении теорий со спонтанно нарушенной симметрией и при построении эффективных теорий стандартной модели.

DOI: 10.31857/S123456782106001X

Понятие собственного времени было введено в квантовую теорию в работах Фока [1, 2] и Швингера [3]. В сочетании с методом фонового поля это позволило ДеВитту разработать явно ковариантный подход к калибровочной теории поля [4] и квантовой гравитации [5]. Метод применим в любой теории поля, но особое значение он приобретает при необходимости обеспечить явную ковариантность вычислений на всех этапах. Во всех упомянутых выше случаях и во многих других [6, 7] возникает задача вычисления детерминанта положительно определенного эллиптического оператора, описывающего квадратичные флуктуации квантовых полей во внешнем фоновом поле. Результатом, как правило, является асимптотическое разложение эффективного действия по степеням собственного времени с коэффициентами Сили–ДеВитта $a_n(x, y)$, которые зависят от фоновых полей. Примечательно, что каждый член разложения инвариантен относительно действия группы внутренней симметрии. Это следует из общей ковариантности формализма. В настоящее время асимптотические коэффициенты a_n хорошо известны вплоть до значений $n = 5$ для произвольного оператора типа Лапласа, и детали их вычислений можно найти, например, в работах [6–8].

Если квантовые поля имеют большие и равные массы m , то легко перейти от разложения по степеням собственного времени к разложению по обратным степеням массы, которое справедливо, когда все фоновые поля и их производные малы по сравнению

с массой квантового поля. В этом случае асимптотические коэффициенты a_n не меняются. Такое длинноволновое ($\lambda \gg 1/m$) разложение позволяет получить эффективное действие, описывающее лидирующий низкоэнергетический эффект от учета виртуальных вкладов тяжелых состояний. Этот сценарий часто реализуется в теориях со спонтанно нарушенной симметрией или в теориях с тяжелыми виртуальными частицами. Типичным примером теорий первого типа является модель Намбу–Иона-Лазинио (НИЛ) [9, 10], в которой основное состояние в режиме сильной связи оказывается отделенным щелью от возбужденных квазичастиц – нуклонов. В кварковой интерпретации модели можно получить низкоэнергетическое эффективное мезонное действие, порождаемое кирально симметричными четырехкварковыми взаимодействиями [11]. Здесь особенно полезен метод разложения по собственному времени [12, 13]. Примеры второго типа возникают, в частности, при эффективном расширении некоторой теории поля X с группой симметрии G до следующей теории X' , когда X' содержит тяжелые степени свободы, принадлежащие некоторому представлению группы G . В настоящее время такие теории активно изучаются в контексте расширения стандартной модели электрослабых взаимодействий [14].

В указанных выше исследованиях нередко необходимо решать задачу построения эффективной теории, возникающей в результате интегрирования однопетлевых вкладов тяжелых состояний, обладающих неравными массами $M = \text{diag}(m_1, m_2, \dots, m_i)$. В этом специфическом случае полная факториза-

¹⁾e-mail: aaosipov@jinr.ru

ция M^2 в тепловом ядре невозможна, поскольку M не коммутирует с остальной частью эллиптического оператора. В результате асимптотический ряд имеет более сложную структуру [15–17]. Математическая сложность данной задачи зачастую обходится путем упрощений, которые, как правило, не имеют под собой серьезной аргументации [13].

В работах [18–20] был предложен альтернативный метод получения эффективного действия в теории с тяжелыми состояниями неравной массы, основанный на перестройке асимптотического ряда по степеням собственного времени. Пересуммирование учитывает различие в массах тяжелых частиц. Метод особенно эффективен, когда мы имеем дело со случаем почти вырожденной матрицы M . Достоинством этого подхода является имеющаяся связь коэффициентов модифицированного разложения со стандартными коэффициентами Сили–ДеВитта [21].

В настоящей работе мы существенно развиваем вышеуказанный метод. А именно, мы отказываемся от процедуры пересуммирования асимптотического ряда, которая основывается на рекуррентном (т.е. пошаговом) выделении конечного зависящего от разности квадратов масс вклада. Данная процедура позволяет факторизовать симметричную (относительно перестановки масс) часть вклада. При этом антисимметричная часть раскладывается в ряд по степеням разности квадратов масс и модифицирует коэффициенты Сили–ДеВитта. Отказ от этой изящной, но вносящей дополнительные приближения идеи, делает связь со стандартными коэффициентами Сили–ДеВитта более сложной. Как мы покажем, новые коэффициенты разложения b_n зависят не только от фоновых полей, но и от масс, причем последняя зависимость имеет неполиномиальный (логарифмический) вид. В пределе равных масс b_n переходят в a_n . Интересной особенностью предлагаемого подхода является возможность связать массовую часть коэффициентов b_n с порождающими их фейнмановскими интегралами. Таким образом, каждый из коэффициентов b_n содержит полную информацию о конечных вкладах связанных с ним однопетлевых диаграмм.

Для определенности здесь мы рассматриваем теорию с $U(3) \times U(3)$ киральной симметрией, явно и спонтанно нарушенной до подгруппы $U(1)$. Известно, что группа $U(3)_L \times U(3)_R$ отвечает симметрии КХД лагранжиана в идеальном мире безмассовых кварков. В реальном мире с ненулевыми затравочными массами токовых кварков, киральная симметрия явно нарушена. При низких энергиях в результате динамического нарушения киральной симметрии возникает щель в спектре фермионов, кварки тяже-

леют и приобретают неравные массы, что и позволяет построить эффективный низкоэнергетический мезонный лагранжиан в виде ряда по $1/M^2$. Излагаемый ниже метод может быть положен в основу математически строгого подхода к решению данной задачи в рамках расширенной модели НИЛ.

Материал распределяется следующим образом. Сначала мы формулируем задачу. Затем обсуждаем основную идею расчетов и приводим основные результаты. Многочисленные детали вычислений будут изложены в отдельной подробной публикации.

Логарифм формального определителя самоспряженного эллиптического оператора второго порядка описывает однопетлевые радиационные поправки к классической теории. В дальнейшем нас будет интересовать только действительная часть эффективного действия, являющегося результатом вычисления определителя оператора Дирака D в фоновых скалярном s , псевдоскалярном p , векторном v_μ , и аксиально-векторном a_μ полях. Метод собственного времени не может быть применен непосредственно к фермионам, поскольку оператор Дирака является эллиптическим оператором первого порядка, и его спектр неограничен как сверху, так и снизу. Вместо этого рассмотрим функционал

$$W_E = -\ln |\det D_E| = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dt}{t} \rho(t, \Lambda^2) \text{Tr} \left(e^{-tD_E^\dagger D_E} \right), \quad (1)$$

представляющий действительную часть однопетлевого эффективного действия в евклидовом пространстве²⁾ в виде интеграла по собственному времени t . Интеграл расходится на нижнем пределе, поэтому вводится регулятор $\rho(t, \Lambda^2)$, где Λ – обрезающее. Оператор Дирака имеет вид

$$D_E = i\gamma_\alpha d_\alpha - M + \Sigma, \quad (2)$$

где $d_\alpha = \partial_\alpha + i\Gamma_\alpha$, $\Gamma_\alpha = v_\alpha + \gamma_{5E} a_\alpha$, $\Sigma = s + i\gamma_{5E} p$, $\alpha = 1, 2, 3, 4$, а массовая матрица тяжелых кварков равна $M = \text{diag}(m_1, m_2, m_3)$. Фоновые поля принимают значения в алгебре Ли $U(3)$ группы, например, $s = s_a \lambda_a$, и т.д., $\lambda_a = (\lambda_0, \lambda_i)$, где $\lambda_0 = \sqrt{2/3}$ и λ_i – восемь эрмитовых $SU(3)$ матриц Гелл–Манна. Символ Tr обозначает взятие шпура по цветовым, ароматическим, и гамма матрицам, а также интегрирование по координатам. Вся зависимость от фоновых полей в D_E после перехода к эрмитовому оператору

$$D_E^\dagger D_E = M^2 - d_\alpha^2 + Y \quad (3)$$

²⁾ Все вычисления мы проводим в евклидовом пространстве, на что указывает индекс E . Аналитическое продолжение полученного результата в пространство Минковского хорошо известно, поэтому здесь мы не будем на этом останавливаться.

собирается в Y и ковариантной производной d_α .

Чтобы продвинуться в вычислении выражения (1), мы воспользуемся швингеровской техникой фиктивного гильбертова пространства, изложенной, например, в обзоре [6]. Она позволяет представить эффективное действие в виде интеграла по 4-импульсам k_α

$$W_E = \frac{1}{2} \int d^4x \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-k^2} \times \int_0^\infty \frac{dt}{t^3} \rho(t, \Lambda^2) \text{tr} \left(e^{-t(M^2+A)} \right), \quad (4)$$

где $A = -d_\alpha^2 - 2ik\partial/\sqrt{t} + Y$. Поскольку оператор A содержит производные по координатам, необходимо уточнить смысл операции tr . Действительно, так как пространство $x \in \mathbb{R}^4$ не имеет границ, мы можем интегрировать по частям. Однако эта операция будет однозначной только при условии, что шпур не изменяется при циклической перестановке его x -зависимых элементов. Учитывая наличие производных в A , для гарантированного выполнения данного условия в (4) предполагается полная симметризация шпура, т.е., tr в таких случаях понимается как

$$\text{str}(A_1 A_2 \dots A_n) = \frac{1}{n} \sum_{\text{cycl. perm.}} \text{tr}(A_1 A_2 \dots A_n). \quad (5)$$

Чтобы выделить лидирующие в разложении по $1/M^2$ вклады, достаточно учесть слагаемые не выше t^4 степени, которые под знаком ароматического шпура (что обозначается индексом f) имеют вид

$$\begin{aligned} \text{tr}_f \left(e^{-t(M^2+A)} \right) &= \sum_{i=1}^3 c_i(t) - t \sum_{i=1}^3 c_i(t) \text{tr}_f A_i + \\ &+ \frac{t^2}{2!} \sum_{i,j} c_{ij}(t) \text{tr}_f (A_i A_j) - \frac{t^3}{3!} \sum_{i,j,k} c_{ijk}(t) \text{tr}_f (A_i A_j A_k) + \\ &+ \frac{t^4}{4!} \sum_{i,j,k,l} c_{ijkl}(t) \text{tr}_f (A_i A_j A_k A_l) + \mathcal{O}(t^5). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $A_i = E_i A$, где 3×3 матрицы $(E_i)_{nm} = \delta_{in} \delta_{im}$, а коэффициенты $c_{i_1 i_2 \dots i_n}(t)$ полностью симметричны относительно перестановки индексов и хорошо известны [19]. Они зависят от масс и собственного времени. Если массы вырождены, то все они совпадают, т.е., $c_i(t) = c_{ii}(t) = c_{iii}(t) = c_{iiii}(t) = e^{-tm_i^2}$.

Подставляя это разложение в (4) и интегрируя по импульсам и собственному времени, приходим к выражению

$$W_E = \frac{N_c}{32\pi^2} \int d^4x \sum_{n=0}^\infty \text{tr}_{Lf} b_n(x, x), \quad (7)$$

где $N_c = 3$, а tr_{Lf} означает взятие шпура по γ и λ_i -матрицам. Коэффициенты $b_n(x, x)$ зависят от фоновых полей и кварковых масс, т.е., содержат информацию, как о мезонных вершинах, так и о соответствующих им константах связи. В случае равных масс зависимость от m факторизуется в виде интегралов $J_{n-1}(m^2)$ [19], а мезонные вершины собираются в коэффициенты Сили-ДеВитта, точнее в их предельное значение для совпадающих аргументов $a_n(x, x)$. При больших m коэффициенты $b_n(x, x)$ демонстрируют такое же асимптотическое поведение, как и $J_{n-1}(m^2)$, т.е., $b_n \sim m^{-2(n-2)}$.

Здесь мы рассмотрим только лидирующие коэффициенты, а именно, b_1 и b_2 . Случай $n = 0$ не представляет интереса, поскольку b_0 не содержит фоновых полей и опускается из эффективного действия. Коэффициенты с $n \geq 3$ стремятся к нулю в пределе бесконечных масс, что и объясняет сделанное приближение.

Для удобства записи результата, наряду с обычным умножением матриц, мы будем также использовать нестандартное произведение [22], часто называемое адамаровским, которое определяется почленным умножением соответствующих элементов матриц

$$(A \circ B)_{ij} = A_{ij} B_{ij} \quad (8)$$

без суммирования по повторяющимся индексам. Это произведение, в отличие от стандартного, коммутативно, но сохраняет свойства ассоциативности и дистрибутивности.

Теперь мы можем записать результат для коэффициента b_1 в виде

$$b_1 = -J_0 \circ Y, \quad (9)$$

где $(J_0)_{ij} = \delta_{ij} J_0(m_i^2)$ - диагональная матрица, а интеграл

$$J_0(m_i^2) = \int_0^\infty \frac{dt}{t^2} \rho(t, \Lambda^2) c_i(t). \quad (10)$$

Эта формула описывает вклад фейнмановской однопетлевой диаграммы, известной как "головастик". Регуляризация выбирается в соответствии с рассматриваемой задачей, для модели НИЛ это $\rho(t, \Lambda^2) = 1 - (1 + t\Lambda^2)e^{-t\Lambda^2}$.

Перейдем к рассмотрению второго коэффициента b_2 . Результат представим в виде

$$b_2 = \frac{1}{2} Y (J \circ Y) - \frac{1}{12} \Gamma^{\alpha\beta} (J \circ \Gamma^{\alpha\beta}) + \Delta b_2, \quad (11)$$

где антисимметричный тензор $\Gamma_{\alpha\beta} = F_{\alpha\beta} + i[\Gamma_\alpha, \Gamma_\beta]$, а $F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha \Gamma_\beta - \partial_\beta \Gamma_\alpha$. $J_{ij} = J(m_i, m_j)$ - симметричная

3×3 матрица, элементами которой являются логарифмически расходящиеся части (при $\Lambda \rightarrow \infty$) фейнмановских собственно-энергетических диаграмм с массами виртуальных частиц m_i и m_j . Поскольку нам также потребуются выражения для аналогичных вкладов треугольных J_{ijk} и четырехугольных J_{iijk} диаграмм, представим их все сразу

$$(J_{ij}, J_{ijk}, J_{iijk}) = \int_0^\infty \frac{dt}{t} \rho(t, \Lambda^2) (c_{ij}(t), c_{ijk}(t), c_{iijk}(t)). \quad (12)$$

В рассматриваемой теории имеется всего три аромата кварков, поэтому в J_{iijk} как минимум два индекса совпадают. Подчеркнем, что формула (11) является основным результатом данной работы.

В пределе равных масс, первые два члена в (11) переходят в хорошо известный результат [6], а третье слагаемое обращается в ноль, т.е., оно представляет только вклады, связанные с явным нарушением киральной симметрии. Без учета этого члена описание явного нарушения ароматической симметрии представляется неполным. Мы запишем его в виде четырех слагаемых

$$\Delta b_2 = \Omega_Y + \sum_{n=0}^2 \Omega^{(n)}, \quad (13)$$

где выделен вклад линейных по Y членов Ω_Y , а вклад векторных частиц разбит на три группы $n = 0, 1, 2$ по числу имеющихся производных.

Линейная по Y часть состоит из двух слагаемых

$$\Omega_Y = AY + \frac{i}{3} (R \circ \Gamma^\alpha) \overset{\leftrightarrow}{\partial}^\alpha Y, \quad (14)$$

где R и A являются 3×3 матрицами с элементами

$$\begin{aligned} R_{ij} &= -\frac{1}{2} (J_{iij} - J_{jji}), \\ A_{ii} &= \sum_{j \neq i} (J_{ii} - J_{ij} + R_{ij}) \Gamma_{ij}^\alpha \Gamma_{ji}^\alpha, \\ A_{ij} &= (J_{ij} - J_{ijk}) \Gamma_{ik}^\alpha \Gamma_{kj}^\alpha - \\ &- R_{ij} (\Gamma_{ij}^\alpha \Gamma_{jj}^\alpha - \Gamma_{ii}^\alpha \Gamma_{ij}^\alpha)_{|i \neq j \neq k}, \end{aligned} \quad (15) \quad (16)$$

а двусторонняя производная определена как разность $Y \overset{\leftrightarrow}{\partial}^\alpha \Gamma^\alpha \equiv Y \partial^\alpha \Gamma^\alpha - (\partial^\alpha Y) \Gamma^\alpha$. Чтобы не было недоразумений, подчеркнем, что повторяющиеся индексы аромата не предполагают суммирования по ним. Здесь и далее суммирование проводится, только если явно выписан знак суммы.

Рассмотрим теперь члены с двумя производными

$$\Omega^{(2)} = \frac{1}{24} [F^{\alpha\beta} (T \circ F^{\alpha\beta}) + 6(\partial\Gamma) (T \circ \partial\Gamma)]. \quad (17)$$

Первое слагаемое дает дополнительный вклад в уже известные нам кинетические члены эффективного лагранжиана. Симметричная матрица T имеет вид $T_{ij} = J_{ij} - J_{iij}$. В выражении $\partial\Gamma$ подразумевается суммирование по опущенным индексам $\partial^\alpha \Gamma^\alpha$. Ввиду поперечности векторных полей, второе слагаемое в (17) обращается в ноль на массовой поверхности этих состояний. Поэтому его можно опустить.

Члены с одной производной можно собрать в следующее выражение

$$\begin{aligned} \Omega^{(1)} &= \frac{i}{3} C^{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} + \frac{i}{6} \delta_{\alpha\beta\gamma\sigma} (K \circ \partial^\alpha \Gamma^\beta) E^{\gamma\sigma} + \\ &+ \frac{3i}{4} (T \circ \partial^\alpha \Gamma^\beta) L_-^\alpha, \end{aligned} \quad (18)$$

которое представляет эффективные трехчастичные вершины, описывающие локальное взаимодействие векторных и аксиально-векторных полей. Символ $\delta_{\alpha\beta\gamma\sigma} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\sigma} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\sigma} + \delta_{\alpha\sigma}\delta_{\beta\gamma}$ является полностью симметричным тензором, составленным из произведения двух символов Кронекера. Диагональные и недиагональные элементы матрицы $C^{\alpha\beta}$ имеют соответственно вид

$$\begin{aligned} C_{ii}^{\alpha\beta} &= \sum_{j \neq i} \left(J_{ii} - J_{ij} + \frac{1}{4} R_{ij} + \frac{3}{4} T_{ij} \right) \Gamma_{ij}^\alpha \Gamma_{ji}^\beta, \\ C_{ij}^{\alpha\beta} &= (J_{ij} - J_{123}) \Gamma_{ik}^\alpha \Gamma_{kj}^\beta_{|i \neq j \neq k} + \frac{1}{4} R_{ij} (L_+^{\alpha\beta})_{ij} + \\ &+ \frac{3}{4} T_{ij} (L_-^{\alpha\beta})_{ij}, \end{aligned} \quad (19)$$

где мы положили

$$(L_\pm^{\alpha\beta})_{ij} = (\Gamma_{ii}^\alpha \pm \Gamma_{jj}^\alpha) \Gamma_{ij}^\beta. \quad (20)$$

Обратим внимание на то, что элементы матрицы Γ_{ij}^α перестановочны между собой, поскольку, входящие в них единичная и γ_5 матрицы коммутативны. Антисимметричная матрица K определяется выражением

$$K_{ij} = (J_{jjk} - J_{iik})_{|i \neq j \neq k}. \quad (21)$$

Тензор $E^{\gamma\sigma}$ также не имеет диагональных элементов, хотя и не является антисимметричным

$$E_{ii}^{\gamma\sigma} = 0, \quad E_{ij}^{\gamma\sigma} = \Gamma_{ik}^\gamma \Gamma_{kj}^\sigma, \quad (i \neq j \neq k). \quad (22)$$

Последнее, что нам осталось рассмотреть, – это вклад членов без производных, т.е. членов $\propto \Gamma^4$. Поскольку таких слагаемых много (78 независимых комбинаций из Γ), удобно не собирать их в матричную форму, а представить результат в виде явных сумм по ароматическим индексам. Тогда мы имеем

$$\begin{aligned}
\text{tr}_f \Omega^{(0)} = & \sum_{i < j} \left\{ (\Gamma_{ij} \Gamma_{ji})^2 \left[\frac{2}{3} (J_{ii} + J_{jj}) - \frac{4}{3} J_{ij} \right] + \right. \\
& + (\Gamma_{ij} \Gamma_{ij}) (\Gamma_{ji} \Gamma_{ji}) \frac{1}{6} (2J_{ij} - J_{ii} - J_{jj}) \left. \right\} + \sum_{\substack{i \neq j \neq k, \\ j < k}} \\
& \left\{ (\Gamma_{ij} \Gamma_{ji}) (\Gamma_{ik} \Gamma_{ki}) \left[\frac{1}{3} (J_{jk} + 2J_{iijk}) + J_{ii} - J_{ij} - J_{ik} \right] \right. \\
& + (\Gamma_{ji} \Gamma_{ik}) (\Gamma_{ki} \Gamma_{ij}) \left[\frac{1}{3} (J_{ii} + 2J_{iijk}) + J_{jk} - 2J_{ijk} \right] + \\
& + [(\Gamma_{ii} \Gamma_{jk}) (\Gamma_{ij} \Gamma_{ki}) + (\Gamma_{ik} \Gamma_{ji}) (\Gamma_{kj} \Gamma_{ii})] \times \\
& \times \frac{1}{3} (2J_{iijk} - J_{ij} - J_{ik}) + \\
& + (\Gamma_{ij} \Gamma_{ik}) (\Gamma_{ki} \Gamma_{ji}) \frac{1}{3} (2J_{iijk} - J_{ii} - J_{jk}) \left. \right\} + \\
& + \sum_{i \neq j \neq k} \left\{ [(\Gamma_{ii} \Gamma_{ij}) (\Gamma_{jk} \Gamma_{ki}) + (\Gamma_{ik} \Gamma_{kj}) (\Gamma_{ji} \Gamma_{ii})] \times \right. \\
& \times \frac{1}{3} (J_{ik} + 2J_{iijk} - J_{ijk}) + \\
& + \left. \left[(L^{\alpha\alpha}_{-})_{ij} (\Gamma_{jk} \Gamma_{ki}) + (\Gamma_{ij} \Gamma_{ji}) (\Gamma_{ik} \Gamma_{ki}) \right] R_{ij} \right\} + \\
& + \sum_{i \neq j} \left(\Gamma_{ii}^{\alpha} \Gamma_{ii}^{\beta} \Gamma_{ij}^{\gamma} \Gamma_{ji}^{\sigma} - \Gamma_{ii}^{\alpha} \Gamma_{ij}^{\beta} \Gamma_{jj}^{\gamma} \Gamma_{ji}^{\sigma} - \frac{1}{2} \Gamma_{ij}^{\alpha} \Gamma_{ji}^{\beta} \Gamma_{ij}^{\gamma} \Gamma_{ji}^{\sigma} \right) \times \\
& \times \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta\gamma\sigma} T_{ij}. \quad (23)
\end{aligned}$$

Здесь выражение в круглых скобках понимается как $(\Gamma_{ij} \Gamma_{ji}) \equiv \Gamma_{ij}^{\alpha} \Gamma_{ji}^{\alpha}$. В пределе равных масс фермионов (23) равно нулю, так как все J -зависимые коэффициенты в этом случае обращаются в нуль.

В заключение отметим, что полученные нами выражения для коэффициентов $b_1(x, x)$ и $b_2(x, x)$ могут быть положены в основу построения целого ряда эффективных теорий, возникающих в результате исключения тяжелых состояний неравной массы. Наиболее прямым приложением было бы их использование для анализа явного нарушения $SU(3)$ и $SU(2)$ симметрий в моделях НИЛ. Как мы уже отмечали, многочисленные имеющиеся в литературе исследования этих вопросов неполны, поскольку коэффициент b_2 содержит множество ранее не рассматриваемых вершин. Хотя мы здесь ограничились частным при-

мером, предлагаемый подход легко распространяется на случай произвольной группы внутренней симметрии. Это является прямым следствием общности метода Фока–Швингера, лежащего в основе наших вычислений.

1. V. A. Fock, *Izv. Akad. Nauk. USSR (Phys.)* **4–5**, 551 (1937).
2. V. A. Fock, *Phys. Zs. Sowjet.* **12**, 404 (1937).
3. J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 664 (1951).
4. B. S. DeWitt, *Dynamical Theory of Groups and Fields*, Gordon & Breach, N.Y. (1965).
5. B. S. DeWitt, *Phys. Rep.* **19**, 295 (1975).
6. R. D. Ball, *Phys. Rep.* **182**, 1 (1989).
7. D. V. Vassilevich, *Phys. Rep.* **388**, 279 (2003).
8. P. B. Gilkey, *Invariance theory, the heat equation, and the Atiyah-Singer index theorem*, 2nd ed., CRC Press LLC, Boca Raton, FL (1995).
9. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, *Phys. Rev.* **122**, 345 (1961).
10. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, *Phys. Rev.* **124**, 246 (1961).
11. M. K. Volkov, *Ann. of Phys.* **157**, 282 (1984).
12. A. Dhar, R. Shankar, and S. R. Wadia, *Phys. Rev. D* **31**, 3256 (1985).
13. D. Ebert and H. Reinhardt, *Nucl. Phys. B* **271**, 188 (1986).
14. G. Passarino, *arxiv*: 1901.04177.
15. C. Lee, H. Min, and P. Y. Pac, *Nucl. Phys. B* **202**, 336 (1982).
16. C. Lee, T. Lee, and H. Min, *Phys. Rev. D* **39**, 1681 (1989).
17. C. Lee, T. Lee, and H. Min, *Phys. Rev. D* **39**, 1701 (1989).
18. A. A. Osipov and B. Hiller, *Phys. Rev. D* **63**, 094009 (2001); *arxiv*: hep-ph/0012294.
19. A. A. Osipov and B. Hiller, *Phys. Rev. D* **64**, 087701 (2001); *arxiv*: hep-th/0106226.
20. A. A. Osipov and B. Hiller, *Phys. Lett. B* **515**, 458 (2001).
21. L. L. Salcedo, *EPJ direct* **3**, 1 (2001); <https://doi.org/10.1007/s1010501c0014>.
22. G. P. H. Styan, *Linear Algebra Its Appl.* **6**, 217 (1973).

Параметрически возбуждаемые хаотические спайковые последовательности и информационные аспекты в ансамбле нейронов ФитцХью–Нагумо

Д. С. Шапин⁺¹⁾, В. И. Некоркин^{+*}

⁺Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

^{*}Научно-образовательный математический центр “Математика технологий будущего”, 603950 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2020 г.

После переработки 8 февраля 2021 г.

Принята к публикации 8 февраля 2021 г.

В статье рассматривается влияние параметрического изменения порога возбуждения на процессы генерации спайковой активности в ансамбле нейронов ФитцХью–Нагумо. Показано, что периодическое изменение порога возбуждения приводит к существованию хаотических режимов генерации спайковой активности с различными статистическими свойствами. Установлено, что возникновение хаоса в модели отдельного нейрона происходит через перемежаемость Помо–Манневила. Показано, что изменяя глубину модуляции и частоту параметрического воздействия, можно управлять информационными характеристиками нейрона. Установлено, что при объединении нейронов в ансамбль возникают хаотические спайковые последовательности, формирующие фракталоподобные пространственно-временные паттерны.

DOI: 10.31857/S1234567821060094

Введение. Как известно [1], в процессах обработки и кодирования информации нейронными структурами важную роль играет так называемый порог возбуждения нейрона, т.е. значение мембранного потенциала, при превышении которого происходит генерация спайка (импульса возбуждения или потенциала действия). Обычно считают, что пороговое значение является постоянной величиной. Однако, многочисленные нейрофизиологические эксперименты [2–9] показывают, что не всегда такое упрощение является корректным. Во многих случаях пороговое напряжение изменяется во времени, и, чтобы подчеркнуть это свойство, такие пороги называют динамическими [2, 3, 10]. Кроме того, большее количество типов ионных каналов может участвовать в изменении порога [11–14]. Нейроны обладающие динамическими порогами, демонстрируют ряд уникальных свойств: формируют сложные ответы нейронов [9, 10], повышают селективность нейронных функций [6], позволяют различать слабую асинхронную нейронную активность [2, 15, 16], играют важную роль во временном кодировании [14, 17] и оказывают влияние на эффективность передачи и затрат энергии [18] в нейронных системах.

Настоящая статья посвящена исследованию

динамики ансамбля взаимодействующих через электрический синапс нейронов ФитцХью–Нагумо (ФХН), обладающих динамическими порогами, которые формируются за счет параметрического воздействия.

Модель. Динамика ансамбля связанных через электрический синапс нейронов ФХН с параметрическим изменением порога возбуждения описывается системой:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{du_j}{dt} &= f(u_j) - v_j + d(u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}) \\ \frac{dv_j}{dt} &= \gamma u_j - v_j + I_0(1 + A \sin(2\pi\omega t)), \\ j &= 1 \dots N, u_0 \equiv u_1, u_{N+1} \equiv u_N,\end{aligned}\tag{1}$$

где (см., например, [19, 20]) u – мембранный потенциал, v – совокупная восстанавливающая переменная, описывающая, в частности, динамику тока ионов калия, $f(u) = u - u^3/3$ – функция, характеризующая ток ионов натрия. Параметры ε и γ определяют характерные временные масштабы изменения переменных u и v , I_0 – внешнее напряжение, воздействующее на нейрон и контролирующее порог возбуждения нейрона [20], d – сила электрической синаптической связи, пропорциональная проводимости щелевого контакта (*gap junction* [21]), A и ω – глубина

¹⁾shapinds@mail.ru

модуляции и частота параметрического воздействия соответственно.

Динамика нейрона в отсутствии параметрического воздействия. Динамика одиночного нейрона ($d = 0$, $A = 0$) описывается следующей системой:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{du}{dt} &= f(u) - v \\ \frac{dv}{dt} &= \gamma u - v + I_0.\end{aligned}\quad (2)$$

Зафиксируем значения параметров $\varepsilon = 0.28$ и $\gamma = 0.762$ и $I_0 = -0.028596$, тогда на фазовой плоскости системы (2) существует устойчивый предельный цикл l^s (см. рис. 1), охватывающий три состояния

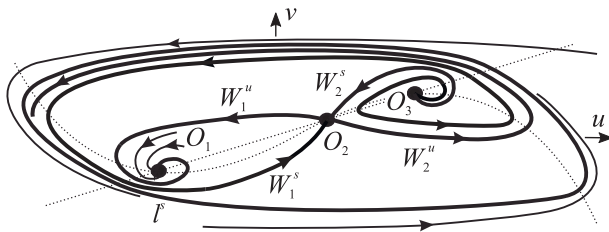


Рис. 1. Фазовая плоскость системы (2) для $\varepsilon = 0.28$, $\gamma = 0.762$, $I_0 = -0.028596$

равновесия $O_i(u_0^i, v_0^i)$, $i = 1, 2, 3$, расположенные на прямой $v = \gamma u - I_0$, где O_1 – устойчивый фокус, O_2 – седло, и O_3 – неустойчивый фокус, а u_0^i, v_0^i – координаты соответствующего состояния равновесия. Таким образом, при выбранных значениях параметров система (2) описывает генерацию нейроном периодических спайков, порог возбуждения которых определяется сепаратриссой W_1^s , проходящей при $t < t_0$, где t_0 – некоторое положительное число (см. рис. 1), вблизи сепаратриссы W_2^u . Ниже будет показано, что при параметрическом воздействии такой выбор параметров приводит к появлению хаотических режимов в отдельном нейроне.

Динамика нейрона с изменяющимся порогом и спайковые последовательности. Из (1) следует, что динамика нейрона описывается следующей неавтономной системой, которую можно представить в следующем эквивалентном виде:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{du}{dt} &= f(u) - v, \\ \frac{dv}{dt} &= \gamma u - v + I_0(1 + A \sin(2\pi\theta)), \\ \frac{d\theta}{dt} &= \omega,\end{aligned}\quad (3)$$

где $\theta = \omega t$. Система (3) определена в трехмерном фазовом пространстве $G = \{u, v, \theta | (u, v) \in \mathbb{R}^2, \theta \in \mathbb{S}^1\}$.

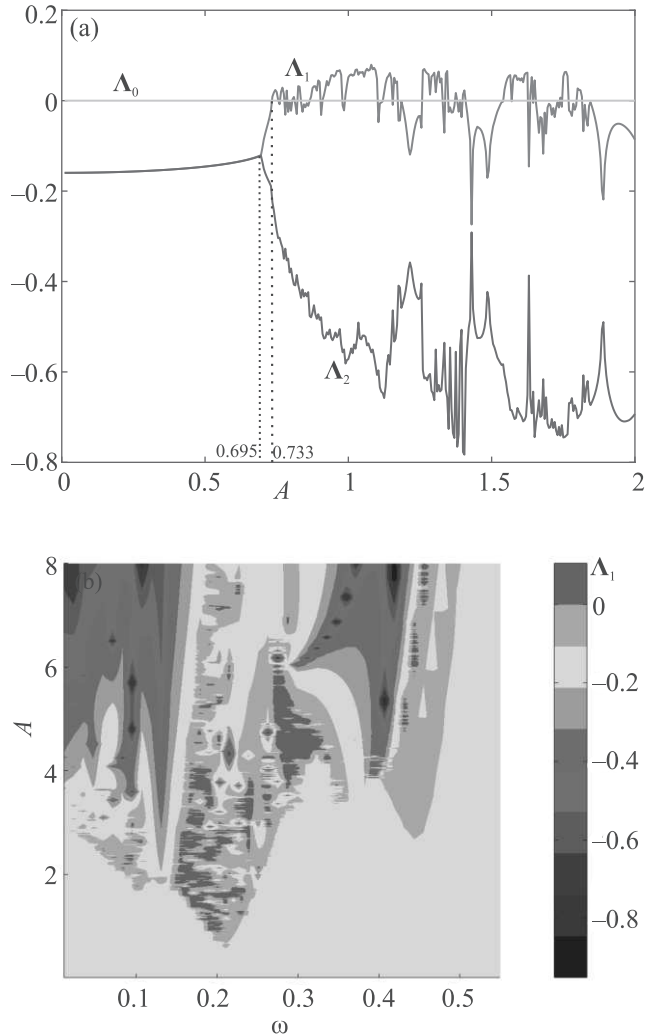


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость показателей Ляпунова $\Lambda_{0,1,2}$ от параметра A при $\omega = 0.2$; (б) – зависимость показателя Λ_1 от частоты ω и параметра A (цветом указано значение Λ_1). Параметры $\varepsilon = 0.28$, $I_0 = -0.028596$ и $\gamma = 0.762$

На рисунке 2а представлены результаты численного исследования ляпуновских показателей аттракторов системы (3) в зависимости от амплитуды A параметрического воздействия. При $A < 0.733$ динамика системы является регулярной и в G существует устойчивая периодическая траектория, которую обозначим через L^s . При этом, для значений $A \leq 0.695$ траектория L^s имеет комплексно сопряженные мультипликаторы $s_{1,2} = \alpha \pm i\beta$, лежащие внутри единичной окружности на комплексной плоскости, и поэтому равные отрицательные ляпуновские показатели $\Lambda_{1,2} = \frac{1}{T} \ln |s_{1,2}|$, где T – период L^s . Если A принадлежит интервалу $(0.695; 0.733)$, то L^s имеет два действительных мультипликатора внутри единичной

окружности, которым соответствуют два различных отрицательных показателя Ляпунова.

Мы обнаружили, что процесс установления периодических колебаний, соответствующих периодической траектории L^s , с произвольных начальных условий носит сложный характер. На рисунке 3а по-

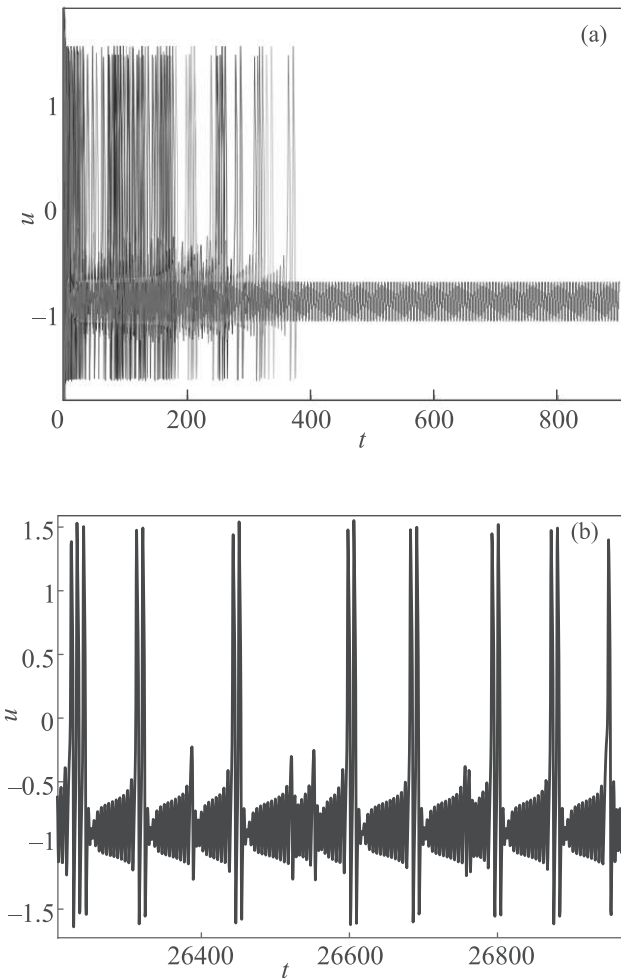


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Эволюция переменной $u(t)$ для 1000 начальных условий при $A = 0.730$; (б) – эволюция переменной $u(t)$, отвечающая хаотическому аттрактору при $A = 0.77$. Параметры $\varepsilon = 0.28$, $I_0 = -0.028596$, $\gamma = 0.762$ и $\omega = 0.2$

казана эволюция переменной $u(t)$, соответствующая процессу асимптотического приближения к периодической траектории L^s траекторий с 1000 случайных начальных условий. До прихода этих траекторий в окрестность L^s переменная $u(t)$ совершает нерегулярные спайковые “выбросы” связанные со существованием в фазовом пространстве G инвариантного непротивящего множества (гомклической структуры), образованного в результате пере-

сечения инвариантных многообразий седлового периодического движения L^u . Заметим, что при $A = 0$ траектория L^u формируется в фазовом пространстве G седлом O_2 системы (2) (см. рис. 1). При $A = 0.733$ один из ляпуновских показателей обращается в ноль (см. рис. 2а). В этом случае в фазовом пространстве G происходит слияние периодических движений L^s и L^u и их исчезновение при дальнейшем увеличении параметра A . Другими словами, значение $A = 0.733$ соответствует седло-узловой бифуркации периодических движений. В результате этой бифуркации один из ляпуновских показателей становится положительным (рис. 2а), а в фазовом пространстве G формируется хаотический аттрактор в результате трансформации гомклической структуры. На рисунке 3б представлена эволюция переменной $u(t)$, которая имеет вид хаотических спайковых колебаний на фоне почти периодических ламинарных колебаний. Следовательно, в системе (3) реализуется переход к хаотическим колебаниям через механизм перемежаемости Помо–Манневиля [22]. Дальнейшее увеличение параметра A приводит к чередованию интервалов регулярной и хаотической динамики.

Мы также изучили влияние частоты ω на динамику системы (3). Представленные на рис. 2б результаты показывают, во-первых, что хаотическая динамика реализуется лишь в некотором интервале значений ω , а во-вторых, для ее получения параметр A должен быть больше некоторого минимального значения. При этом области на плоскости (ω, A) , соответствующие хаотической и регулярной динамике, чередуются между собой. Следовательно, режимы генерации спайков нейроном ФХН могут быть как хаотическими, так и регулярными. В свою очередь, такое разнообразие активности существенно влияет на статистику межспайковых интервалов – одну из важных информационных характеристик нейронных структур.

Другой, не менее значимой, информационной характеристикой нейронных систем является вероятность генерации спайка в течении заданного интервала времени (временного “окна”) или, другими словами, – средняя частота появления спайков. На рисунке 4 представлена зависимость вероятности генерации спайка от глубины и частоты параметрического воздействия для значений параметров, соответствующих существованию хаотического аттрактора системы (3). Представленные результаты показывают, что существует широкий диапазон значений вероятности появления спайка, так как минимальное и максимальное значение для различных A и ω отличаются более, чем в два раза. Таким образом, выби-

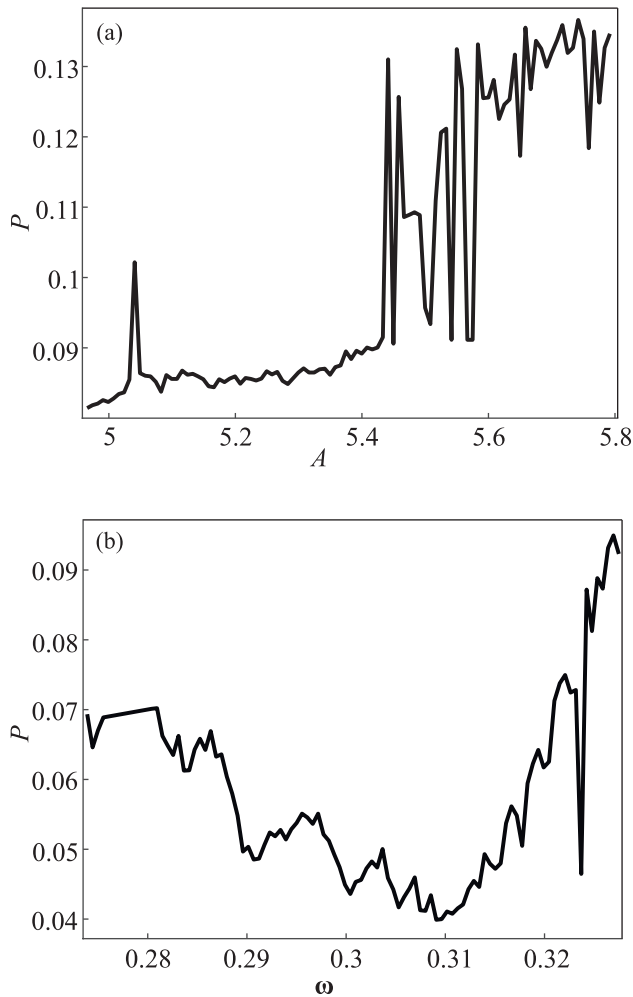


Рис. 4. Вероятность появления спайка P в заданном интервале времени (окно шириной 8 безразмерных единиц). (a) – в зависимости от A (при $\omega = 0.27342$) и (b) – в зависимости от ω (при $A = 4.5$) в системе (3). Параметры $\varepsilon = 0.28$, $I_0 = -0.028596$, $\gamma = 0.762$

рая соответствующее параметрическое воздействие мы можем управлять этой информационной характеристикой нейрона ФХН в больших пределах.

Пространственно-временная динамика ансамбля и хаотические последовательности спайков. Рассмотрим динамику ансамбля (1), когда каждый его элемент-нейрон ФХН демонстрирует хаотическое поведение, описанное выше. Численное моделирование системы (1) при $d = 0.06$ показало, что ее динамика остается хаотической. Мы обнаружили, что в системе при $N = 100$ в спектре ляпуновских показателей 99 являются положительными и, следовательно, реализуется режим гиперхаоса [23]. Мы изучили как режим гиперхаоса отражается на пространственно-временной динамике спайковых последовательностей ансамбля.

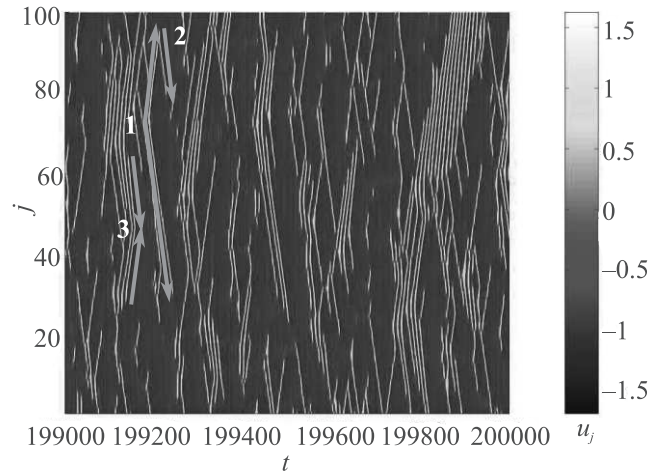


Рис. 5. (Цветной онлайн) Пространственно-временная диаграмма ансамбля из $N = 100$ элементов (цветом отмечено значение переменной u_j), отвечающая хаотическому аттрактору в системе (1). Параметры $\varepsilon = 0.28$, $I_0 = -0.028596$, $\gamma = 0.762$, $A = 0.77$, $\omega = 0.2$ и $d = 0.06$

При этом номер элемента ансамбля j мы трактовали как пространственную координату. На рисунке 5 представлена пространственно-временная диаграмма ансамбля (1), полученная численно. Она показывает, что в любой фиксированный момент времени генерация спайков происходит лишь в некоторых отдельных нейронах ансамбля, а остальные нейроны находятся ниже порога возбуждения спайков (см. рис. 5). Существуют группы последовательно (один за другим) генерирующих спайки нейронов вдоль ансамбля. На рисунке 5 такие группы показаны желтыми наклонными линиями. На диаграмме присутствуют линии различной длины, начиная от двух до 55-ти последовательно генерирующих спайки нейронов. Стрелками показаны примеры распространения спайков по ансамблю. В точке “1” стартуют два спайка, распространяющиеся в разные стороны. Спайк, идущий “вниз” по ансамблю аннигилирует, а бегущий “вверх” в точке “2” отражается и затем аннигилирует. В точке “3” показано столкновение двух импульсов и их аннигиляция. Следовательно, спайки распространяются лишь в течение конечного интервала, “пробегают” последовательно несколько нейронов, формируя при этом спайковые последовательности. Представленная на рис. 5 пространственно-временная динамика спайковых последовательностей, демонстрирует фракталоподобные свойства.

Мы установили, что взаимодействие нейронов приводит к увеличению плотности распределения

межспайковых интервалов. Например, 1-й (граничный) и 50-й нейроны имеют спектры межспайковых распределений достаточно близкие, но существенно с большей плотностью по сравнению со спектром одиночного нейрона (см. рис. 6), т.е. число возникающих

что в ансамбле возникают хаотические спайковые последовательности, состоящие из различного числа нейронов, которые, в свою очередь, формируют фракталоподобные пространственно-временные паттерны.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 19-12-00338).

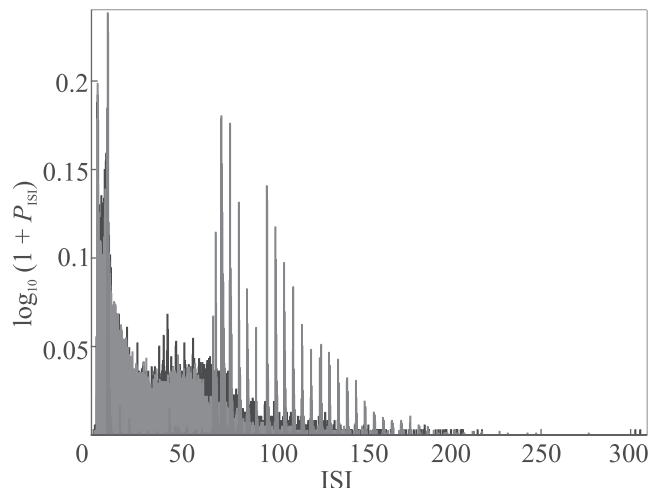


Рис. 6. (Цветной онлайн) Распределение межспайковых интервалов для 1-го (показано черным цветом) и 50-го (показано зеленым цветом) нейронов в ансамбле (1) при $N = 100$, и распределение межспайковых интервалов для одиночного нейрона (3) (показано красным цветом). По оси абсцисс отложен межспайковый интервал ISI в безразмерных единицах времени, а по оси ординат вероятность P_{ISI} , соответствующая значению ISI в логарифмическом масштабе $\log_{10}(1 + P_{ISI})$. Параметры $\varepsilon = 0.28$, $I_0 = -0.028596$, $\gamma = 0.762$, $A = 0.77$, $\omega = 0.2$ и $d = 0.06$

значений межспайковых интервалов в ансамбле существенно увеличивается. Отметим, что уменьшается и минимальное время между спайками (см. рис. 6), за счет чего нейроны демонстрируют хаотические последовательности с большей во времени плотностью спайков. Заметим, что сложные спайковые паттерны в ансамбле нейронов ФХН, взаимодействующих через электрический синапс, могут возникать также и в случае колебательных бистабильных элементов [24, 25].

В данной статье мы изучили влияние параметрического воздействия на генерацию спайков в ансамбле электрически связанных нейронов ФХН с изменяющимся порогом. Установили, что периодическое изменение порога возбуждения приводит к возникновению в фазовом пространстве хаотического аттрактора в соответствии со сценарием Памо–Манневиля. Показали, что изменяя глубину и частоту параметрического воздействия можно управлять информационными характеристиками нейрона. Обнаружили,

1. J. G. Nicholls, A. R. Martin, B. G. Wallace, and P. A. Fuchs, *From Neuron to Brain*, 4th ed., Sunderland, MA (2001).
2. R. Azouz and C. M. Gray, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **97**(14), 8110 (2000).
3. U. Lu, S. M. Roach, D. Song, and T. W. Berger, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering* **59**(3), 706 (2011).
4. D. A. Henze and G. Buzsaki, *Neuroscience* **105**(1), 121 (2001).
5. G. Daoudal and D. Debanne, *Learn. Mem.* **10**(6), 456 (2003).
6. W. B. Wilent and D. J. Contreras, *J. Neurosci.* **25**(11), 2983 (2005).
7. B. Naundorf, F. Wolf, and M. Volgushev, *Nature* **440**(7087), 1060 (2006).
8. D. A. McCormick, Y. Shu, and Y. Yu, *Nature* **445**(7123), E1 (2007).
9. M. A. Farries, H. Kita, and C. J. Wilson, *J. Neurosci.* **30**, 13180 (2010).
10. С. Ю. Кириллов, В. И. Некоркин, *Изв. вузов. Радиофизика* **58**(12), 1062 (2015).
11. P. M. Harrison, M. J. Wall, and M. J. Richardson, *BMC Neuroscience* **14**(1), 1 (2013).
12. J. Platkiewicz and R. Brette, *PLoS Comput. Biol.* **7**(5), 1001129 (2011).
13. B. Fontaine, J. L. Pen, and R. Brette, *PLoS Comput. Biol.* **10**(4), 1003560 (2014).
14. M. H. Higgs and W. J. Spain, *J. Physiol.* **589**(21), 5125 (2011).
15. F. Munoz and P. Fuentealba, *PLoS One* **7**(1), e30154 (2012).
16. A. Wallach and J. Marom, *J. Neurophysiol.* **107**(11), 2926 (2012).
17. H. Kuba, T. M. Ishii, and H. Ohmori, *Nature* **444**(7122), 1069 (2006).
18. G.-S. Yi, J. Wang, K.-M. Tsang, X.-L. Wei, and B. Deng, *Front. Comput. Neurosci.* **9**, 62 (2015).
19. A. Scott, *Neuroscience: A mathematical primer*, Springer Science & Business Media, N.Y. (2002).
20. A. S. Dmitrichev, D. V. Kasatkin, V. V. Klinshov, S. Y. Kirillov, O. V. Maslennikov, D. S. Shchapin, and V. I. Nekorkin, *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics* **26**(4), 5 (2018).

- 21. A. Henriquez, R. Vogel, B. Muller-Borer, C. Henriquez, R. Weingart, and W. Cascio, *Biophys. J.* **81**(4), 2112 (2001).
- 22. П. Берже, И. Помо, К. Видалъ, *Порядок в хаосе*, Мир, М. (1991).
- 23. O. E. Rossler, *Phys. Lett. A* **71**(2–3), 155 (1979).
- 24. D. S. Shchapin, A. S. Dmitrichev, and V. I. Nekorkin, *JETP Lett.* **106**(9), 617 (2017).
- 25. A. S. Dmitrichev, D. S. Shchapin, and V. I. Nekorkin, *JETP Lett.* **108**(8), 543 (2018).

Текущий авторский указатель томов 112–113 ¹⁾

- Abbad A. **112**, 387 (364)
 Afashokov Yu. Z. **112**, 797 ()
 Alsobhi B. O. **113**, 326 ()
 Andjelković L. **113**, 236 ()
 Aziz Z. **112**, 313 (290)
 Belyaeva T. L. **112**, 499 (463)
 Benstaali W. **112**, 313 (290);
112, 387 (364)
 Bentata S. **112**, 313 (290);
112, 387 (364)
 Bouadjemi B. **112**, 313 (290);
112, 387 (364)
 Chen J. **112**, 119 (117)
 Chernodubov D. A. **112**, 112 (106)
 Chu J. H. **113**, 131 ()
 Clark J. W. **112**, 700 (657)
 Danilov A. N. **112**, 499 (463)
 Demyanova A. S. **112**, 499 (463)
 Dmitriev A. P. **113**, 132 ()
 Dmitriev V. V. **112**, 820 ()
 Dolinina D. A. **112**, 79 (71)
 Doumi B. **112**, 617 (568)
 Dzaparova I. M. **112**, 797 ()
 Dzhabpuev D. D. **112**, 797 ()
 Falcon E. **112**, 799 ()
 Garifullin I. A. **113**, 210 ()
 Goncharov S. A. **112**, 499 (463)
 Gorbacheva E. A. **112**, 797 ()
 Haid S. **112**, 387 (364)
 He X. **112**, 172 (157)
 Houari M. **112**, 313 (290);
112, 387 (364)
 Inyushkin A. V. **112**, 112 (106)
 Iskrenović P. **113**, 236 ()
 Japaridze G. S. **112**, 700 (657)
 Kamashev A. A. **113**, 210 ()
 Karpikov I. S. **112**, 797 ()
 Khadzhiev M. M. **112**, 797 ()
 Klimenko N. F. **112**, 797 ()
 Kochurin E. **112**, 799 ()
 Kompaniets L. A. **112**, 482 (444)
 Kudzhaev A. U. **112**, 797 ()
 Kukovitsky E. **113**, 265 ()
 Kurenja A. N. **112**, 797 ()
 Kutuzov M. S. **112**, 820 ()
 Lantri T. **112**, 313 (290);
112, 387 (364)
 Leevik Y. S. **112**, 700 (657)
 Lidvansky A. S. **112**, 797 ()
 Li L. **112**, 119 (117)
 Luo M. **112**, 68 (58)
 Matouguia M. **112**, 387 (364)
 Matougui M. **112**, 313 (290)
 Mavrogordatos Th. K. **112**, 304 (274)
 Mikhailova O. I. **112**, 797 ()
 Milenković M. R. **113**, 236 ()
 Mokaddem A. **112**, 617 (568)
 Msezane A. Z. **112**, 700 (657)
 Naryshkin Yu. G. **113**, 221 ()
 Milenković A. S. **113**, 236 ()
 Ogloblin A. A. **112**, 499 (463)
 Petkov V. B. **112**, 797 ()
 Pikalov A. **113**, 274 ()
 Remil G. **112**, 313 (290)
 Ricard G. **112**, 799 ()
 Romanenko V. S. **112**, 797 ()
 Roy A. M. **112**, 187 (173);
113, 263 ()
 Rubtsov G. I. **112**, 797 ()
 Sakhin V. **113**, 265 ()
 Shabara R. M. **113**, 326 ()
 Shaginyan V. R. **112**, 700 (657)
 Shalin A. S. **112**, 79 (71)
 Shen Y. H. **112**, 68 (58)
 Shreter Yu. G. **112**, 112 (106)
 Soldatov A. A. **112**, 820 ()
 Solovyev I. V. **112**, 686 (642)
 Starastin V. I. **112**, 499 (463)
 Streltsov S. V. **112**, 686 (642)
 Milenković M. **113**, 236 ()
 Surovtsev E. V. **112**, 820 ()
 Tadjer A. **112**, 617 (568)
 Talanov Yu. **113**, 265 ()
 Taldenkov A. N. **112**, 112 (106)
 Tan Q. **112**, 172 (157)
 Teitel'baum G. **113**, 265 ()
 Troitsky S. V. **112**, 797 ()
 Trzaska W. H. **112**, 499 (463)
 Unatlov I. B. **112**, 797 ()
 Ushakov A. V. **112**, 686 (642)
 Volovik G. E. **112**, 539 (505)
 Voronenkov V. V. **112**, 112 (106)
 Wang H. **112**, 172 (157)
 Xu Y. E. **113**, 131 ()
 Yanin A. F. **112**, 797 ()
 Yudin A. N. **112**, 820 ()
 Yulin A. V. **112**, 79 (71)
 Zakharov B. G. **112**, 435 (393);
112, 723 ()
 Zakhvataev V. E. **112**, 482 (444)
 Zhezher Ya. V. **112**, 797 ()
 Zhuravleva K. V. **112**, 797 ()
 Zitouni A. **112**, 313 (290)
 Zubarev N. **112**, 799 ()
 Аверкиев Н. С. **113**, 52 ()
 Азаревич А. Н. **112**, 451 (413)
 Айдакина Н. А. **113**, 96 ()
 Акмаев М. А. **112**, 650 (607)
 Акопян Л. А. **112**, 626 (585)
 Алешкин В. Я. **112**, 541 (508)
 Альшиц В. И. **112**, 127 (127)
 Аминев Д. Ф. **112**, 501 (471)
 Амусья М. Я. **112**, 233 (219);
112, 709 (673)
 Андреев А. А. **112**, 598 (550)
 Андреева М. А. **113**, 175 ()
 Андрианов Е. С. **112**, 725 ()
 Анисимов А. Н. **112**, 813 ()
 Антоненко Д. С. **112**, 466 (428)
 Антропов А. С. **112**, 334 (310)
 Аплеснин С. С. **112**, 680 (636)
 Арбузов А. Б. **112**, 493 (457)
 Аристова И. М. **113**, 189 ()
 Аристов В. Ю. **113**, 189 ()
 Аронин Кобелев А. С. Н. П. **113**,
 341 ()
 Артемов В. В. **112**, 374 (352)
 Артемьев А. А. **112**, 291 (263)
 Архипов М. В. **113**, 237 ()
 Архипов Р. М. **113**, 237 ()
 Асадчиков В. Е. **113**, 161 ();
113, 175 ()
 Афонин А. Г. **113**, 223 ()
 Ахматханов А. Р. **112**, 644 (602)
 Ашитков С. И. **113**, 84 ();
113, 311 ()
 Бабиченко В. С. **112**, 618 (577)
 Бабуц Р. А. **112**, 813 ()
 Багаев В. С. **112**, 160 (145)
 Бакаров А. К. **112**, 54 (45)
 Бакаров А. К. s **112**, 475 (437)
 Бакшеев Д. Г. **112**, 196 (186);
113, 328 ()
 Балацкий Д. В. **113**, 267 ()
 Банников М. И. **112**, 263 (246)
 Барабанов А. Л. **112**, 343 (323)
 Баранов В. Т. **113**, 223 ()
 Баранов П. Г. **112**, 813 ()
 Барецки Б. **112**, 45 (37);
112, 275 (257)
 Баркалова А. С. **112**, 88 (84)
 Барнов Е. В. **113**, 223 ()
 Баулин Р. А. **113**, 175 ()
 Баюков О. А. **113**, 267 ()
 Бекиров А. Р. **112**, 361 (341)
 Белавин А. **112**, 388 (370)
 Белозеров Е. И. **112**, 516 (485)
 Белошлов Д. В. **113**, 133 ()
 Белотелов В. И. **112**, 314 (299);
 Белотелов В. И. **112**, 749 ();
112, 759 ()
 Бельх В. В. **112**, 650 (607)
 Бельская Н. А. **113**, 267 ()
 Бельтюков Я. М. **112**, 547 (513)
 Бен Хаида Я. **112**, 743 ()
 Бессас Д. **113**, 175 ()
 Бовкун Л. С. **112**, 541 (508)
 Богач А. В. **112**, 451 (413)
 Больгинов В. В. **112**, 743 ()
 Бондаревская А. С. **113**, 52 ()
 Бочкин Г. А. **112**, 754 ()
 Брагута В. В. **112**, 9 (6)
 Бражкин В. В. **112**, 787 ()
 Бреев И. Д. **112**, 813 ()
 Бритвич Г. И. **113**, 223 ()
 Буздин А. И. **113**, 38 ();
113, 102 ()

¹⁾В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 112(1)–112(10).

- Бузмаков А. В. **113**, 161 ()
 Бункин А. Ф. **112**, 437 (399)
 Буньков Ю. М. **112**, 101 (95);
 Буньков Ю. М. **112**, 314 (299);
112, 749 ()
 Буримов Н. И. **112**, 644 (602)
 Быков А. А. **112**, 54 (45);
112, 475 (437)
 Вайшнине Л. А. **112**, 343 (323)
 Валуев К. А. **113**, 68 ()
 Ванчо П. **112**, 328 (305)
 Ваньков А. Б. **112**, 62 (53);
113, 112 ()
 Варлачев В. А. **113**, 229 ()
 Васильев С. Г. **112**, 754 ()
 Введенский Н. В. **112**, 81 (77)
 Веневцев И. Д. **112**, 240 (225)
 Ветошко П. М. **112**, 314 (299);
112, 749 ()
 Вильшанская Е. В. **113**, 92 ()
 Виноградов А. П. **112**, 725 ()
 Власенко В. А. **112**, 822 ()
 Власов И. И. **112**, 17 (13)
 Волков В. В. **112**, 632 (591)
 Волков М. К. **112**, 493 (457)
 Воробьев А. С. **112**, 343 (323)
 Воробьев Н. С. **112**, 774 ()
 Воронин А. А. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
 Воронин В. В. **112**, 639 (597)
 Воронов А. А. **112**, 759 ()
 Вуль А. Я. **112**, 807 ()
 Гавриленко В. И. **112**, 541 (508)
 Гавричков В. А. **112**, 258 (241)
 Гагарский А. М. **112**, 343 (323)
 Газизов А. Р. **113**, 152 ()
 Галеева А. В. **112**, 263 (246)
 Галимов А. И. **113**, 248 ()
 гальперин Ю. М. **112**, 54 (45)
 Гартман А. Д. **112**, 730 ()
 Гижя С. С. **112**, 774 ()
 Глазков В. Н. **112**, 688 (647)
 Глазов М. М. **113**, 10 ()
 Глек П. Б. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
 Глушков В. В. **112**, 451 (413)
 Головчанский И. А. **112**, 743 ()
 Горан А. В. **112**, 475 (437)
 Григорьев П. Д. **112**, 107 (101)
 Гришаков К. С. **113**, 182 ()
 Гришаков К. С. **112**, 674 (630)
 Гришин М. Я. **112**, 437 (399)
 Громилов С. А. **113**, 267 ()
 Гудков В. В. **113**, 52 ()
 Гуров Ю. Б. **113**, 147 ()
 Гусева Ю. А. **113**, 248 ()
 Гущин М. Е. **113**, 96 ()
 Давыдов М. А. **112**, 437 (399)
 Данилов М. В. **112**, 484 (452)
 Данилов П. А. **112**, 579 (533);
113, 299 ()
 Дворецкий С. А. **112**, 263 (246);
112, 541 (508)
 Двуреченский А. В. **113**, 58 ()
 Дегтяренко Н. Н. **112**, 674 (630)
 Делев В. А. **113**, 26 ()
 Демин В. А. **112**, 328 (305);
112, 379 (357)
 Демишев С. В. **112**, 451 (413)
 Димитриева С. Е. **112**, 501 (471)
 Дмитриев А. А. **112**, 54 (45)
 Долженко Д. Е. **112**, 263 (246)
 Доронин И. В. **112**, 725 ()
 Дричко И. Л. **112**, 54 (45)
 Дровосеков А. Б. **112**, 88 (84)
 Дружинин А. В. **112**, 45 (37)
 Дубиков А. В. **112**, 644 (602)
 Дудкин Г. Н. **113**, 229 ()
 Дулебо А. И. **112**, 650 (607)
 Дьячкова И. Г. **113**, 161 ()
 Дюгаев А. М. **112**, 107 (101)
 Евдокимов С. В. **113**, 291 ()
 Еганова Е. М. **113**, 84 ()
 Егоров С. В. **112**, 743 ()
 Егранов А. В. **113**, 52 ()
 Екимов Е. А. **112**, 17 (13)
 Екомасов Е. Г. **112**, 357 (337)
 Емельянов А. В. **112**, 379 (357)
 Еремин Б. **112**, 388 (370)
 Есин А. А. **112**, 644 (602)
 Жаров А. А. **112**, 73 (65)
 Жаров А. А. мл. **112**, 73 (65)
 Жарова Н. А. **112**, 73 (65)
 Жаховский В. В. **113**, 84 ();
113, 311 ()
 Жевстовских И. В. **113**, 52 ()
 Желтиков А. М. **113**, 3 ()
 Желтиков А. М. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
 Жигадло Н. Д. **112**, 523 (491)
 Жилиева Е. И. **112**, 623 (582)
 Жолудев М. С. **112**, 541 (508)
 Жукова М. О. **113**, 237 ()
 Журавлев А. С. **112**, 516 (485)
 Задиранов Ю. М. **113**, 248 ()
 Задорожная Л. А. **112**, 240 (225)
 Зайцев-Зотов С. В. **112**, 93 (88);
112, 367 (346)
 Заливако И. В. **112**, 626 (585)
 Зверев В. Н. **112**, 623 (582)
 Зегря Г. Г. **112**, 807 ()
 Зеленер Б. Б. **113**, 92 ()
 Зеленер Б. В. **113**, 92 ()
 Зиновьева А. Ф. **113**, 58 ()
 Зиновьев В. А. **113**, 58 ()
 Зиятдинова М. З. **112**, 774 ()
 Золотов Д. А. **113**, 161 ()
 Зубарев Н. М. **113**, 256 ()
 Зудин И. Ю. **113**, 96 ()
 Зыбцев С. Г. **112**, 93 (88)
 Зябловский А. А. **112**, 725 ()
 Ивченко Е. Л. **113**, 10 ()
 Игнатов А. И. **113**, 84 ()
 Игнатьева Д. О. **112**, 759 ()
 Изучеев В. И. **113**, 291 ()
 Иконников А. В. **112**, 541 (508)
 Ильичев Л. В. **113**, 212 ()
 Иногамов Н. А. **113**, 84 ();
113, 311 ()
 Ионин А. А. **112**, 579 (533);
113, 299 ()
 Казак Н. В. **113**, 267 ()
 Казаков А. С. **112**, 263 (246)
 Казей З. А. **112**, 189 (180)
 Кайсин Б. Д. **112**, 62 (53)
 Калиш А. Н. **112**, 759 ()
 Каневский В. М. **112**, 240 (225)
 Караштин Е. А. **112**, 121 (122)
 Карелина Л. Н. **112**, 743 ()
 Каримов Д. Н. **113**, 175 ()
 Карки Д. **112**, 759 ()
 Катин К. П. **113**, 182 ()
 Кашин А. М. **112**, 531 (498)
 Кашкаров П. К. **112**, 379 (357)
 Квашнин Д. Г. **112**, 328 (305)
 Квон З. Д. **112**, 174 (161);
113, 328 ()
 Кецко В. А. **112**, 680 (636)
 Кившарь Ю. **112**, 658 (615)
 Кильмаметов А. Р. **112**, 45 (37)
 Кирпичев В. Е. **112**, 38 (31)
 Кирпиченкова Н. В. **112**, 114 (112)
 Кирпиченков В. Я. **112**, 114 (112)
 Китаева Г. Х. **112**, 297 (269)
 Климко Г. В. **113**, 248 ()
 Князев Г. А. **112**, 314 (299);
112, 749 ()
 Князев Ю. В. **113**, 267 ()
 Ковальчук О. Е. **112**, 579 (533)
 Кожаев М. А. **112**, 759 ()
 Козлов Д. А. **112**, 174 (161)
 Колачевский Н. Н. **112**, 626 (585)
 Колобов А. В. **112**, 501 (471)
 Комаров П. С. **113**, 311 ()
 Комельков А. С. **112**, 774 ()
 Конарев П. В. **112**, 632 (591)
 Кондорский А. Д. **112**, 736 ()
 Кондратюк Е. С. **113**, 291 ()
 Кон И. А. **112**, 93 (88)
 Консежо К. **112**, 541 (508)
 Константинова Е. А. **112**, 562 (527)
 Константинов Д. **112**, 101 (95)
 Кончаков Р. А. **113**, 341 ()
 Конюх Д. А. **112**, 547 (513)
 Копасов А. А. **113**, 38 ()
 Коробков С. В. **113**, 96 ()
 Коршунов М. М. **113**, 63 ()
 Косач А. А. **112**, 114 (112)
 Костин В. А. **112**, 81 (77)
 Котов А. Ю. **112**, 9 (6)
 Кочергин И. В. **112**, 291 (263)
 Кочиев М. В. **112**, 650 (607)
 Красиков К. М. **112**, 451 (413)
 Крейнс Н. М. **112**, 88 (84)
 Кривенков В. А. **112**, 584 (537)
 Кривобок В. С. **112**, 160 (145);
112, 501 (471)
 Криштопенко С. С. **112**, 541 (508)
 Кройчук М. К. **112**, 730 ()
 Крюкова А. Е. **112**, 632 (591)
 Крюкова И. С. **112**, 584 (537)
 Кугель К. И. **112**, 693 (651);
112, 764 ()
 Кудасов Ю. Б. **113**, 168 ()

- Кудрявцев О. С. **112**, 17 (13)
 Кудряшов С. И. **112**, 579 (533);
113, 299 ()
 Кузмичев А. Н. **112**, 314 (299);
112, 749 ()
 Кузнецов Д. Д. **112**, 9 (6)
 Кузнецов В. А. **112**, 516 (485)
 Кузнецов К. А. **112**, 297 (269)
 Кузьмичева Т. Е. **112**, 523 (491);
112, 822 ()
 Кузьмичев С. А. **112**, 523 (491);
112, 822 ()
 Кукушкин В. И. **112**, 38 (31)
 Кукушкин И. В. **112**, 38 (31);
 Кукушкин И. В. **112**, 62 (53);
 Кукушкин И. В. **112**, 516 (485);
113, 112 ()
 Кулеева Н. А. **112**, 603 (555)
 Кулик Л. В. **112**, 516 (485);
113, 58 ()
 Куликов А. Г. **112**, 374 (352)
 Кунцевич А. Ю. **112**, 650 (607)
 Кутлин А. Г. **113**, 38 ()
 Кучинский Э. З. **112**, 603 (555)
 Кытина Е. В. **112**, 562 (527)
 Лапушкин С. В. **113**, 147 ()
 Ларюшин И. Д. **112**, 81 (77)
 Латышев А. В. **113**, 328 ()
 Лахманский К. Е. **112**, 626 (585)
 Леви М. **112**, 759 ()
 Левин В. М. **113**, 68 ()
 Левченко А. О. **112**, 579 (533)
 Леонова Т. И. **113**, 147 ()
 Леонтьев А. А. **112**, 297 (269)
 Лерер А. М. **112**, 152 (138)
 Лисянский А. А. **112**, 725 ()
 Лобанов И. С. **113**, 223 ()
 Лозин О. И. **112**, 114 (112)
 Ломоносова Т. А. **113**, 320 ()
 Лукьянчук Б. С. **112**, 361 (341)
 Любимов В. Н. **112**, 127 (127)
 Любовская Р. Н. **112**, 623 (582)
 Любовский Р. Б. **112**, 623 (582)
 Любутин И. С. **112**, 374 (352)
 Мазилкин А. А. **112**, 45 (37)
 Мазилкин И. А. **112**, 275 (257)
 Мазурицкий М. И. **112**, 152 (138)
 Маишеев В. А. **112**, 3 (1)
 Макаров А. С. **113**, 341 ()
 Макаров Г. Н. **112**, 226 (213)
 Макушина В. А. **112**, 774 ()
 Мареев Е. И. **112**, 780 ()
 Марк Г. **112**, 328 (305)
 Мартовицкий В. П. **112**, 501 (471)
 Маслов М. М. **113**, 182 ()
 Масюгин А. Н. **112**, 680 (636)
 Махмудиан М. М. **112**, 246 (230)
 Мацукатова А. Н. **112**, 379 (357)
 Мельников А. С. **113**, 38 ();
113, 102 ()
 Месяц Г. А. **113**, 256 ()
 Мигдал К. П. **113**, 299 ()
 Микушкин В. М. **112**, 801 ()
 Мильштейн А. И. **112**, 352 (332)
 Минакова В. Е. **112**, 367 (346)
 Миннегалиев М. М. **113**, 3 ()
 Миннеханов А. А. **112**, 379 (357);
112, 562 (527)
 Миронов С. В. **113**, 38 ();
113, 102 ()
 Митрофанов А. В. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
 Михайлов Н. Н. **112**, 174 (161);
 Михайлов Н. Н. **112**, 263 (246);
112, 541 (508)
 Михальков Ю. М. **112**, 774 ()
 Могиленец Ю. А. **112**, 374 (352)
 Моисеев С. А. **113**, 3 ()
 Молодцова О. В. **113**, 189 ()
 Молотков С. Н. **112**, 401 (383)
 Морозова Е. Н. **112**, 38 (31)
 Мороков Е. С. **113**, 68 ()
 Мохов Е. Н. **112**, 813 ()
 Муслимов А. Э. **112**, 240 (225)
 Набиев И. Р. **112**, 584 (537)
 Назаров М. М. **113**, 304 ()
 Найденев М. Н. **112**, 147 (133)
 Некрасов И. А. **113**, 63 ();
113, 126 ()
 Ненашев А. В. **113**, 58 ()
 Неронов А. **113**, 77 ()
 Нестеров А. И. **112**, 268 (250)
 Нечаев Б. А. **113**, 229 ()
 Никитина А. М. **112**, 367 (346)
 Николаев Н. Н. **112**, 352 (332)
 Николаев С. В. **112**, 268 (250)
 Николаев С. Н. **112**, 88 (84);
 Николаев С. Н. **112**, 160 (145);
112, 501 (471)
 Номоконов Д. В. **112**, 475 (437)
 Овчинникова Т. М. **112**, 258 (241)
 Овчинников С. Г. **112**, 258 (241);
112, 268 (250)
 Ольшанецкий Е. Б. **112**, 174 (161)
 Онищенко Е. Е. **112**, 501 (471)
 Орлита М. **112**, 541 (508)
 Орлов А. П. **112**, 93 (88)
 Орлов Ю. С. **112**, 258 (241);
112, 268 (250)
 Павлов Н. С. **113**, 63 ();
113, 126 ()
 Паршиков А. Н. **113**, 311 ()
 Пахомов А. В. **113**, 237 ()
 Пеньков Ф. М. **113**, 229 ()
 Перваков К. С. **112**, 822 ()
 Першина Е. А. **113**, 84 ()
 Першин С. М. **112**, 437 (399)
 Песоцкий С. И. **112**, 623 (582)
 Петин А. Н. **112**, 226 (213)
 Петров А. Г. **112**, 165 (150)
 Петров Ю. В. **113**, 311 ()
 Пивоваров А. А. **112**, 493 (457)
 Пиршин И. В. **112**, 774 ()
 Платонов К. Ю. **112**, 598 (550)
 Побойко И. В. **112**, 251 (234)
 Подливаев А. И. **113**, 182 ()
 Полищук Б. В. **113**, 291 ()
 Полищук И. Я. **112**, 618 (577)
 Полуэктов И. В. **113**, 223 ()
 Пополитова Д. В. **112**, 702 (666)
 Попруженко С. В. **113**, 320 ()
 Потемкин Ф. В. **112**, 508 (478);
112, 780 ()
 Потемски М. **112**, 541 (508)
 Поторочин Д. В. **113**, 189 ()
 Протасова С. Г. **112**, 45 (37)
 Прохоров В. Е. **112**, 591 (543)
 Пугачев М. В. **112**, 650 (607)
 Пухов А. А. **112**, 725 ()
 Пушкин А. В. **112**, 508 (478)
 Раттенбахер Д. **112**, 17 (13)
 Рахлин М. В. **112**, 17 (13);
113, 248 ()
 Рахманов А. Л. **112**, 693 (651);
112, 764 ()
 Решетников С. Ф. **113**, 223 ()
 Ривнюк А. С. **113**, 299 ()
 Родный П. А. **112**, 240 (225)
 Родякина Е. Е. **113**, 328 ()
 Роевко А. А. **112**, 9 (6)
 Рожков А. В. **112**, 693 (651);
112, 764 ()
 Рожко М. В. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
 Розанов Н. Н. **113**, 157 ();
113, 237 ()
 Розенбаум В. М. **112**, 341 (316)
 Ромашевский С. А. **113**, 84 ();
113, 311 ()
 Ромшин А. М. **112**, 17 (13)
 Рошин Б. С. **113**, 175 ()
 Рубан В. П. **112**, 554 (520)
 Руденко В. В. **113**, 267 ()
 Румянцев Б. В. **112**, 780 ()
 Рупасов А. Е. **112**, 579 (533)
 Руффенах С. **112**, 541 (508)
 Рыжкин И. А. **112**, 531 (498)
 Рыжкин М. И. **112**, 531 (498)
 Рыльков В. В. **112**, 88 (84);
112, 379 (357)
 Рябова Л. И. **112**, 263 (246)
 Рябчук С. В. **112**, 22 (17)
 Рязанов В. В. **112**, 743 ()
 Саакян С. А. **113**, 92 ()
 Савин Д. А. **113**, 223 ()
 Савченков Е. Н. **112**, 644 (602)
 Савченко М. Л. **112**, 174 (161)
 Садовников С. И. **112**, 203 (193)
 Садовский М. В. **112**, 603 (555)
 Садовский С. А. **113**, 291 ()
 Сазонов С. В. **112**, 30 (24);
112, 306 (283)
 Сайфутдинова А. А. **112**, 443 (405)
 Сайфутдинов А. И. **112**, 443 (405)
 Салимов Р. К. **112**, 357 (337)
 Салимов Т. Р. **112**, 357 (337)
 Сальников С. Г. **112**, 352 (332)
 Самойлов Р. М. **112**, 211 (199);
112, 487 (455)
 Самосват Д. М. **112**, 807 ()
 Самохвалов А. В. **113**, 38 ();
113, 102 ()
 Самохвалов П. С. **112**, 584 (537)
 Сандлер В. А. **113**, 348 ()

- Сандомирский Ю. Е. **112**, 3 (1);
113, 223 ()
- Сандуковский В. Г. **113**, 147 ()
- Сандуляну Ш. В. **112**, 165 (150)
- Сарычев М. Н. **113**, 52 ()
- Сатунин С. Н. **112**, 667 (623)
- Саутенков В. А. **113**, 92 ()
- Сбойчаков А. О. **112**, 693 (651);
112, 764 ()
- Семикоз Д. **113**, 77 ()
- Сенков В. М. **112**, 774 ()
- Серебров А. П. **112**, 211 (199);
112, 487 (455)
- Серебрянников Е. Е. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
- Сидоров-Бирюков Д. А. **112**,
 22 (17);
113, 304 ()
- Синицын В. В. **112**, 531 (498)
- Ситников А. В. **112**, 88 (84)
- Ситников М. Н. **112**, 680 (636)
- Скворцов М. А. **112**, 394 (376);
112, 466 (428)
- Скробова Н. А. **112**, 484 (452)
- Слободчиков А. А. **113**, 63 ()
- Словинский И. С. **112**, 508 (478)
- Случанко Н. Е. **112**, 451 (413)
- Смаглюк Д. С. **113**, 223 ()
- Смирнов М. А. **113**, 3 ()
- Смирнов А. В. **112**, 774 ()
- Смирнова М. Н. **112**, 680 (636)
- Смирнов И. Ю. **112**, 54 (45)
- Смирнов Н. А. **112**, 579 (533)
- Снегирев В. В. **112**, 189 (180)
- Снегирев Н. И. **112**, 374 (352)
- Соловьев В. В. **112**, 38 (31)
- Солтамов В. А. **112**, 813 ()
- Сорокин Д. А. **113**, 133 ()
- Стаховский И. Р. **112**, 830 ()
- Степанов Н. А. **112**, 394 (376)
- Столяренко М. С. **112**, 189 (180)
- Страумал А. Б. **112**, 275 (257)
- Страумал Б. Б. **112**, 45 (37);
112, 275 (257)
- Стриковский А. В. **113**, 96 ()
- Стругацкий М. Б. **112**, 374 (352)
- Струлева Е. В. **113**, 311 ()
- Стрыгин И. С. **112**, 475 (437)
- Суворов Э. В. **113**, 161 ()
- Султанов В. Д. **112**, 297 (269)
- Суриков В. Т. **113**, 52 ()
- Сухих А. С. **113**, 267 ()
- Сухорукова О. С. **112**, 458 (420)
- Сушков О. П. **112**, 196 (186)
- Тарасенко А. С. **112**, 458 (420)
- Тарасенко В. Ф. **113**, 133 ()
- Тарасенко С. В. **112**, 458 (420)
- Телькушев М. В. **113**, 147 ()
- Тепш Ф. **112**, 541 (508)
- Терехов В. И. **113**, 223 ()
- Тимеркаев Б. А. **112**, 443 (405)
- Тихонова О. В. **112**, 702 (666)
- Ткаченко В. А. **112**, 196 (186);
113, 328 ()
- Ткаченко О. А. **112**, 196 (186);
113, 328 ()
- Томилин В. А. **113**, 212 ()
- Тонкаев П. **112**, 658 (615)
- Торопов А. А. **112**, 17 (13);
113, 248 ()
- Торунова С. А. **112**, 623 (582)
- Трахтенберг Л. И. **112**, 341 (316)
- Трошков С. И. **113**, 248 ()
- Трусов Г. В. **112**, 562 (527)
- Турьянский А. Г. **112**, 774 ()
- Уланов В. А. **113**, 52 ()
- Устинов Н. В. **112**, 30 (24)
- Федорова А. В. **112**, 754 ()
- Федоров А. Н. **112**, 437 (399)
- Федоров В. В. **112**, 639 (597)
- Федотов А. Б. **112**, 22 (17);
113, 304 ()
- Федотова Я. В. **112**, 38 (31)
- Федотов И. В. **113**, 3 ()
- Федянин А. А. **112**, 361 (341);
112, 730 ()
- Фейгельман М. В. **112**, 251 (234)
- Фельдман Э. Б. **112**, 754 ()
- Филипович М. **113**, 229 ()
- Филиппов А. В. **113**, 229 ()
- Филиппов В. Б. **112**, 451 (413)
- Фишман Р. И. **112**, 774 ()
- Флусова Д. С. **113**, 229 ()
- Фортов В. Е. **113**, 92 ()
- Форш П. А. **112**, 379 (357)
- Фраерман А. А. **113**, 353 ()
- Франк А. Г. **112**, 667 (623)
- Хабарова К. Ю. **112**, 626 (585)
- Хайдуков З. В. **113**, 21 ()
- Харинцев С. С. **113**, 152 ()
- Харитонов А. В. **113**, 152 ()
- Харлов Ю. В. **113**, 291 ()
- Хмельницкий Р. А. **112**, 579 (533)
- Холин А. А. **112**, 314 (299)
- Хоник В. А. **113**, 341 ()
- Хорошилов А. Л. **112**, 451 (413)
- Хохлов В. А. **113**, 84 ();
113, 311 ()
- Хохлов Д. А. **112**, 764 ()
- Хохлов Д. Р. **112**, 263 (246)
- Цой К. В. **112**, 275 (257)
- Цыганков П. А. **113**, 311 ()
- Цымбаленко В. Л. **113**, 33 ()
- Цыпкин А. Н. **113**, 237 ()
- Чайка А. Н. **113**, 189 ()
- Чаплик А. В. **112**, 246 (230)
- Ченцов С. И. **112**, 501 (471)
- Чернозатонский Л. А. **112**,
 328 (305)
- Чернопицкий М. А. **112**, 160 (145)
- Чернышева Л. В. **112**, 233 (219);
112, 709 (673)
- Чернышев Б. А. **113**, 147 ()
- Чесноков М. Ю. **112**, 3 (1);
113, 223 ()
- Чесноков Ю. А. **112**, 3 (1);
113, 223 ()
- Чижев М. В. **112**, 147 (133)
- Чирков П. Н. **113**, 223 ()
- Чичков В. И. **112**, 743 ()
- Чумаков А. И. **113**, 175 ()
- Чумаков Д. К. **113**, 229 ()
- Шавров В. Г. **112**, 458 (420)
- Шакуров Г. С. **113**, 52 ()
- Шангараев А. А. **113**, 291 ()
- Шандаров С. М. **112**, 644 (602)
- Шапиро Д. Д. **112**, 639 (597)
- Шапочкина И. В. **112**, 341 (316)
- Шараева А. Е. **112**, 644 (602)
- Шашков Е. В. **112**, 774 ()
- Шицевалова Н. Ю. **112**, 451 (413)
- Шкарин А. Б. **112**, 17 (13)
- Шкляев А. А. **113**, 58 ()
- Шкляев В. А. **113**, 133 ()
- Шорохов А. С. **112**, 730 ()
- Шубина Т. В. **113**, 248 ()
- Шувалов Е. Н. **113**, 229 ()
- Шур В. Я. **112**, 644 (602)
- Шустин М. С. **113**, 267 ()
- Щербаков О. А. **112**, 343 (323)
- Эркенов Ш. А. **112**, 743 ()
- Юанов Ю. В. **112**, 725 ()
- Ягулов С. В. **112**, 374 (352)
- Язынин И. А. **112**, 3 (1)
- Якушкин Е. Д. **113**, 348 ()
- Янович А. А. **112**, 3 (1);
113, 223 ()
- Янушкевич К. И. **112**, 680 (636)
- Ярошевич А. С. **113**, 328 ()
- Ярошевич А. С. **112**, 174 (161)

Информация для авторов

Журнал “Письма в ЖЭТФ” (и его англоязычная версия “JETP Letters”) публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.
- Миниобзоры на наиболее актуальные “горячие” темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.
- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

“Письма в ЖЭТФ” является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках¹⁾. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В “JETP Letters” все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК “Наука/Интерпериодика”. Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двухколоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер миниобзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи²⁾, с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF-8³⁾, кодировка KOI8-R⁴⁾).

Статьи в редакцию можно направлять

- по электронной почте letters@kapitza.ras.ru – направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (.ps), EncapsulatedPostScript (.eps) или PaintBrush (.pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроеными рисунками.
- по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, “Письма в ЖЭТФ” – два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, может быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

¹⁾<http://www.jetpletters.ac.ru/ru/info.shtml#sub1>

²⁾<http://www.jetpletters.ac.ru/tex/utf8/example.tex>

³⁾<http://www.jetpletters.ac.ru/tex/utf8/jetpl.cls>

⁴⁾<http://www.jetpletters.ac.ru/tex/koi/jetpl.cls>

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов или членов Редколлегии.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу, с учетом мнения рецензентов. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала “JETP Letters”, наш журнал “Письма в ЖЭТФ” с середины 2016 года лишен возможности публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в “Письмах в ЖЭТФ” расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале “JETP Letters”.

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — Учреждения, где работают авторы (включая город и почтовый индекс;
e-mail одного из авторов)

Дата поступления

Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line, и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. B. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP **71**, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из “Писем в ЖЭТФ” в “JETP Letters” все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторы, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются “on-line” в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стиливой файл можно найти на WWW-странице “Писем в ЖЭТФ” (<http://www.jetpletters.ac.ru/>).

Дополнительный материал

Журнал “Письма в ЖЭТФ” предоставляет авторам возможность публикации **Дополнительного материала**. **Дополнительный материал**, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В **Дополнительный материал** помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. **Дополнительный материал** не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается **на английском языке** в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы **Дополнительного материала** могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано “Дополнительный материал”. В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла **Дополнительного материала** совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано “Дополнительный материал к статье {название статьи}”. Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами **Дополнительный материал** рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка **Дополнительного материала** ответственность ложится на авторов.

Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес **Дополнительного материала** приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}

Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

Дополнительный материал не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение **Дополнительного материала** должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

Комментарии в журнале “Письма в ЖЭТФ”

Журнал “Письма в ЖЭТФ” публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария – если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)⁵⁾.

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его ошибочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

⁵⁾<http://www.jetpletters.ac.ru/ru/supp.shtml>

Миниобзоры

Журнал “Письма в ЖЭТФ” в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал “заказные” мини-обзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РНФ. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению миниобзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров – см. на

<http://www.jetpletters.ac.ru/ru/info.shtml>

Миниобзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

Содержание

Том 113, выпуск 5

Поля, частицы, ядра

Евдокимов С.В., Изучеев В.И., Кондратюк Е.С., Полищук Б.В., Садовский С.А., Харлов Ю.В., Шангараев А.А. Поиск модификации свойств ω -мезона в холодной ядерной материи в эксперименте Гиперон-М	291
--	-----

Оптика, лазерная физика

Данилов П.А., Кудряшов С.И., Мигдал К.П., Ривнюк А.С., Ионин А.А. Усиление поглощения излучения интенсивных фемтосекундных лазерных импульсов видимого диапазона в пленке серебра	299
---	-----

Митрофанов А.В., Сидоров-Бирюков Д.А., Воронин А.А., Рожко М.В., Глек П.Б., Назаров М.М., Серебрянников Е.Е., Федотов А.Б., Желтиков А.М. Усиление плазменных нелинейностей и генерация СВЧ-ТГц-суперконтинуума в поле субтераваттных импульсов среднего инфракрасного диапазона	304
--	-----

Ромашевский С.А., Хохлов В.А., Ашитков С.И., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Комаров П.С., Паршиков А.Н., Петров Ю.В., Струлева Е.В., Цыганков П.А. Фемтосекундное лазерное воздействие на многослойную наноструктуру металл–металл	311
--	-----

Попруженко С.В., Ломоносова Т.А. О возможности наблюдения коллективного туннельного эффекта при ионизации атомов интенсивным лазерным полем	320
---	-----

Конденсированное состояние

Shabara R.M., Alsobhi B.O. Calculations of structural, elastic and magnetic properties of the novel full Heusler alloys Ru_2XY ($X = \text{Nb}, \text{Mn}$) and ($Y = \text{Te}, \text{Sb}$)	326
--	-----

Ткаченко В.А., Квон З.Д., Ткаченко О.А., Ярошевич А.С., Родякина Е.Е., Бакшеев Д.Г., Латышев А.В. Фотонно-стимулированный транспорт в квантовом точечном контакте (Миниобзор)	328
---	-----

Кончаков Р.А., Макаров А.С., Аронин А.С. Кобелев Н.П., Хоник В.А. К вопросу о механизме плавления простых металлов	341
--	-----

Якушкин Е.Д., Сандлер В.А. Фазовый переход в сегнетоэластике CsHSO_4 в магнитном поле .	348
--	-----

Фраерман А.А. Обменное усиление магнитокалорического эффекта в ферромагнитных наноструктурах (Миниобзор)	353
--	-----

Содержание

Том 113, выпуск 6

Оптика, лазерная физика

Компанец В.О., Кудряшов С.И., Толордава Э.Р., Шельгина С.Н., Соколова В.В., Сараева И.Н., Ковалев М.С., Ионин А.А., Чекалин С.В. Фемтосекундная лазерная ИК-спектроскопия характеристических молекулярных колебаний бактерий в области 6 мкм	365
--	-----

Плазма, гидро- и газодинамика

Гашков М.А., Зубарев Н.М., Зубарева О.В., Месяц Г.А., Шарыпов К.А., Шпак В.Г., Шунайлов С.А., Яландин М.И. Компрессия потока убегающих электронов в воздушном зазоре с неоднородным магнитным полем	370
---	-----

Конденсированное состояние

Борман В.Д., Белогорлов А.А., Тронин И.В. Кооперативный транспорт несмачивающей жидкости в случайной системе нанопор	378
--	-----

Рунов В.В., Бугров А.Н., Смыслов Р.Ю., Копица Г.П., Иванькова Е.М., Павлова А.А., Феоктистов А. Магнитное рассеяние нейтронов в восстановленном оксиде графена	385
--	-----

Orlova N.N., Ryshkov N.S., Timonina A.V., Kolesnikov N.N., Deviatov E.V. Evidence of the ferroelectric polarization in charge transport through WTe ₂ Weyl semimetal surface	390
---	-----

Федоров И.Д., Стегайлов В.В. Диссоциация экситонных состояний в разогретом плотном водороде	392
---	-----

Козлов Д.В., Уаман Светикова Т.А., Иконников А.В., Румянцев В.В., Разова А.А., Жолудев М.С., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А., Гавриленко В.И., Морозов С.В. Фототермическая ионизационная спектроскопия вакансий ртути в эпитаксиальных пленках HgCdTe	399
--	-----

Методы теоретической физики

Кудрявцев А.Г. О нелокальном преобразовании Дарбу для стационарных аксиально-симметричных уравнений Шредингера и Гельмгольца	406
--	-----

Осипов А.А. Метод Фока–Швингера в случае неравных масс	410
--	-----

Нелинейные явления

Щапин Д.С., Некоркин В.И. Параметрически возбуждаемые хаотические спайковые последовательности и информационные аспекты в ансамбле нейронов ФитцХью–Нагумо	415
--	-----

Текущий авторский указатель томов 112–113	421
---	-----

Информация для авторов	425
------------------------------	-----

