

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 113

Выпуск 3

10 февраля 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>

© Российская академия наук, 2021

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2021

Образование ${}^8\text{He}$ в реакциях поглощения остановившихся пионов ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$

Ю. Б. Гуров^{1*}, С. В. Лапушкин⁺, Т. И. Леонова⁺, В. Г. Сандуковский^{*}, М. В. Телькушев⁺, Б. А. Чернышев⁺¹⁾

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

^{*}Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 7 декабря 2020 г.

После переработки 30 декабря 2020 г.

Принята к публикации 30 декабря 2020 г.

Структура уровней тяжелого изотопа гелия ${}^8\text{He}$ исследовалась в реакциях поглощения остановившихся пионов: ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$. Измерения были выполнены с помощью двухплечевого многослойного полупроводникового спектрометра на ускорителе LANL. Получены указания на существование мягкой дипольной моды при энергии возбуждения $E_x \approx 3$ МэВ. Впервые наблюдалось состояние с высокой энергией возбуждения (12.2(5) МэВ).

DOI: 10.31857/S1234567821030010

1. Введение. Среди нуклонно-стабильных ядер тяжелый изотоп гелия ${}^8\text{He}$ обладает рекордным отношением числа нейтронов к протонам: $N/Z = 3$. Энергия отделения двух нейтронов составляет величину $S_{2n}({}^8\text{He}) = 2.14$ МэВ, что превышает соответствующую величину для ${}^6\text{He} - 0.973$ МэВ [1]. Поэтому можно предположить, что основное состояние ${}^8\text{He}$ представляет собой α -частичный кор, окруженный четырьмя валентными нейтронами, а не трехчастичную систему ${}^6\text{He} + n + n$. При этом, как было показано экспериментально [2, 3] и теоретически [4, 5], волновая функция наряду с $(p_{3/2})^4$ компонентой содержит заметную примесь других компонент – $(p_{3/2})^2(s_{1/2})^2$, $(p_{3/2})^2(d_{5/2})^2$ и $(p_{3/2})^2(p_{1/2})^2$.

Возбужденные уровни ${}^8\text{He}$ наблюдались в ограниченном числе экспериментальных работ (см. компиляцию мировых данных [1] и обзоры [6–8]), при этом статистическая обеспеченность результатов невысока. По-видимому, это является одной из причин в неопределенности энергии первого возбужденного состояния, значения которой лежат в интервале $E_{x1} = 2.7 \div 3.6$ МэВ [1]. Другое объяснение такого разброса может быть связано с тем, что в экспериментах наблюдается суперпозиция двух состояний – 2^+ резонанса и мягкой дипольной моды (МДМ) с $J^P = 1^-$ [9]. Следовательно, отличия в результатах могут быть обусловлены различной заселенностью этих состояний. В [9] первое возбужденное состояние связывают с МДМ при $E_x \approx 3$ МэВ, а второе возбужден-

ное состояние $J^P = 2^+$ лежит в области энергий возбуждения $3.6 \div 3.9$ МэВ. Однако в остальных работах [1, 3, 10, 11] утверждается, что для первого возбужденного состояния $J^P = 2^+$, а вопрос о спин-четности второго возбужденного состояния остается открытым [11].

В нескольких работах [1, 5, 10, 11] наблюдались более высокие возбуждения ${}^8\text{He}$. Параметры этих состояний представлены в табл. 1. Отметим, что в реакциях на ионных пучках наблюдаемый спектр возбуждений ограничен энергией $E_x = 7.5$ МэВ [9].

Ранее исследование структуры уровней ${}^8\text{He}$ было выполнено нами в реакциях поглощения остановившихся пионов: ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$ [12], ${}^{12}\text{C}(\pi^-, p^3\text{He})X$, ${}^{14}\text{C}(\pi^-, t^3\text{He})X$ и ${}^{14}\text{C}(\pi^-, d^4\text{He})X$ [13].

Полученные результаты представлены в табл. 1. Отметим, что в работе [12] впервые наблюдались высоковозбужденные состояния с $E_x = 9.3(4)$ и $12.2(3)$ МэВ. Также в трех реакциях впервые наблюдалось состояние с $E_x \approx 6.4$ МэВ и $\Gamma \sim 0.6$ МэВ [12, 13]. Следует отметить, что в реакции захвата двух протонов ${}^{10}\text{Be}({}^{12}\text{C}, {}^{14}\text{O}){}^8\text{He}$ наблюдался близкий по энергии возбуждения уровень с $E_x \approx 6.03(10)$ МэВ, но заметно менее широкий $\Gamma = 0.15(15)$ МэВ [14].

В настоящей работе с целью получения новой информации и подтверждения ранее полученных результатов по спектроскопии ${}^8\text{He}$ исследовались реакции ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$. Заметим, что предварительная информация о реакции ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ была представлена нами в работе [15] на ограниченном наборе статистики.

¹⁾e-mail: chernyshev@mephi.ru

Таблица 1. Экспериментальные результаты по возбужденным уровням ^8He

E_x , МэВ	Γ , МэВ	J^P	Реакция, работа
$2.6 \div 3.6$	~ 0.6	2^+	[1]
≈ 3		(1^-)	[9] $^{10}\text{B}(\pi^-, pp)^8\text{He}$
≈ 3	~ 0.6	$(1^-), (2^+)$	[11]
$3.6 \div 3.9$	≈ 0.5	2^+	[9, 27]
3.9 ± 0.2	≈ 0.5		$^9\text{Be}(\pi^-, p)^8\text{He}$, $^{11}\text{B}(\pi^-, pd)^8\text{He}$ [12], $^{12}\text{C}(\pi^-, p^3\text{He})^8\text{He}$, $^{14}\text{C}(\pi^-, t^3\text{He})^8\text{He}$, $^{14}\text{C}(\pi^-, d^4\text{He})^8\text{He}$ [13]
≈ 4.2	1.2	(1^-)	[1, 11]
4.6 ± 0.3	≈ 0.5		$^9\text{Be}(\pi^-, p)^8\text{He}$, $^{10}\text{B}(\pi^-, pp)^8\text{He}$, $^{11}\text{B}(\pi^-, pd)^8\text{He}$ [12]
5.4(5)	0.5(3)	1^+	[3, 9]
(6.03(10))	0.15(15)		[14]
≈ 6.4	~ 0.6		$^{10}\text{B}(\pi^-, pp)^8\text{He}$, $^{11}\text{B}(\pi^-, pd)^8\text{He}$ [12], $^{14}\text{C}(\pi^-, t^3\text{He})^8\text{He}$, $^{14}\text{C}(\pi^-, d^4\text{He})^8\text{He}$ [13]
7.16(4)	0.1(1)	(1^-)	[14]
9.3(4)	1.7(3)		$^{11}\text{B}(\pi^-, pd)^8\text{He}$ [12]
12.2(3)	0.8(3)		$^{10}\text{B}(\pi^-, pp)^8\text{He}$

Важно отметить, что реакция поглощения оставившихся пионов была ранее успешно использована нами для исследования структуры уровней других тяжелых изотопов гелия: ^6He [16, 17] и ^7He [18–20].

2. Эксперимент. Эксперимент был выполнен на канале пионов низких энергий ускорителя LANL с помощью двухплечевого многослойного полупроводникового спектрометра [21, 22]. Пучок отрицательных пионов с энергией 30 МэВ проходил через бериллиевый замедлитель и останавливался в тонкой мишени ($\sim 24 \text{ мг} \cdot \text{см}^{-2}$). Скорость остановок пионов в мишенях составляла $\sim 6 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. Мишень ^9Be являлась изотопно-чистой, в мишени ^{10}B вклад примеси ^{11}B составлял 15 %, вклад неконтролируемых примесей в обеих мишенях ≤ 1 %. Измерения на мишенях ^9Be , ^{10}B , ^{11}B проводились в рамках одного экспериментального сеанса, что позволило минимизировать погрешности вычитания вклада примеси ^{11}B из результатов измерения на мишени ^{10}B .

Заряженные частицы, образующиеся при поглощении пионов ядрами мишени, регистрировались двумя многослойными полупроводниковыми телескопами, расположенными под углом 180° относительно друг друга. Энергетическое разрешение при регистрации протонов составило величину ΔE (FWHM) $\approx 0.45 \text{ МэВ}$ [21]. Разрешение по недостающей массе (MM) при регистрации pp -пар составило величину ΔMM (FWHM) $\approx 1 \text{ МэВ}$

[22]. Точность абсолютной привязки шкалы в инклюзивных и корреляционных измерениях была лучше 200 кэВ [22]. Более подробно спектрометр и экспериментальная методика описаны в работах [21, 22].

3. Результаты и обсуждение. Поиск состояний ^8He проводился по пикам в спектрах недостающих масс, измеренных в реакциях $^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и $^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$.

Спектр MM , полученный в инклюзивных измерениях реакции $^9\text{Be}(\pi^-, p)X$, представлен на рис. 1. За начало отсчета принята масса основного состояния ^8He . Экспериментальный спектр был описан суммой брейт-вигнеровских распределений и n -частичных распределений по фазовому объему ($n > 2$) с учетом энергетического разрешения установки. Описание основного состояния представляет собой фактически приборную линию установки. При описании спектра удалось надежно выделить основное и два возбужденных состояния ^8He со следующими параметрами (E_x, Γ): (3.9(2) МэВ, ≈ 0.5 МэВ) и (4.6(3) МэВ, ≈ 0.5 МэВ). Сравнение с предварительными результатами ($E_x = 4.4(2) \text{ МэВ}$), полученными нами ранее, показывает, что наблюдаемый в работе [15] пик представляет собой суперпозицию двух состояний, которые не удалось разделить вследствие ограниченной статистики.

Также в экспериментальном спектре наблюдаются превышения над описанием в трех областях при

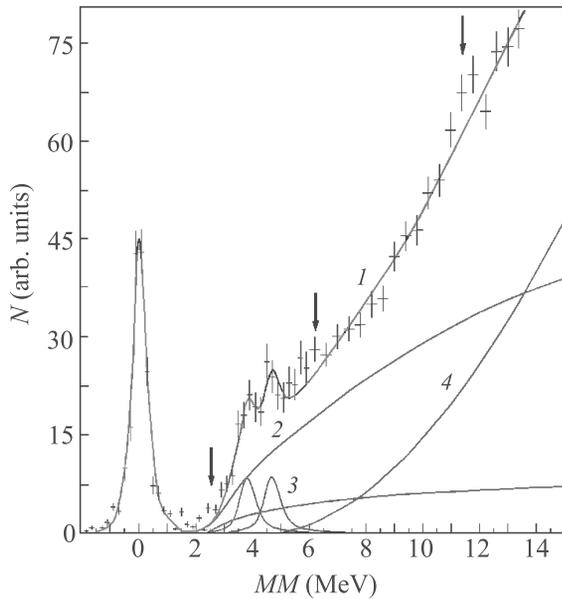


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектр MM для реакции ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$. Точки с погрешностями – экспериментальные данные. Сплошные линии – описание основного и возбужденных состояний, 1 – полное описание; распределения по фазовому объему: 2 – $\pi^- + {}^9\text{Be} \rightarrow p + {}^6\text{He} + 2n$; 3 – $\pi^- + {}^9\text{Be} \rightarrow p + {}^7\text{He} + n$; 4 – $\pi^- + {}^9\text{Be} \rightarrow p + {}^6\text{He}^*(1.797) + 2n$. Стрелками отмечены области спектра, в которых экспериментальные данные превышают описание

энергиях $E_x \approx 3, 6.5$ и 12 МэВ, что указывает на возможное существование в этих областях возбужденных состояний. Отметим, что энергия отделения двух нейтронов $S_{2n}({}^8\text{He}) = 2.14$ МэВ, поэтому избыток событий вблизи порога реакции трудно объяснить, не привлекая гипотезу о существовании низколежащего состояния.

Спектр MM , полученный в корреляционных измерениях реакции ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$, полученный после вычета вклада примеси ${}^{11}\text{B}$, представлен на рис. 1. За начало отсчета принята масса основного состояния ${}^8\text{He}$. Экспериментальный спектр был описан суммой брейт-вигнеровских распределений и n -частичных распределений по фазовому объему ($n > 3$) с учетом энергетического разрешения установки.

Как видно на рис. 2, реакция поглощения остановившихся пионов легкими ядрами с образованием двух быстрых протонов ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$ обладает ярко выраженной селективностью – в конечном состоянии не наблюдается основное состояние остаточного ядра. Аналогично, образование основного состояния нейтронно-избыточных ядер подавлено в реакциях ${}^9\text{Be}(\pi^-, pp){}^7\text{H}$ [23], ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pp){}^9\text{He}$, ${}^{12}\text{C}(\pi^-, pp){}^{10}\text{Li}$ [24] и ${}^{14}\text{C}(\pi^-, pp){}^{12}\text{Li}$ [25].

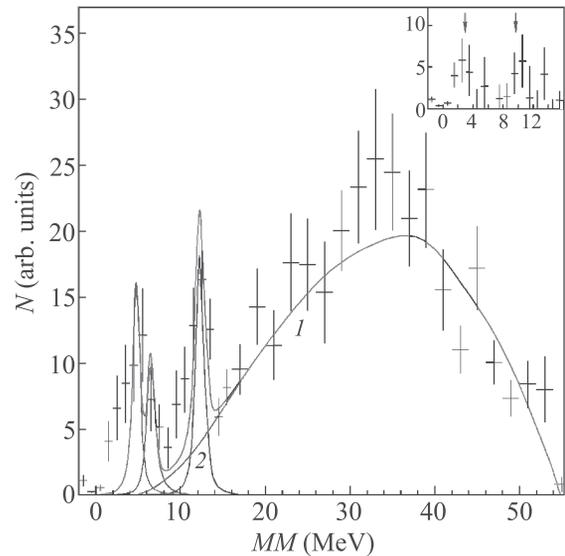


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр MM для реакции ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$. Точки с погрешностями – экспериментальные данные. Сплошные линии – описание возбужденных состояний, 1 – полное описание; 2 – распределение по фазовому объему: 2 – $\pi^- + {}^{10}\text{B} \rightarrow p + p + {}^6\text{He}^*(1.8) + 2n$. На вставке – разность между экспериментальным спектром и его описанием в области $0 < MM < 16$ МэВ. Стрелками отмечены средние значения полученной разности

По-видимому, основным механизмом образования двух протонов является поглощение пиона на pp -паре, с последующей перезарядкой нейтрона на остаточном ядре: ${}^8\text{Li}(n, p){}^8\text{He}$. К сожалению, мы не нашли экспериментальной информации об этой реакции. Реакция ${}^8\text{He}(p, n){}^8\text{Li}$ была измерена в RIKEN при энергии пучка ${}^8\text{He}$ 190 МэВ в обратной кинематике [26]. Несмотря на достаточно высокую статистическую обеспеченность результатов, авторам удалось выделить переходы только в два возбужденных состояния ${}^8\text{Li}$ с $E_x = 0.98$ МэВ и ≈ 8 МэВ, при этом второе состояние наблюдалось впервые. Как и в наших измерениях, переход ${}^8\text{Li}_{g.s.} \leftrightarrow {}^8\text{He}_{g.s.}$ отсутствует. Возможно, это отсутствие связано с запретом гамма-теллеровского перехода между этими состояниями, имеющими спин-четности $2^+({}^8\text{Li}_{g.s.})$ и $0^+({}^8\text{He}_{g.s.})$. Нам также неизвестны расчеты спектроскопических факторов для отделения двух протонов в ${}^8\text{Li}$. В связи с этим точные расчеты, описывающие этот механизм, вряд ли возможны. Заметим, что во всех остальных случаях реакции (π^-, pp) соответствующие спины отличаются на единицу и имеют противоположные четности: $(1/2^+)$ (${}^7\text{H}_{g.s.}$) и $3/2^-$ (${}^7\text{He}_{g.s.}$), $1/2^+$ (${}^9\text{He}_{g.s.}$) и $3/2^-$ (${}^9\text{Li}_{g.s.}$), 1^- (${}^{10}\text{Li}_{g.s.}$) и 0^+ (${}^{10}\text{Be}_{g.s.}$), $(1^-, 2^-)$ (${}^{12}\text{Li}_{g.s.}$) и 0^+ (${}^{12}\text{Be}_{g.s.}$).

Таким образом, события, наблюдаемые вблизи порога на рис. 2, по-видимому, обусловлены первым возбужденным состоянием ${}^8\text{He}$. Некоторое превышение в этой области энергий экспериментальных спектров над описанием, наблюдаемое в реакции ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ (рис. 1) и ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$ [12], подтверждает это предположение. Описание этого избытка с помощью порогового распределения Брейта–Вигнера не оказалось успешным. Это согласуется с предположением о том, что в этой реакции наблюдается МДМ, форма которого не описывается распределением Брейта–Вигнера [9]. Отметим также, что непрерывный спектр описывается только одним распределением по фазовому объему с участием возбужденного состояния ${}^6\text{He}^*(1.8)$ без привлечения каналов с основным состоянием ${}^6\text{He}$.

В спектре MM в реакции ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$ удалось выделить три возбужденных состояния ${}^8\text{He}$ со следующими параметрами (E_x, Γ) : $(4.6(3) \text{ МэВ}, \approx 0.5 \text{ МэВ})$, $(\approx 6.4 \text{ МэВ}, \approx 0.5 \text{ МэВ})$ и $(12.2(5) \text{ МэВ}, 0.8(3) \text{ МэВ})$. Отметим также превышение эксперимента над описанием в области 9.5 МэВ.

В области низких энергий возбуждений обнаруженный в реакции ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$ уровень с $E_x \approx \approx 4.6 \text{ МэВ}$ также наблюдался в реакциях ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$. В то же время мы не получили указаний на существование уровня с $E_x \approx 3.6 \text{ МэВ}$, который наблюдался в большом числе экспериментов, в том числе и в реакциях с остановившихся пионов (см. табл. 1), что дает дополнительные доказательства селективности этой реакции. Одновременное наблюдение этих двух состояний в реакциях ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$ дает основание предположить существование в области низких энергий возбуждения трех уровней: МДМ при энергии возбуждения $E_x \approx 3 \text{ МэВ}$ и двух резонансных состояний. Отметим, что резонансные состояния находятся вблизи порогов распада ${}^8\text{He}$ в ${}^4\text{He} + 4n$ (3.11 МэВ) и ${}^5\text{He} + 3n$ (4.0 МэВ). Меньшее число уровней, наблюдаемое в этой области в ионных экспериментах, по-видимому, обусловлено недостаточной статистической обеспеченностью результатов.

Наблюдение состояния с $E_x \approx 6.4 \text{ МэВ}$ в реакции ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$ подтверждает результаты, полученные в реакциях ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$ [12], ${}^{14}\text{C}(\pi^-, t^3\text{He})X$ и ${}^{14}\text{C}(\pi^-, d^4\text{He})X$ [13]. Во всех этих случаях ширина уровня ($\sim 0.6 \text{ МэВ}$) существенно больше $\Gamma = = 0.15(15) \text{ МэВ}$ для уровня с $E_x \approx 6.03(10) \text{ МэВ}$ [14], что указывает на разную природу этих состояний. Выполнившийся в работе [13] анализ обосновал предположение, что структура валентной оболочки состояния (6.4 МэВ) имеет следующий вид $-(p_{3/2})^2(p_{1/2})^2$.

Сравнение ширин указывает на то, что спин состояния с $E_x \approx 6.4 \text{ МэВ}$ меньше спина состояния с $E_x \approx 6.03 \text{ МэВ}$, которому приписывают $J^P = 2^-$ [14].

Указание на существование уровня вблизи 9.5 МэВ подтверждается наблюдением состояния с $E_x = 9.3(4) \text{ МэВ}$, $\Gamma = 1.7(3) \text{ МэВ}$, обнаруженного в реакции ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$ [12].

Состояние с высокой энергией возбуждения (12.2(5) МэВ) наблюдалось впервые. Заметим, что это состояние лежит ниже порога распада ${}^8\text{He} \rightarrow {}^3\text{H} + {}^3\text{H} + 2n$ (14.445 МэВ), поэтому не может быть обусловлено возбуждением α -частичного ядра. В реакции ${}^{11}\text{B}(\pi^-, pd)X$ наблюдалось близкое по энергии возбуждения состояние с $E_x = 11.5(3) \text{ МэВ}$, но с заметно худшей статистикой [24]. Так как ошибки измерений перекрываются, не исключено, что в этих реакциях наблюдается одно и то же состояние. В измерениях реакции ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ в этой области наблюдается некоторое превышение экспериментальных данных над описанием (рис. 1), но вследствие быстрого роста непрерывного спектра в инклюзивных измерениях статистическая обеспеченность этого превышения отсутствует.

Заметим, что существование двух высоковозбужденных состояний, лежащих выше 9 МэВ, предсказано в ряде теоретических работ (см. обзор [7]).

4. Заключение. Поиск возбужденных состояний тяжелого изотопа гелия ${}^8\text{He}$ проводился в спектре недостающих масс, полученных в измерениях реакций ${}^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и ${}^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$. В области низких энергий возбуждений обнаружены три состояния, при этом первое возбужденное состояние, по-видимому, представляет собой мягкую дипольную моду при $E_x \approx 3 \text{ МэВ}$. Были получены подтверждения существования уровней при $E_x \approx 6.4$ и 9.3 МэВ , наблюдаемые нами ранее в других реакциях поглощения остановившихся пионов легкими ядрами. Состояние с высокой энергией возбуждения (12.2(5) МэВ) наблюдалось впервые.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ (проект # 0723-2020-0041) и Российским научным фондом (проект # 18-12-00312).

1. D. R. Tilley, J. H. Kelley, J. L. Godwin, D. J. Millenar, J. E. Purcell, C. J. Sheu, and H. R. Weller, Nucl. Phys. A **745**, 155 (2005).
2. L. V. Chulkov, F. Aksouh, A. Bleile et al. (Collaboration), Nucl. Phys. A **759**, 43 (2005).
3. F. Skaza, V. Lapoux, N. Keeley et al. (Collaboration), Nucl. Phys. A **788**, 260c (2007).

4. K. Hagino, N. Takahashi, and H. Sagawa, *Phys. Rev. C* **77**, 054317 (2008).
5. Y. Kanada-Euno, Y. Taniguchi, and M. Kimura, *Nucl. Phys. A* **805**, 392c (2008).
6. I. Tanihata, H. Savajols, and R. Kanungo, *Progr. Part. Nucl. Phys.* **68**, 215 (2013).
7. Ю. Э. Пенионжкевич, Р. Г. Калпакчиева, *Легкие ядра у границы нейтронной стабильности*, издательство ОИЯИ, Дубна (2016).
8. Л. В. Григоренко, М. С. Головков, С. А. Крупко, С. И. Сидорчук, Г. М. Тер-Акопьян, А. С. Фомичев, В. Худоба, *УФН* **186**, 337 (2016).
9. M. S. Golovkov, L. V. Grigorenko, G. M. Ter-Akopian et al. (Collaboration), *Phys. Lett. B* **672**, 22 (2009).
10. M. Meister, K. Markenroth, D. Aleksandrov et al. (Collaboration), *Nucl. Phys. A* **700**, 3 (2002).
11. J. Xiao, Y.-L. Ye, Z.-X. Cao et al. (Collaboration), *Chin. Phys. Lett.* **29**, 082501 (2012).
12. B. A. Chernyshev, Yu. B. Gurov, S. V. Lapushkin, T. I. Leonova, and V. G. Sandukovsky, *J. Phys. Conf. Ser.* **1390**, 012012 (2019).
13. Ю. Б. Гуров, С. В. Лапушкин, Т. И. Леонова, В. Г. Сандуковский, Б. Чернышев, *Изв. РАН, сер. физ.* **83**, 530 (2019).
14. H. G. Bohlen, A. Blazevic, B. Gebauer, W. von Oertzen, S. Thummerer, R. Kalpakchieva, S. M. Grimes, and T. N. Massey, *Progr. Part. Nucl. Phys.* **42**, 17 (1999).
15. М. Г. Горнов, Ю. Б. Гуров, С. В. Лапушкин, П. В. Морохов, В. А. Печкуров, К. Сет, Т. Педлар, Д. Вайс, Д. Цзао, *Изв. РАН, сер. физ.* **63**, 2209 (1998).
16. Yu. B. Gurov, V. S. Karpukhin, S. V. Lapushkin, I. V. Laukhin, V. A. Pechkurov, N. O. Poroshin, V. G. Sandukovsky, M. V. Tel'kushev, and B. A. Chernyshev, *JETP Lett.* **84**, 1 (2006).
17. Ю. Б. Гуров, С. В. Лапушкин, Т. И. Леонова, М. В. Телькушев, Б. Чернышев, В. Г. Сандуковский, *ЯФ* **83**, 193 (2020).
18. Yu. B. Gurov, L. Yu. Korotkova, S. V. Lapushkin, R. V. Pritula, V. G. Sandukovsky, M. V. Tel'kushev, and B. A. Chernyshev, *JETP Lett.* **101**, 69 (2015).
19. B. A. Chernyshev, A. S. Demyanova, S. A. Goncharov, Yu. B. Gurov, S. V. Lapushkin, A. A. Ogloblin, V. G. Sandukovsky, and W. H. Trzaska, *JETP Lett.* **110**, 97 (2019).
20. B. A. Chernyshev, A. S. Demyanova, Yu. B. Gurov, S. V. Lapushkin, T. I. Leonova, A. A. Ogloblin, and V. G. Sandukovsky, *J. Phys. Conf. Ser.* **1555**, 012029 (2020).
21. M. G. Gornov, Yu. B. Gurov, P. V. Morokhov, S. V. Lapushkin, V. A. Pechkurov, B. A. Chernyshev, V. G. Sandukovsky, and E. A. Pasyuk, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **446**, 461 (2000).
22. Yu. B. Gurov, S. V. Lapushkin, B. A. Chernyshev, and V. G. Sandukovsky, *Phys. Part. Nucl.* **40**, 558 (2009).
23. Ю. Б. Гуров, Д. В. Алешкин, С. В. Лапушкин, И. В. Лаухин, В. А. Печкуров, Н. О. Порошин, В. Г. Сандуковский, М. В. Телькушев, Б. Чернышев, *ЯФ* **69**, 1 (2006).
24. B. A. Chernyshev, Yu. B. Gurov, L. Yu. Korotkova, S. V. Lapushkin, R. V. Pritula, and V. G. Sandukovsky, *Int. J. Mod. Phys. E* **24**, 1550004 (2015).
25. B. A. Chernyshev, Yu. B. Gurov, V. S. Karpukhin, L. Yu. Korotkova, S. V. Lapushkin, R. V. Pritula, and V. G. Sandukovsky, *Eur. Phys. J. A* **49**, 68 (2013).
26. M. Kobayashi, K. Yako, S. Shimoura, M. Dozono, S. Kawase, K. Kisamori, C. S. Lee, S. Michimasa, H. Miya, Sh. Ota, H. Sakai, M. Sasano, and M. Takaki, *JPS Conf. Proc.* **1**, 013034 (2014).
27. V. Lapoux, N. Alamanos, and N. Keeley, *J. Phys. Conf. Ser.* **49**, 161 (2006).

Эффекты усиления вынужденного комбинационного рассеяния света в средах с близким к нулю показателем преломления

А. Р. Газизов⁺*, А. В. Харитонов⁺, С. С. Харинцев^{+,*1)}

⁺Институт физики, Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия

^{*}Институт прикладных исследований, Академия наук РТ, 420111 Казань, Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2020 г.

После переработки 20 декабря 2020 г.

Принята к публикации 21 декабря 2020 г.

Материалы с близким к нулю показателем преломления открывают новые возможности для усиления нелинейно-оптических взаимодействий. Это позволяет снизить порог нелинейной генерации и уменьшить размеры существующих нелинейных устройств, а также открывает перспективы для новых приложений. Настоящая работа посвящена исследованию эффектов усиления вынужденного комбинационного рассеяния света (ВКР) в материалах, которые обладают близкой к нулю диэлектрической проницаемостью. Показано, что в данных средах наблюдается частотный сдвиг коэффициента усиления стоксовой волны, который приводит к сдвигу линий в спектре ВКР. Также получено условие для диэлектрической проницаемости среды, при которой достигается максимальное значение коэффициента усиления ВКР.

DOI: 10.31857/S1234567821030022

В последние годы класс материалов с близкими к нулю значениями оптических констант (диэлектрическая проницаемость ϵ и/или магнитная восприимчивость μ , и, как следствие, показатель преломления n) вызвал широкий интерес, что связано с обнаружением ряда уникальных явлений, таких как статический свет, фотонное туннелирование, нелокальная волновая динамика и др. [1, 2]. Большой практический интерес представляет гигантское усиление нелинейно-оптических взаимодействий в средах с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью (БНДП, англ. *epsilon-near-zero*, *ENZ*) [3]. Высокоэффективная генерация нелинейно-оптических сигналов играет важную роль в таких областях, как телекоммуникации [4, 5], оптическая обработка и хранение информации [6, 7], квантовые информационные технологии [8, 9], оптическая спектроскопия и микроскопия сверхвысокого разрешения [10, 11], и др. Обычно для этих целей используются импульсные лазерные источники с большими значениями пиковой интенсивности ($I_p > 1 \text{ ГВт/см}^2$) [12]. Также для накопления нелинейного сигнала зачастую используются протяженные среды, например, оптические волокна [13]. Растущий спрос на нанофотонные технологии стимулирует поиск физических механизмов, позволяющих осуществлять нелинейно-

оптические преобразования в наноразмерной области при использовании непрерывной лазерной накачки малой интенсивности (порядка 1 МВт/см^2). Современные методы усиленной нелинейной фотоники основаны на использовании структурированных сред. В частности, значительный прогресс был достигнут благодаря использованию оптических нановолноводов, микрорезонаторов, плазмонных наноструктур и резонансных диэлектрических антенн [14–16]. Применение данных подходов несет в себе ряд ограничений, которые связаны либо с невозможностью миниатюризации до наноразмеров, либо с большими оптическими потерями.

Среды с БНДП объединяют в себе такие свойства, как низкие оптические потери и усиление нелинейно-оптических взаимодействий на наношкале [3]. Увеличение нелинейного отклика достигается благодаря следующим эффектам: (1) снижение групповой скорости и (2) усиление продольных оптических полей на границе среды с БНДП. За последнее время в средах с БНДП было обнаружено усиление ряда нелинейных процессов, среди которых: генерация высших гармоник [17, 18], сверхбыстрое оптическое переключение [19], волновое смешение [20] и др. Вообще говоря, БНДП может наблюдаться как в природных [2], так и в искусственно синтезированных материалах [1, 21]. В том случае, когда среда является еще и активной в комбинаци-

¹⁾e-mail: Sergey.Kharintsev@kpfu.ru

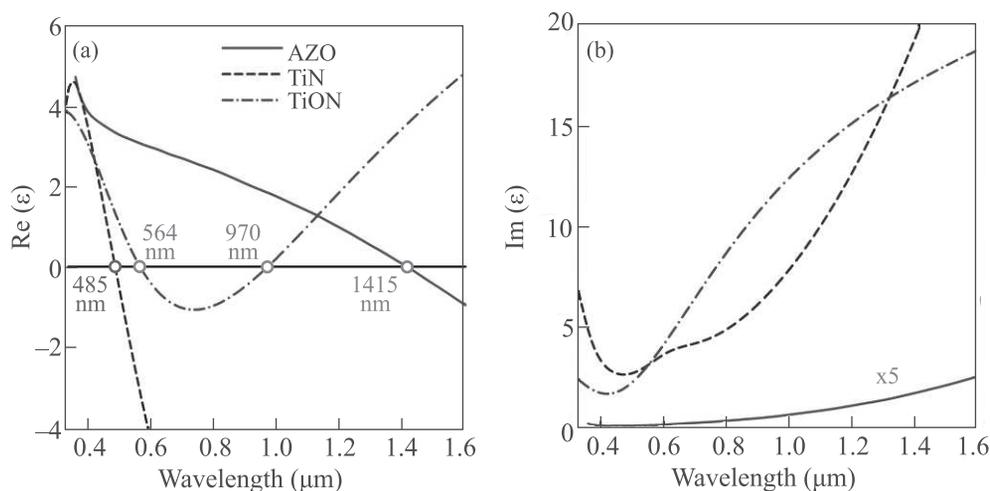


Рис. 1. (Цветной онлайн) Графики действительной (a) и мнимой (b) части диэлектрической функции для AZO, TiN и TiON. Точками на графиках отмечены нули действительной части диэлектрической функции. Для наглядности значения мнимой части диэлектрической проницаемости AZO увеличены в 5 раз

онном рассеянии (КР) света, появляются дополнительные возможности управления оптическими полями. К примеру, становится возможным наблюдение целого класса нелинейных эффектов, связанных с неупругим рассеянием света: вынужденное комбинационное рассеяние, когерентное антистоксово рассеяние, гиперкомбинационное рассеяние, вынужденное рассеяние Мандельштама–Бриллюэна и др. [22–26]. Данные явления могут быть использованы для построения таких устройств, как когерентные источники излучения и преобразователи частоты [27], усилители [28], биосенсоры [22] и плоские сверхлинзы [29–31]. Однако, процессы неупругого рассеяния света в средах с БНДП до сих пор остаются плохо изученными. Данная работа посвящена исследованию эффектов усиления вынужденного комбинационного рассеяния света (ВКР) в материалах с БНДП.

На рисунке 1 представлены графики действительной и мнимой части диэлектрической функции для различных материалов, обладающих БНДП. Широко известным примером сред с БНДП являются металлы. В частности, плазменная частота у золота, серебра и алюминия лежит в ультрафиолетовой области спектра [32]. В видимом диапазоне было предложено использование нитридов металлов переходной группы (TiN, ZrN, HfN, ...) [33]. Отличительная особенность нитридов металлов заключается в возможности настройки их диэлектрической функции на этапе синтеза [34]. Это позволяет управлять положением длины волны λ_{ENZ} , при которой $\text{Re } \epsilon = 0$, в пределах видимого и ближнего инфракрасного

диапазонов. К примеру, для пленок TiN, синтезированных в работе [35], $\lambda_{ENZ} = 485$ нм (рис. 1a, синяя штриховая линия). Одними из наиболее часто используемых материалов в фотонике сред с нулевым показателем преломления являются прозрачные проводящие оксиды. К данному классу относятся: оксид индия-олова (ITO), оксид алюминия-цинка (AZO) и оксид галлия-цинка (GZO). Как показано на рис. 1a, в случае AZO $\lambda_{ENZ} = 1415$ нм. По сравнению с металлами, данные среды обладают существенно меньшими оптическими потерями, что следует из графиков мнимой части диэлектрической функции (рис. 1b). В последнее время большой интерес привлекли оксинитриды металлов переходной группы [36, 37]. Как показано на рис. 1a, диэлектрическая функция TiON демонстрирует необычное поведение, принимая нулевое значение при двух различных длинах волн. В данной работе тонкие пленки TiON были синтезированы методом магнетронного напыления, следуя протоколу, описанному в работе [37]. Материалы, обладающие несколькими нулями диэлектрической функции, позволят увеличить пропускную способность нелинейных фотонных устройств и расширить рабочий диапазон длин волн. Важно подчеркнуть, что представленные на рис. 1 среды являются активными в комбинационном рассеянии (КР) [16, 38–41].

ВКР представляет собой нелинейно-оптический эффект, характеризующийся гигантским усилением интенсивности стоксова излучения. На практике вплоть до 50% энергии лазерной накачки может быть перекачено в одну из стоксовых компонент [12].

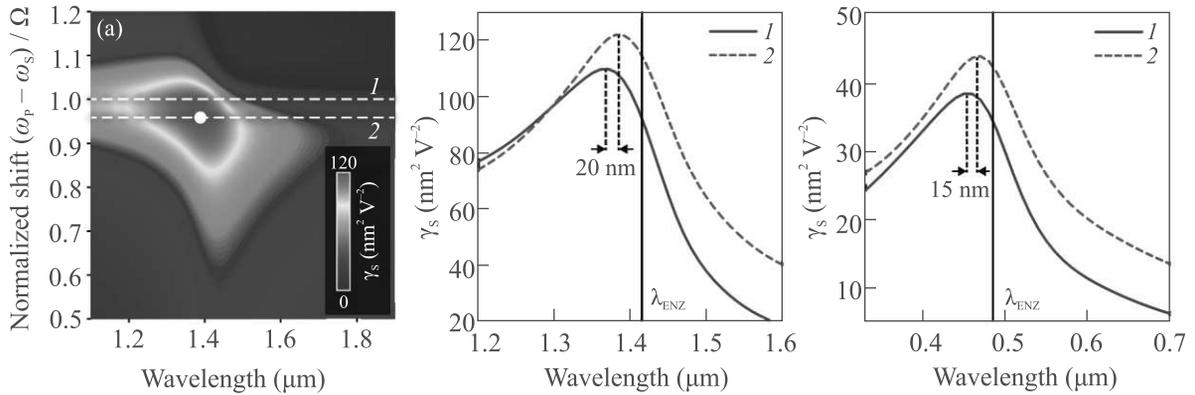


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость коэффициента усиления γ_S от длины волны и нормированного частотного сдвига, построенная с использованием диэлектрической проницаемости AZO. Точкой отмечен максимум γ_S ; (b) – Зависимость γ_S от длины волны для двух случаев (отмечены пунктирными линиями 1 и 2 на рис. (a)): $(\omega_p - \omega_s)/\Omega = 1$ (резонанс) – сплошная синяя линия, значение $(\omega_p - \omega_s)/\Omega$ соответствует максимуму γ_S – пунктирная красная линия. (c) – Зависимости γ_S , рассчитанные с использованием диэлектрической проницаемости TiN. Вертикальными линиями на рисунках (b) и (c) отмечены длины волн, при которых $\text{Re}[\varepsilon] = 0$

Эффективность ВКР описывается коэффициентом усиления стоксовой волны g . В простейшей модели с неистощимой накачкой коэффициент g входит в формулу для интенсивности стоксовой волны следующим образом [12]:

$$I_S(x) \propto \exp(g|E_P|^2 x), \quad (1)$$

где g – коэффициент усиления стоксовой волны, $|E_P|^2$ – интенсивность накачки, x – длина распространения. Коэффициент усиления g записывается следующим образом:

$$g(D, \lambda_S) = -\frac{6\omega_S}{c} \text{Im} \left[\frac{\chi_R^{(3)}(D)}{n(\lambda_S)} \right] = \frac{6\omega_S}{c} \frac{\text{Re}[\chi_R^{(3)}] \text{Im}[n_S] - \text{Im}[\chi_R^{(3)}] \text{Re}[n_S]}{(\text{Re}[n_S])^2 + (\text{Im}[n_S])^2}, \quad (2)$$

где $\chi_R^{(3)}$ – кубическая восприимчивость среды, $n = n(\lambda_S)$ – показатель преломления среды на стоксовой длине волны λ_S , $D = (\omega_p - \omega_s)/\Omega$ – нормированный частотный сдвиг, ω_p и ω_s – частоты волны накачки и стоксовой волны, Ω – частота колебательной моды. В явном виде зависимость кубической восприимчивости от частоты записывается следующим образом:

$$\chi_R^{(3)}(\omega_S) = \frac{A}{\Omega^2 - (\omega_p - \omega_s)^2 + 2i\Gamma(\omega_p - \omega_s)}, \quad (3)$$

где A – константа, пропорциональная квадрату компонент тензора КР, Γ – константа затухания. В дальнейшем будет анализироваться величина $\gamma_S = g\lambda_S$,

которая описывает усиление стоксовой моды, приходящееся на единицу нормированной длины распространения x/λ .

На рисунке 2а построена зависимость γ_S от длины волны и нормированного частотного сдвига $(\omega_p - \omega_s)/\Omega$, рассчитанная с использованием диэлектрической функции AZO. Как видно из этого рисунка, γ_S принимает максимальное значение при некотором частотном сдвиге $(\omega_p - \omega_s)$, который не совпадает с частотой колебательной моды Ω . Следовательно, максимальное усиление будет приходиться не на центр, а на крыло линии КР. В результате линии в спектре ВКР излучения на выходе из такой среды могут быть смещены по сравнению со случаем спонтанного КР. Описанный эффект объясняется тем, что в случае поглощающей среды ($\text{Im}[n_S] \neq 0$), коэффициент усиления γ_S определяется не только мнимой частью $\chi_R^{(3)}$ (максимум при $\omega_p - \omega_s = \Omega$), но и действительной частью (максимум при $\omega_p - \omega_s \neq \Omega$) (уравнение (2)).

Как следует из рис. 2b, коэффициент γ_S испытывает усиление вблизи длины волны λ_{ENZ} , при которой $\text{Re}[\varepsilon] = 0$. Однако положение максимума не совпадает с λ_{ENZ} . Условие, накладываемое на $\text{Re}[\varepsilon]$, при котором γ_S принимает максимальное значение, можно найти с помощью уравнения (2). В случае $\omega_p - \omega_s = \Omega$ (резонанс), данное условие имеет следующий вид:

$$\text{Re}[\varepsilon] = \frac{\partial \text{Im}[n(\lambda)]/\partial \lambda}{\partial \text{Re}[n(\lambda)]/\partial \lambda} \text{Im}[\varepsilon]. \quad (4)$$

Из уравнения (4) следует, что максимум функции γ_S будет возникать при длине волны λ_{ENZ} только в том случае, когда $\text{Im}[\varepsilon]$ при данной длине волны численно равна нулю. Очевидно, что данная ситуация не может быть реализована в силу принципа причинности. Таким образом, для того, чтобы получить максимальное усиление, длина волны стоксова излучения должна быть равна некоторому значению $\lambda_S \neq \lambda_{ENZ}$, которое зависит от оптических потерь и дисперсии материала (рис. 2b, синяя кривая). Более того, в эффекте ВКР возникает резонансное поведение кубической восприимчивости вблизи частоты накачки (в отличие, например, от эффекта Керра или генерации гармоник) [12]. Это приводит к тому, что условие, накладываемое на $\text{Re}[\varepsilon]$, при которой усиление коэффициента $\gamma(\lambda)$ максимально, модифицируется. Это выражается в сдвиге максимума кривой $\gamma(\lambda)$ на величину $\Delta\lambda$ (в случае AZO $\Delta\lambda = 20$ нм) (рис. 2b). Данный эффект связан с тем, что действительная и мнимая часть $\chi_R^{(3)}$ вносят вклад в нелинейный процесс и оказываются перемешаны с действительной и мнимой частью показателя преломления n_S (уравнение (2)). В этом случае формула (4) будет иметь более сложный вид, куда будут входить $\text{Re}[\chi_R^{(3)}]$ и $\text{Im}[\chi_R^{(3)}]$. Таким образом, вблизи λ_{ENZ} наблюдается двукратное увеличение коэффициента γ_S по сравнению со случаем вдали от λ_{ENZ} (при длинах волн видимого диапазона). При интенсивности накачки $I_P = 3.2$ ГВт/см², это приводит к усилению сигнала ВКР в ~ 90 раз по сравнению со случаем без усиления. Для нитрида титана TiN (рис. 2c), усиление коэффициента γ_S оказывается меньше по сравнению с AZO, что связано с большими оптическими потерями.

На рисунке 3 (сплошная синяя линия) построена зависимость γ_S от длины волны для случая TiON, диэлектрическая функция которого принимает нулевое значение дважды (рис. 1a). Несмотря на наличие двух длин волн λ_{ENZ} (отмечены вертикальными линиями на рис. 3), в зависимости $\gamma(\lambda_S)$ присутствует только один максимум. Причиной отсутствия усиления на длине волны λ_{ENZ2} является большое омическое поглощение, которое существенно превосходит поглощение на длине волны λ_{ENZ1} (рис. 1b). На рисунке 3 (пунктирная красная линия) построена зависимость $\gamma(\lambda_S)$ от длины волны для случая, когда мнимая часть диэлектрической проницаемости TiON искусственно уменьшена в 10 раз. Как видно, коэффициент γ_S имеет два пика на различных длинах волн. Таким образом, в средах с несколькими точками λ_{ENZ} и низким уровнем оптических потерь становится возможным усиление

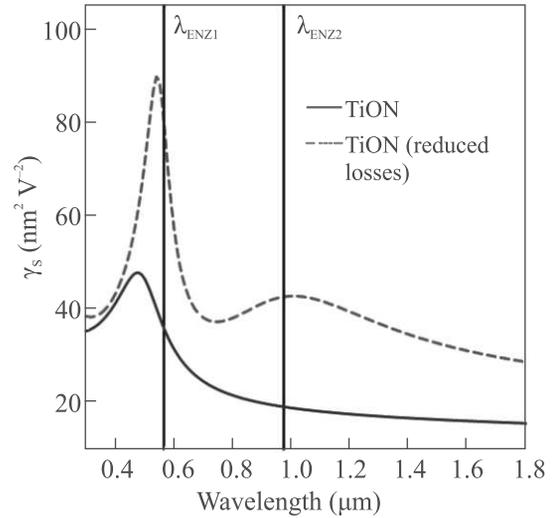


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента усиления γ_S от длины волны для случая TiON и TiON с уменьшенной в 10 раз мнимой частью диэлектрической проницаемости. График построен для частотного сдвига $(\omega_P - \omega_S)/\Omega$, соответствующего максимуму γ_S . Вертикальными линиями отмечены длины волн, при которых $\text{Re}[\varepsilon] = 0$

сигнала ВКР одновременно на нескольких длинах волн.

В заключение отметим, что среды с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью являются перспективной платформой для создания устройств, способных осуществлять нелинейно-оптические преобразования в наноразмерной области и имеющих низкий порог нелинейной генерации. Полученные в данной работе результаты позволяют оптимальным образом подбирать параметры среды и условия возбуждения для достижения максимальной эффективности преобразования частоты с помощью ВКР.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (# 0671-2020-0050). Работы А. Р. Газизова и С. С. Харинцева (синтез образцов TiON) были выполнены за счет средств Российского научного фонда (# 19-12-00066).

Авторы благодарны проф. М. Х. Салахову (Академия наук Республики Татарстан) за ценные замечания к работе.

1. I. Liberal and N. Engheta, Nature Photon. **11**, 149 (2017).
2. N. Kinsey, C. DeVault, A. Boltasseva, and V.M. Shalaev, Nat. Rev. Mater. **4**, 742 (2019).

3. O. Reshef, I. De Leon, M. Z. Alam, and R. W. Boyd, *Nat. Rev. Mater.* **4**, 535 (2019).
4. A. E. Willner, S. Khaleghi, M. R. Chitgarha, and O. F. Yilmaz, *J. Light. Technol.* **32**, 66 (2014).
5. Z. Chai, X. Y. Hu, F. F. Wang, X. X. Niu, J. Y. Xie, and Q. H. Gong, *Adv. Opt. Mater.* **5**, 1600665 (2017).
6. D. Cotter, R. J. Manning, K. J. Blow, A. D. Ellis, A. E. Kelly, D. Nasset, I. D. Phillips, A. J. Poustie, and D. C. Rogers, *Science* **286**, 1523 (1999).
7. E. N. Glezer, M. Milosavljevic, L. Huang, R. J. Finlay, T. H. Her, J. P. Callan, and E. Mazur, *Opt. Lett.* **21**, 2023 (1996).
8. D. E. Chang, V. Vuletic, and M. D. Lukin, *Nature Photon.* **8**, 685 (2014).
9. F. Flamini, N. Spagnolo, and F. Sciarrino, *Rep. Prog. Phys.* **82**, 016001 (2019).
10. J. L. Ma and M. T. Sun, *Nanophotonics* **9**, 1341 (2020).
11. S. Mukamel, *Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy*, Oxford Univ. Press, Oxford (1999).
12. R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, San Diego (2008).
13. G. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, Academic Press, N.Y. (2013).
14. J. I. Dadap, N. C. Panoiu, X. Chen, I.-W. Hsieh, X. Liu, C.-Y. Chou, E. Dulkeith, S. J. McNab, F. Xia, W. M. J. Green, L. Sekaric, Y. A. Vlasov, and R. M. Osgood, *Opt. Express* **16**, 1280 (2008).
15. G. P. Lin, A. Coillet, and Y. K. Chembo, *Adv. Opt. Photonics* **9**, 828 (2017).
16. S. S. Kharintsev, A. V. Kharitonov, S. K. Saikin, A. M. Alekseev, and S. G. Kazarian, *Nano Lett.* **17**, 5533 (2017).
17. Y. M. Yang, J. Lu, A. Manjavacas, T. S. Luk, H. Z. Liu, K. Kelley, J. P. Maria, E. L. Runnerstrom, M. B. Sinclair, S. Ghimire, and I. Brener, *Nat. Phys.* **15**, 1022 (2019).
18. I. A. Kolmychek, V. B. Novikov, I. V. Malysheva, A. P. Leontiev, K. S. Napolskii, and T. V. Murzina, *Opt. Lett.* **45**, 1866 (2020).
19. Z. Chai, X. Y. Hu, F. F. Wang, C. Li, Y. T. Ao, Y. Wu, K. B. Shi, H. Yang, and Q. H. Gong, *Laser Photonics Rev.* **11**, 1700042 (2017).
20. M. Clerici, N. Kinsey, C. DeVault, J. Kim, E. G. Carnemolla, L. Caspani, A. Shaltout, D. Faccio, V. Shalaev, A. Boltasseva, and M. Ferrera, *Nat. Commun.* **8**, 15829 (2017).
21. I. Liberal and N. Engheta, *Science* **358**, 1540 (2017).
22. R. C. Prince, R. R. Frontiera, and E. O. Potma, *Chem. Rev.* **117**, 5070 (2017).
23. J. X. Cheng and X. S. Xie, *J. Phys. Chem. B* **108**, 827 (2004).
24. A. M. Kelley, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **61**, 41 (2010).
25. B. J. Eggleton, C. G. Poulton, P. T. Rakich, M. J. Steel, and G. Bahl, *Nature Photon.* **13**, 664 (2019).
26. I. S. Maksymov and A. D. Greentree, *Nanophotonics* **8**, 367 (2019).
27. M. A. Ferrara and L. Sirleto, *Micromachines* **11**, 330 (2020).
28. J. Bromage, *J. Lightwave Technol.* **22**, 79 (2004).
29. S. S. Kharintsev, *Opt. Lett.* **44**, 5909 (2019).
30. S. S. Kharintsev, A. V. Kharitonov, A. R. Gazizov, and S. G. Kazarian, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 3862 (2020).
31. S. S. Kharintsev, A. V. Kharitonov, A. M. Alekseev, and S. G. Kazarian, *Nanoscale* **11**, 7710 (2019).
32. E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, Boston (1985), p. 286, 350, 377.
33. G. V. Naik, J. Kim, and A. Boltasseva, *Opt. Mater. Express* **1**, 1090 (2011).
34. A. V. Kharitonov, I. V. Yanilkin, A. I. Gumarov, I. R. Vakhitov, R. V. Yusupov, L. R. Tagirov, S. S. Kharintsev, and M. Kh. Salakhov, *Thin Solid Films* **653**, 200 (2018).
35. H. Reddy, U. Guler, Zh. Kudyshev, A. V. Kildishev, V. M. Shalaev, and A. Boltasseva, *ACS Photonics* **4**, 1413 (2017).
36. A. Kharitonov and S. Kharintsev, *Opt. Mater. Express* **10**, 513 (2020).
37. L. Braic, N. Vasilantonakis, A. Mihai, I. J. V. Garcia, S. Fearn, B. Zou, N. M. Alford, B. Doiron, R. F. Oulton, S. A. Maier, A. V. Zayats, and P. K. Petrov, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**, 29857 (2017).
38. J. Gwamuri, M. Marikkannan, J. Mayandi, P. K. Bowen, and J. M. Pearce, *Mater.* **9**, 63 (2016).
39. A. Momot, M. N. Amini, G. Reekmans, D. Lamoen, B. Partoens, D. R. Slocombe, K. Elen, P. Adriaensens, A. Hardy, and M. K. van Bael, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 27866 (2017).
40. S. Horzum, F. Iyikanat, R. T. Senger, C. Celebi, M. Sbeta, A. Yildiz, and T. Serin, *J. Mol. Struct.* **1180**, 505 (2019).
41. M. Gioti, J. Arvanitidis, D. Christofilos, K. Chaudhuri, T. Zorba, G. Abadias, D. Gall, V. M. Shalaev, A. Boltasseva, and P. Patsalas, *J. Opt.* **22**, 11 (2020).

Электрон в поле встречных импульсов излучения

Н. Н. Розанов¹⁾

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

Поступила в редакцию 21 декабря 2020 г.

После переработки 22 декабря 2020 г.

Принята к публикации 23 декабря 2020 г.

Получено точное решение задачи о воздействии встречных импульсов плосковолнового излучения на классическую заряженную частицу и на частицу со спином в случае симметричных и антисимметричных профилей напряженности поля импульсов. Показано, что эффективность воздействия определяется преимущественно электрической площадью импульсов, что подчеркивает актуальность разработки источников квазиуниполярного излучения. Приведено выражение для мощности испускаемого при повороте спина магнитно-дипольного излучения.

DOI: 10.31857/S1234567821030034

В настоящее время имеется значительный прогресс в генерации сверхсильных лазерных полей с длительностями импульсов, достигающими до аттосекундного уровня [1–7]. Это позволяет наблюдать нетривиальные эффекты релятивистской оптики [8, 9] и делает актуальными фундаментальные и прикладные исследования взаимодействия таких импульсов с микрообъектами – электронами, ионами, атомами, молекулами и т.д. При приближении напряженностей полей к швингеровскому пределу принципиальную роль начинают играть квантово-электродинамические эффекты, связанные с генерацией электрон-позитронных пар [10–13]. Но и для более слабых полей, которые и рассматриваются далее, в литературе описаны различные нетривиальные эффекты, допускающие как классическое, так и квантовое описание. Спецификой предельно коротких импульсов в этой области служит то, что эффективность взаимодействия определяется, главным образом, не энергией импульсов, а их электрической площадью – интегралом по времени от электрической напряженности поля \mathbf{E} , $\mathbf{S}_E = \int \mathbf{E} dt$, см. общие свойства электрической площади и методы генерации таких импульсов в обзорах [14, 15] и цитируемой там литературе. Так, в [16] получено точное решение классической задачи о движении одиночного электрона в поле импульса излучения с линейной поляризацией. Отметим, что в этих условиях квантово-механические расчеты согласуются с классическими не только применительно к движению электрона, но и к спиновым эффектам [17–21] (спин сопоставляется магнитному моменту заряженной частицы, см.

ниже некоторые оговорки). В настоящем сообщении представлено точное решение классической задачи о динамике электрона или заряженной частицы со спином в поле встречных синфазных и противофазных импульсов линейно-поляризованного плосковолнового излучения. Подчеркивается роль электрической площади импульсов в эффективности их воздействия на электрон.

Рассматриваем динамику одиночной частицы с электрическим зарядом q и массой m . Без ограничения общности можно считать, что частица в начальный момент покоится в начале координат (рис. 1, $z = 0$). На частицу падают два первоначально не перекрывающихся пакета излучения с напряженно-

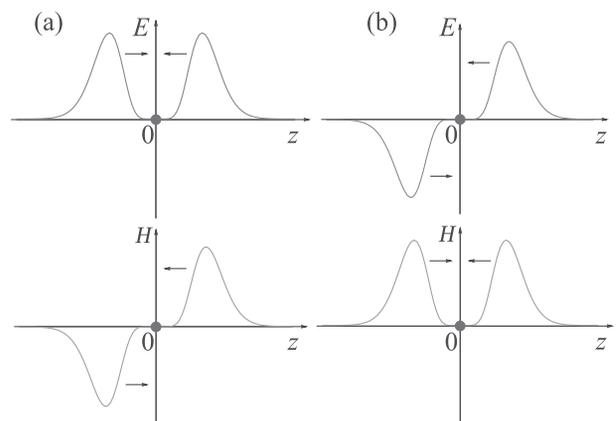


Рис. 1. (Цветной онлайн) Профили электрической E и магнитной H напряженности поля плосковолновых синфазных (а) и противофазных (б) импульсов излучения, сталкивающихся с зарядом (кружок) в плоскости $z = 0$. Стрелки показывают направление движения импульсов

¹⁾e-mail: nnrosanov@mail.ru

стями электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{H} поля, обладающих электрической площадью $\mathbf{S}_{E1,2} = \int \mathbf{E}_{1,2} dt$. Считаем, что это пакеты плосковолновые, движущиеся в вакууме вдоль оси z во встречных направлениях и обладающие линейной поляризацией. Тогда (c – скорость света в вакууме, t – время, $\mathbf{e}_{x,y}$ – орты по соответствующим осям)

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= E(z, t)\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{H} = H(z, t)\mathbf{e}_y, \quad \mathbf{S}_{E1,2} = S_{E1,2}\mathbf{e}_x, \\ E(z, t) &= E_1(ct - z) + E_2(ct + z), \quad (1) \\ H(z, t) &= E_1(ct - z) - E_2(ct + z). \end{aligned}$$

Одномерное волновое уравнение допускает произвольную форму импульсов E_1 и E_2 . Будем считать профили встречных импульсов зеркально симметричными. Формулы для случаев синфазных и противофазных импульсов будем снабжать далее указателями (а) и (b). Для синфазных импульсов (рис. 1а)

$$\begin{aligned} E(z, t) &= f(t - z/c) + f(t + z/c), \\ H(z, t) &= f(t - z/c) - f(t + z/c), \quad (2a) \\ S_{E1} &= \int f(t) dt, \quad S_{E2} = S_{E1}, \end{aligned}$$

а для противофазных (рис. 1b),

$$\begin{aligned} E(z, t) &= f(t - z/c) + f(t + z/c), \\ H(z, t) &= f(t - z/c) + f(t + z/c), \quad (2b) \\ S_{E2} &= -S_{E1}. \end{aligned}$$

В первом случае поле в плоскости $z = 0$ чисто электрическое

$$E(0, t) = 2f(t), \quad H(z, t) = 0, \quad (3a)$$

а во втором – чисто магнитное

$$E(0, t) = 0, \quad H(z, t) = 2f(t). \quad (3b)$$

Уравнение движения частицы под действием силы Лоренца с учетом реакции излучения имеет вид (\mathbf{p} – релятивистский импульс частицы, \mathbf{v} – ее скорость) [22]

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] + \frac{2q^2}{3c^3} \frac{d^2\mathbf{v}}{dt^2}. \quad (4)$$

Для синфазных импульсов интегрирование уравнения движения (4) по времени в течение всего времени показывает, что заряд движется прямолинейно в направлении электрического поля \mathbf{E} . После окончания импульса частица приобретает механический импульс

$$\mathbf{p} = q\mathbf{S}_E = 2qS_{E1}\mathbf{e}_x. \quad (5a)$$

Соответственно, конечные энергия E_{kin} и скорость частицы

$$E_{\text{kin}} = mc^2 \sqrt{1 + S_E^2/S_0^2}, \quad \frac{v}{c} = \frac{S_E/S_0}{\sqrt{1 + S_E^2/S_0^2}}, \quad (6a)$$

где $S_E = 2S_{E1}$, $S_0 = mc/q$. Отметим, что наличие реакции излучения не влияет на эти результаты, поскольку ее тормозящее действие на части импульса компенсируется ускоряющим на другой части импульса.

Для противофазных импульсов сохраняется исходно неподвижное состояние частицы, которую мы считали исходно неподвижной (скорость $\mathbf{v} = 0$). Это можно соотнести с тем обстоятельством, что суммарная электрическая площадь двух противофазных импульсов равна нулю.

Важной характеристикой частицы служит ее спин \mathbf{s} и отвечающий ему магнитный момент $\boldsymbol{\mu} = \eta\mathbf{s}$, где $\eta = gq\hbar/(2mc)$ и g – g -фактор частицы (для электрона $g < 0$ и $g \approx 2$). Нерелятивистское уравнение Томаса–Френкеля движения момента имеет вид

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \eta\boldsymbol{\mu} \times \left(\mathbf{H} - \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right), \quad (7)$$

а его релятивистское обобщение следующее [23, 24]

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \eta\boldsymbol{\mu} \times \left(\frac{1}{\gamma} \mathbf{H} - \frac{1}{\gamma + 1} \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right), \quad \gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}. \quad (8)$$

При синфазных импульсах (рис. 1а) в обоих вариантах (7) и (8) получим

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = 0, \quad (9a)$$

так что исходное состояние спина сохраняется. При противофазных импульсах (рис. 1b), когда скорость $\mathbf{v} = 0$, уравнения (7) и (8) также совпадают и сводятся к следующему

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \eta[\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H}]. \quad (9b)$$

Отметим также, что в этом случае совпадают и обобщаемые в [21] различные варианты квантовомеханического оператора спина (Паули [25], Френкеля [26], Прайса [27] и Фолди–Ваутхойзена [28]).

Как видно из (9b), абсолютная величина магнитного момента и, соответственно, спина сохраняется и во время воздействия импульсов излучения, $\frac{d\boldsymbol{\mu}^2}{dt} = 0$. Ориентация же этих векторов меняется. В покомпонентной записи (далее мы опускаем в номерах формул указатель (b), так как все они относятся к случаю противофазных импульсов)

$$\frac{d\mu_x}{dt} = -2\eta f(t)\mu_z, \quad \frac{d\mu_y}{dt} = 0, \quad \frac{d\mu_z}{dt} = 2\eta f(t)\mu_x. \quad (10)$$

Из (10) следует, что параллельная магнитному полю компонента момента (и спина) сохраняется, так же, как и абсолютная величина ортогональной составляющей: $\frac{d\mu_{\perp}^2}{dt} = 0$, $\mu_{\perp}^2 = \mu_x^2 + \mu_z^2 = \text{const}$. Положив

$$\mu_x(t) = \mu_{\perp} \cos \Phi(t), \quad \mu_z(t) = \mu_{\perp} \sin \Phi(t), \quad (11)$$

сводим (10) к уравнению для угловой скорости

$$\frac{d\Phi}{dt} = 2\eta f(t) \quad (12)$$

с очевидным решением

$$\Phi(t) - \Phi_0 = 2\eta \int_{t_0}^t f(t) dt. \quad (13)$$

Соответственно, за все время действия импульсов изменение угла Φ составит

$$\delta\Phi = \eta S_E. \quad (14)$$

Тем самым, воздействие встречных противофазных импульсов излучения на электрон сводится к повороту ортогональных магнитному полю компонент магнитного момента и спина на угол, пропорциональный электрической площади импульсов.

Вращение магнитного момента во время действия импульсов вызывает в рамках модели Томаса–Френкеля магнитно-дипольное излучение. Отвечающие ему напряженности поля \mathbf{E} и \mathbf{H} и мощность полного излучения по всем направлениям P_{md} имеют вид [22]

$$\mathbf{E} = \frac{1}{c^2 R} \left[\mathbf{n} \times \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} \right], \quad \mathbf{H} = \frac{1}{c^2 R} \left[\left[\frac{d^2\boldsymbol{\mu}}{dt^2} \times \mathbf{n} \right] \times \mathbf{n} \right],$$

$$P_{md} = \frac{2}{3c^3} \left(\frac{d^2\boldsymbol{\mu}}{dt^2} \right)^2. \quad (15)$$

Здесь R – расстояние от электрона до точки наблюдения и \mathbf{n} – единичный вектор в этом направлении. С учетом (10) для мощности P_{md} получаем

$$P_{md} = \frac{32\eta^4}{3c^3} (\mu_{x0}^2 + \mu_{z0}^2)^2 \left(f^2 + \frac{4}{S_0^2} f^4 \right)^2. \quad (16)$$

В соответствии с (14), импульсы излучения вызывают вращение момента импульса (спина). Вращение приводит к появлению магнитно-дипольного излучения электрона с мощностью (16) (для модели Томаса–Френкеля). Но отсюда следует необходимость проявления вращательной реакции излучения, приводящей к торможению вращения. Для классической системы зарядов скорость потери момента импульса за счет излучения выражается через скорости и ускорения составляющих объект зарядов [19].

Электрон со спином, абсолютная величина которого не должна изменяться, не сводится к подобному классическому объекту. Естественно полагать, что магнитно-дипольное излучение электрона во время действия импульсов излучения уменьшит угол поворота. Это уменьшение не может быть значительным ввиду вторичного характера такого излучения, но количественное описание этого эффекта требует отдельного квантового рассмотрения.

Таким образом, как ускорение заряда синфазными импульсами излучения, так и поворот спина противофазными импульсами определяются, главным образом, электрической площадью импульсов, которая является важнейшей характеристикой эффективности их воздействия на заряженную частицу. Масштабом ее служит величина $S_0 = mc/q$, которая для электрона составляет величину $S_0 = 5.69 \cdot 10^{-8} \text{ г}^{1/2}/\text{см}$. Электрическую площадь импульса можно оценить как произведение максимальной амплитуды поля E_{max} на длительность импульса τ . Тогда уже при длительности $\tau = 10^{-17} \text{ с} = 10 \text{ ас}$ для поворота спина на угол $\delta\Phi = 2$ потребовалась бы амплитуда поля $E_{\text{max}} = 5.69 \cdot 10^9 \text{ ед. СГСЭ}$. Это значение много меньше достигнутого уровня для более длительных биполярных лазерных импульсов.

В рассмотренном варианте для двух синфазных импульсов с такой площадью у каждого из (6а) получим, что под их действием исходно неподвижный электрон приобретет кинетическую энергию $\sqrt{5}mc^2 = 2.24mc^2$, причем движение будет прямолинейным в направлении, задаваемом электрической напряженностью поля. При противофазных импульсах согласно (14) спин электрона повернется на угол $\delta\Phi = 2$. Для оценки излучаемой, согласно модели Томаса–Френкеля, в процессе поворота мощности (16) требуется задание, помимо электрической площади, еще и формы импульсов, оптимизация которой является отдельной задачей. Отметим также, что какие-либо неустойчивости динамических режимов не должны быть критичными в рассматриваемом случае предельно коротких импульсов.

Исследование поддержано Российским фондом фундаментальных исследований, гранты # 19-02-00312 и 20-32-70049.

1. T. Brabec and F. Krausz, Rev. Mod. Phys. **72**, 545 (2000).
2. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
3. U. Keller, Appl. Phys. B **100**, 15 (2010).
4. M. T. Hassan, T. T. Luu, A. Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov,

- V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Nature (London)* **530**, 66 (2016).
5. Y. You, Y. Yin, Y. Wu, A. Chew, X. Ren, F. Zhuang, S. Gholam-Mirzaei, M. Chini, Z. Chang, and S. Ghimire, *Nat. Commun.* **8**, 1 (2017).
 6. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, *Sci. Rep.* **8**, 2669 (2018).
 7. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 9 (2019) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. A. Shimko, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **110**, 15 (2019)].
 8. Y. Abe, K. F. F. Law, Ph. Korneev, et al. (Collaboration), *Pis'ma v ZhETF* **107**, 366 (2018).
 9. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 22 (2020) [A. V. Mitrofanov, D. A. Sidorov-Biryukov, M. V. Rozhko, A. A. Voronin, P. B. Glek, S. V. Ryabchuk, E. E. Serebryannikov, A. B. Fedotov, and A. M. Zheltikov, *JETP Lett.* **112**, 17 (2020)].
 10. G. A. Mourou, T. Tajima, and S. V. Bulanov, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 309 (2006).
 11. T. Z. Esirkepov, S. S. Bulanov, J. K. Koga, M. Kando, K. Kondo, N. N. Rosanov, G. Korn, and S. V. Bulanov, *Phys. Lett. A* **379**, 2044 (2015).
 12. D. Del Sorbo, D. Seipt, A. G. R. Thomas, and C. P. Ridgers, *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 064003 (2018).
 13. T. Blackburn, *Rev. Mod. Plasma Phys.* **4**, 5 (2020).
 14. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, *УФН* **188**, 1347 (2018) [N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, and M. V. Arkhipov, *Phys. Usp.* **61**, 1227 (2018)].
 15. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, *Квантовая электроника* **50**(9), 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, *Quantum Electron.* **50**(9), 801 (2020)].
 16. Н. Н. Розанов, Н. В. Высотина, *ЖЭТФ* **157**, 63 (2020) [N. N. Rosanov and N. V. Vysotina, *JETP* **130**, 52 (2020)].
 17. M. W. Walser, D. J. Urbach, K. Z. Hatsagortsyan, S. X. Hu, and C. H. Keitel, *Phys. Rev. A* **65**, 043410 (2002).
 18. H. Bauke, S. Ahrens, C. H. Keitel, and R. Grobe, *Phys. Rev. A* **89**, 052101 (2014).
 19. Y. Fu, Y. Liu, C. Wang, J. Zeng, and J. Yuan, *Phys. Rev. A* **100**, 013405 (2019).
 20. Y.-F. Li, R. Shaisultanov, K. Z. Hatsagortsyan, F. Wan, C. H. Keitel, and J.-X. Li, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 154801 (2019).
 21. I. A. Aleksandrov, D. A. Tumakov, A. Kudlis, V. M. Shabaev, and N. N. Rosanov, *Phys. Rev. A* **102**, 023102 (2020).
 22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, М. (1988).
 23. Дж. Джексон, *Классическая электродинамика*, Мир, М. (1965).
 24. И. М. Тернов, В. А. Бордовицын, *УФН* **132**, 346 (1980) [I. Ternov and V. Bordovitsyn, *Sov. Phys. Usp.* **23**, 679 (1980)].
 25. W. Pauli, *Z. Phys.* **31**, 373 (1925).
 26. J. Frenkel, *Z. Phys.* **37**, 243 (1926).
 27. M. H. L. Pryce, *Proc. R. Soc. A* **195**, 62 (1948)
 28. L. L. Foldy and S. A. Wouthuysen, *Phys. Rev.* **78**, 29 (1950).

Необычные X-образные дефекты в монокристалле кремния, возникающие под действием четырехпорного изгиба

Д. А. Золотов¹⁾, В. Е. Асадчиков⁺, А. В. Бузмаков⁺, И. Г. Дьячкова⁺, Э. В. Суворов*

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

*Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 30 ноября 2020 г.

После переработки 14 декабря 2020 г.

Принята к публикации 24 декабря 2020 г.

В работе с применением лабораторного источника рентгеновского излучения исследовались дислокации в монокристаллическом кремнии, введенные методом четырехпорного изгиба. Впервые получены двумерные и трехмерные дифракционные изображения в геометрии Лауэ необычных X-образных дислокационных структур. Проанализировано пространственное расположение таких линейных дефектов и определены количественно их геометрические характеристики.

DOI: 10.31857/S1234567821030046

Постановка задачи. Монокристаллы и сложные многослойные системы, изготавливаемые из них, составляют основу устройств современной техники. Монокристаллические полупроводниковые пластины (чаще всего кремниевые) сегодня являются основными материалами для производства микроэлектронных устройств. Большинство практически важных свойств полупроводников определяются дефектами кристаллической структуры – точечными дефектами, дислокациями, границами зерен, двойниками, кластерами и пр. Это, в большой степени, определило необходимость многолетнего совершенствования технологии, что позволило к настоящему времени получать практически бездислокационные кристаллы кремния. Однако, в процессе неизбежной термической обработки любой микроскопический дефект на поверхности может спровоцировать возникновение радикальных дефектов. При этом избежать пластических деформаций, вызванных зарождением и расширением дислокаций, по-прежнему сложно [1]. Они могут быстро развиваться в так называемые полосы скольжения [2, 3], значительно расширяясь в первоначально свободные от дислокаций участки подложки и приводя к крупномасштабным деформациям на поверхности [4, 5]. Поэтому контроль термического сбоя (*thermal slip*) [6], понимание происхождения и прогнозирование его эволюции с помощью различных экспериментальных и теоретических моделей, представляют, как научный, так и практический интерес.

Одним из методов контролируемого введения дислокаций является метод четырехпорного изгиба [7–10]. Описанная в этих работах методика позволяет вводить дислокации строго определенной геометрии с заданными векторами Бюргерса. Для получения таких образцов используются монокристаллы с высокими барьерами Пайерлса (кремний, германий, антимонид индия и пр.), в которых дислокации располагаются вдоль канавок потенциального рельефа [8]. Считалось и было экспериментально подтверждено, что в используемой геометрии единичные дислокации образуются по граням тетраэдра в плоскостях $(\bar{1}11)$ и $(1\bar{1}1)$. В каждой из этих плоскостей скольжения в условиях описанной методики деформирования образуются дислокационные полупетли, расположенные вдоль плотноупакованных направлений $\langle 110 \rangle$. Отметим, что первые работы по исследованию таких дислокационных структур проведены под руководством В. Л. Инденбоба [11]. Поскольку названные плоскости с кристаллографической точки зрения эквивалентны, различить расположенные в них дислокационные полупетли очень трудно. Для этого требуется получить несколько рентгеновских топограмм хорошего качества, причем наиболее прецизионный метод секционной топографии не позволяет увидеть форму дислокационной петли.

Авторы [7–10] предполагали, что предложенная ими методика может приводить к образованию не одной дислокационной полупетли, а их скоплению. Это предположение до последнего времени не было подтверждено экспериментально. Возможно, потому, что контраст от скоплений дислокаций много боль-

¹⁾e-mail: zolotovden@crys.ras.ru

ше, чем от единичной, и отличить одно от другого чрезвычайно затруднительно, даже несмотря на высокое, до одного микрона, разрешение рентгеновских фотопластинок. При обработке фотопластин изображения просто сливаются. Такие скопления были обнаружены нами лишь недавно с использованием метода рентгеновской топо-томографии как на синхротронном, так и на лабораторном источниках [12]. Однако вопрос о взаимном расположении дислокаций в двух названных плоскостях, а также о том, являются ли эти дислокации единичными или образуется их скопление, до сих пор оставался не изученным. Именно его рассмотрению посвящена настоящая работа.

Методы исследования. Достаточно подробную информацию о реальной структуре кристаллов позволяют получать дифракционные методы исследований. Особое место среди этих методов занимает рентгеновская топография, поскольку именно этот метод позволяет непосредственно визуализировать дефекты структуры, определить их тип, физико-химические параметры и расположение в кристаллической решетке [13–17]. Рентгеновская топография обладает высокой чувствительностью к деформациям кристаллической решетки ($\Delta d/d \approx 10^{-8} - 10^{-12}$), а выбор длины волны зондирующего излучения позволяет выявить дефекты, расположенные на достаточно большой глубине.

Традиционные рентгеновские типографические методики, конечно, являются неразрушающими, но отображают лишь проекцию изображения дефектов на топограмме, т.е. возможно получить двумерную картину расположения дефектов в объеме кристалла (проекция образуется в основании треугольника рассеяния, точнее в основании “палатки Бормана”). Однако несомненный интерес представляет получение объемного изображения реальной структуры кристалла.

Известно, что формирование изображений реальной структуры кристалла происходит при отражении (пропускании) рентгеновских лучей кристаллографическими плоскостями. При вращении кристалла вокруг нормали к одной из таких плоскостей (вектора дифракции) регистрируется набор дифракционных изображений, которые можно рассматривать, как аналоги проекций в классической компьютерной томографии. Таким образом, для восстановления трехмерных изображений дефектов кристаллической решетки можно использовать алгоритмы классической абсорбционной микротомографии при их адаптации применительно к геометрии топографического эксперимента (например, с

использованием методов Ланга [18] или Бормана [19]), а затем вычислять геометрические параметры дефектов. Применение такого комбинированного подхода (топо-томография) делает возможным изучение трехмерного расположения индивидуальных дислокаций в кристаллах. В настоящее время подобные задачи принято решать с применением синхротронных источников рентгеновского излучения [20], что не всегда доступно. Однако в практическом плане важно иметь возможность проводить такие исследования в рамках обычной рентгеновской лаборатории.

Так, ранее с применением лабораторного источника рентгеновского излучения методом топо-томографии была показана возможность определения пространственного расположения искусственно введенных дислокационных полигональных полупетель в монокристалле кремния [21]; по набору рентгено-дифракционных проекционных данных восстановлено трехмерное расположение как полигональных скоплений общей протяженностью до 700 мкм, так и одиночных дислокаций [22]; в синтетических алмазах обнаружены конусообразные дефекты, связанные с дислокациями и декорированные оксидными включениями [23, 24].

Другим, также примененным в настоящей работе подходом получения изображения дефектной структуры в монокристаллах, является “топография в белом пучке” [25]. Это направление в литературе также известно, как метод Фудживары [26]. При использовании полихроматического излучения на лауэграмме каждый рефлекс, по сути, представляет собой топограмму и анализируется в отдельности. Поскольку регистрируются отражения от разных кристаллографических плоскостей, появляется возможность получения дополнительной информации о типе наблюдаемых дислокаций. Поскольку ставилась задача не только выявления пространственного расположения сложных дислокационных структур, но и определения характеристик дислокаций, в работе использовались оба описанных метода.

Экспериментальная часть. Отработку методики по изучению реальной структуры кристаллов целесообразно проводить на специально подготовленных для таких исследований объектах с известной геометрией дислокационной структуры.

Использовался образец бездислокационного монокристаллического кремния, выращенного по методу Чохральского. Из слитка была вырезана пластина вдоль кристаллографической плоскости (111), которая затем подвергалась четырехопорному изгибу вокруг оси $\langle 112 \rangle$. Источниками дислокаций служи-

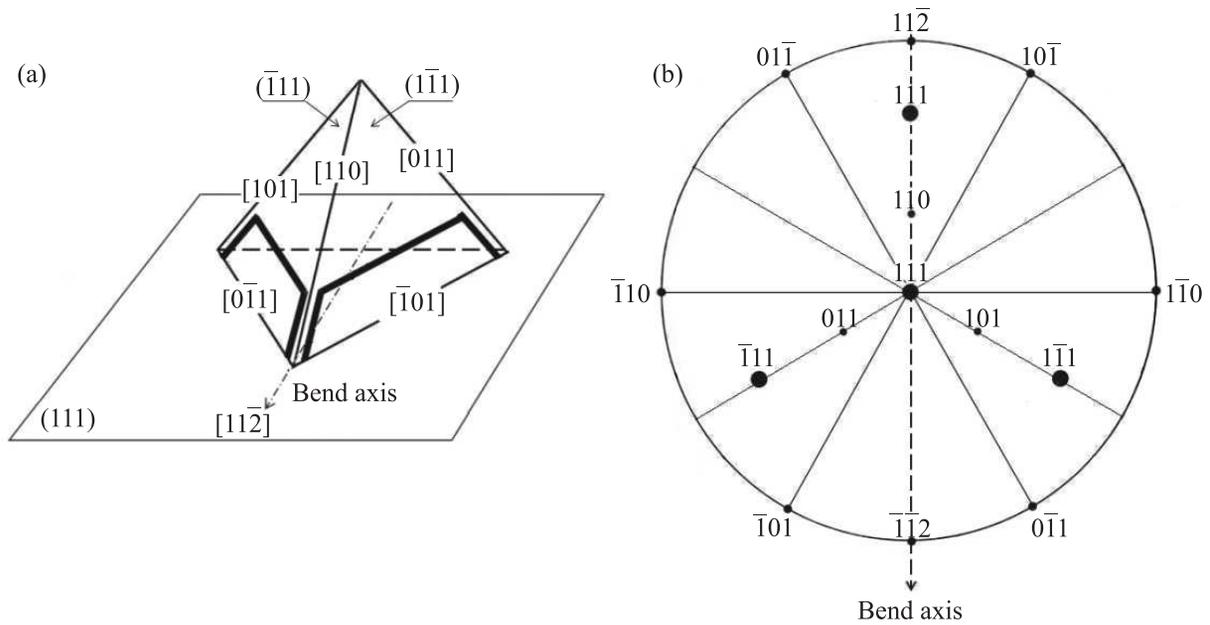


Рис. 1. (а) – Геометрия плоскостей скольжения типа $\{111\}$ и линии дислокаций вдоль направлений типа $\{110\}$ в монокристаллах кремния; (б) – соответствующая стереографическая проекция [7]

ли царапины, специально нанесенные алмазным индентором вдоль длинного ребра призмы с нагрузкой 1–2 г. Условия деформирования были следующие: постоянная нагрузка на образец 2–10 кг/мм² и температура 500–600 °С. Нагрузка и время деформирования подбирались так, чтобы в кристалле возникало ограниченное количество дислокационных полупетель.

У кристаллов со структурой алмаза плоскостями легкого скольжения являются плоскости типа $\{111\}$, которые образуют тетраэдр Томпсона (рис. 1). Именно в этих плоскостях имеются наиболее слабые атомные связи. В используемой геометрии это будут две боковые грани тетраэдра ($\bar{1}11$) и ($1\bar{1}1$). В каждой из плоскостей скольжения в условиях описанной методики деформирования дислокации располагаются вдоль плотноупакованных направлений $\langle 110 \rangle$.

Согласно геометрии деформирования образца (рис. 1) в каждой из плоскостей скольжения зарождаются полупетли, состоящие из трех участков, расположенных вдоль направлений $\langle 110 \rangle$. Например, для плоскостей скольжения ($1\bar{1}1$) они могут иметь вектора Бюргерса, направленные вдоль $[011]$ или $[\bar{1}01]$, а для плоскостей ($\bar{1}11$), это будут направления $[101]$ и $[0\bar{1}1]$.

После снятия нагрузки образец утончался химической полировкой поверхности (111) кристалла до значений $50 \times 4.75 \times 0.77$ мм.

Приготовленный по описанной методике образец был исследован на лабораторном рентгеновском дифрактометре “ДИТОМ-М”²⁾, схема которого приведена на рис. 2. Источником рентгеновско-

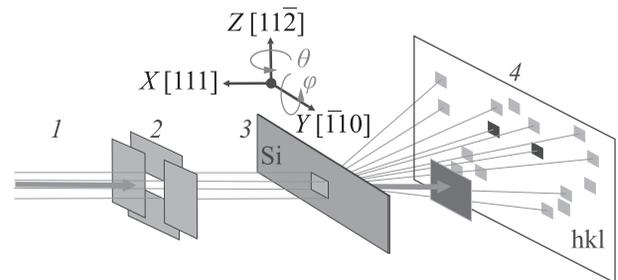


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема эксперимента: 1 – рентгеновский пучок; 2 – система щелей; 3 – держатель с образцом; 4 – двумерный детектор

го излучения служила рентгеновская трубка с молибденовым анодом с размером фокуса 0.4×12 мм. Излучение монохроматизировалось ($K_{\alpha 1}$ -линия Мо, $E = 17.479$ кэВ) с помощью асимметрично срезанного кристалла кремния (111) с коэффициентом асимметрии ~ 10 . Регистрация дифракционных изобра-

²⁾ Патент РФ # 2017144083, 11.12.2018. Асадчиков В. Е., Бузмаков А. В., Дымшиц Ю. М., Золотов Д. А., Шишков В. А. Установка для томотографических исследований образцов // Патент на изобретение # 2674584. 2018.

жений осуществлялась с помощью двумерного детектора Ximea XiRay11 с полем зрения 36×29 мм и размером пикселя 9 мкм. С учетом размеров образца все исследования выполнены в геометрии Лауэ, в условиях экстинкционного контраста при μt порядка 1, где μ – линейный коэффициент поглощения и t – толщина кристалла. Исследуемый кристалл кремния крепился на держателе и настраивался на максимум $K_{\alpha 1}$ -линии (рис. 2, поз. 3). Расстояние “монохроматор-образец” составляло 1000 мм, расстояние “образец-детектор” – 22 мм. Рентгеновские топограммы фиксировались для кристаллографической плоскости $(2\bar{2}0)$ при последовательном сканировании вдоль направления, перпендикулярного падающему пучку (рис. 2, ось Y). Время получения одной топограммы составило 30 мин.

Кроме того, в ряде экспериментов использовался полихроматический пучок для получения лауэграмм и определения векторов Бюргера исследуемых дефектов.

Индексирование экспериментальных лауэграмм производилось с помощью программы LauePt [27], которая позволяет моделировать дифракционные отражения и сопоставлять их с измеренными (рис. 2, поз. 4). При расчете учитывается материал кристалла, его ориентация, углы поворота, размеры зондирующего пучка и окна детектора, расстояние от образца до детектора, спектр лабораторного рентгеновского источника.

С целью восстановления трехмерных изображений были проведены топо-томографические эксперименты с вращением образца вокруг выбранного вектора дифракции $\mathbf{h} = [2\bar{2}0]$ в диапазоне от 0° до 200° с угловым шагом 0.5° (рис. 2, угол φ). Время экспозиции составило 100 с на проекцию.

Полученные результаты и их обсуждение.

Двумерные топографические изображения исследуемого монокристалла для случая монохроматического пучка при отражении от плоскости $(2\bar{2}0)$ показаны на рис. 3. Особое внимание привлекает наличие в образце пересекающихся (X-образных) дефектов. Такие дефекты ранее не наблюдались.

Как уже было отмечено выше, дислокационные петли в монокристаллах кремния Si(111) расположены в плоскостях $(\bar{1}11)$ и/или $(1\bar{1}1)$. Подробно анализировались топограммы от кристаллографических плоскостей типа $\{111\}$ для участка, представленного на рис. 3а. Из рисунка 4 видно, что исследуемые X-образные дефекты не являются поверхностными (царапинами или концентраторами напряжений), а представляют собой пучки дислокаций, расположенные в разных плоскостях скольжения $(\bar{1}11)$

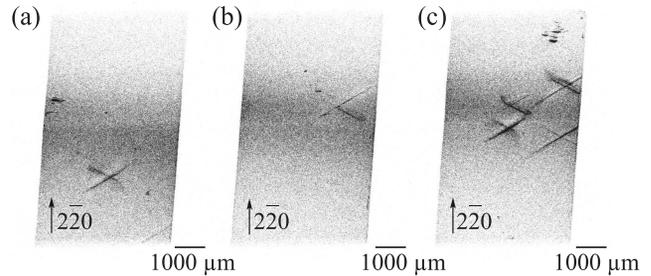


Рис. 3. Рентгеновские проекционные топограммы X-образных дислокационных структур, полученные для исследуемого кристалла при сканировании вдоль оси Y . (a)–(c) – отдельные участки исследуемого кристалла

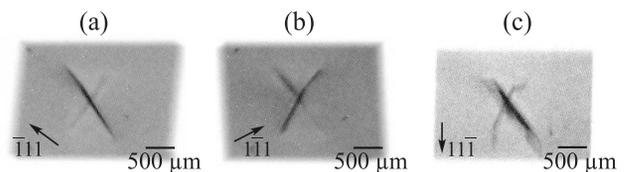


Рис. 4. Топограммы, полученные сканированием по углу φ : (a) – вектор дифракции $\mathbf{h} = [\bar{1}11]$; (b) – $\mathbf{h} = [1\bar{1}1]$; (c) – $\mathbf{h} = [11\bar{1}]$

и $(1\bar{1}1)$. Их поперечная ширина составила 30–40 мкм (3–4 пикселя детектора).

По изображениям на рис. 4 был проведен анализ векторов Бюргера, основанный на сравнении дислокационных картин от одного и того же объема образца, но взятых с разными дифракционными векторами \mathbf{h} . Известно, что если отсутствуют изображения дислокаций, то они соответствуют условию экстинкционного контраста со скалярным произведением векторов Бюргера \mathbf{b} и дифракции, равным нулю. Таким образом, $\mathbf{b} \cdot \mathbf{h} = 0$ для случая винтовой дислокации и $\mathbf{b} \cdot \mathbf{h} \times \mathbf{l} = 0$ – для краевой, где \mathbf{l} – направление линии дислокации [13, 14].

Так, например, для отражений $(\bar{1}11)$ и $(1\bar{1}1)$ (рис. 4а, б) наблюдается частичное погасание рефлексов как для одной, так и для другой кристаллографической плоскости. Исходя из этого, а также геометрии расположения дислокационных полупетель, можно заключить, что вектором Бюргера для дефекта, лежащего в плоскости $(\bar{1}11)$, является направление $[0\bar{1}1]$, а для плоскости $(1\bar{1}1)$ – $[\bar{1}01]$. Анализ изображений для плоскости $(11\bar{1})$ (рис. 4с и 5а) показывает наличие большого количества отдельных дислокационных линий, расположенных близко к друг другу. Этот результат является важным, так как в более ранних работах [7–10] были обнаружены лишь единичные дислокационные

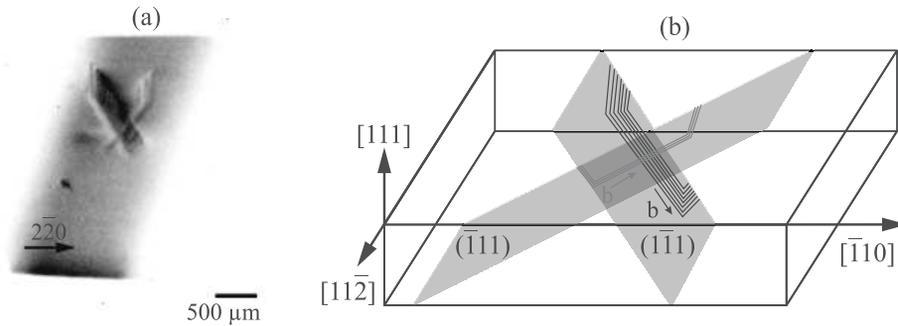


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Экспериментальная топограмма участка с X-образными дефектами для исследуемого образца, вектор дифракции $\mathbf{h} = [2\bar{2}0]$; (b) – схематическое представление

полупетли. Определить их количество и конфигурацию не удастся в силу относительно низкого пространственного разрешения детектора.

Из полученных топограмм (рис. 5а), соответствующих вращению кристалла вокруг вектора дифракции $\mathbf{h} = [2\bar{2}0]$, видно, что скопления дефектов приводят к размытию изображения, что затрудняет дальнейшую 3D реконструкцию. Однако, набор экспериментальных данных от разных кристаллографических плоскостей типа $\{111\}$ и (220) позволяет получить схематическое представление о пространственном расположении исследуемой X-образной дислокационной структуры (рис. 5b), а также оценить протяженность и глубину залегания полупетель. Так для дислокаций, лежащих в плоскости скольжения $(\bar{1}11)$, протяженность составила порядка 1.2 мм и глубина залегания составила порядка 300 мкм; а для плоскости $(1\bar{1}1)$ – порядка 1.5 мм и 350 мкм соответственно.

Кроме того, была рассмотрена другая X-образная дислокационная структура, представленная на рис. 3с. Для ее детального изучения был проведен аналогичный эксперимент с вращением вокруг вектора дифракции $\mathbf{h} = [2\bar{2}0]$ и по полученным дифракционным данным была проведена трехмерная реконструкция.

Для решения задачи топо-томографии, а именно, 3D восстановления изображения дефектов кристаллической решетки, были введены допущения, описанные в [20]: дифрагированное от образца излучение представляет собой плоскопараллельный пучок, при этом падающее на образец рентгеновское излучение равномерно засвечивает весь объект исследования, угол дифракции относительно оси вращения сохраняется при повороте объекта и равен углу Брэгга θ_B . При этих условиях отражающая способность объекта r не является функцией угла поворота, а только пространственных координат $r(x, y, z)$. Поэтому задачу топо-томографии можно решать мето-

дами традиционной (трансмиссионной) томографии. Таким образом, томографическая реконструкция по набору полученных дифракционных проекций производилась методом сопряженных градиентов наименьших квадратов (CGLS), реализованном в пакете ASTRA tomography Toolbox [28]. Результат 3D восстановления X-образной дислокационной структуры представлен на рис. 6.

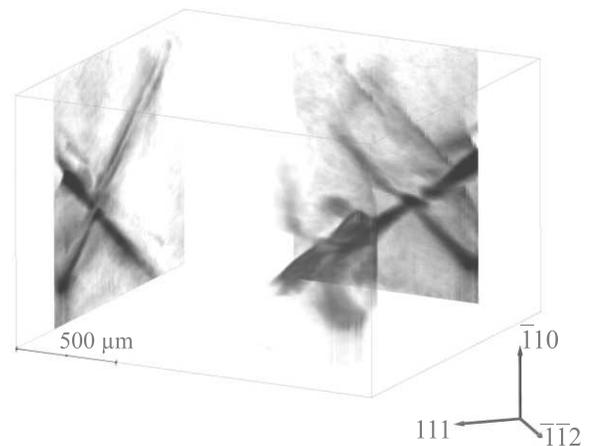


Рис. 6. (Цветной онлайн) Результат 3D-восстановления участка с X-образными дефектами (цветное изображение). Для лучшего восприятия трехмерной картины показаны 2 ортогональные проекции

Как показано в работах [10, 29], размер полупетли и глубину залегания дислокаций можно оценить, зная динамические характеристики дислокаций в изучаемом кристалле. Преимуществом используемого в данной работе топо-томографического подхода по сравнению с двумерными топограммами является возможность непосредственно выделить интересующую плоскость (в том числе и плоскость скольжения дислокации) из трехмерного объема и определить геометрические размеры исследуемого дефек-

та, а также его пространственное расположение. Таким образом, для представленной на рис. 6 дислокационной структуры были оценены размеры и глубины залегания полупетель. Для дислокаций, лежащих в плоскости скольжения ($\bar{1}11$), протяженность составила порядка 1.3 мкм и глубина залегания составила порядка 450 нм; а для плоскости ($1\bar{1}1$) – порядка 1.2 мкм и 360 нм соответственно. Представленные плоские проекции результатов реконструкции (рис. 6) ясно подтверждают сделанное выше утверждение, что в кристалле образуются два близко расположенных, а, возможно, и пересекающихся набора дислокационных полупетель, лежащих однако в различных кристаллографических плоскостях.

Выводы. В работе представлены результаты дифракционных топо-томографических исследований монокристалла кремния с введенными при пластическом изгибе дислокационными полупетлями. В отличие от более ранних работ [12–15] установлено, что в исследуемом монокристалле Si(111) возникли преимущественно скопления близко лежащих дислокаций, которые расположены в разных плоскостях скольжения и образуют X-образные дислокационные структуры. Оценены геометрические размеры и определены вектора Бюргера для наблюдаемых дислокаций. По данным топо-томографического эксперимента выявлено пространственное расположение исследуемых дефектов в кристалле кремния. Экспериментальные данные по выявлению X-образных дислокационных структур, образующихся при четырехпорном изгибе, а также пространственное расположение таких дефектов получены впервые.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части применения томографических алгоритмов и Российского фонда фундаментальных исследований в части поиска дифракционных отражений (проект #18-29-26036_мк), в части анализа экспериментальных данных (проект #19-02-00556_А).

1. A. Fischer, G. Kissinger, G. Ritter, V. Akhmetov, and M. Kittler, *Mater. Sci. Eng. B* **159**, 103 (2009).
2. J. Wittge, A. N. Danilewsky, D. Allen, P. McNally, Z. Li, T. Baumbach, E. Gorostegui-Colinas, J. Garagorri, M. R. Elizalde, D. Jacques, M. C. Fossati, D. K. Bowen, and B. K. Tanner, *J. Appl. Crystallogr.* **43**, 1036 (2010).
3. B. K. Tanner, J. Wittge, D. Allen, M. C. Fossati, A. N. Danilewsky, P. McNally, J. Garagorri, M. R. Elizalde, and D. Jacques, *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 489 (2011).
4. J. M. Yi, Y. S. Chu, T. S. Argunova, J. Z. Domagala, and J. H. Je, *J. Synchrotron Radiat.* **15**, 96 (2008).
5. A. N. Danilewsky, J. Wittge, A. Cröll, D. Allen, P. McNally, P. Vagovič, T. d. S. Rolo, Z. Li, T. Baumbach, E. Gorostegui-Colinas, J. Garagorri, M. R. Elizalde, M. C. Fossati, D. K. Bowen, and B. K. Tanner, *J. Cryst. Growth* **318**, 1157 (2011).
6. B. Tanner, J. Wittge, P. Vagovič, T. Baumbach, D. Allen, P. McNally, R. Bytheway, D. Jacques, M. Fossati, D. Bowen, J. Garagorri, M. Elizalde, and A. Danilewsky, *Powder Diffr.* **28**, 95 (2013).
7. В. Н. Ерофеев, В. И. Никитенко, В. И. Половинкина, Э. В. Суворов, *Кристаллография* **16**, 1 (1971).
8. В. И. Никитенко, *Дислокации и физические свойства полупроводников*, Наука, Л. (1967), с. 30.
9. В. И. Никитенко, А. А. Полянский, *Материалов Всесоюзного совещания по дефектам структуры в полупроводниках*, Ин-т физ. полупроводников СО АН СССР, Новосибирск (1969).
10. В. И. Никитенко, В. Н. Ерофеев, Н. М. Надгорная, *Динамика дислокаций*, Физ.-техн. ин-т низких температур АН УССР, Харьков (1968).
11. E. V. Suvorov, V. I. Polovinkina, V. I. Nikitenko, and V. L. Indenbom, *Phys. Stat. Sol. (a)* **26**, 385 (1974).
12. V. Asadchikov, A. Buzmakov, F. Chukhovskii, I. Dyachkova, D. Zolotov, A. Danilewsky, T. Baumbach, S. Bode, S. Naaga, D. Hänschke, M. Kabukcuoglu, M. Balzer, M. Caselle, and E. Suvorov, *J. Appl. Crystallogr.* **51**, 6 (2018).
13. N. Danilewsky, *Crystal Research and Technology* **55**, 2000012 (2020).
14. В. В. Лидер, *Рентгеновская дифракционная топография*, Юридический Дом Юстицинформ, М. (2020), 120 с.
15. Э. В. Суворов, И. А. Смирнова, *УФН* **185**, 897 (2015).
16. Э. В. Суворов, И. А. Смирнова, *ФТТ* **52**, 2325 (2010).
17. И. Л. Шулпина, И. А. Прохоров, *Кристаллография* **57**, 745 (2012) [I. L. Shul'pina and I. A. Prokhorov, *Crystallogr. Rep.* **57**, 740 (2012)].
18. A. R. Lang, *Acta C Crystallogr.* **12**(3), 249 (1959).
19. G. Borrmann, *Phys. Z.* **42**, 157 (1941).
20. D. Hänschke, A. Danilewsky, L. Helfen, E. Namann, and T. Baumbach, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 21 (2017).
21. Д. А. Золотов, А. В. Бузмаков, Д. А. Елфимов, В. Е. Асадчиков, Ф. Н. Чуховский, *Кристаллография* **62**(1), 12 (2017) [D. A. Zolotov, A. V. Buzmakov, D. A. Elfimov, V. E. Asadchikov, and F. N. Chukhovskii, *Crystallogr. Rep.* **62**(1), 20 (2017)].
22. Д. А. Золотов, В. Е. Асадчиков, А. В. Бузмаков, И. Г. Дьячкова, Ю. С. Кривоносов, Ф. Н. Чуховский, Э. В. Суворов, *Автоматрия* **55**, 29 (2019) [D. A. Zolotov, V. E. Asadchikov, A. V. Buzmakov, I. G. D'yachkova, Yu. S. Krivonosov, F. N. Chukhovskii, and E. V. Suvorov, *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing* **59**, 2 (2019)].

23. A. A. Shiryayev, D. A. Zolotov, O. M. Suprun, S. A. Ivakhnenko, A. A. Averin, A. V. Buzmakov, V. V. Lysakovskiy, I. G. Dyachkova, and V. E. Asadchikov, *CrystEngComm* **20**, 7700 (2019).
24. А. А. Ширяев, Д. А. Золотов, Е. М. Супрун, И. Г. Дьячкова, С. А. Ивахненко, В. Е. Асадчиков, *Письма в ЖЭТФ* **111**(9), 597 (2020) [A. A. Shiryayev, D. A. Zolotov, E. M. Suprun, I. G. Dyachkova, S. A. Ivakhnenko, and V. E. Asadchikov, *JETP Lett.* **111**, 9 (2020)].
25. A. N. Danilewsky, A. Rack, J. Wittge, T. Weitkamp, R. Simon, H. Riesemeier, and T. Baumbach, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **266**, 2035 (2008).
26. T. Fujiwara, S. Dohi, and T. T. Memo, *Defense Academy* **3**, 17 (1963).
27. X. R. Huang, *J. Appl. Crystallogr.* **43**, 926 (2010).
28. W. van Aarle, W. J. Palenstijn, J. Cant, E. Janssens, F. Bleichrodt, A. Dabravolski, J. De Beenhouwer, K. J. Batenburg, and J. Sijbers, *Opt. Express* **24**(22), 25129 (2016).
29. V. N. Erofeev, V. I. Nikitenko, and V. B. Osvenskii, *Phys. Stat. Sol.* **35**, 79 (1969).

Геликоидальное магнитное упорядочение и аномальная электропроводность PdCrO_2 ¹⁾

Ю. Б. Кудасов²⁾

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
607188 Саров, Россия

Саровский физико-технический институт Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”,
607186 Саров, Россия

Поступила в редакцию 13 ноября 2020 г.

После переработки 15 декабря 2020 г.

Принята к публикации 15 декабря 2020 г.

Исследовано влияние геликоидального магнитного поля на дисперсию электронов в одно- и двумерных системах. В PdCrO_2 геликоидальное магнитное упорядочение в диэлектрических прослойках CrO_2 создает необычную спиновую структуру на поверхности Ферми в гексагональных слоях палладия, обеспечивающих электронный транспорт. При этом электрон-фононное рассеяние с перебросом (*umklapp*) оказывается сильно подавленным, что приводит к аномально высокой проводимости при низких температурах, наблюдаемой экспериментально.

DOI: 10.31857/S1234567821030058

1. Введение. Слоистые соединения ABO_2 со структурой делафоссита проявляют разнообразные экзотические свойства: фрустрация и крайне сложная магнитная фазовая диаграмма [1], мультиферроидное поведение [2], аномальные транспортные свойства [3] и т.д. В последнее десятилетие значительное внимание было привлечено к необычному электронному транспорту в PdCoO_2 , PtCoO_2 и PdCrO_2 [4, 3]. Комнатная электропроводность этих веществ достигает рекордных значений среди металлических оксидов. Она сравнима с величиной проводимости в элементарных металлах, таких как алюминий, медь, серебро [3]. Длина свободного пробега в PdCoO_2 при комнатной температуре составляет 700 Å, а при низких температурах увеличивается до 20 мкм (или примерно 10^5 периодов решетки) [5], что предполагает существование необычного механизма электронного транспорта, поскольку длина свободного пробега значительно превышает расстояние между дефектами решетки. Следует также заметить, что крайне медленная релаксация суммарного импульса электронов проводимости приводит к гидродинамическому режиму движения электронов в металлических делафосситах [6, 7].

Структура металлических делафосситов образована двумерными (2D) гексагональными слоями пал-

ладия или платины, которые обеспечивают электронный транспорт. Эти слои разделены диэлектрическими прослойками CoO_2 или CrO_2 [8, 9]. Среди делафосситов с аномальной проводимостью обнаружено соединение с дальним магнитным порядком: в PdCrO_2 при температуре $T_N \approx 38$ К в каждом из слоев CrO_2 возникает 120° магнитная структура, причем киральность в соседних слоях предполагается противоположной [10, 11]. Таким образом, всего появляется 18 магнитных подрешеток. Упорядочение внутри отдельного магнитного слоя может быть описано псевдодипольной моделью, в которой рассматривается суперобмен в присутствии спин-орбитального взаимодействия [11]. Между собой слои CrO_2 связаны мостиками O–Pd–O. Однако, в случае 120° внутрислойного магнитного порядка межслойные магнитные взаимодействия через эти мостики точно компенсируют друг друга [10]. Поэтому в качестве механизма смены киральности в соседних слоях было предложено слабое четырехспиновое взаимодействие [12].

Удельное сопротивление PdCrO_2 резко падает при переходе к трехмерному магнитному упорядочению при T_N [13]. Таким образом, неколлинеарный магнетизм стимулирует переход к состоянию с высокой проводимости в этом соединении. Аномальное поведение магнетотермоэда указывает на существование ближнего магнитного порядка с большой корреляционной длиной при температурах, значительно превышающих T_N [14]. Исследования дифракции

¹⁾См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru.

²⁾e-mail: kudasov@ntc.vniief.ru

нейтронов на монокристалле также демонстрируют развитие двумерных магнитных корреляций выше T_N [15].

Другой интересной проблемой является нетрадиционный аномальный эффект Холла, наблюдающийся в PdCrO_2 [16]. 120° магнитная структура со сменной киральности в соседних слоях дает нулевое значение полной киральности в системе, т.е. PdCrO_2 представляет собой редкий пример аномального эффекта Холла при нулевой киральности [10].

Поверхность Ферми металлических дельтафосфитов была тщательно исследована [5, 15, 17, 18]. Было обнаружено, что она имеет почти двумерный характер во всех этих соединениях. Сечение поверхности Ферми PdCrO_2 в плоскости ab имело скругленную гексагональную форму, соответствующую полузаполненной зоне проводимости [5]. Неколлинеарное магнитное упорядочение в PdCrO_2 приводило к реконструкции поверхности Ферми типа $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. В результате этого один из ее листов находился вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна (γ -лист), [17, 18]. Также возникали карманы в углах магнитной зоны Бриллюэна (α -лист).

В настоящем письме обсуждается необычное поведение электронов проводимости в слоях палладия под действием геликоидального магнитного упорядочения в прослойках CrO_2 в PdCrO_2 . Сначала кратко исследуется зонная структура в простой одномерной системе. Предлагаемый подход несколько отличается от используемого ранее в работе [19] и легко обобщается на двумерную модель слоев палладия в эффективном поле магнитных слоев. Затем обсуждается электрон-фононное взаимодействие и транспортные свойства в двумерной модели PdCrO_2 .

2. 1D модель. Рассмотрим простую модель воздействия периодического геликоидального магнитного поля на подвижные носители заряда со спином $1/2$. Уравнение Шредингера такой системы может быть представлено в следующем виде:

$$\left[H_0 \hat{\mathbf{I}} + \mathbf{h}(\mathbf{r}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] \Psi = \mathcal{E} \Psi, \quad (1)$$

где $H_0 = -\Delta/2 + V(\mathbf{r})$ – немагнитная часть гамильтониана, т.е. сумма операторов кинетической энергии и периодического кристаллического потенциала $V(\mathbf{r})$, $\hat{\mathbf{I}}$ – единичная матрица, $\mathbf{h}(\mathbf{r})$ – магнитное поле, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ – матрицы Паули и Ψ – волновая функция в виде двухкомпонентного спинора.

Пусть одномерная (1D) структура ориентирована вдоль оси z . Тогда в выражении (1) полагаем $\mathbf{r} \equiv z$,

$\Delta \equiv \partial^2/\partial z^2$. Магнитное поле лежит в плоскости xy и имеет вид спирали с периодом a_m :

$$h_x(z) = h_0 \cos(Kz), \quad h_y(z) = h_0 \sin(Kz), \quad (2)$$

где h_0 – константа, $K = 2\pi/a_m$. Для простоты изложения, будем считать, что a_m кратен постоянной решетки a ($a_m > a$). Схематично одномерная структура с геликоидальным магнитным полем показана на рис. 1а.

Коэффициенты Фурье для магнитного потенциала могут быть найдены интегрированием по магнитной элементарной ячейке:

$$\hat{U}_{\mathbf{K}} = \frac{1}{V} \int \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}) \mathbf{h}(\mathbf{r}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} d\mathbf{r}, \quad (3)$$

где \mathbf{K} – вектор обратной (магнитной) решетки. Поскольку $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ являются эрмитовыми операторами, $\hat{U}_{-\mathbf{K}} = \hat{U}_{\mathbf{K}}^\dagger$. После подстановки выражения (2) в (3) мы получаем

$$\hat{U}_{\mathbf{K}} = \frac{h_0}{2} (\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y). \quad (4)$$

Предполагая магнитный потенциал слабым возмущением, мы можем применить следующий простой анзац в качестве пробной функции

$$|\Psi_{\mathbf{k}i}\rangle = C_{\mathbf{k}i\sigma} |\mathbf{k}, \sigma\rangle + C_{\mathbf{k}-\mathbf{K}i\bar{\sigma}} |\mathbf{k} - \mathbf{K}, \bar{\sigma}\rangle, \quad (5)$$

где $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ – невозмущенное состояние (без магнитного поля), $C_{\mathbf{k}i\sigma}$ – комплексные коэффициенты, $\bar{\sigma}$ – значение спина, противоположное σ , индекс i принимает значения 1 и 2, что соответствует состояниям $\uparrow\downarrow$ и $\downarrow\uparrow$. Тогда можно определить дисперсионные кривые $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ при помощи традиционного подхода [20]

$$(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^0) (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0) \hat{\mathbf{I}} = \hat{U}_{\mathbf{K}} \hat{U}_{\mathbf{K}}^\dagger, \quad (6)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}^0$ – энергия невозмущенных электронов. Подстановка выражения (4) приводит к правой части (6) следующего вида

$$\hat{U}_{\mathbf{K}} \hat{U}_{\mathbf{K}}^\dagger = h_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Тогда из формулы (6) видно, что состояния со спином вверх имеют дисперсию невозмущенных электронов $\varepsilon_{\mathbf{k}}^0$, а в исходной зоне состояний со спином вниз возникает щель. Для электронов с противоположным волновым вектором заменяем $\mathbf{K} \rightarrow -\mathbf{K}$, что приводит к аналогичному результату, но с перестановкой спинов. Заметим, что нарушение симметрии $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{-\mathbf{k}\sigma}$ связано с тем, что оператор $\hat{U}_{\mathbf{K}}$ не является нормальным [21].

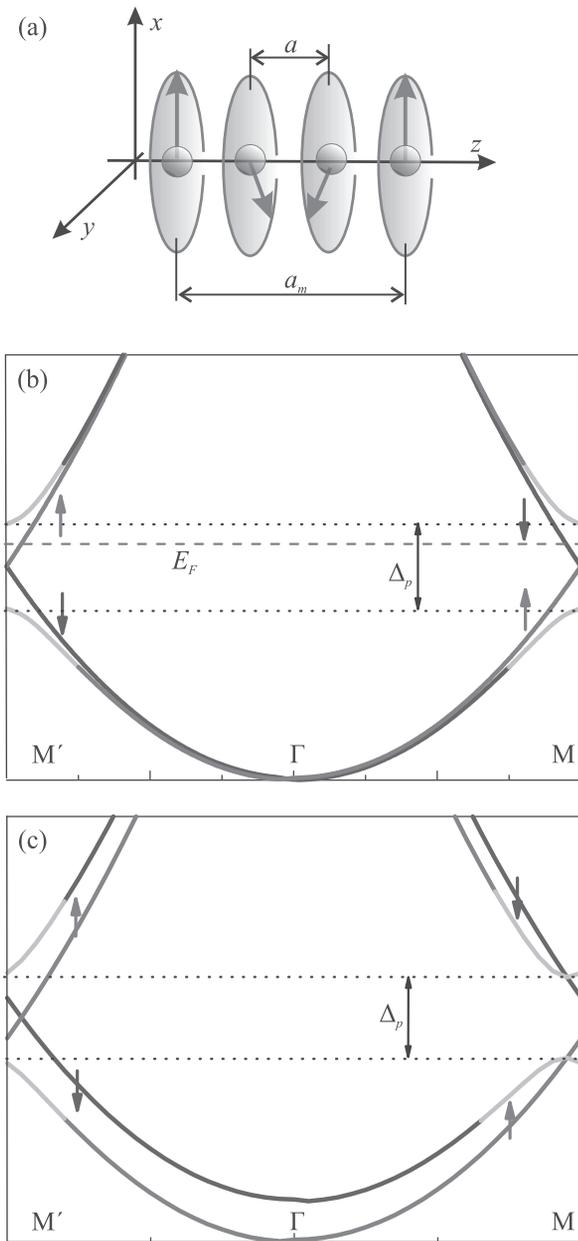


Рис. 1. (Цветной онлайн) Электроны в геликоидальном магнитном поле: (a) – схематичный вид 1D цепочки; (b) – зонная структура в 1D и 2D (вдоль направления $M'-\Gamma-M$) моделях при $h_z = 0$ и (c) – при $h_z = h_0/2$. Спиновые состояния (спин-вверх и спин-вниз) обозначены цветом и стрелками, состояния с сильным перемешиванием (см. формулу (5)) показаны серой линией

Дисперсионные кривые в магнитной зоне Бриллюэна для $V(\mathbf{r}) = 0$ показаны на рис. 1b. В области энергий шириной Δ_p возникает пара невырожденных ветвей с противоположными спинами. Далее будем называть эту область невырожденной зоной (по

аналогии с запрещенной и разрешенной зонами). Законы дисперсии невырожденных ветвей совпадают с $\varepsilon_{\mathbf{k}}^0$. При этом выполняются условия $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{-\mathbf{k}-\sigma}$, которые обычно характерны для системы со спин-орбитальным взаимодействием. В действительности, ветви с противоположными спинами попарно симметричны относительно Γ точки. Это хорошо видно, если добавить однородное магнитное поле вдоль оси z . Для этого в обе скобки в правой части выражения (6) необходимо ввести слагаемое $\hat{\sigma}_z h_z$. Тогда дисперсионные кривые примут вид, представленный на рис. 1c.

Такая одномерная зонная структура проявляет необычные транспортные свойства. Видно, что если уровень Ферми E_F лежит в невырожденной зоне, как это показано на рис. 1b, упругое рассеяние назад без переворота спина запрещено. Кроме того, суммарный спин состояний ниже уровня Ферми с положительными и отрицательными волновыми векторами различен (рис. 1b). Таким образом, в системе существует постоянный спиновый ток.

3. 2D модель зонной структуры. Магнитное взаимодействие ближайших ионов хрома и палладия в PdCrO_2 , на первый взгляд, должно определяться косвенным обменом через ион кислорода, как это видно из фрагмента структуры на рис. 2a. Однако в случае 120° упорядочения в верхнем и нижнем слоях CrO_2 эффективные поля трех магнитных подрешеток на ионе Pd точно компенсируют друг друга. Поэтому более слабые магнитные взаимодействия определяют связь магнитных слоев с электронами проводимости [10, 12].

Предположим, что прямое обменное взаимодействие между ионами хрома и электронами проводимости создает некоторое эффективное поле в слое палладия. Его можно описать тем же гамильтонианом (1), где \mathbf{r} – 2D радиус-вектор в плоскости слоя. Сначала рассмотрим воздействие одного магнитного слоя хрома, например, нижнего на рис. 2a. Тогда эффективное поле примет вид

$$\mathbf{h}(\mathbf{r}) = \sum_{i=A,B,C} f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{m}_i \hat{\sigma}, \quad (8)$$

где индексы A, B, C обозначают магнитные подрешетки хрома в нижнем слое, $f(\mathbf{r})$ – некоторая гладкая функция, описывающая распределение обменного потенциала вблизи иона Cr^{3+} , \mathbf{r}_i – проекция положения ядра i -го иона хрома на плоскость палладия, \mathbf{m}_i – его магнитный момент. Положения ионов и функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ схематично изображены

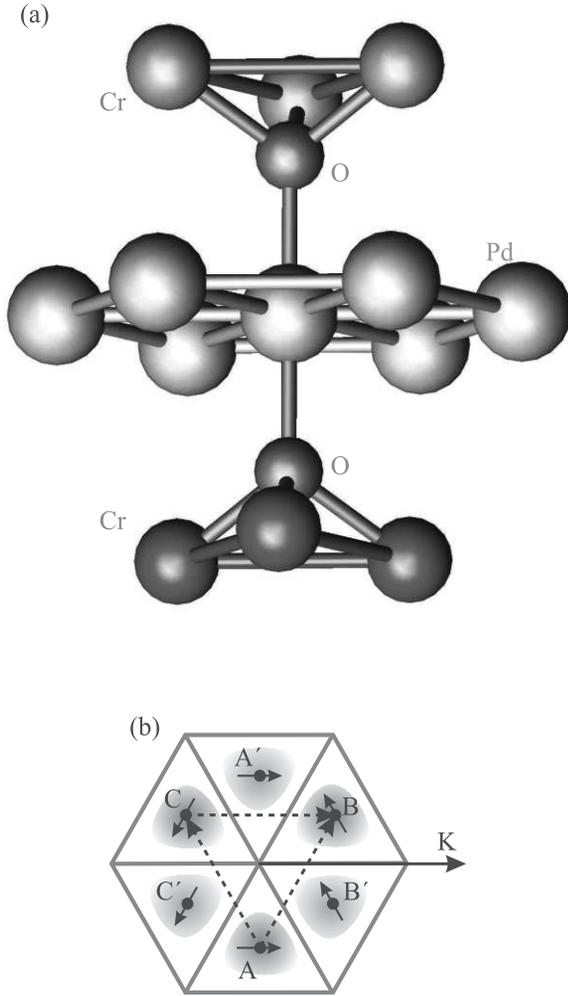


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Схематичный вид гексагонального слоя палладия с прилегающими слоями PdCrO_2 . (б) – Магнитная элементарная ячейка: позиции ионов хрома соответствуют обозначениям магнитных подрешеток в тексте, направления магнитных моментов ионов хрома показаны стрелками. Закрашенные области обозначают функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$

на рис. 2b. Для простоты мы предположим, что магнитные моменты \mathbf{m}_i лежат в плоскости xy ³⁾.

Вектора $\mathbf{r}_{AB} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$, $\mathbf{r}_{CA} = \mathbf{r}_C - \mathbf{r}_A$ и $\mathbf{r}_{CB} = \mathbf{r}_C - \mathbf{r}_B$ являются векторами трансляции кристаллической решетки. С другой стороны, они соответствуют одной третьей вектора трансляции для магнитной трехподрешеточной структуры. Тогда интегрирование в формуле (3) приводит к следующему выражению

³⁾На самом деле, эта плоскость в PdCrO_2 вертикальная, т.е. она содержит ось z [10]. Однако, такое упрощение не влияет на конечный результат.

$$\hat{U}_{\mathbf{K}} = \sum_{i=A,B,C} F \alpha_i \mathbf{m}_i \hat{\sigma}, \quad (9)$$

где $F = \int \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}) f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) d\mathbf{r}/V$ и α_i – коэффициенты, принимающие следующие значения: 1 и $\exp(\pm 2\pi/3)$. Для вектора \mathbf{K} , ориентированного, как показано на рис. 2b, мы получаем $\alpha_A = 1$, $\alpha_B = \exp(-2\pi/3)$ и $\alpha_C = \exp(2\pi/3)$.

Магнитные моменты подрешеток хрома, соответствующие 120° упорядочению могут быть заданы следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_A &= m_0 (\mathbf{i} \cos(\phi) + \mathbf{j} \sin(\phi)), \\ \mathbf{m}_B &= m_0 (\mathbf{i} \cos(\phi + 2\pi\chi/3) + \mathbf{j} \sin(\phi + 2\pi\chi/3)), \\ \mathbf{m}_C &= m_0 (\mathbf{i} \cos(\phi - 2\pi\chi/3) + \mathbf{j} \sin(\phi - 2\pi\chi/3)), \end{aligned} \quad (10)$$

где \mathbf{i} и \mathbf{j} – единичные базисные вектора в плоскости xy , $\chi = \pm 1$ – киральность и ϕ – начальный угол [10]. Подставляя эти выражения в (9), получаем коэффициенты Фурье для магнитного потенциала:

$$\hat{U}_{\mathbf{K}} = \frac{3}{2} e^{i\chi\phi} F m_0 (\hat{\sigma}_x - i\chi \hat{\sigma}_y). \quad (11)$$

Это выражение по форме совпадает с формулой (4). Поэтому дисперсионные кривые вдоль направления $M'-\Gamma-M$ оказываются такими же, как и для 1D модели (рис. 1b). Используя анзац (5), получаем ширину невырожденной зоны $\Delta_p = 3Fm_0$ независимо от киральности и начального угла. Смена киральности приводит просто к перестановке спинов. Замена $\mathbf{K} \rightarrow -\mathbf{K}$ приводит к такому же эффекту.

Чтобы привести модель к более реалистичному виду для описания электронной структуры PdCrO_2 , рассмотрим теперь пару магнитных слоев, прилегающих к слою палладия (рис. 2а). Прямыми вычислениями легко показать, что в случае противоположной киральности верхнего и нижнего слоев мы получаем обычную щель между вырожденными по спину ветвями. Однако, если киральности одинаковые, зонная структура оказывается сходной с рассмотренной выше для одиночного магнитного слоя. Единственное существенное отличие заключается в том, что ширина невырожденной зоны становится анизотропной и зависит от разности $\phi_t - \phi_b$, где индексы t и b обозначают верхний и нижний магнитный слой, соответственно. Например, если $\phi_t = \phi_b = 0$ и вектор \mathbf{K} лежит вдоль на линии симметрии эффективных полей верхнего и нижнего магнитных слоев, как показано на рис. 2b, величина ширины невырожденной зоны равна $\Delta_p = 12Fm_0$. Для других ориентаций вектора обратной решетки получаем $\Delta_p = 3Fm_0$.

Предположим, что верхний и нижний слои имеют одинаковую киральность. В действительности, вы-

ше уже отмечалось, что дифракция нейтронов в монокристаллах PdCrO_2 указывает на противоположный знак χ в соседних слоях хрома [10]. Мы обсудим это несоответствие ниже. Реконструированная поверхность Ферми в PdCrO_2 близка к границе магнитной зоны Бриллюэна (γ -лист). Это означает, уровень Ферми лежит в невырожденной зоне, например, как показано на рис. 1b пунктирной линией. Соответствующая форма поверхности Ферми для γ -листа изображена на рис. 3. Она состоит из участков с раз-

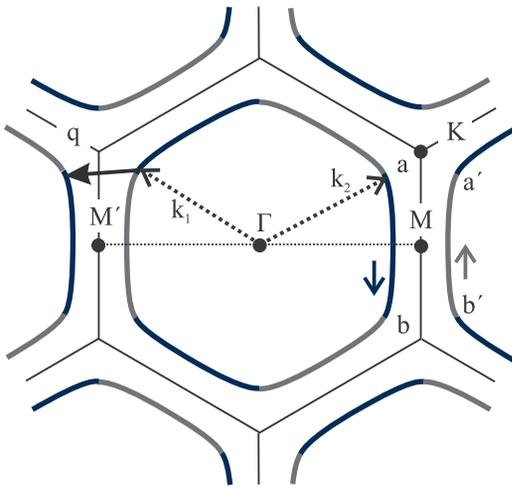


Рис. 3. (Цветной онлайн) Поверхность Ферми и рассеяние электронов с перебросом. Спиновые состояния отмечены цветом и стрелками. Начальный (\mathbf{k}_1) и конечный волновые вектора электрона, а также волновой вектор фонона (\mathbf{q}) показаны пунктирными и сплошной стрелками

личными спиновыми состояниями, которые обозначены цветом и стрелками. Вблизи линии Γ - K анзац (5) становится некорректным из-за дополнительного вырождения. Это приводит к перемешиванию спиновых состояний в области пересечения линии Γ - K и γ -листа.

4. Электрон-фононное рассеяние. Приступая к исследованию транспортных свойств 2D зонной структуры, полученной выше (рис. 3), мы, как обычно, предполагаем, что температурная зависимость проводимости при низкой температуре определяется электрон-фононным взаимодействием [20, 22].

Удельное сопротивление, связанное с электрон-фононным взаимодействием, можно определить при помощи вариационной процедуры [22–26]. Без учета эффекта увлечения фононов его можно представить в следующем виде:

$$\rho(T) = \frac{A}{T} \times \iint \frac{[\mathbf{K}_{21}\mathbf{u}]^2 [\mathbf{K}_{21}\boldsymbol{\xi}(\mathbf{q})]^2 w^2(\mathbf{K}_{21})}{(\exp[\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{kT}] - 1) (1 - \exp[-\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{kT}])} \frac{dS dS'}{v_F v'_F}, \quad (12)$$

где $\mathbf{K}_{21} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$ – вектор рассеяния, \mathbf{u} – единичный вектора вдоль направления электрического поля, $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{q})$ – вектор поляризации фонона (единичный вектор вдоль направления смещения атомов), \mathbf{q} – волновой вектор фонона, $w(\mathbf{K}_{21})$ – форм-фактор, $\varepsilon_{\mathbf{q}}$ – энергия фонона, k – константа Больцмана, T – температура, dS и dS' – элементы поверхности Ферми для исходного и рассеянного электронов (для 2D системы – элементы дуги), а v_F и v'_F – соответствующие фермиевские скорости. В выражении (12) для простоты опущено суммирование по ветвям дисперсионных кривых фононов и предполагается взаимодействие электронов только с продольными акустическими фононами. Справедливость этого предположения будет видна ниже.

В удельное сопротивление, определяемое формулой (12), вносят вклад два типа процессов рассеяния: нормальное и с перебросом. Мы не будем останавливаться на нормальном рассеянии, потому что оно в рассматриваемой структуре аналогично тому, что имеет место в обычных квазидвумерных металлах. Хорошо известно [22], что при низкой температуре релаксацию импульса электрон-фононной системы в целом и, следовательно, удельное сопротивление определяет рассеяние с перебросом (*umklapp*). В случае замкнутой поверхности Ферми оно приводит к вкладу в удельное сопротивление следующего вида [24]: $\rho_U \propto T^n \exp(-\varepsilon_{qm}/T)$, где ε_{qm} – энергия фонона в процессе переброса с минимальным волновым вектором, n – некоторая константа, зависящая от формы поверхности Ферми и особенностей фононного спектра.

При низких температурах в процессах рассеяния участвуют фононы только с малыми волновыми векторами. Поэтому рассеяние с перебросом между дугами ab и $a'b'$ на рис. 3 должны давать основной вклад в ρ_U [22]. Однако, при электрон-фононном взаимодействии сохраняется спин электрона [20]. Поэтому переход электрона между дугами ab и $a'b'$ оказывается запрещенным (рис. 3). Процессы переброса с малыми волновыми векторами \mathbf{q} возможны только для состояний вблизи точки K , как показано на рис. 3. Они охватывают лишь небольшие области вблизи углов поверхности Ферми.

Рассмотрим подавление электрон-фононного рассеяния с перебросом при низких температурах подробнее. Как обычно, заменим $[\mathbf{K}_{21}\mathbf{u}]^2 \approx aK_{12}^2$, где a – константа (для кубических кристаллов $a = 1/3$).

Из рисунка 3 видно, что вектор рассеяния \mathbf{K}_{21} почти параллелен $\xi(\mathbf{q})$, поэтому в рассеянии участвуют только продольные фононы. Для простоты будем считать фермиевскую скорость изотропной, пренебрежем зависимостью форм-фактора от вектора рассеяния и будем считать γ -лист поверхности Ферми правильным шестиугольником и $\varepsilon_{\mathbf{q}} = \hbar u|\mathbf{q}|$, где u – скорость продольной акустической волны. Тогда интегрирование в выражении (12) для рассеяния между дугами ab и $a'b'$ в пределе низких температур приводит к следующему вкладу в удельное сопротивление:

$$\rho_U^{ab} \propto T^{-1/2} \exp(-T_0/T), \quad (13)$$

где $T_0 = \hbar u q_0/k$, q_0 – расстояние между дугами ab и $a'b'$. Аналогичное вычисление для рассеяния в углу поверхности Ферми дает

$$\rho_U^c \approx \frac{4T}{\sqrt{3}T_{ab}} \rho_U^{ab}, \quad (14)$$

где $T_{ab} = \hbar u q_{ab}/k$, q_{ab} – длина дуги ab . Выражение (14) имеет простой физический смысл: процессы переброса в ρ_U^c охватывают небольшую часть поверхности Ферми в углах зоны Бриллюэна, которая сужается с уменьшением температуры.

Полное удельное сопротивление для процессов переброса состоит из суммы (13) и (14). Из фотоэмиссионных спектров при низкой температуре можно оценить параметры γ -листа реконструированной поверхности Ферми [25]: $q_0 = 0.3 \text{ \AA}$ и $q_{ab} = 0.7 \text{ \AA}$, что дает значения $T_0 = 110 \text{ K}$ и $T_{ab} = 270 \text{ K}$ (предполагается $u = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$). Видно, что вклад процессов переброса в удельное сопротивление сам по себе слабый из-за экспоненциального множителя. Кроме того, видно, что $\rho_U^{ab} \gg \rho_U^c$, поэтому подавление процессов переброса между прилегающими дугами листов поверхности Ферми (ρ_U^{ab}) за счет спиновой структуры приводит дополнительно к снижению удельного сопротивления переброса примерно на порядок (при $T < T_N$).

Когда процессы переброса слабые, низкотемпературное удельное сопротивление определяется ρ_U благодаря эффекту увлечения фононов [26]: $\rho = \gamma \rho_U$, где γ – некоторый множитель порядка единицы. Таким образом, электрон-фононное удельное сопротивление в PdCrO₂ оказывается аномально низким. В то же время, нормальное рассеяние остается примерно таким же, как и в обычных металлах. Такая ситуация приводит к необычному гидродинамическому течению электронов [6].

5. Обсуждение. Как отмечалось выше, невырожденная зона возникает только в случае одинако-

вой киральности в соседних магнитных слоях, прилегающих к слою палладия. Однако, дифракция нейтронов на монокристалле и порошковая дифракция рентгеновского излучения указывает на переменную киральность в соседних слоях CrO₂ [10, 11]. С другой стороны, ширина магнитных брэгговских пиков соответствуют слабо коррелированной магнитной структуре вдоль оси z с корреляционной длиной около 97 \AA в отличие от хорошо упорядоченной структуры в плоскости [15]. Следовательно, существует значительная доля слоев палладия, находящихся на границах доменов, в соседних магнитных слоях которых киральности одинаковые. Эти слои обеспечивают высокую электропроводность вещества в целом. Это предположение может быть проверено, например, при помощи импедансной спектроскопии.

Выше T_N в PdCrO₂ наблюдается магнитный двумерный ближний порядок [15]. Причем он сохраняется до довольно высоких температур [14, 27]. В частности, при исследовании электронного спинового резонанса наблюдались следы кирального упорядочения вплоть до комнатных температур [27]. Поэтому предложенный механизм аномальной проводимости может быть применен и к парамагнитной фазе этого соединения.

Хотя PdCoO₂ и PtCoO₂ не обладают дальним магнитным порядком, аномальный эффект Холла, который возникает в магнитных поверхностных слоях [28], а также чрезвычайно высокое магнитосопротивление [29] указывает на роль ближнего магнитного порядка в этих соединениях. Следует также заметить, что хотя ионы Co³⁺ в октаэдрическом окружении номинально находятся в немагнитном состоянии, они могут обеспечивать сильное косвенное обменное взаимодействие (как, например, в Ca₃Co₂O₆ [30]). Таким образом, модель, предложенная в данной работе, может быть распространена на парамагнитные соединения с сильным ближним магнитным порядком.

В заключение, в работе исследуется формирование необычной 2D зонной структуры под действием кирального эффективного поля. Отметим, что совсем недавно необычная спиновая структура на поверхности Ферми, индуцированная киральной кристаллической структурой, была экспериментально обнаружена в теллуре [31]. В слоях палладия в PdCrO₂ спиновая структура индуцируется парой прилегающих магнитных слоев с 120° упорядочением и одинаковой киральностью. Рассеяние назад без переворота спина в полученной зонной структуре запрещено независимо от механизма рассеяния. Электрон-фононное рассеяние с перебором оказы-

вается сильно подавленным, что приводит к эффекту увлечения фононов, резкому снижению удельного сопротивления и гидродинамическому течению электронов проводимости. Подробное обсуждение квазидвумерной зонной структуры и количественные расчеты удельного сопротивления будут представлены отдельно.

1. T. T. A. Lummen, C. Strohm, H. Rakoto, A. A. Nugroho, and P. H. M. van Loosdrecht, *Phys. Rev. B* **80**, 012406 (2009).
2. T. Arima, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 073702 (2007).
3. A. P. Mackenzie, *Rep. Prog. Phys.* **80**, 032501 (2017).
4. V. Eyert, R. Frésard, and A. Maignan, *Chem. Mater.* **20**, 2370 (2008).
5. C. W. Hicks, A. S. Gibbs, A. P. Mackenzie, H. Takatsu, Y. Maeno, and E. A. Yelland, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 116401 (2012).
6. T. Scaffidi, N. Nandi, B. Schmidt, A. P. Mackenzie, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 226601 (2017).
7. P. J. W. Moll, P. Kushwaha, N. Nandi, B. Schmidt, and A. P. Mackenzie, *Science* **351**, 1061 (2016).
8. F. Lechermann, *Phys. Rev. Materials* **2**, 085004 (2018).
9. K. P. Ong, J. Zhang, J. S. Tse, and P. Wu, *Phys. Rev. B* **81**, 115120 (2010).
10. H. Takatsu, G. Nénert, H. Kadowaki, H. Yoshizawa, M. Enderle, S. Yonezawa, Y. Maeno, J. Kim, N. Tsuji, M. Takata, Y. Zhao, M. Green, and C. Broholm, *Phys. Rev. B* **89**, 104408 (2014).
11. M. D. Le, S. Jeon, A. I. Kolesnikov, D. J. Voneshen, A. S. Gibbs, J. S. Kim, J. Jeong, H.-J. Noh, C. Park, J. Yu, T. G. Perring, and J.-G. Park, *Phys. Rev. B* **98**, 024429 (2018).
12. C. Park and J. Yu, *cond-mat.str-el/2001.06834v1* (2020).
13. H. Takatsu, S. Yonezawa, C. Michioka, K. Yoshimura, and Y. Maeno, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 012198 (2010).
14. S. Arsenijević, J. M. Ok, P. Robinson, S. Ghannadzadeh, M. I. Katsnelson, J. S. Kim, and N. E. Hussey, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 087202 (2016).
15. D. Billington, D. Ernsting, T. E. Millichamp, C. Lester, S. B. Dugdale, D. Kersh, J. A. Duffy, S. R. Giblin, J. W. Taylor, P. Manuel, D. D. Khalyavin, and H. Takatsu, *Sci. Rep.* **96**, 027212 (2006).
16. H. Takatsu, S. Yonezawa, S. Fujimoto, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 13720 (2010).
17. J. M. Ok, Y. J. Jo, K. Kim, T. Shishidou, E. S. Choi, H. J. Noh, T. Oguchi, B. I. Min, and J. S. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 176405 (2013).
18. C. W. Hicks, A. S. Gibbs, L. Zhao, P. Kushwaha, H. Borrmann, A. P. Mackenzie, H. Takatsu, S. Yonezawa, Y. Maeno, and E. A. Yelland, *Phys. Rev. B* **92**, 014425 (2015).
19. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *Phys. Rev. B* **81**, 094407 (2010).
20. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Brooks/Cole Publishing Company, Belmont (1976).
21. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Физматлит, М. (2004).
22. J. M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, Oxford (1960).
23. G. Grimvall, *The Electron-Phonon Interaction in Metals*, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, N.Y., Oxford (1981).
24. R. J. M. van Vucht, H. van Kempen, and P. Wyder, *Rep. Prog. Phys.* **48**, 853 (1985).
25. H.-J. Noh, J. Jeong, B. Chang, D. Jeong, H. S. Moon, E.-J. Cho, J. M. Ok, J. S. Kim, K. Kim, B. I. Min, H.-K. Lee, J.-Y. Kim, B.-G. Park, H.-D. Kim, and S. Lee, *Sci. Rep.* **4**, 3680 (2014).
26. M. Kaveh and N. Wiser, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 1374 (1972).
27. M. Hemmida, H.-A. Krug von Nidda, and A. Loidl, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 053707 (2011).
28. T. Harada, K. Sugawara, K. Fujiwara, M. Kitamura, S. Ito, T. Nojima, K. Horiba, H. Kumigashira, T. Takahashi, T. Sato, and A. Tsukazaki, *Phys. Rev. Res.* **2**, 013282 (2020).
29. H. Takatsu, J. J. Ishikawa, S. Yonezawa, H. Yoshino, T. Shishidou, T. Oguchi, K. Murata, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 056601 (2013).
30. Yu. B. Kudasov, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027212 (2006).
31. M. Sakano, M. Hirayama, T. Takahashi, S. Akebi et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **124**, 136404 (2020).

Скошенное магнитное межслойное упорядочение в $[\text{Fe}(3.0 \text{ нм})/\text{Cr}(1.2 \text{ нм})]_{10}$ структуре, выявленное методом синхротронной мессбауэровской рефлектометрии с поляризационным анализом

Р. А. Баулин^{+*1)}, М. А. Андреева⁺¹⁾, А. И. Чумаков^{×*}, Д. Бессас[×], Б. С. Рошин[°], Д. Н. Каримов[°],
В. Е. Асадчиков[°]

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

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

[×] ESRF-The European Synchrotron, CS 38043 Grenoble, France

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

Поступила в редакцию 8 декабря 2020 г.

После переработки 16 декабря 2020 г.

Принята к публикации 16 декабря 2020 г.

Мессбауэровские спектры отражения, измеренные для $[\text{Fe}(3.0 \text{ нм})/\text{Cr}(1.2 \text{ нм})]_{10}$ структуры в брэгговском максимуме $1/2$ порядка, соответствующего удвоению периода, выявили формирование скошенной антиферромагнитной структуры под действием внешнего магнитного поля $B^{\text{ext}} = 0.06 \text{ Т}$, приложенного перпендикулярно плоскости рассеяния. Этот результат неопровержимо следует из появления 2-й и 5-й линий в мессбауэровском секстете, которые должны быть подавлены при любой симметричной ориентации магнитного сверхтонкого поля в двух слоях ^{57}Fe в одном магнитном периоде. В эксперименте применен поляризационный анализ отраженного пучка и показано, что этот новый подход упрощает вид угловых зависимостей и спектров отражения, поскольку он исключает interfering вклад нерезонансного рассеяния, и улучшает достоверность интерпретации данных.

DOI: 10.31857/S123456782103006X

Антиферромагнитная (АФ) спинтроника, интенсивно развивающаяся в последние годы [1, 2], требует детального анализа особенностей магнитного упорядочения в многослойных наноструктурах и стимулирует развитие соответствующих методов исследования. Эффект гигантского магнетосопротивления для $[\text{Fe}/\text{Cr}]_n$ многослойных структур, имеющих АФ упорядочение между слоями Fe при определенных толщинах прослойки Cr [3], было обнаружено еще в 1988 г. [4], что впоследствии привело к присуждению Нобелевской премии в 2007 г. Альберту Ферту и Петеру Грюнбергу за исследование этого эффекта в различных мультислоях и его применениях. Сначала рассматривалась простейшая коллинеарная модель АФ упорядочения, диагностируемая по наличию дополнительного максимума на угловых зависимостях зеркального отражения нейтронов или ядерно-резонансного излучения [5–7]. При дальней-

ших исследованиях оказалось, что разворот намагниченности под действием поля происходит не одновременно для всей структуры, и начальное “АФ” состояние оказывается более сложным [8–18]. АФ межслойное упорядочение стимулирует формирование скирмионов на поверхности таких слоев [19].

Синхротронная мессбауэровская рефлектометрия является эффективным методом для исследования профиля распределения намагниченности в тонких пленках и многослойных структурах. В отличие от стандартных методов рефлектометрии поляризованных нейтронов [5, 8–10], мессбауэровская рефлектометрия может быть дополнена измерением мессбауэровских временных или энергетических спектров зеркального отражения при различных углах скольжения падающего излучения θ , что предоставляет дополнительную информацию о распределении по глубине магнитного сверхтонкого поля \mathbf{V}_{hf} на резонансных ядрах и ориентации магнитного момента. Так, методом мессбауэровской рефлектометрии обнаружено возникновение спин-

¹⁾ e-mail: baulin.roman@physics.msu.ru;
mandreeva1@yandex.ru

флоп эффекта под действием внешнего магнитного поля B^{ext} [7, 16–18], наличие неколлинеарного магнитного упорядочения в мультислоях $[\text{Fe}/\text{FeO}]_n$ [13], изменение по глубине направления намагниченности при напылении ^{57}Fe разнонаправленными потоками атомов [14], обнаружение спин-реориентационного перехода при росте эпитаксиального слоя ^{57}Fe на поверхности $\text{W}(110)$ [15], сложную вариацию профиля намагниченности под действием приложенного поля [16] и формирование двойной-спиральной магнитной структуры в $[\text{Fe}/\text{Cr}]_n$ [17].

Следует в то же время отметить, что при исследовании сложных неколлинеарных и спиральных магнитных структур имеет место известная при обработке рефлектометрических спектров неоднозначность интерпретации, усложненная, к тому же, применяемым до последнего времени временным способом регистрации ядерно-резонансного рассеяния [20]. Измерение мессбауэровских спектров на энергетической шкале стало возможным после инсталляции ядерных монохроматоров на некоторых синхротронных станциях [21, 22]. Важным усовершенствованием метода, недавно опробованным нами и позволяющим решить некоторые неопределенности, является поляризационный анализ отраженного пучка [23, 24]. Выделение в отраженном пучке “повернутой” поляризации ($\pi \rightarrow \sigma'$), возникающей только при ядерно-резонансном рассеянии, исключает интерферирующий вклад в отраженный сигнал обычного релеевского рассеяния на электронных оболочках, что упрощает вид угловых кривых и мессбауэровских спектров $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения.

Эксперимент проведен на станции ядерно-резонансного рассеяния ID18 [25] Европейского синхротрона (ESRF, Гренобль, Франция) с действующим “синхротронным мессбауэровским источником” (SMS – *Synchrotron Mossbauer Source* [22]), работающим на чисто ядерном отражении (111) от монокристалла $^{57}\text{FeBO}_3$. Использование такого ядерного монохроматора с шириной излучаемого спектра $\Delta E_{\text{ph}} \cong 10 \text{ нэВ}$ позволяет измерять мессбауэровские спектры поглощения и рассеяния на энергетической шкале. SMS дает практически полностью π -поляризованное излучение, что определяет специфические особенности измеряемых спектров. Для поляризационного анализа отраженного пучка в настоящей работе использовался кристалл LiF , отражение (622) от которого для резонансного излучения с длиной волны 0.086 нм (14.4 кэВ переход в ^{57}Fe) происходит под углом $2\theta_B = 89.96^\circ$, что обеспечивает практически полное подавление отраженной образцом π' -поляризации. Отражение

от многослойных пленок, как правило, имеет весьма большую расходимость [23], поэтому важно, что ширина брэгговского отражения от этого кристалла-анализатора достаточно большая ($\Delta\theta \cong 90''$), чтобы зарегистрировать весь отраженный сигнал [24].

В работе исследовался образец $[^{57}\text{Fe}(3.0 \text{ нм})/\text{Cr}(1.2 \text{ нм})]_{10}$ (приведены номинальные толщины слоев в периоде) на подложке Si , наличие АФ межслойного упорядочения в котором подтверждено предшествующими исследованиями [16]. Образец помещался в крио-магнитную камеру и был охлажден до 4 К .

Мессбауэровские спектры отражения измерялись при жестко определенной температуре 348.95 К ядерного монохроматора $^{57}\text{FeBO}_3$ и его специфичной ориентации в пределах брэгговского максимума (111) ($\theta_B + 0.004^\circ$), обеспечивающих энергетическую ширину дифрагированного излучения $\Delta E_{\text{ph}} \cong 10 \text{ нэВ}$ (0.21 мм/с в единицах доплеровского смещения энергии) [22, 26]. Для развертки спектров по энергии ядерный монохроматор помещен на вибратор, соединенный с многоканальным анализатором скоростей. Благодаря использованию LiF анализатора поляризации регистрируемая интенсивность $\pi \rightarrow \sigma'$ отраженного излучения увеличилась в $\sim 5 \div 10$ раз (в зависимости от образца) по сравнению с измерениями с $\text{Si}(422)$ анализатором, примененным в работе [23], что позволило измерять спектры не только в критическом угле полного отражения, но и в брэгговских отражениях [24].

Угловые зависимости интенсивности мессбауэровского отражения $I^{\tau \rightarrow \tau'}$ измерялись как интеграл по мессбауэровскому спектру отражения в пределах $\pm 13 \text{ мм/с}$ (этот интервал полностью перекрывает область мессбауэровского рассеяния на нашем образце) в функции угла скольжения θ :

$$I^{\tau \rightarrow \tau'}(\theta) = \int_{\omega_1}^{\omega_2} I^{\tau \rightarrow \tau'}(\theta, \omega) d\omega. \quad (1)$$

В (1) $\tau = \sigma, \pi$ – поляризации падающего и отраженного (со штрихом) излучения, $\hbar\omega_1 \div \hbar\omega_2$ – интервал энергий падающего излучения, соответствующий доплеровским смещениям энергии в мессбауэровском спектре, в нашем случае $\pm 13 \text{ мм/с}$. Для записи мессбауэровских рефлектометрических кривых ширина линии от синхротронного мессбауэровского источника специально увеличивалась до $\Delta E_{\text{ph}} = 240 \text{ нэВ}$ (5 мм/с) с помощью небольшого понижения температуры монокристалла $^{57}\text{FeBO}_3$ до 343 К , что позволяло увеличить интенсивность падающего излучения в ~ 15 раз.

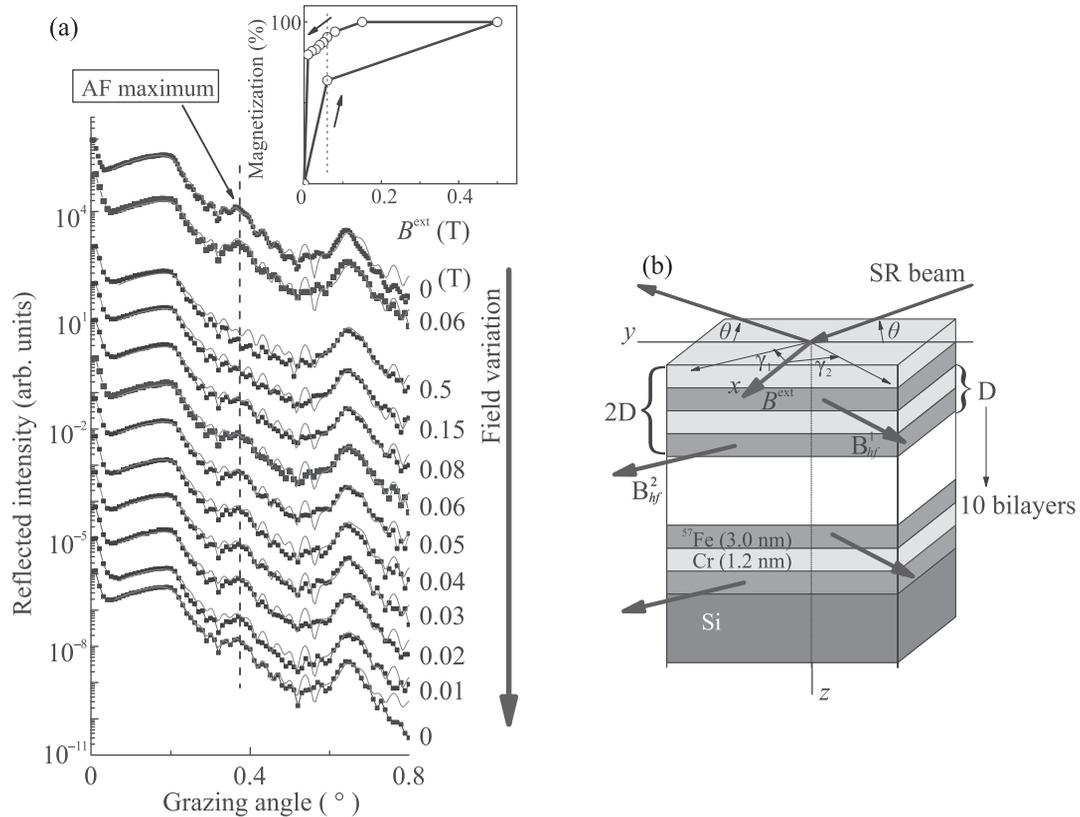


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Мессбауэровские рефлектометрические кривые, измеренные сначала при увеличении напряженности B^{ext} , а затем при ее уменьшении. Вертикальная линия отмечает положение АФ максимума. Различие относительной интенсивности АФ максимума на выделенных рефлектометрических кривых для 0.06 Т, измеренных при возрастании и убывании поля, демонстрирует наличие гистерезиса. На вставке: изменение суммарной намагниченности структуры под действием B^{ext} , определенной как $(\cos \gamma_1^{\text{eff}} + \cos \gamma_2^{\text{eff}})/2$, вертикальная пунктирная линия отмечает разные намагниченности при 0.06 Т при возрастании и убывании B^{ext} . (b) – Схематичное изображение образца, геометрии эксперимента и углов, характеризующих направления $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в слоях ^{57}Fe

Магнитное поле B^{ext} прикладывалось перпендикулярно плоскости рассеяния (рис. 1b). АФ межслойное упорядочение слоев ^{57}Fe в структуре проявляется наличием АФ максимума при $\theta = 0.36^\circ$ на мессбауэровских рефлектометрических кривых (рис. 1a). Этот максимум возникает, когда магнитный период структуры в два раза больше химического, поскольку $\theta = 0.36^\circ$ соответствует $2D = 8.41 \text{ нм}$ (структурный брэгговский максимум при $\theta = 0.64^\circ$ соответствует $D = 4.205 \text{ нм}$). Изменение интенсивности АФ максимума под действием B^{ext} характеризует переориентацию магнитного сверхтонкого поля $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в соседних слоях ^{57}Fe . Моделирование интенсивности АФ максимума позволяет найти $\gamma_{1,2}^{\text{eff}}$ – эффективные азимутальные углы, задающие ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в соседних резонансных слоях ^{57}Fe (см. вставку на рис. 1a). Магнитную природу АФ максимума подтверждает его исчезновение при достаточно большом $B^{\text{ext}} = 0.5 \text{ Т}$: $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ выстраиваются параллельно

в соседних слоях ^{57}Fe ($\gamma_1^{\text{eff}} = \gamma_2^{\text{eff}} = 0^\circ$ – спин-флип, т.е. ферромагнитное упорядочение) и различие амплитуд рассеяния на ^{57}Fe ядрах пропадает. Изменение интенсивности АФ максимума при дальнейшем уменьшении B^{ext} демонстрирует наличие гистерезиса, поскольку интенсивности АФ максимума при одинаковых значениях увеличивающегося и уменьшающегося B^{ext} не совпадают. При постепенном снятии B^{ext} АФ упорядочение между слоями железа восстанавливается: $\gamma_2^{\text{eff}} = \gamma_1^{\text{eff}} + 180^\circ$, но ось АФ упорядочения имеет произвольное направление в разных доменах, что соответствует $\gamma_1^{\text{eff}} = 45^\circ$.

В отсутствии магнитно-кристаллической анизотропии и B^{ext} выделенное направление для оси АФ упорядочения, очевидно, отсутствует, и возникают магнитные домены. При полностью когерентном усреднении амплитуд рассеяния по разноориентированным доменам АФ максимум не должен возникать. Его существование в отсутствии B^{ext} объ-

яснено в работах [15, 18] как проявление частичной пространственной когерентности падающего излучения.

Важно понимать, что измеряемые мессбауэровские рефлектометрические кривые включают не только рассеяние на резонансных ядрах, но и нерезонансное рассеяние на электронных оболочках атомов. АФ максимум, появление которого обусловлено практически полностью ядерно-резонансным рассеянием, характеризуется “повернутой” поляризацией (в нашем случае $\pi \rightarrow \sigma'$). Селекция $\pi \rightarrow \sigma'$ интенсивности позволяет выделить чисто ядерную составляющую в отраженной интенсивности, что существенно повышает информативность метода.

На рисунке 2 приведена рефлектометрическая кривая $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения в сравнении с кривыми,

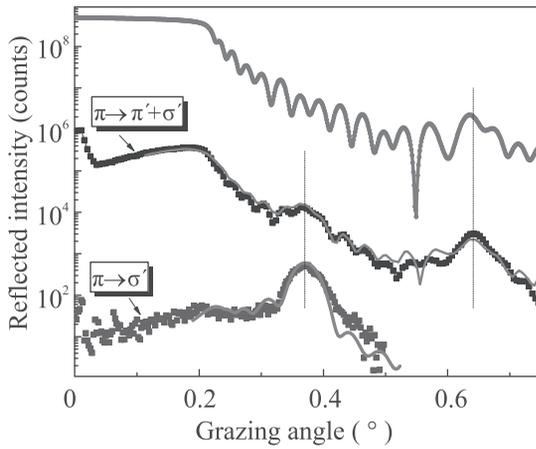


Рис. 2. (Цветной онлайн) Рентгеновская кривая отражения для длины волны $\lambda = 0.086$ нм (зеленая линия) и мессбауэровские рефлектометрические кривые, измеренные без селекции по поляризации ($\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$, черные символы) и с селекцией по поляризации ($\pi \rightarrow \sigma'$, синие символы) в отсутствие B^{ext} . Красные кривые – обработка. Вертикальная пунктирная кривая при $\theta = 0.36^\circ$ отмечает положение АФ максимума, при $\theta = 0.64^\circ$ – положение брэгговского максимума первого порядка

измеренными без селекции поляризации в отраженной интенсивности. На ядерно-резонансной кривой $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения АФ максимум гораздо ярче выделяется, чем на кривой, измеряемой без селекции отраженной интенсивности по поляризации. В отличие от случая ферромагнитного межслойного упорядочения, на кривой $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения пик вблизи критического угла полного внешнего отражения, зарегистрированный в работах [23, 24], практически незаметен. Это объясняется тем, что $\pi \rightarrow \sigma'$ составляющие амплитуд рассеяния от последовательно распо-

ложенных АФ слоев ^{57}Fe при практически нулевом сдвиге фаз в критическом угле компенсируют друг друга.

Наличие АФ максимума на угловой зависимости ядерно-резонансного отражения диагностирует только существование удвоения магнитного периода в структуре, но детали магнитного упорядочения могут быть выявлены только при исследовании спектров отражения. Измеренные мессбауэровские спектры отражения представлены на рис. 3.

Изменение спектров, измеренных в АФ максимуме при приложении слабого $B^{\text{ext}} = 0.06$ Т оказалось достаточно интересным. На $\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$ спектре, измеренном без анализа поляризации, под действием поля возникли линии, соответствующие сверхтонкому переходу $\Delta m = 0$ (2-я и 5-я линии в магнитном секстете). Спектры $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения практически не изменились. На них присутствуют только 4 линии, соответствующие резонансным переходам $\Delta m = \pm 1$.

Зависимость суммарной амплитуды ядерно-резонансного рассеяния на разных сверхтонких переходах $\Delta m = m_e - m_g = \pm 1, 0$ для удвоенного периода структуры от направления $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в двух резонансных слоях может быть представлена выражениями [16, 18]:

$$F_{\Delta m=0}^{\text{nuc}} = \begin{pmatrix} F_{\Delta m=0}^{\text{nuc}, \pi \rightarrow \pi'} \\ F_{\Delta m=0}^{\text{nuc}, \pi \rightarrow \sigma'} \end{pmatrix} \propto \quad (2)$$

$$\propto \begin{pmatrix} \sin^2 \beta_1 \cos^2 \gamma_1 + e^{2i\varphi} \sin^2 \beta_2 \cos^2 \gamma_2 \\ -\sin \beta_1 \cos \beta_1 \cos \gamma_1 - e^{2i\varphi} \sin \beta_2 \cos \beta_2 \cos \gamma_2 \end{pmatrix},$$

$$F_{\Delta m=\pm 1}^{\text{nuc}} = \begin{pmatrix} F_{\Delta m=\pm 1}^{\text{nuc}, \pi \rightarrow \pi'} \\ F_{\Delta m=\pm 1}^{\text{nuc}, \pi \rightarrow \sigma'} \end{pmatrix} \propto \quad (3)$$

$$\propto \begin{pmatrix} (\sin^2 \gamma_1 + \cos^2 \gamma_1 \cos^2 \beta_1) + \\ + e^{2i\varphi} (\sin^2 \gamma_2 + \cos^2 \gamma_2 \cos^2 \beta_2) \\ (\cos \beta_1 \cos \gamma_1 \pm i \sin \gamma_1) \sin \beta_1 + \\ + e^{2i\varphi} (\cos \beta_2 \cos \gamma_2 \pm i \sin \gamma_2) \sin \beta_2 \end{pmatrix},$$

где $\gamma_{1,2}$, $\beta_{1,2}$ – азимутальные и полярные углы, задающие направления $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ относительно пучка СИ в нечетных и четных слоях железа (рис. 1b). Набег фазы для волны, рассеянной вторым периодом, относительно волны, рассеянной первым периодом, 2φ , вычисляется по формуле

$$2\varphi = \frac{4\pi}{\lambda} \sum \sqrt{\sin^2 \theta + \chi_i d_i} \approx \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta D, \quad (4)$$

где χ_i , d_i – восприимчивости и толщины отдельных слоев в одном периоде, включая резонансный слой,

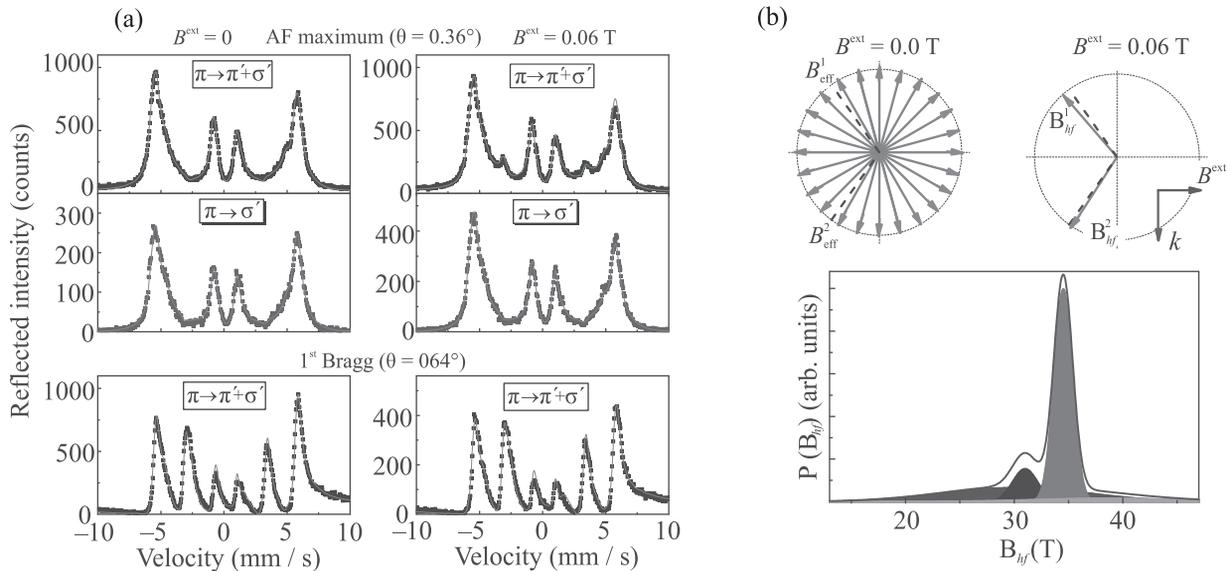


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Мессбауэровские спектры отражения, измеренные в АФ максимуме ($\theta = 0.36^\circ$), без селекции по поляризации ($\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$) и с селекцией интенсивности $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения и в брэгговском максимуме 1-го порядка ($\theta = 0.64^\circ$). Слева – спектры в отсутствии B^{ext} , справа – при $B^{\text{ext}} = 0.06 \text{ Т}$, приложенного перпендикулярно плоскости отражения. Символы – экспериментальные спектры, сплошные линии – подгонка. (б) – Функция распределения $P(\mathbf{B}_{hf})$ величины поля $|\mathbf{B}_{hf}|$ (как суперпозиция 4-х мультиплетов), полученная при обработке всех измеренных спектров; сверху – пиктограммы, обозначающие ориентацию $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в двух ^{57}Fe слоях в одном периоде при $B^{\text{ext}} = 0 \text{ Т}$ и при $B^{\text{ext}} = 0.06 \text{ Т}$

D – период структуры. Хотя преломление и поглощение в отдельном резонансном слое может быть заметным даже для нанометровых слоев, расчеты показывают, что можно полагать $2\varphi = 2\pi, 4\pi$ для брэгговских максимумов на рефлектометрической кривой и $2\varphi = \pi, 3\pi, \dots$ для АФ максимумов. Таким образом, в АФ максимуме два слагаемых в (2), (3) складываются в противофазе, и при планарной ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$, когда $\beta_1 = \beta_2 = 90^\circ$, 2-я и 5-я линии отсутствуют в интенсивности $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения ($\cos \beta_i = 0$), а интенсивности 2-й и 5-й линий определяются множителем $(\cos^2 \gamma_1 - \cos^2 \gamma_2)$ в отражении с неизменной поляризацией ($\pi \rightarrow \pi'$). Соответственно эти линии отсутствуют при коллинеарной АФ или симметричной относительно нормали к отражающей плоскости ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в соседних слоях ^{57}Fe . (При симметричной ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в соседних слоях ^{57}Fe относительно направления пучка АФ максимум пропадает.) Появление 2-й и 5-й линий в спектре отражения, измеренном в АФ максимуме, является прямым свидетельством возникновения скошенного АФ упорядочения.

Выражения для амплитуд рассеяния (2), (3) дают качественное представление об интенсивности отдельных линий в мессбауэровском спектре, но спектры отражения формируются достаточно сложным

образом (4×4 матричная теория отражения, см. supplement к [16]). Результаты численного анализа формы мессбауэровских спектров отражения в АФ максимуме для разных случаев взаимной ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ в двух слоях ^{57}Fe в магнитном периоде, включая возможность выхода намагниченности из плоскости поверхности, представлены на рис. 4. Как видно, если “схлопывание” направлений для $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ к направлению B^{ext} происходит симметрично относительно B^{ext} , перпендикулярно направлению пучка, то 2-я и 5-я линии в спектре отражения в АФ максимуме не возникают. Они появляются, если модули проекции направлений $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ на направление пучка различаются, и только для отраженной π' поляризации. Коллинеарное АФ упорядочение даже с выходом из плоскости поверхности направлений $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ не приводит к появлению 2-й и 5-й линий. Но 2-я и 5-я линии в спектре $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения все же могут возникнуть при некоторых специальных взаимных ориентациях $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ с выходом из плоскости поверхности (когда направления связаны двукратным отражением от плоскости поверхности и плоскости отражения – см. нижние спектры на рис. 4).

Обработка угловых зависимостей (рис. 1, 2) и всех спектров отражения (рис. 3), измеренных в АФ максимуме и в брэгговском максимуме первого порядка,

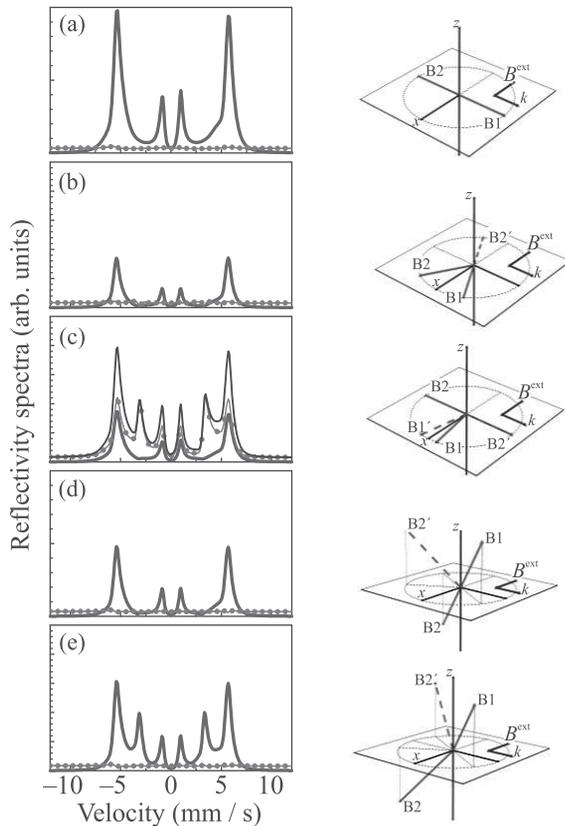


Рис. 4. (Цветной онлайн) Рассчитанные мессбауэровские спектры $\pi \rightarrow \sigma'$ (сплошная синяя линия) и $\pi \rightarrow \pi'$ (тонкая зеленая линия с символами) отражения от структуры $[\text{}^{57}\text{Fe}(3\text{ нм})/\text{Cr}(1.2\text{ нм})]_{30}$ в АФ максимуме ($\theta = 0.36^\circ$) для различных типов магнитного межслойного упорядочения в слоях железа в одном магнитном периоде. Обозначения углов соответствующую (β_1, γ_1)/(β_2, γ_2): для (a) – $(0^\circ, 90^\circ)/(0^\circ, -90^\circ)$, для (b) – $(0^\circ, 30^\circ)/(0^\circ, -30^\circ)$, для (c) – $(0^\circ, 10^\circ)/(0^\circ, -90^\circ)$, для (d) – $(45^\circ, 60^\circ)/(135^\circ, 240^\circ)$ или $(45^\circ, 60^\circ)/(45^\circ, -60^\circ)$, для (e) – $(45^\circ, 60^\circ)/(135^\circ, -60^\circ)$ или $(45^\circ, 60^\circ)/(45^\circ, 240^\circ)$. Суммарный спектр (сплошная черная линия) показан только для случая, когда интенсивности $\pi \rightarrow \sigma'$ и $\pi \rightarrow \pi'$ спектров сопоставимы. На пиктограммах справа стрелки с обозначениями B1 и B2 соответствуют направлениям $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ соответственно в нечетном и четном слоях ^{57}Fe , пунктирные стрелки представляют альтернативные ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$, при которых спектры остаются такими же

дающим возможность дополнительной проверки выявленной скошенной структуры, проводилась с использованием комплекса программ REFTIM, адаптированного для расчетов и обработки энергетических спектров отражения [28, 29]. Асимметрия спектров зависит от небольших смещений угла θ вблизи брэгговского максимума и объясняется различием условия Брэгга для разных линий в спектре (вслед-

ствие разных резонансных поправок на преломление) [27]. Асимметрия фона наблюдается для спектров, измеренных в брэгговском максимуме 1-го порядка, она обусловлена интерференцией с нерезонансным рассеянием на электронных оболочках (в АФ максимуме этот вклад пренебрежимо мал). Для структурных максимумов относительная интенсивность 2-й и 5-й линий в спектре является очень точной характеристикой азимутального угла АФ упорядочения. При $\gamma_{1,2} = +90^\circ/-90^\circ$ 2-я и 5-я линии отсутствуют (рассматриваем π -поляризацию падающего излучения), при $\gamma_{1,2} = +0^\circ/180^\circ$ в спектре пропадают 1, 3, 4 и 6 линии. При $B^{\text{ext}} = 0\text{ Т}$ можно предполагать хаотическую ориентацию оси АФ упорядочения, но соотношение линий в экспериментальном спектре в брэгговском максимуме 1-го порядка соответствует $\gamma_{1,2}^{\text{eff}} = 54.5^\circ/234.5^\circ$. Это значение несколько отличается от $\gamma_{1,2}^{\text{eff}} = 45^\circ/225^\circ$, соответствующего идеально разупорядоченному случаю [18], что можно объяснить слабой анизотропией формы или остаточной намагниченностью. Асимметричный скос ориентации $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ при $B^{\text{ext}} = 0.06\text{ Т}$ совсем невелик, но он обеспечивает возникновение 2-й и 5-й линий в спектре $\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$ отражения в АФ максимуме. Наилучшее соответствие теоретических расчетов с экспериментальными рефлектометрическими кривыми и спектрами, измеренными при приложении $B^{\text{ext}} = 0.06\text{ Т}$ получается при $\gamma_1 = 49^\circ$, $\gamma_2 = -57^\circ$. Отсутствие 2-й и 5-й линий в мессбауэровском спектре $\pi \rightarrow \sigma'$ отражения, измеренном в АФ максимуме, исключает выход $\mathbf{B}_{hf}^{1,2}$ из плоскости поверхности, а их наличие в АФ спектре $\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$ отражения является экспериментально обоснованным доказательством формирования скошенной планарной АФ структуры под действием слабого B^{ext} .

В заключении отметим, что в работе получено прямое свидетельство возникновения скошенной АФ структуры, возникающей под действием слабого внешнего поля. Продемонстрированы возможности поляризационного анализа для исследования структур со сложным неколлинеарным межслойным упорядочением. Селекция $\pi \rightarrow \sigma'$ поляризационной компоненты позволяет исключить вклад нерезонансного рассеяния в отраженной интенсивности и получить чисто ядерную отраженную интенсивность. Измерение $\pi \rightarrow \sigma'$ мессбауэровских спектров дает возможность расширить объем информации об ориентации намагниченности в резонансных слоях.

Авторы признательны проф. А. Гупта (Ajay Gupta, Center for Spintronic Materials, Amity University UP, India) и д-ру Г. Шарма (Gagan Sharma, Indore Center, UGC-DAE Consortium for

Scientific Research, India) за изготовленный и предоставленный нам образец, характеризующийся АФ межслойным упорядочением. Авторы благодарны администрации и сотрудникам Европейского синхротрона в Гренобле (ESRF) за возможность провести измерения на станции ID18 и гостеприимство.

1. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
2. S. Fukami, V.O. Lorenz, and O. Gomonay, *J. Appl. Phys.* **128**, 070401 (2020).
3. P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, and H. Sowers, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2442 (1986).
4. M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
5. B. Rodmacq, P. Mangin, and C. Vettier, *Europhysics Letters (EPL)* **15**, 503 (1991).
6. T.S. Toellner, W. Sturhahn, R. Röhlberger, E.E. Alp, C.H. Sowers, and E.E. Fullerton, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3475 (1995).
7. L. Bottyán, L. Deák, J. Dekoster, E. Kunnen, G. Langouche, J. Meersschant, M. Majora, D.L. Nagy, H.D. Rüter, E. Szilágyi, and K. Temst, *J. Magn. Magn. Mater.* **240**, 514 (2002).
8. S.G.E. te Velthuis, J.S. Jiang, S.D. Bader, and G.P. Felcher, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 127203 (2002).
9. V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter, B.P. Toperverg, L. Romashev, and V.V. Ustinov, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 167203 (2002).
10. J. Meersschant, C. L'abbé, F.M. Almeida, J.S. Jiang, J. Pearson, U. Welp, M. Gierlings, H. Maletta, and S.D. Bader, *Phys. Rev. B* **73**, 144428 (2006).
11. V.V. Ustinov, M.A. Milayev, L.N. Romashev, T.P. Krinitsina, A.M. Burkhanov, V.V. Lauter-Pasyuk, and H.J. Lauter, *J. Magn. Magn. Mater.* **300**, e281 (2006).
12. V.V. Ustinov, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 2219 (2007).
13. Th. Diederich, S. Couet, and R. Röhlberger, *Phys. Rev. B* **76**, 054401 (2007).
14. K. Schlage, R. Röhlberger, T. Klein, E. Burkel, C. Strohm, and R. Rüffer, *New J. Phys.* **11**, 013043 (2009).
15. T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Zajęc, K. Freindl, A. Koziol-Rachwał, K. Matlak, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Partyka-Jankowska, M. Rennhofer, A.I. Chumakov, S. Stankov, R. Rüffer, and J. Korecki, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 027206 (2010).
16. M. Andreeva, A. Gupta, G. Sharma, S. Kamali, K. Okada, and Y. Yoda, *Phys. Rev. B* **92**, 134403 (2015).
17. M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.I. Chumakov, R. Rüffer, G.V. Smirnov, Y.A. Babanov, D.I. Devyaterikov, M.A. Milyaev, D.A. Ponomarev, L.N. Romashev, and V.V. Ustinov, *Phys. Rev. B* **97**, 024417 (2018).
18. M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.I. Chumakov, R. Rüffer, G.V. Smirnov, Yu.A. Babanov, D.I. Devyaterikov, M.A. Milyaev, D.A. Ponomarev, L.N. Romashev, and V.V. Ustinov, *J. Synchrotron Radiat.* **25**, 473 (2018).
19. Y. Li, Q. Feng, S. Li, K. Huang, M. Ma, W. Gan, H. Zhou, X. Jin, X.R. Wang, Y. Lu, W.S. Lew, Q. Lu, and F. Ma, *Adv. Funct. Mater.* **30**, 1907140 (2019).
20. G.V. Smirnov, *Hyperfine Interactions* **123/124**, 31 (1999).
21. T. Mitsui, M. Seto, R. Masuda, K. Kiriyama, and Y. Kobayashi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, L703 (2007).
22. V. Potapkin, A.I. Chumakov, G.V. Smirnov, J.P. Celse, R. Rüffer, C. McCammon, and L. Dubrovinsky, *J. Synchrotron Radiat.* **19**, 559 (2012).
23. M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.I. Chumakov, T. Yu. Kiseleva, and R. Rüffer, *Condensed Matter* **4**, 8 (2019); <https://doi.org/10.3390/condmat4010008>.
24. M.A. Andreeva, R.A. Baulin, O.V. Slinko, L. Högström, V.E. Asadchikov, D.N. Karimov, B.S. Roshchin, D.A. Ponomarev, L.N. Romashev, A.I. Chumakov, D. Bessas, and R. Rüffer, *J. Phys. Conf. Ser.* **1389**, 012016 (2019).
25. R. Rüffer and A.I. Chumakov, *Hyperfine Interactions* **97/98**, 589 (1996).
26. G.V. Smirnov, *Hyperfine Interactions* **125**, 91 (2000).
27. M.A. Andreeva, A.I. Chumakov, G.V. Smirnov, Yu.A. Babanov, D.I. Devyaterikov, B. Yu. Goloborodsky, D.A. Ponomarev, L.N. Romashev, V.V. Ustinov, and R. Rüffer, *Hyperfine Interactions* **237**, 25 (2016).
28. M.A. Andreeva, *Hyperfine Interactions* **185**, 17 (2008).
29. M.A. Andreeva, B. Lindgren, and V. Panchuck, <http://www.esrf.eu/Instrumentation/software/data-analysis/OurSoftware/REFTIM-1>. Last updated in 2015.

Межслоевая теплопроводность и термическая устойчивость деформированного двухслойного графена

А. И. Подливаев¹⁾, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов

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

Поступила в редакцию 7 декабря 2020 г.

После переработки 17 декабря 2020 г.

Принята к публикации 18 декабря 2020 г.

Неортогональный потенциал сильной связи дополнен дальнедействующими слагаемыми, необходимыми для корректного описания межслоевого взаимодействия в двухслойном графене. Методом молекулярной динамики исследован теплообмен между двумя деформированными графеновыми слоями, один из которых изначально охлажден до 0 К, а второй нагрет до $77 \div 7000$ К. Определено характерное время теплообмена в зависимости от начальной температуры нагретого слоя и деформации слоев. Продемонстрировано, что оба фактора существенно влияют на интенсивность межслоевого теплообмена. Установлено, что в течение характерного времени выравнивания температур в системе могут возникать тепловые дефекты различного типа, включая плавление, отслоение и тангенциальный сдвиг нагретого слоя. Показано, что появление тепловых дефектов может увеличить скорость межслоевого теплообмена более чем на порядок величины.

DOI: 10.31857/S1234567821030071

Введение. Двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG) представляет собой двумерный углеродный материал, составленный из двух графеновых листов, связанных друг с другом силами ван-дер-Ваальса. Впервые BG был синтезирован на подложке из карбида кремния в 2006 г. [1]. Этот материал обладает настраиваемой запрещенной зоной [1], которая в вертикальном электрическом поле может достигать 250 мэВ, что позволяет использовать BG в качестве основы для полевого транзистора [2, 3]. Кроме того, BG предлагается применять как датчик влажности [4] и как адсорбент ядовитых газов CO, NO, SO₂ и HCN [5]. Поворот графеновых плоскостей друг относительно друга на некоторый угол θ позволяет получать структуры с различными электронными свойствами. Например, структура с “магическим” углом $\theta = 1.1^\circ$, отнесенная авторами работы [6] к категории “странных металлов”, демонстрирует необычную температурную зависимость проводимости [7] и обладает плоскими энергетическими зонами [8].

Температура существенно влияет на электронную структуру и проводимость BG [6, 7, 9]. Кроме того, локальный перегрев может вызывать структурные дефекты в нем. При неодинаковом нагреве слоев BG важное значение приобретает теплообмен между ними. Неодинаковый нагрев возникает, например,

при пропускании импульсного тока через BG, один из слоев которого имеет пониженную проводимость из-за функционализации (наличие областей, допированных фтором [10, 11], хлором [12] или водородом [13], может блокировать протекание тока через один из слоев). Протяженная лента BG, имеющая диэлектрический “пояс” гидрированного графена на нижней плоскости будет пропускать ток через верхнюю плоскость, которая только и будет нагреваться. Также односторонний нагрев BG возможен при его облучении потоком частиц, падающих под острым углом и рассеивающихся преимущественно на внешнем слое. В этом случае желательно применение легких частиц (электронов). Применение иона водорода нежелательно из-за возможного гидрирования верхней углеродной плоскости.

В настоящей работе исследуется процесс теплообмена между слоями теплоизолированного BG, не связанного с подложкой. В результате перегрева одного из слоев выше температуры плавления возможны два конкурирующих процесса: термический распад нагретого слоя или его охлаждение ниже температуры плавления за счет теплообмена со вторым слоем. Реализация первого или второго процесса определяется соотношением времени образования тепловых дефектов в перегретом слое и характерного времени межслоевого теплообмена. Эти времена зависят от начальной температуры перегретого слоя и от деформации слоев. В настоящей работе рассмат-

¹⁾e-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

риваются два типа деформации: гидростатическое растяжение в плоскости ВГ и одноосное сжатие, в результате которого слои становятся гофрированными [14, 15].

Потенциал межатомного взаимодействия.

Межатомное взаимодействие описывалось в рамках неортогональной модели сильной связи с параметризацией [16], реализованной в программном пакете NTBM [17]. Эта модель обладает высокой по сравнению с *ab initio* подходами производительностью и пригодна для длительных молекулярно-динамических расчетов. Она корректно описывает углеродные системы с разными типами гибридизации атомов [18] и успешно применялась для исследования термической устойчивости углеродных систем, в том числе на основе графена (см. работы [19–24] и ссылки в них). Однако при определении ее параметров рассматривались только ковалентно связанные системы, а дальнедействующее взаимодействие не учитывалось [16]. Для корректного моделирования ВГ потенциал [16] должен быть дополнен поправками, учитывающими нековалентное притяжение графеновых слоев.

Энергия взаимодействия слоев может быть определена как

$$E_{AA,AB} = \frac{1}{N}(E(\text{BG}) - 2E(\text{G})),$$

где $E(\text{BG})$ и $E(\text{G})$ – полные энергии элементарной ячейки ВГ и изолированного слоя соответственно; N – число атомов в ячейке ВГ; индексы АА и АВ показывают взаимное расположение слоев. Разница энергий конфигураций АА и АВ характеризуется безразмерным параметром $\gamma = (E_{AB} - E_{AA})/E_{AA}$. Ван-дер-ваальсовский потенциал, пригодный для исследования межслоевого теплообмена в ВГ, должен удовлетворять нескольким условиям. Во-первых, он должен обеспечивать устойчивость метастабильной конфигурации АА (в некоторых потенциалах она оказывается неустойчивой, см. работу [25]). Во-вторых, он должен корректно воспроизводить величины E_{AB} , γ и равновесное межслоевое расстояние d . В-третьих, он должен правильно учитывать “жесткость” межслоевой связи, характеризующейся величиной $C_{ZZ} = d^2 \frac{\partial^2 E_{AB}}{\partial d^2}$. Кроме того, разумно ограничить радиус действия ван-дер-ваальсового потенциала величиной $2d$ (согласно работе [26], при увеличении межслоевого расстояния от d до $2d$ энергия взаимодействия слоев уменьшается на порядок).

При подборе параметров потенциала мы ориентировались на следующие значения:

$E_{AB} = -25$ мэВ/атом; $\gamma = 0.10$; $d = 3.35$ Å; $C_{ZZ} = 2.083$ эВ/атом. Значение d соответствует экспериментально измеренному межслоевому расстоянию в графите [27] и теоретическому значению для ВГ, полученному в рамках теории функционала плотности с поправками ван-дер-Ваальса (vdW-DFT) [28]. Отметим, что другие теоретические подходы предсказывают d в интервале $3.1 \div 3.6$ Å [28]. Значение C_{ZZ} соответствует экспериментальному значению упругой константы C_{33} объемного графита, равному $3.7 \cdot 10^{10}$ Па [29]. Значения E_{AB} и γ , полученные разными авторами, заметно отличаются друг от друга [25, 26, 28]. Так, в работе [25] приведены значения величин E_{AB} и γ , рассчитанные в рамках нескольких *ab initio* и классических подходов: разброс составил $-29.3 \div -50.6$ мэВ/атом и $0.44 \div 1.8$ соответственно. Применение потенциала Леннарда–Джонса приводит к заниженному значению $\gamma = 0.02$. Квантовый метод Монте-Карло предсказывает значения $E_{AB} = -17.7$ мэВ/атом и $E_{AA} = -11.5$ мэВ/атом, что соответствует $\gamma = 0.54$ [28]. В работе [26] разные модификации подхода vdW-DFT привели к значениям E_{AB} , равным -47 и -22 мэВ/атом; при этом значения γ составили 0.12 и 0.10 . При этом второй подход, разработанный для “слоевой геометрии” (“*layered geometry*” в работе [26]), представляется более адекватным для ВГ. В объемном графите энергия межслоевого взаимодействия E_{AB} лежит в интервале $-24 \div -50$ мэВ/атом (см. работу [26] и ссылки в ней). Выбранные нами величины $E_{AB} = -25$ мэВ/атом и $\gamma = 0.10$ представляются разумным компромиссом между значениями, полученными разными методами.

Для учета взаимодействия слоев ВГ мы модифицировали парный центральный потенциал, действующий между всеми парами атомов углерода и зависящий только от межатомного расстояния r . Модель NTBM уже включает такой потенциал, описывающий классическое отталкивание ионов углерода и имеющий форму $\phi(r) = \phi_0 \exp(-\xi r)$ ($\phi_0 = 2.25$ кэВ; $\xi = 4.913$ Å⁻¹ [16]). Наша модификация состояла в добавлении к имеющемуся потенциалу ϕ двух кусочно-непрерывных тригонометрических функций ϕ_1 и ϕ_2 следующего вида:

$$\phi_1(r) = \begin{cases} A_1 \cdot \sin(\pi(r-d)/R_c) \times \\ \times [\cos(\pi(r-d)/R_c) + 1], & |r-d| \leq R_c, \\ 0, & |r-d| > R_c; \end{cases} \quad (1)$$

$$\phi_2(r) = \begin{cases} A_2 \cdot \cos^2(\pi(r-1.5d)/4d), & |r-1.5d| \leq 0.5d, \\ 0, & |r-1.5d| > 0.5d. \end{cases}$$

Параметры A_1 , A_2 и R_C подбирались так, чтобы получить желаемые значения величин $E_{AB} = -25$ мэВ/атом; $\gamma = 0.10$; $d = 3.35$ Å; $C_{ZZ} = 2.083$ эВ/атом. Это достигается при следующих значениях параметров: $A_1 = -2.694$ мэВ, $A_2 = -1.773$ мэВ, $R_C = 0.8$ Å.

На рисунке 1 представлены графики исходного $\varphi(r)$ и модифицированного $\varphi(r) + \varphi_1(r) + \varphi_2(r)$ пар-

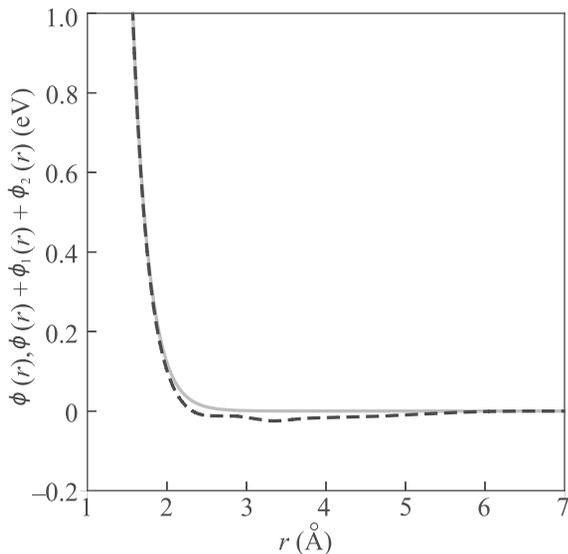


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость немодифицированного (сплошная линия) и модифицированного (пунктирная линия) парного потенциала от расстояния между взаимодействующими атомами углерода (см. формулу (1))

ного потенциала. Видно, что на расстояниях ковалентного взаимодействия ($r \leq 2$ Å) различие этих потенциалов незначительно: оно проявляется только на расстояниях, близких к d . Малость вносимой поправки подтверждается и тем, что изменение энергии связи и длин связей в фуллерене C_{60} , обусловленное введенной поправкой, составляет менее 0.3%. Таким образом, модификация потенциала не влияет на ковалентное взаимодействие, хорошо описываемое в рамках исходной модели НТВМ, и корректно учитывает нековалентное взаимодействие между слоями ВГ.

Молекулярно-динамическое моделирование. Для исследования ВГ использовалась 2×2 сверхъячейка C_{128} , состоящая из двух слоев C_{64} (см. работу [30]). Граничные условия были периодическими в плоскости ВГ (X, Y) и свободными в поперечном направлении (Z). Периоды равновесной сверхъячейки оптимизировались вместе с атомными координатами. Молекулярно-динамическая траектория начиналась с оптимизированной конфигурации

АВ. Начальные скорости атомов одного слоя равнялись нулю, а второго — определялись распределением Максвелла, соответствующего начальной температуре 77, 300, 1000, 3000, 5000 или 7000 К. Также атомам нагретого слоя придавались начальные смещения, соответствующие его начальной температуре. Для каждой начальной температуры проводилось четыре независимых расчета, различающихся исходным стохастическим распределением скоростей и термических смещений атомов нагретого слоя, что позволило определить дисперсии времени межслоевого теплообмена. Моделирование проводилось в рамках микроканонического NVE ансамбля [31] при помощи алгоритма Верле с временным шагом 0.3 фс. Расчет продолжался до выравнивания энергий слоев или до появления очевидных термических дефектов. По завершении молекулярно-динамического расчета, последняя геометрия системы оптимизировалась для выявления накопленных термических дефектов.

Помимо недеформированного ВГ, рассматривались два типа его деформации: гидростатическое растяжение на 5% и одноосное сжатие на 10%. Деформация вводилась путем изменения периодов счетных ячеек ВГ. Рассмотренное растяжение лежит в области упругости графена [32], что подтвердилось нашими расчетами упругих модулей. Сжатие привело к гофрированию слоев ВГ без заметного укорочения С–С связей, как это ранее наблюдалось в работах [14, 15].

Результаты. На рисунке 2 показано изменение энергии межслоевого взаимодействия ВГ как функ-

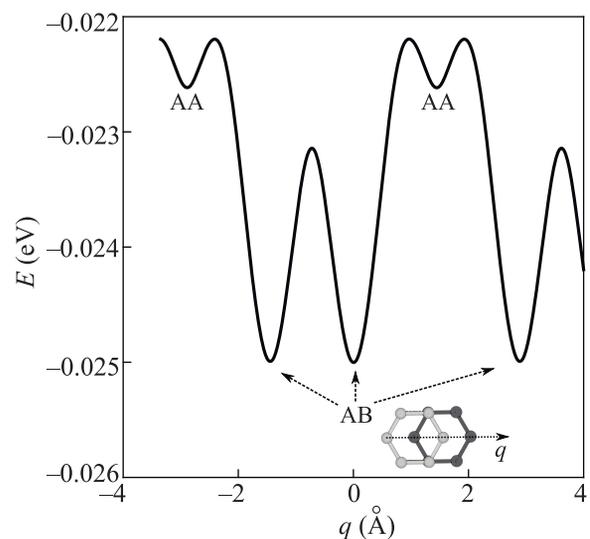


Рис. 2. Зависимость энергии межслоевого взаимодействия в ВГ при параллельном смещении одного из слоев вдоль С–С связи, направление q которой показано на вставке

ция смещения одного слоя относительно другого в направлении q , соединяющем АВ и АА конфигурации. Видно, что конфигурация АВ является глобальным, а конфигурация АА – локальным минимумом энергии, что свидетельствует об адекватности модифицированного потенциала.

Рассчитанные нами критическое напряжение и критическая одноосная растягивающая деформация однослойного графена, приводящие к его разрыву, составили 36 Н/м и 18 % соответственно. Это соответствует экспериментально измеренным значениям 25–55 Н/м и 18–31 % [33], а также независимо рассчитанным методом сильной связи значениям 42 Н/м и 27 % [32]. В любом случае, использованная в работе деформация 5 % значительно ниже критической.

Для определения характерного времени межслоевого теплообмена τ мы использовали экспоненциальную интерполяцию временной зависимости кинетической энергии атомов нагретого E_1 и нагревающегося E_2 слоев ВГ:

$$E_1 = \frac{1}{2}E_0 \left(1 + \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right); \tag{2}$$

$$E_2 = \frac{1}{2}E_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right),$$

где E_0 – начальная кинетическая энергия нагретого слоя. Величина τ выбиралась исходя из наилучшего соответствия между формулой (2) и зависимостью, полученной из молекулярно-динамического расчета. Характерный пример зависимостей $E_1(t)$ и $E_2(t)$, соответствующих начальной температуре верхнего слоя 5000 К и гидростатической деформации 5 %, представлен на рис. 3. Из рисунка 3 видно, что зависимости хорошо аппроксимируются формулами (2).

На рисунке 4 представлено характерное время межслоевого теплообмена τ как функция начальной температуры нагретого слоя и деформации ВГ. Видно, что оба фактора изменяют величину τ в несколько раз. Понижение τ для бездефектного и растянутого ВГ при уменьшении начальной температуры от 300 до 77 К (рис. 4а) объясняется ослаблением ангармонизма межслоевого взаимодействия. Повышение теплопроводности при низких температурах характерно для бездефектных трехмерных кристаллов, включая алмаз, сапфир, кварц и алюминий (см. [34, 35] и ссылки в них). Принципиально другая зависимость наблюдается в гофрированном ВГ, одноосно сжатом на 10 %. При уменьшении температуры от 300 до 77 К время теплообмена возрастает в ~ 2.5 раза (см. рис. 4б). Этот эффект также связан с ангармонизмом; однако, в ВГ он не является слабым и специфически зависит от температуры. Одно-

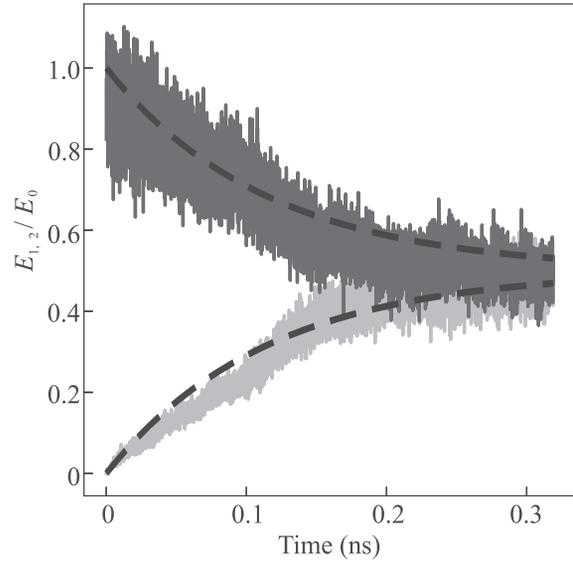


Рис. 3. (Цветной онлайн) Временная зависимость кинетической энергии атомов нагретого E_1 и нагревающегося E_2 слоев ВГ. Обе энергии нормированы на начальную энергию нагретого слоя E_0 . Черные пунктирные жирные линии – экспоненциальная интерполяция по формулам (2)

осно сжатый гофрированный ВГ находится на грани расслоения: вследствие сжатия энергия E_{AB} и жесткость C_{ZZ} межслоевого взаимодействия уменьшаются почти вдвое, а расстояние d возрастает до 3.78 Å. Из-за удаленности слоев теплообмен при 77 К почти прекращается. Лишь при температуре 300 К амплитуда тепловых колебаний атомов нагретого слоя становится достаточной для того, чтобы они могли взаимодействовать со вторым слоем.

В интервале $T = 300–5000$ К наблюдается слабая температурная зависимость времени τ . Существенное падение τ в экстремальном диапазоне 5000 ÷ 7000 К связано с возникновением в нагретом слое множества тепловых дефектов, вплоть до его разрушения. Этот диапазон лежит выше температуры плавления графена. Расщепление графита на графеновые слои происходит при ~ 3000 К [36], а плавление графена происходит вблизи 5000 К (~ 4900 К [37], ~ 4510 К [38], ~ 5100 К [39]). При начальной температуре верхнего слоя в диапазоне 5000 ÷ 7000 К возможны два конкурирующих процесса: распад ВГ за счет расслоения или плавления нагретого слоя или его охлаждение вдвое за счет теплообмена с нижним слоем, после чего термический распад ВГ радикально замедлится. В предположении постоянной теплоемкости в случае сохранения структуры при начальной температуре 7000 К, конечная температура каждой плоскости будет равна 3500 К, что может приве-

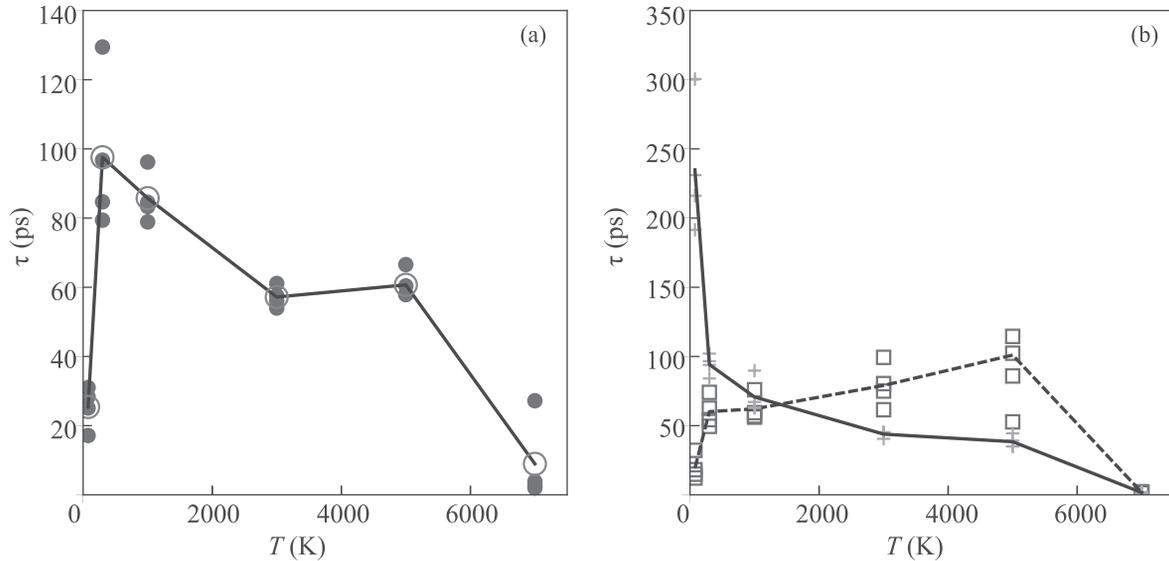


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурная зависимость характерного времени межслоевого теплообмена в ненапряженном (а) и деформированном (б) ВГ. (а) – Маленькие сплошные кружки – время теплообмена для четырех вариантов начальных условий; большие кружки и сплошная линия – усредненное по четырем вариантам значение этого времени. (б) – Квадраты и пунктирная линия – аналогичные характеристики для растянутого ВГ (двухосное растяжение на 5%); кресты и сплошная линия – аналогичные характеристики для гофрированного ВГ (одноосное сжатие на 10%)

сти только к расслоению ВГ, но не к его плавлению. Поскольку при таком нагреве выравнивания температур не происходит, а происходит плавление верхней плоскости, исследовать более высокие начальные температуры не имеет смысла.

Существенное переупорядочение атомов в процессе выравнивания энергий слоев ВГ наблюдалось при температурах $5000 \div 7000$ К. При 5000 К нагретый слой не успевал разрушиться, однако часто наблюдался его сдвиг относительно второго слоя. В ненапряженном и растянутом графене в результате сдвига система переходила из конфигурации АВ в соседнюю конфигурацию, также имеющую тип АВ (только один раз наблюдался переход в конфигурацию АА, что объясняется метастабильностью этой конфигурации). В гофрированном ВГ во всех случаях наблюдался сильный сдвиг вдоль направления гребня гофра. Высокая относительная подвижность слоев гофрированного ВГ обусловлена существенным ослаблением межплоскостного взаимодействия. При 7000 К в ненапряженном и в обоих деформированных образцах ВГ происходит накопление термических дефектов, аналогичных дефектам, возникающим при плавлении графена [39]. В нагретом слое образуются смежные многоатомные кольца. По мере накопления дефектов значительная часть атомов приобретает *sp*-гибридизацию. Атомы нагретого слоя формируют “клубок” карбиновых нитей и мелких углеродных фрагментов (рис. 5а). Рисунок 5б

иллюстрирует процесс расслоения ВГ при 7000 К: отделившийся верхний слой находится в состоянии распада.

В работе [40] обсуждалась возможность ковалентного связывания слоев ВГ: кромки отверстий в разных слоях могут соединяться между собой. В настоящей работе ни при каких условиях не наблюдалось ковалентное связывание слоев, несмотря на существование дефектов в разрушающемся слое и высокую кинетическую энергию, позволяющую атомам близко подходить друг к другу. Видимо, это связано с отсутствием дефектов во втором слое ВГ.

Заключение. Показана сильная зависимость интенсивности межслоевого теплообмена в ВГ от начальной температуры нагретого слоя и характера деформации системы. Гидростатическое растяжение в пределах 5% является упругим, при этом энергия межслоевого взаимодействия и межслоевое расстояние практически не меняются. При одноосном сжатии на 10% ВГ становится гофрированным, межслоевое расстояние возрастает, а энергия и жесткость межслоевого взаимодействия уменьшаются в ~ 2 раза. При понижении начальной температуры от комнатной до температуры жидкого азота межслоевая теплопроводность ненапряженного и растянутого ВГ возрастает в 3–4 раза. В сжатом (гофрированном) образце, который находится на пороге расслоения, наблюдается обратная зависимость: при понижении температуры до 77 К теплопровод-

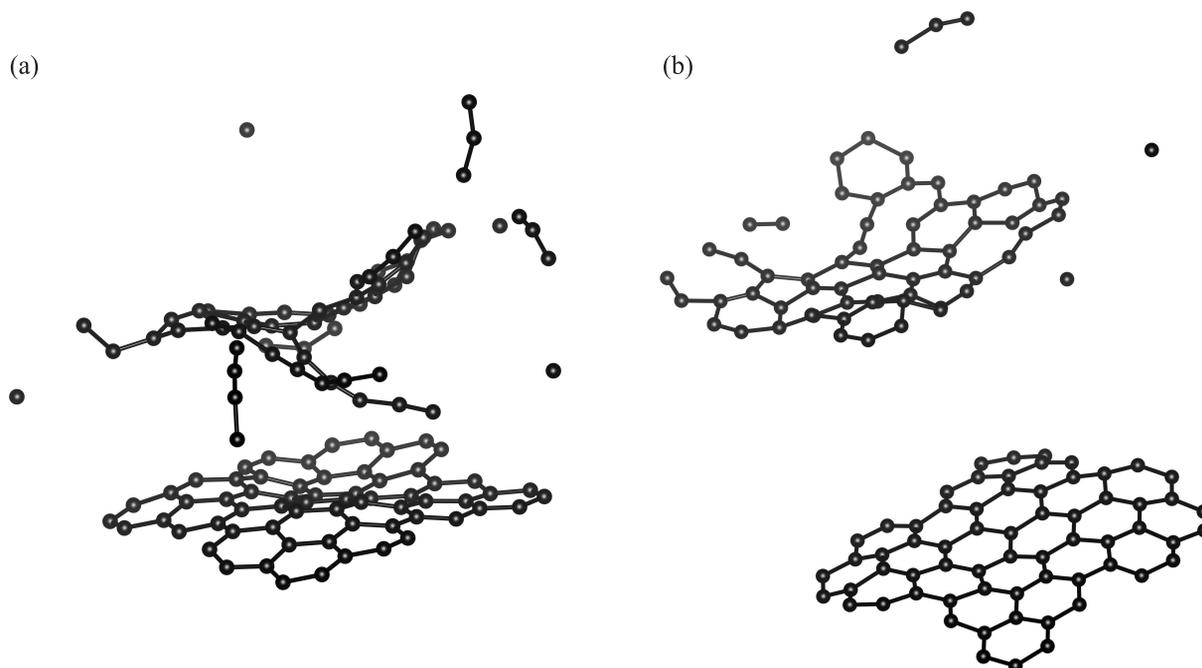


Рис. 5. Термические дефекты в ВГ при начальной температуре нагретого слоя 7000 К: плавление нагретого слоя (а) и расслоение системы (b)

ность падает в 2.5 раза. В температурном интервале 300–5000 К наблюдается слабая зависимость межслоевой теплопроводности от температуры. При начальной температуре нагретого слоя до 3000 К структурные дефекты не успевают возникнуть в нем в течение времени, необходимого для теплообмена. При начальной температуре 5000 К часто наблюдается параллельный сдвиг слоев без расслоения ВГ. В сжатом образце параллельный сдвиг происходит только вдоль направления гофра. При начальной температуре 7000 К наблюдаются как накопление структурных дефектов, так и плавление, а в некоторых случаях – отслоение нагретого слоя. Плавление нагретого слоя приводит к существенному усилению межслоевого теплообмена, из-за чего межслоевая теплопроводность возрастает на порядок при увеличении начальной температуры нагретого слоя от 5000 до 7000 К. Учитывая существенное влияние дефектов на интенсивность межслоевого теплообмена, представляет интерес провести аналогичное исследование для дефектного ВГ и для двухслойного Стоун-Уэльсовского графена – недавно открытого квазидвумерного кристалла графена, содержащего в своей структуре регулярную решетку дефектов [41].

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации # МК-722.2020.2 и Министерства науки и высшего образо-

вания РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ.

1. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *Science* **313**, 951 (2006).
2. Y. Zhang, T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
3. G. Fiori and G. Iannaccone, *IEEE Electron Device Letters* **30**, 261 (2009).
4. M.-C. Chen, C.-L. Hsu, and T.-J. Hsueh, *IEEE Electron Device Letters* **35**, 590 (2014).
5. Y. Tang, Z. Liu, Z. Shen, W. Chen, D. Ma, and X. Dai, *Sens. Actuator B: Chem.* **238**, 182 (2017).
6. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthil, and P. Jarillo-Herrero, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 076801 (2020).
7. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
8. Y. Choi, J. Kemmer, Y. Peng, A. Thomson, H. Arora, R. Polski, Y. Zhang, H. Ren, J. Alicea, G. Refael, F. von Oppen, K. Watanabe, T. Taniguchi, and S. Nadj-Perge, *Nat. Phys.* **15**, 1174 (2019).
9. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgo and L. M. K. Vandersypen, *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
10. J. T. Robinson, J. S. Burgess, C. E. Junkermeier, S. C. Badescu, T. L. Reinecke, F. K. Perkins,

- M. K. Zalalutdniov, J. W. Baldwin, J. C. Culbertson, P. E. Sheehan, and E. S. Snow, *Nano Lett.* **10**, 3001 (2010).
11. K. S. Grishakov, K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, and M. M. Maslov, *Applied Surface Science* **463**, 1051 (2019).
12. B. Li, L. Zhou, D. Wu, H. Peng, K. Yan, Y. Zhou, and Z. Liu, *ACS NANO* **5**, 5957 (2011).
13. D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Science* **323**, 610 (2009).
14. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, K. Zhou, and A. V. Savin, *Phys. Rev. B* **86**, 035427 (2012).
15. S. V. Dmitriev, J. A. Baimova, A. V. Savin, and Y. S. Kivshar, *Comput. Mater. Sci.* **53**, 194 (2012).
16. M. M. Maslov, A. I. Podливаев, and K. P. Katin, *Molecular Simulation* **42**, 305 (2016).
17. K. P. Katin, K. S. Grishakov, A. I. Podливаев, and M. M. Maslov, *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 2065 (2020).
18. K. P. Katin and M. M. Maslov, *Phys. and Chem. Solids* **108**, 82 (2017).
19. K. P. Katin, S. A. Shostachenko, A. I. Avhadieva, and M. M. Maslov, *Adv. Chem. Phys.* **2015**, 506894 (2015).
20. А. И. Подливаев, Л. А. Опенов, *ФТТ* **60**, 160 (2018).
21. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *ФТТ* **60**, 795 (2018).
22. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 746 (2019).
23. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *ФТП* **53**, 724 (2019).
24. И. Ю. Долинский, К. П. Катин, К. С. Гришаков, В. С. Прудковский, Н. И. Каргин, М. М. Маслов, *ФТТ* **60**, 816 (2018).
25. I. V. Lebedova, A. A. Knizhnik, A. M. Popov, Y. E. Lozovik, and B. V. Potapkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 5687 (2011).
26. S. D. Chakarova-Käck, A. Vojvodic, J. Kleis, P. Hyldgaard, and E. Schröder, *New J. Phys.* **12**, 013017 (2010).
27. R. Al-Jishi and G. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **26**, 4514(1982).
28. E. Mostaani and N. D. Drummond, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 115501 (2015).
29. Н. А. Абдуллаев, *ФТТ* **48**, 623 (2006).
30. А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 728 (2020).
31. E. M. Pearson, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, *Phys. Rev. A* **32**, 3030 (1985).
32. E. Cadelano, P. L. Palla, S. Giordano, and L. Colombo, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 235502 (2009).
33. C. Lee, X. Wei, W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
34. G. Fugallo, M. Lazzeri, L. Paulatto, and F. Mauri, *Phys. Rev. B* **88**, 045430 (2013).
35. F. Pobell, *Matter and Methods at Low Temperatures*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2007), p. 64.
36. F. Colonna, J. H. Los, A. Fasolino, and E. J. Meijer, *Phys. Rev. B* **80**, 134103 (2009).
37. K. V. Zakharchenko, A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 202202 (2011).
38. J. H. Los, K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, *Phys. Rev. B* **91**, 045415 (2015).
39. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *ФТТ* **58**, 821 (2016).
40. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and Ph. Lambin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 27432 (2016).
41. H. Yin, X. Shi, C. He, M. Martinez-Canales, J. Li, C. J. Pickard, C. Tang, T. Ouyang, C. Zhang, and J. Zhong, *Phys. Rev. B* **99**, 041405 (2019).

Наноструктурированный графен на β -SiC/Si(001): атомная и электронная структура, магнитные и транспортные свойства (Миниобзор)

В. Ю. Аристов⁺¹⁾, А. Н. Чайка⁺¹⁾, О. В. Молодцова*, И. М. Аристова⁺, Д. В. Поторочин*

⁺Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

* Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Росси

Поступила в редакцию 18 декабря 2020 г.

После переработки 18 декабря 2020 г.

Принята к публикации 28 декабря 2020 г.

В обзоре представлены результаты исследований, выполненных в рамках проекта Российского фонда фундаментальных исследований # 17-02-01139. Изучены свойства графена, синтезированного на поверхности эпитаксиальных пленок монокристаллического кубического карбида кремния, предварительно выращенных на пластинах Si(001). Полученные результаты демонстрируют, что слои графена, синтезированные на подложках β -SiC/Si(001), имеют атомную структуру и электронные свойства свободно висящего однослойного графена. На вицинальных подложках SiC(001) могут быть синтезированы непрерывные слои графена с одним предпочтительным направлением границ нанодоменов, которое определяется ориентацией ступеней на исходной поверхности. Продемонстрирована возможность контролируемого роста одно-, двух- и трехслойного графена на пластинах β -SiC/Si(001). Проведенные исследования показали открытие транспортной щели и большое положительное магнетосопротивление в параллельном магнитном поле в упорядоченной системе нанополос графена на вицинальной поверхности SiC(001). Показано, что функционализация графена органическими соединениями приводит к изменению электронных свойств графена на SiC(001), превращая его в полупроводник с заданными свойствами, что открывает возможности для применений в современной микро- и нанoeлектронике.

DOI: 10.31857/S1234567821030083

Введение. Графен – один слой атомов углерода, связанных между собой sp^2 -орбиталями и образующих двумерную (2D) гексагональную решетку. Термин “графен” может применяться, строго говоря, только к “свободно висящему” монослою атомов углерода. Тем не менее, этот термин часто применяется в литературе для нескольких слоев графена, или даже ультратонких графитовых мультислоев, уложенных в определенном порядке. Электронные свойства графена, связанные с симметрией его двумерной кристаллической решетки, были теоретически изучены несколько десятилетий назад [1]. Тем не менее, интерес к графену резко вырос в 2000-е гг. после успешного практического извлечения ультратонких слоев из пиролитического графита [2]. С 2004 года было опубликовано много работ, демонстрирующих уникальные физические свойства графена, квантово-размерные эффекты, наблюдаемые в эксперименте даже при комнатной температуре, а также возможности его применения, например, для разработки фо-

тодатчиков, прозрачных электрических контактов и ячеек памяти. Благодаря своим уникальным механическим и электронным транспортным свойствам графен можно рассматривать в качестве альтернативы кремнию в электронных технологиях. Графен может быть особенно перспективным для создания приборов, работающих в условиях высоких температур и высоких частот, требующих повышенной устойчивости кристаллической решетки и чрезвычайно высокой подвижности электронов, которыми обладают ультратонкие графитовые пленки. Уникальные свойства графена могут быть использованы для разработки приборов спинтроники, квантовых компьютеров, терагерцовых источников и др. Однако для успешного применения в электронных устройствах слои графена должны быть синтезированы на полупроводниковых или изолирующих подложках.

Графитизация поверхности карбида кремния [3–5] позволяет выращивать слои графена на широкозонной полупроводниковой подложке. Эпитаксиальные слои графена, синтезированные на подложках из гексагонального карбида кремния

¹⁾e-mail: aristov@issp.ac.ru; chaika@issp.ac.ru

(α -SiC) в сверхвысоком вакууме (СВВ) и в атмосфере аргона [4, 5], демонстрируют почти идеальные линейные зависимости в энергетическом спектре электронов [6] и транспортные свойства, характерные для монослойного графена, полученного с помощью механического отслаивания [2]. Однако слои графена, синтезированные на α -SiC, не подходят для массовых технологий из-за небольшого размера и высокой стоимости монокристаллических пластин. Синтез графена на поверхности тонких пленок кубической модификации карбида кремния β -SiC, выращенных эпитаксиально на технологичных пластинах Si(001) [7–19], может обеспечить метод производства графена на относительно дешевых полупроводниковых подложках, преимуществом которого является совместимость с существующей технологией производства элементов микро- и нанoeлектроники на основе кремния.

Целью данной работы являлась разработка методов синтеза и исследование свойств наноструктурированного графена с контролируемым числом слоев и направлением междоменных границ на поверхности тонких (толщиной 1–3 микрона) монокристаллических эпитаксиальных слоев β -SiC, предварительно выращенных на пластинах кремния Si(001), используемых в микроэлектронике для создания больших интегральных схем. На этих подложках по методикам, описанным в работах [7–10], были синтезированы непрерывные и однородные по толщине графеновые слои (до нескольких моноатомных слоев) с размерами, ограниченными только размерами подложки β -SiC/Si(001).

Процесс приготовления ультратонких графеновых покрытий заключается в сублимации атомов кремния с поверхности SiC(001) с последующей графитизацией поверхностного слоя при высоких температурах в контролируемых условиях сверхвысокого вакуума. Как показали наши предыдущие исследования [8–10], слои графена на SiC(001), синтезированные таким способом, состоят из нанодоменов (узких полосок шириной от 5 до 20 нанометров, разделенных междоменными границами). При использовании низкоиндексной поверхности SiC(001) наблюдаются два предпочтительных направления роста нанодоменов графена и ориентации междоменных границ: $[110]$ и $[1\bar{1}0]$. Это обусловлено наличием двух типов зерен подложки (антифазных доменов, АФД), имеющих одинаковую плоскость (001), параллельную подложке, но развернутых на 90° вокруг нормали к поверхности. Размер зерен, как правило, составляет несколько микрон. Как показали наши исследования с использованием сканирующей туннельной

микроскопии (СТМ) [8], кристаллические решетки в нанодоменах графена, выращенных на поверхности АФД, развернуты на угол $\pm 13.5^\circ$ относительно направлений $[110]$ или $[1\bar{1}0]$, а сами нанодомены и границы между ними в пределах каждого АФД вытянуты вдоль одного из этих направлений. В связи с этим следует отметить ряд существенных особенностей:

1. Для исследования свойств, обусловленных границами нанодоменов, необходимы методики, позволяющие тестировать области индивидуальных зерен (АФД), в которых все нанодомены и границы между ними ориентированы одинаково, например, микро-дифракция медленных электронов (микро-ДМЭ), микроскопия медленных электронов (ММЭ), СТМ с атомным разрешением и др.

2. Исследования интегральными методами (ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (УФЭСУР), рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), дифракция медленных электронов (ДМЭ)) будут приводить к детектированию доменов с различной ориентацией кристаллической решетки, что в ряде исследований не позволяет понять свойства и роль индивидуальной границы.

3. Использование таких систем для создания больших интегральных схем невозможно, ввиду невозможности предсказать ориентацию нанодоменов и границ между ними, особенно в том случае, когда используются физические явления, зависящие от структуры и направления междоменных границ.

Важной задачей данной работы было исследование структуры и свойств графена, синтезированного на вицинальных подложках при небольших углах отклонения кристаллографической оси $[001]$ карбида кремния от нормали к подложке (0–4 градуса). Как было показано ранее (работа [20] и ссылки в ней), для реконструированной поверхности SiC(001) это может приводить к “подавлению” одного из двух типов зерен подложки. При этом в СТМ-изображениях и картинах ДМЭ поверхностные реконструкции на SiC(001) оказываются однодоменными. Это может привести к упорядочению нанодоменов графена и границ между ними. В частности, могут быть достигнуты условия, при которых все междоменные границы будут ориентированы вдоль одного из направлений $\langle 110 \rangle$ по всей поверхности подложки. Очевидно, что такие системы нанополос графена предпочтительны для потенциальных применений. Кроме того, такое упорядочение может позволить контролировать транспортные и магнетотранспортные свойства наноструктурированного графена на SiC(001). На одной из вицинальных подложек β -SiC/Si(001)

нам удалось синтезировать и исследовать однородное покрытие трехслойного графена, состоящее из нанодоменов с одним предпочтительным направлением междоменных границ [11]. Продемонстрировано, что формирование такой системы нанополос графена при температурах ниже 100 К приводит к открытию транспортной щели, позволяющей достигать больших отношений токов включения/выключения ($\sim 10^4$) в трехслойном графене.

В миниобзоре выделены три основных направления исследований:

(I) Изучение механизма послойного роста наноструктурированного графена на пластинах β -SiC/Si(001).

(II) Изучение магнетотранспортных свойств трехслойного графена, синтезированного на β -SiC/Si(001).

(III) Модификация атомных и электронных свойств графена на β -SiC/Si(001) с помощью органических соединений.

Экспериментальные методики. Образцы исследовались современными экспериментальными методами физики поверхности, такими как ММЭ, микро-ДМЭ, РФЭС, УФЭСУР, спектроскопия тонкой околороговой структуры поглощения рентгеновских лучей (NEXAFS), сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия (СТС), просвечивающая электронная микроскопия, фотоэмиссионная электронная микроскопия, рамановская спектроскопия. Для интерпретации полученных результатов использовались расчеты, выполненные с помощью теории функционала плотности (ТФП). Особое внимание уделялось обнаружению и исследованию электронных состояний, локализованных вблизи границ между нанодоменами графена. Следует отметить, что исследование графеновых систем является сложной задачей, требующей применения комплекса взаимодополняющих методов анализа поверхности с использованием уникального оборудования и Европейских источников синхротронного излучения: BESSY-II (Берлин), MAX-Lab (Лунд), ELETTRA (Триест), DESY (Гамбург). Для получения достоверной информации об исследовавшихся системах образцы подготавливались в СВВ непосредственно перед измерениями. Особенности подготовки образцов и проводившихся экспериментов могут быть найдены в оригинальных статьях [21–23].

Послойный рост графена на β -SiC/Si(001). Известно, что толщина пленки графена, выращенного на карбиде кремния, зависит от ряда условий: давления газов в ростовой камере, температуры во время синтеза и длительности нагрева [24]. Поэто-

му чрезвычайно важно иметь возможность контролировать количество синтезированных графеновых слоев *in-situ* во время роста. В работе [21] с помощью РФЭС с микрометровым размером зондируемой области (μ -XPS), микро-УФЭСУР (μ -ARPES), ММЭ и микро-ДМЭ (μ -LEED), показано, что контроль толщины графенового покрытия *in-situ* во время высокотемпературного синтеза в СВВ возможен. Более того, можно остановить синтез в тот момент, когда желаемое количество слоев графена на поверхности SiC(001) уже выращено. Важно отметить, что РФЭС-спектры глубоких уровней, полученные в [21], могут быть использованы для идентификации одно-, двух- и трехслойного графена, синтезированного на поверхности карбида кремния. Например, используя приборы, позволяющие контролировать РФЭС спектры глубокого уровня C 1s *in-situ* во время нагрева образцов в реальном времени [25], можно управляемо выращивать одно-, двух- и трехслойный графен без использования полного набора сложных микро-спектроскопических методов и необходимости следовать определенному рецепту (давление в вакуумной камере, температура и время отжига и т.д.).

Для слоев графена, синтезированных в СВВ на SiC(001), характерны два типа метаструктур различного масштаба. Первая метаструктура представляет собой семейство из четырех видов нанодоменов, каждый из которых имеет определенную ориентацию решетки. Кристаллические решетки в нанодоменах повернуты на углы $\pm 13.5^\circ$ относительно двух ортогональных направлений $[110]$ и $[1\bar{1}0]$ кристаллической решетки β -SiC [8–11]. В работе [11] такой 27-градусный поворот графеновых решеток в соседних нанодоменах был связан с образованием периодической атомной структуры вдоль границ доменов. Примечательно, что такой же угол между решетками графена в соседних доменах наблюдался при изучении поликристаллического однослойного графена, выращенного на медных фольгах путем химического осаждения из газовой фазы [26].

Вторая метаструктура связана с наличием АФД β -SiC микрометрового масштаба. Поворот кристаллических решеток β -SiC на 90° приводит к преобладанию только двух ориентаций кристаллической решетки графена в пределах одного АФД, что соответствует развороту решеток на углы $\pm 13.5^\circ$ относительно одного из направлений $[110]$ или $[1\bar{1}0]$. Поворот кристаллических решеток нанодоменов графена на 90° в различных АФД приводит к четырем предпочтительным вариантам ориентации решетки графена на SiC(001) [8–10].

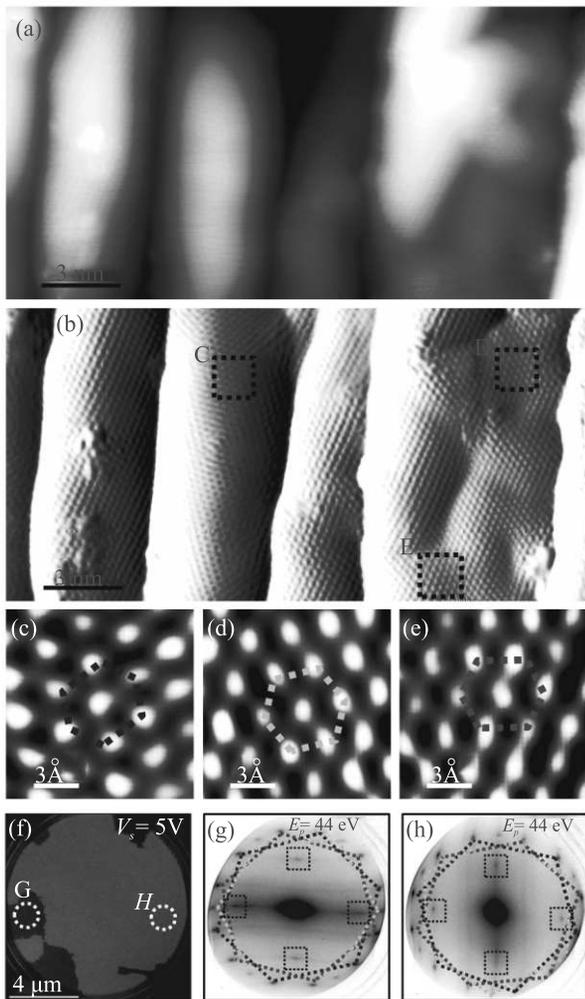


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – СТМ-изображение графена на SiC(001), демонстрирующее верхний наноструктурированный слой. (б) – То же самое изображение после дифференцирования dz/dx . (с)–(е) – Увеличенные СТМ-изображения областей С, D и E на рис. (б), иллюстрирующие три предпочтительные ориентации решетки графена в нанодоменах, которые ответственны за восемнадцать дифракционных пятен, обозначенных цветными шестиугольниками на картинах микро-ДМЭ, измеренных в разных АФД (g или h). (f) – ММЭ-изображение графена на SiC(001). Светлые и темные области соответствуют разным антифазным доменам β -SiC (отмечены как G и H) [21]

На рисунке 1а показано типичное СТМ-изображение слоев графена на SiC(001), полученное внутри одного из АФД. Ширина нанодоменов составляет несколько нанометров, а их границы направлены вдоль одного из направлений $\langle 110 \rangle$. Слой графена случайным образом искривлен в пределах нанодоменов [27] и, в большинстве случаев, изогнут око-

ло границ с радиусом кривизны порядка нескольких нанометров [22]. Чтобы проиллюстрировать атомное разрешение на такой изогнутой поверхности, СТМ-изображение на рис. 1а было продифференцировано вдоль оси быстрого сканирования (результат дифференцирования показан на рис. 1б). На рисунке 1б видны две предпочтительные ориентации гексагональной решетки, повернутые друг относительно друга на 27° (рис. 1с и е). На изображении также заметно присутствие третьей ориентации графена (рис. 1d). Как видно из изображений, представленных на рис. 1с-е, две предпочтительные ориентации решетки графена (рис. 1с и е) симметрично повернуты относительно третьей ориентации решетки (рис. 1d).

Чтобы получить информацию об однородности поверхностной атомной структуры на микро- и миллиметровом масштабе, на том же образце были проведены измерения методами ММЭ и микро-ДМЭ. Данные микро-ДМЭ с различных участков поверхности образца демонстрируют шесть предпочтительных ориентаций решетки графена (красные, синие и желтые шестиугольники на рис. 1g и h). В каждом отдельном АФД микрометрового размера систематически наблюдались три предпочтительные ориентации графеновой решетки. Например, картины микро-ДМЭ, измеренные с участков поверхности G и H на рис. 1f, повернуты на 90° друг относительно друга (рис. 1g и h), что отвечает двум семействам нанодоменов в АФД (темные и светлые области на рис. 1f). Четыре предпочтительные ориентации решетки графена (красные и синие шестиугольники на рис. 1g и h) повернуты на углы $\pm 13.5^\circ$ относительно двух ортогональных направлений $\langle 110 \rangle$, как обсуждалось ранее [8–11]. Две другие ориентации решетки графена (желтые шестиугольники) ориентированы вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ кристаллической решетки β -SiC, что можно заключить из положения рефлексов, отвечающих решеткам графена и SiC(001) на картине микро-ДМЭ (рефлексы от подложки на рис. 1g и h отмечены пунктирными прямоугольниками). Информация о природе двух не повернутых относительно решетки β -SiC графеновых доменов была получена в результате *in-situ* исследований послойного роста графена на β -SiC/Si(001) в СВВ, выполненного с использованием методов ММЭ, микро-ДМЭ, УФЭСУР и РФЭС [21].

На рисунке 2 представлены экспериментальные данные, полученные при исследовании структуры одного АФД образца β -SiC/Si(001) в ходе высокотемпературной графитизации поверхности в СВВ. Чтобы показать изменение структуры

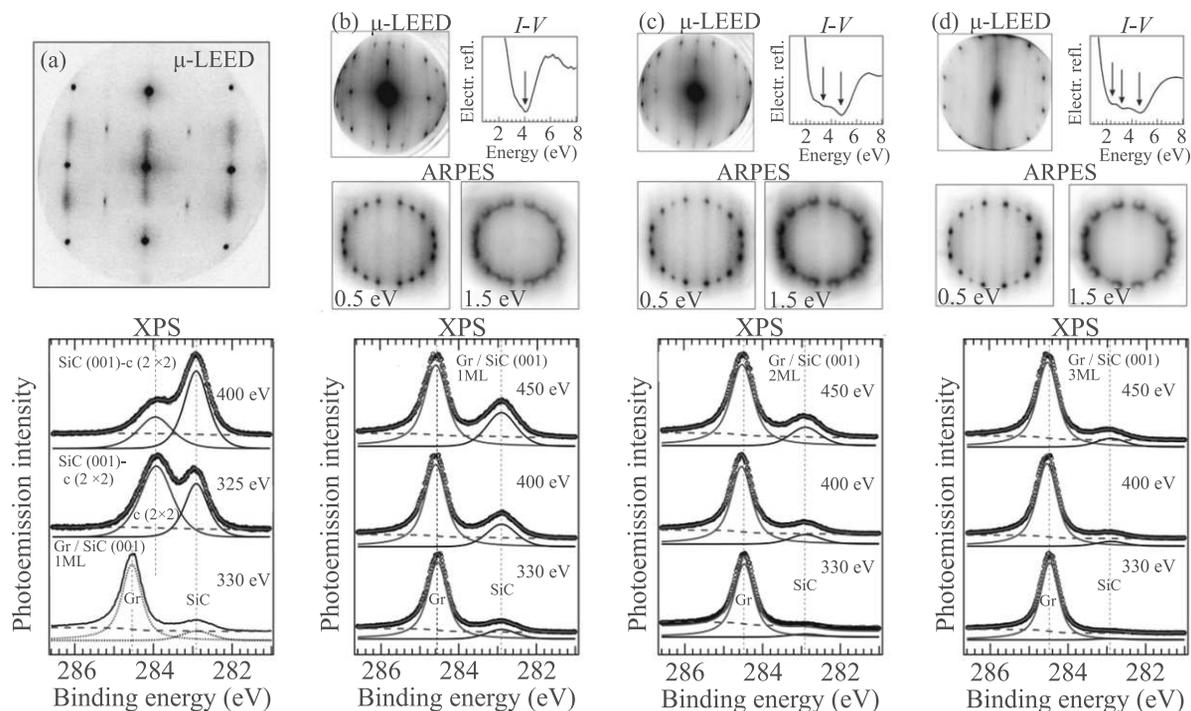


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Данные микро-ДМЭ (верхний ряд) и микро-РФЭС (нижний ряд) структуры SiC(001)- $c(2 \times 2)$. Чтобы проиллюстрировать принципиальное различие между РФЭС-спектрами C 1s структуры $c(2 \times 2)$ и графена, они представлены на одном графике. (b)–(d) – Данные μ -ДМЭ, μ -РФЭС, μ -УФЭСУР, а также спектры отражения электронов (I – V), измеренные с одного участка поверхности при толщине покрытия графена на SiC(001), равной приблизительно одному (b), двум (c) и трем (d) монослоям [21]

поверхности при нагреве, на рис. 2 показаны микро-спектроскопические данные, соответствующие реконструкции $c(2 \times 2)$ (а), одно- (b), двух- (c) и трехслойному графену (d), измеренные последовательно на образце β -SiC/Si(001) при увеличении температуры отжига. На рисунке 2 показаны экспериментальные данные только для одного из АФД, данные с других АФД были аналогичными. Количество синтезированных графеновых слоев можно определить по структуре низкоэнергетической части спектров отражения электронов (I – V), представленных на рис. 2b–d (верхний ряд). Число слоев графена соответствует количеству минимумов на спектрах, что обусловлено интерференцией электронов на слоях графена [28, 29]. Как видно на рис. 2b–d, толщина пленки постепенно увеличивается с увеличением температуры и времени отжига.

Графики на рис. 2 (нижняя часть) показывают эволюцию РФЭС-спектров уровня C 1s, измеренных при расположении плоскости образца нормально к оси анализатора (размер зондируемой области 2 мкм) с использованием фотонов четырех различных энергий (325, 330, 400 и 450 эВ). Выбранные

энергии фотонов соответствуют различной длине свободного пробега фотоэлектронов и, как следствие, различной поверхностной чувствительности РФЭС-спектров уровня C 1s. В этих экспериментах наибольшая поверхностная чувствительность достигается при энергиях фотонов 325 и 330 эВ.

Для независимой оценки толщины пленки графена спектры C 1s были разложены на отдельные компоненты, соответствующие различным химическим связям атомов углерода. РФЭС-спектры анализировались с помощью программного обеспечения CasaXPS (версия 2.3.16 PR 1.5). Перед разложением спектры были нормированы на максимум интенсивности. Разложение спектров C 1s, полученных для сверхструктуры углерода SiC(001)- $c(2 \times 2)$ и графена на SiC(001), было выполнено с использованием свертки либо симметричных функций Гаусса и Лоренца (Gaussian–Lorentzian, GL), либо асимметричной функции Дониаха–Сунжича (Doniach–Šunjić, DS) [30]. Для учета вклада неупруго рассеянных электронов был использован метод Ширли [31]. Симметричные формы линий, полученные с использованием смешанной функции Гаусса и Лоренца, были использованы для аппроксимации пиков SiC и

сверхструктуры углерода $c(2 \times 2)$. Асимметричная функция была использована для компонент графена, проявляющего металлические свойства. Результаты разложения спектров $C 1s$ на отдельные компоненты представлены на рис. 2 вместе с экспериментальными данными (черные кружки), где красная линия – пик графена (Gr), синяя линия – пик подложки SiC, коричневая линия – пик сверхструктуры углерода $c(2 \times 2)$, зеленая пунктирная линия – фон, а бирюзовая линия – это сумма всех компонент. Во время анализа спектров мы сохраняли положение пика подложки на фиксированном значении энергии связи 282.9 эВ и меняли ширину других линий, их энергии связи и интенсивности. Как видно на рис. 2, эти линии достаточно хорошо воспроизводят экспериментальные спектры глубокого уровня $C 1s$.

Можно отметить, что каждый спектр раскладывается только на две компоненты. Для сверхструктуры углерода $c(2 \times 2)$ (рис. 2а) две симметричные компоненты с энергиями связи 282.9 и 283.95 эВ отвечают вкладу объема и поверхности соответственно. Объемная компонента хорошо аппроксимируется с помощью смешанной функции, включающей в себя 70 % функции Лоренца и 30 % функции Гаусса [GL (70)]. Поверхностная компонента структуры $c(2 \times 2)$ хорошо аппроксимируется с использованием смешанной функции Лоренца (65 %) и Гаусса (35 %) [GL (65)]. Для спектров $C 1s$, измеренных на графеновых покрытиях разной толщины, каждый спектр может быть разложен на одну симметричную (GL) и одну асимметричную (DS) линии, которые соответствуют объемной компоненте подложки и компоненте графена, соответственно. Коэффициент асимметрии линий графена DS варьировался от 0.026 до 0.032 для спектров, измеренных при разных энергиях фотонов и толщинах графена. Сравнение спектров $C 1s$, измеренных до и после синтеза одного слоя графена (нижняя часть рис. 2а), показывает, что линия графена смещена в сторону больших энергий связи по сравнению с компонентой $c(2 \times 2)$. Поэтому начало роста графена на пластинах β -SiC/Si(001) можно легко определить, используя положения поверхностных компонент в РФЭС-спектрах глубокого уровня $C 1s$. Пик графена сдвинут примерно на 1.65 эВ в сторону более высоких энергий связи относительно объемного пика SiC с энергией связи 282.9 эВ. Положение линии графена незначительно изменялось (в пределах 0.05 эВ) с увеличением толщины графеновой пленки от одного до трех монослоев. Относительная интенсивность графеновой компоненты в фотоэлектронных спектрах возрастает как при уменьшении энергии фотонов, так и при увеличении количе-

ства графеновых слоев. Отношения интенсивностей компонент SiC и графена в спектрах $C 1s$, измеренных на одном образце при различных энергиях фотонов, определяются длиной свободного пробега электронов [32–34]. Поскольку наши данные РФЭС были получены при нормальном расположении плоскости образца к оси анализатора, спектры глубокого уровня и результаты их разложения [21], показанные на рис. 2b–d, можно использовать для идентификации одно-, двух- и трехслойного графена на подложках β -SiC с помощью фотоэлектронных спектров $C 1s$, измеренных при таких же энергиях фотонов и расположении образца относительно оси анализатора. Эти данные можно использовать и для определения количества слоев графена, синтезированного на поверхностях α -SiC, поскольку компоненты подложки, графена и буферного слоя в спектрах $C 1s$ обычно энергетически разделены более чем на 1 эВ.

Спектры $C 1s$, полученные для сверхструктуры углерода $c(2 \times 2)$ до синтеза графена, можно разложить, используя два симметричных пика. Небольшая асимметрия фотоэлектронного спектра после графитизации поверхности SiC может быть связана с увеличением поверхностной проводимости в результате роста слоев графена. Присутствие в спектрах $C 1s$ только двух компонент подтверждает отсутствие сильного химического взаимодействия между слоем графена и β -SiC, которое могло бы привести к появлению дополнительных компонент, смещенных в область больших энергий связи.

Средний ряд изображений на рис. 2b–d показывает карты распределения интенсивности УФЭСУР, записанные для двух фиксированных значений энергий связи ($E = E_F - 0.5$ эВ и $E = E_F - 1.5$ эВ) в зависимости от толщины слоя графена. Эти карты подтверждают коническую форму поверхности Ферми для всех предпочтительных ориентаций решеток графена. Это дополнительно иллюстрируется картами распределения интенсивности в плоскости $k_x - k_y$, измеренными для одного из конусов Дирака при толщине графенового покрытия, близкой к одному монослою (рис. 3). Карты на рис. 3 демонстрируют увеличение сечения конуса с увеличением энергии связи. Отклонение от идеальной окружности, наблюдаемое в экспериментах при энергиях связи больше 1.4 эВ, может быть связано с эффектами фотовозбуждения [35] или тригональной деформации [36].

Примечательно, что данные микро-ДМЭ и УФЭСУР, измеренные для монослоя графена, говорят о равнозначном вкладе повернутых (на углы $\pm 13.5^\circ$) и не повернутых относительно направлений

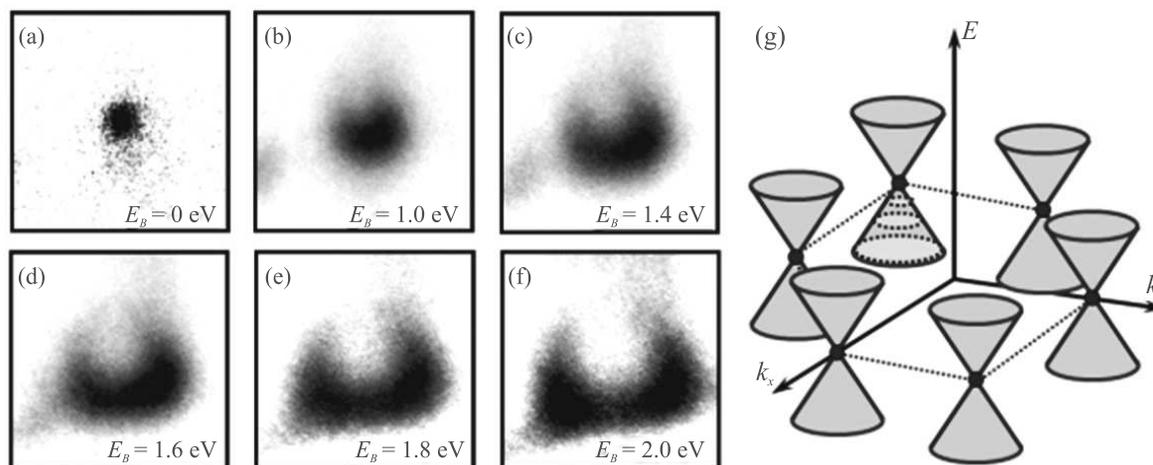


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a)–(f) – Карты распределения интенсивности УФЭСУР монослоя графена ($h\nu = 47$ эВ), измеренные для фиксированных значений энергии связи в диапазоне от 0 до 2 эВ вблизи одной из К-точек зоны Бриллюэна. Данные показывают электронную структуру в плоскости $k_x - k_y$ для одного из конусов Дирака. (g) – Схематичная иллюстрация дисперсии электронов графена $E(k)$ вблизи точек К и К' зоны Бриллюэна [21]

(110) решеток графена. Интенсивность пиков в картинах микро-ДМЭ и картах УФЭСУР, соответствующих “не повернутым” доменам, постепенно уменьшается при увеличении покрытия графена от одного до трех монослоев (рис. 2b–d). Таким образом, не повернутые относительно направлений $\langle 110 \rangle$ решетки графена наблюдаются только на начальном этапе графитизации поверхности SiC(001). Напротив, когда покрытие графена достигает нескольких монослоев, большая часть поверхности покрыта нанодоменами с четырьмя предпочтительными ориентациями решетки, повернутыми на углы $\pm 13.5^\circ$ относительно тех же самых ортогональных направлений $\langle 110 \rangle$ решетки β -SiC. Даже при покрытии в три монослоя сигнал от “не повернутых” графеновых доменов существенно меньше по сравнению с сигналом от “повернутых” доменов (рис. 2d).

На рисунке 4 представлены данные ММЭ (a) и УФЭСУР (b)–(e), полученные для образца монослойного графена на SiC(001). На рисунках 4b и c показаны карты распределения интенсивности УФЭСУР, измеренные для фиксированного значения энергии связи ($E = E_F - 0.5$ эВ) в разных АФД (отмечены как В и С на рис. 4a). На рисунке 4d и e показаны дисперсии электронов, полученные при поперечном сечении экспериментальных данных по координатам обратного пространства, отмеченным пунктирными линиями на рис. 4b и c. Все тридцать шесть конусов демонстрируют одинаковую линейную дисперсию, доказывая, что домены со всеми предпочтительными ориентациями решетки обладают одинаковым энер-

гетическим спектром электронов, который характерен для свободно висящего графена.

Преобладание в данных микро-ДМЭ и УФЭСУР на начальных стадиях роста особенностей, соответствующих не повернутым решеткам графена, объясняет роль сверхструктуры углерода $c(2 \times 2)$, предшествующей графитизации поверхности β -SiC/Si(001). На рисунках 5a–c проиллюстрирована частичная соразмерность гексагональной решетки графена и структуры SiC(001)- $c(2 \times 2)$. Как показано на рис. 5a и c, размеры удвоенной элементарной ячейки $c(2 \times 2)$ (красный квадрат) достаточно хорошо согласуются с размерами четырехугольника (отмечен зеленым), соединяющего эквивалентные атомы решетки графена. Соразмерность решеток дополнительно показана на рис. 5g и h, демонстрирующих СТМ-изображения структуры SiC(001)- $c(2 \times 2)$ и доменов графена одинакового размера. Различия размеров этих двух четырехугольников не превышает 2%, что, по всей видимости, достаточно для начала роста “не повернутого” монослоя графена на SiC(001)- $c(2 \times 2)$. Наши экспериментальные данные свидетельствуют о том, что графеновый слой может быть выращен на SiC(001) только после формирования углеродной сверхструктуры $c(2 \times 2)$. Графен не может быть синтезирован сразу на насыщенной углеродом поверхности со структурой (1×1) . Это согласуется с результатами исследований поверхности SiC(111) [37], где при переходе от структуры $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ к структуре $(3/2 \times \sqrt{3})R30^\circ$ до образования гексагональной решетки графена (1×1)

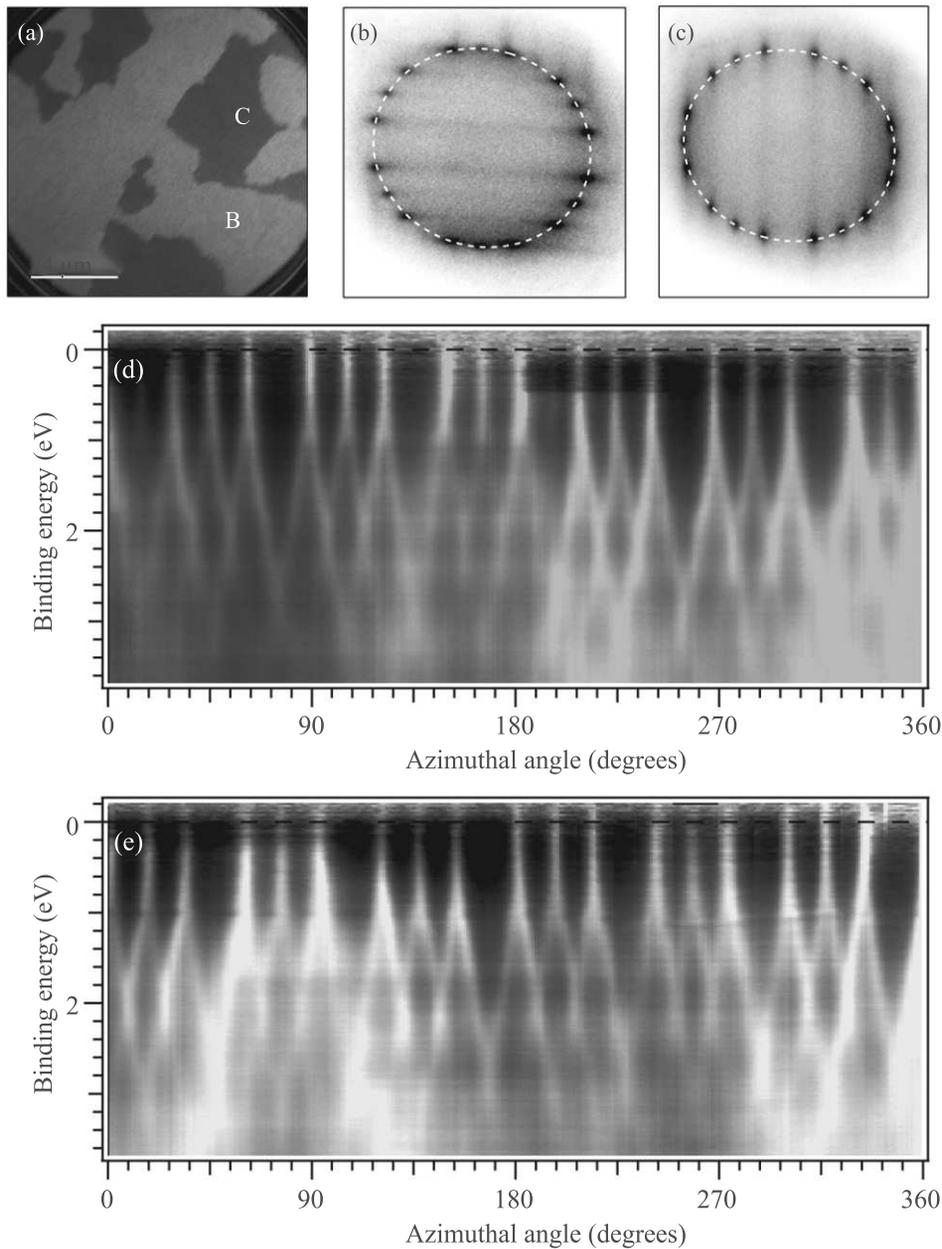


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Темнопольное ММЭ-изображение монослоя графена на SiC(001). (b)–(c) – Карты распределения интенсивности УФЭСУР ($h\nu = 47$ эВ, $E = E_F - 0.5$ эВ, область зондирования $d = 2$ мкм), полученные для доменов, отмеченных буквами В и С на рис. (a). (d)–(e) – Дисперсии электронов, полученные при поперечном сечении экспериментальных данных по координатам обратного пространства, отмеченным пунктирными линиями на рисунках (b) и (c) [21]

наблюдалась очень близкая к графену структура (2×2).

Рисунок 5а демонстрирует, что углеродные димеры сверхструктуры $c(2 \times 2)$ (показаны красным цветом на рис. 5, единичный димер отмечен пунктирным черным овалом на рис. 5а) можно считать элементарными фрагментами “не повернутой” решетки

графена, так как расстояние между атомами углерода в димерах (1.31 \AA) близко к расстоянию между атомами углерода в решетке графена (1.46 \AA). Согласно рис. 5а, на поверхности SiC(001)- $c(2 \times 2)$ должны присутствовать дополнительные атомы углерода, чтобы поверхностная плотность атомов была достаточной для образования монослоя графена.

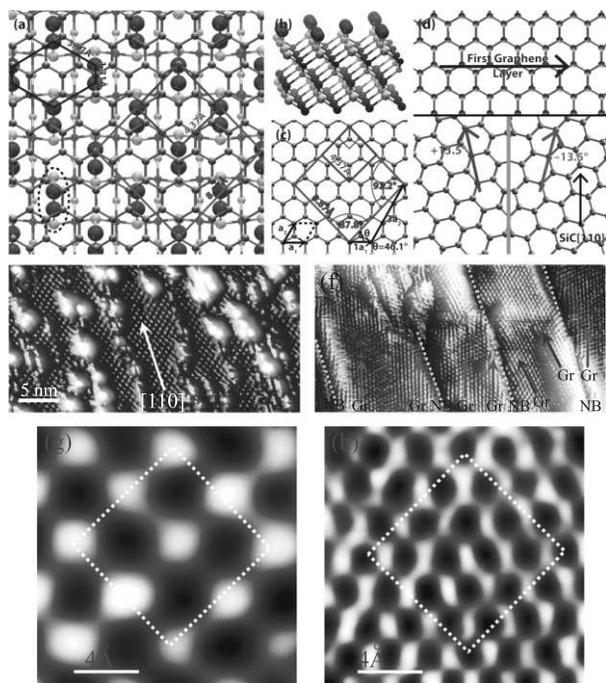


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Схематичное изображение “не повернутого” домена графена, наложенного на сверхструктуру SiC(001)- $c(2 \times 2)$. Атомы углерода и кремния обозначены серыми и желтыми сферами соответственно. Димеры углерода структуры $c(2 \times 2)$ обозначены красными сферами (единичный димер отмечен пунктирным черным овалом). Расстояния между соседними атомами углерода структуры $c(2 \times 2)$ показаны синим шестиугольником. Красный квадрат показывает элементарную ячейку структуры $c(2 \times 2)$, зеленый квадрат иллюстрирует соразмерность удвоенной элементарной ячейки структуры $c(2 \times 2)$ решетке графена. (b) – Квази-3D представление структуры SiC(001)- $c(2 \times 2)$. (c) – Модель, демонстрирующая частичную соразмерность решеток графена и SiC(001)- $c(2 \times 2)$. (d) – Схематичная модель роста многослойного графена на SiC(001): в начале происходит рост “не повернутых” доменов (в соответствии с рисунком (а)), затем – на линейных дефектах начинается рост доменов, в которых решетки графена развернуты на углы 13.5° по и против часовой стрелки относительно направления $\langle 110 \rangle$. (e)–(h) – STM-изображения с атомным разрешением поверхности SiC(001)- $c(2 \times 2)$ (e), (g) и трехслойного графена на β -SiC/Si(001) (f), (h). Квадрат, обозначенный белой штриховой линией на рисунках (g) и (h) показывает удвоенную ячейку $c(2 \times 2)$ и соответствует зеленому квадрату на рис. (a)

Дополнительные атомы углерода действительно наблюдаются в STM-изображениях в виде отдельных особенностей и линейных атомных цепочек, ориентированных вдоль направления $\langle 110 \rangle$ (рис. 5e). Атомы углерода образуют химические связи с димерами

структуры $c(2 \times 2)$ при высокотемпературном отжиге, что приводит к образованию нанодоменов графена с “не повернутой” относительно направления $\langle 110 \rangle$ решеткой.

Размеры “не повернутых” доменов не могут достигать микронного масштаба из-за присутствия на поверхности SiC(001) линейных дефектов (рис. 5e), а также несоответствия между решетками $c(2 \times 2)$ и графена, создающего напряжения. Тем не менее, несоответствие решеток достаточно мало, что приводит к предпочтительному формированию “не повернутых” нанодоменов графена при малых покрытиях. После формирования на поверхности SiC(001) первого монослоя графена следующие слои, предположительно, растут поверх него, начиная с дефектов на поверхности (ступеней или ориентированных вдоль $\langle 110 \rangle$ линейных цепочек атомов), что подтверждается быстрым уменьшением сигнала от “не повернутых” доменов графена в микро-ДМЭ и УФЭСУР с увеличением количества слоев (рис. 2). Второй и третий слой графена, скорее всего, начинают расти на линейных дефектах, которые в итоге определяют ориентацию границ нанодоменов (рис. 5f). В этом случае может быть энергетически выгоден поворот решеток графена в соседних нанодоменах на угол 27° друг относительно друга, как показано на рис. 5f (нижняя часть) [11]. Сравнение STM-изображений с атомным разрешением сверхструктуры углерода $c(2 \times 2)$ и трехслойного графена на SiC(001) показывает совпадение направлений углеродных атомных цепочек (рис. 5e) и границ нанодоменов (рис. 5f).

Таким образом, в результате проведенных исследований был продемонстрирован управляемый послойный рост графена на пластинах β -SiC/Si(001) *in-situ* в условиях сверхвысокого вакуума. Результаты разложения спектров глубокого уровня C 1s [21] могут быть использованы для идентификации одно-, двух- и трехслойного графена, выращенного на подложках из карбида кремния. При использовании динамических станций, расположенных на современных источниках синхротронного излучения и позволяющих регистрировать спектры РФЭС *in-situ* в реальном времени [25], рост графена на SiC(001) может быть остановлен после синтеза желаемого количества слоев графена (один, два или три слоя). Полученные результаты свидетельствуют о том, что использование ступенчатых поверхностей может позволить контролировать ориентацию линейных дефектов на поверхности, определяющих предпочтительное направление границ в системах нанодоменов, синтезированных на подложках β -SiC/Si(001).

Магнетотранспортные свойства трехслойного графена на SiC/Si(001). Спиновая степень свободы электронов может быть использована для разработки новых логических и запоминающих устройств [38], поскольку спин-поляризованные токи способны переносить больше информации, чем только один заряд. В связи с большой (несколько микрометров) диффузионной спиновой длиной, графен представляется перспективным материалом для спинтроники [39–43]. Индуцирование магнитных моментов в графене может быть достигнуто, например, введением вакансионных дефектов [44], легированием молекулами или элементами с сильными спин-орбитальным взаимодействием [45] и связью с подложкой или пленкой графена [46]. В наноструктурированном графене формирование атомной структуры типа зигзага на границах доменов может приводить к появлению спин-поляризованных электронных состояний [47, 48], а нанометровые искривления слоя вблизи границ могут изменять спин-орбитальное взаимодействие (SOC), благодаря гибридизации орбиталей [49].

Как показано на рис. 1а и 5f, покрытие графена на SiC(001) состоит из нанометровых доменов, разделенных границами, ориентированными вдоль одного из направлений $\langle 110 \rangle$. СТМ-исследования с атомным разрешением [11] показали, что в большинстве случаев междоменные границы (NB) повернуты на 3.5° относительно направления $\langle 110 \rangle$, что приводит к асимметричному развороту решеток графена в соседних доменах (одно из СТМ-изображений, соответствующих такой ситуации, показано на рис. 5f). В этом случае кристаллические решетки графена в соседних доменах повернуты в разные стороны на углы 17° и 10° относительно границы, при этом с одной стороны формируется атомная структура типа зигзага. Следует отметить, что такая ситуация не является единственной. Например, СТМ-изображение на рис. 6а демонстрирует ситуацию, когда решетки графена в соседних нанодоменах не развернуты друг относительно друга. На изображении виден сильный изгиб графенового слоя вблизи темных областей. Лист графена в этих областях сначала изгибается вверх, а затем вниз, образуя полутрубки, ориентированные вдоль направления $[1\bar{1}0]$. Характерные диаметры таких полутрубок составляют несколько нанометров. Для изображения, показанного на рис. 6а, диаметры полутрубок, направленных вдоль $[1\bar{1}0]$, находятся в диапазоне 2.9–3.2 нм, как иллюстрирует поперечное сечение на рис. 6b. На рисунке 7 показано СТМ-изображение и поперечные сечения, измеренные на участке поверхности, содержа-

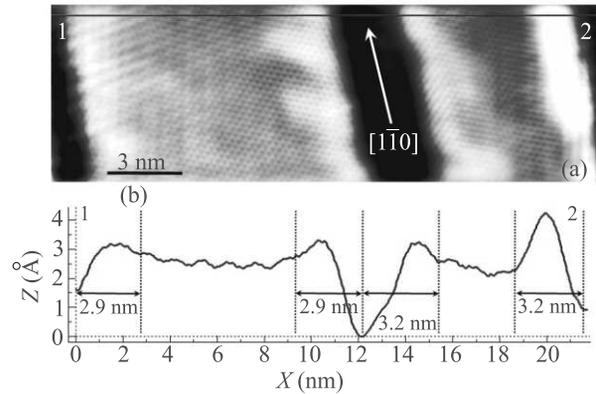


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – СТМ-изображение с атомным разрешением двух нанодоменов с одинаковой ориентацией решетки, вытянутых в направлении $[1\bar{1}0]$. (b) – Сечение 1–2 изображения, показанного на рис. (а) [22]

щем домены с повернутыми решетками. Поперечные сечения изображения позволяют оценить характерные радиусы закругления графенового слоя вблизи границ, которые находились в диапазоне 2.5–3.5 нм. Однако в других участках поверхности радиус закругления графенового слоя вблизи междоменных границ мог превышать эти значения и достигать 5 нм.

Рисунок 8b показывает зависимость магнетосопротивления (МС), измеренную при 10 К с магнитным полем, параллельным плоскости образца графен/ β -SiC/Si(001) в геометрии Холла, как показано на рис. 8а. Из транспортных измерений было установлено, что подвижность электронов в наших образцах составляет $\sim 250 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ при 10 К и $60 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ при 300 К. Эти значения подвижности электронов заметно меньше величин, измеренных для трехслойного графена, полученного механическим отслаиванием ($\sim 1.000 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$) [50]. Наличие границ уменьшает подвижность электронов и приводит к тому, что значительное количество электронов при низких температурах локализовано вблизи границ нанодоменов. Рисунок 8b демонстрирует положительное МС, которое достигает $\sim 5\%$ при величине магнитного поля $B = 14 \text{ Т}$. МС демонстрирует линейную зависимость от B при малых величинах магнитного поля и квадратичную в сильных магнитных полях, что проиллюстрировано на рис. 8с, показывающем зависимость МС от квадрата магнитного поля (B^2). На рисунке 8d показаны температурные зависимости МС, измеренные в параллельном магнитном поле. МС уменьшается с уменьшением температуры в диапазоне 300–100 К и достигает нуля при

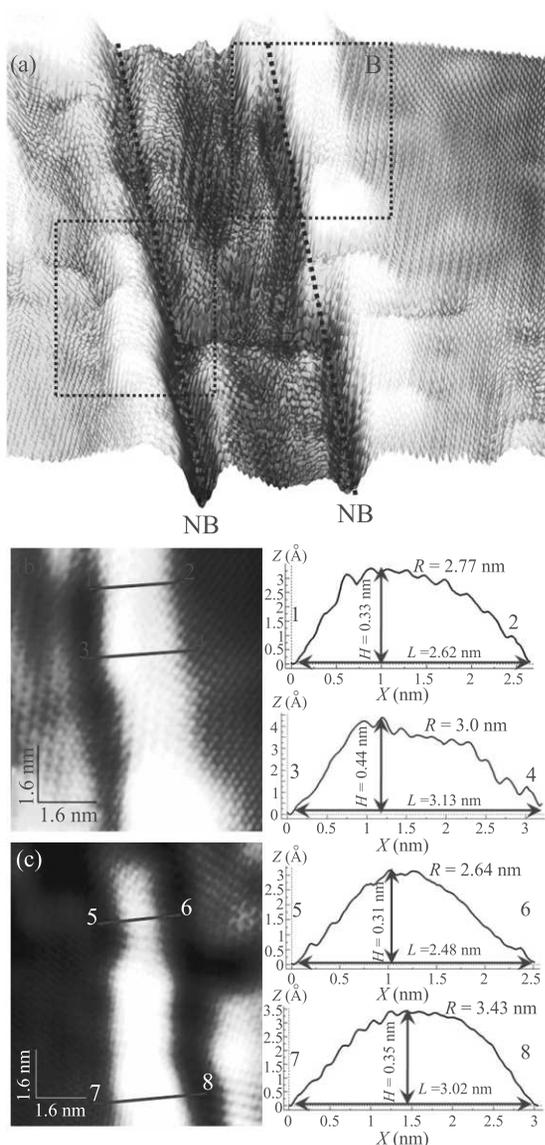


Рис. 7. (Цветной онлайн) (а) – Квази-3D СТМ-изображение ($20 \times 22 \text{ nm}^2$) графена на SiC(001), содержащее две междоменные границы (NB). (b), (c) – СТМ-изображения границ с атомным разрешением и сечения изображений, демонстрирующие радиус закругления слоев графена (R), изогнутых вблизи границ. Радиус закругления слоя был рассчитан по данным СТМ, исходя из высоты и ширины загнутой области [22]

100 К (рис. 8e). Дальнейшее снижение температуры приводит к увеличению МС.

На рисунках 8f и g показаны зависимости сопротивления образца графен/ β -SiC/Si(001) от температуры. Сопротивление демонстрирует неметаллическую зависимость, монотонно возрастающая с понижением температуры от 300 до 10 К. При $T < 150$ К механизм проводимости может быть хоро-

шо описан в рамках 1D модели прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка (ПППДП). $R(T) \approx R_0 \exp[(C/k_B T)^{1/2}]$, где R_0 и C – постоянные величины. Показатель степени в этом выражении указывает на то, что транспорт носителей заряда при температурах ниже 150 К осуществляется только вдоль границ нанодоменов. При температурах выше 150 К кривая $R-T$ имеет другой наклон и лучше описывается с помощью выражения $R(T) \approx R_0 \exp[(C/k_B T)^{1/3}]$, отвечающего двумерной прыжковой проводимости. Это означает, что носители могут пересекать границы нанодоменов при высоких температурах. Отклонение от 2D-транспорта при 300 К обусловлено термическим вкладом, который делает возможными перескоки в направлении z при достаточно высоких температурах. Рисунки 8h и i показывают $I-V$ и dV/dI характеристики, измеренные при разных температурах. При температурах выше 150 К $I-V$ -характеристики линейные, что указывает на 2D-транспорт в этом температурном диапазоне. Линейные зависимости также указывают на хороший омический контакт между электродами и графеном. Ниже 100 К наблюдаются нелинейные $I-V$ -характеристики, а кривые dV/dI демонстрируют максимум при $I = 0$ мА, что согласуется с наблюдением транспортной щели при температурах ниже 100 К [11]. При низких температурах появляются электронные состояния, локализованные вблизи междоменных границ. 1D краевые состояния служат платформой для термически активированного транспорта. Носители заряда могут перемещаться вдоль междоменных границ [11], что согласуется с 1D моделью ПППДП. По мере увеличения температуры тепловая энергия делает возможными перескоки в других направлениях, что приводит к увеличению размерности транспорта, которая близка к 2D (рис. 8g).

В соответствии с формулой Кубо–Гринвуда, изменение проводимости σ в параллельном магнитном поле для безмассовых фермионов Дирака в графене должно приводить к положительной величине $\Delta\sigma(B)$, и, следовательно, отрицательному МС [51]. Положительное МС графена в параллельном магнитном поле (рис. 8) означает отрицательную величину $\Delta\sigma(B)$, которая требует нелинейного поведения $\sigma(\mu) \propto \mu^\alpha$, с $0 < \alpha < 1$, где μ – химический потенциал. Однако МС графена, синтезированного на пластинах β -SiC/Si(001) положительно во всем исследованном диапазоне температур. Кроме того, наблюдаются линейная и квадратичная зависимости МС от B в слабых и сильных магнитных полях соответственно. Наиболее разумное объяснение наблюдающихся

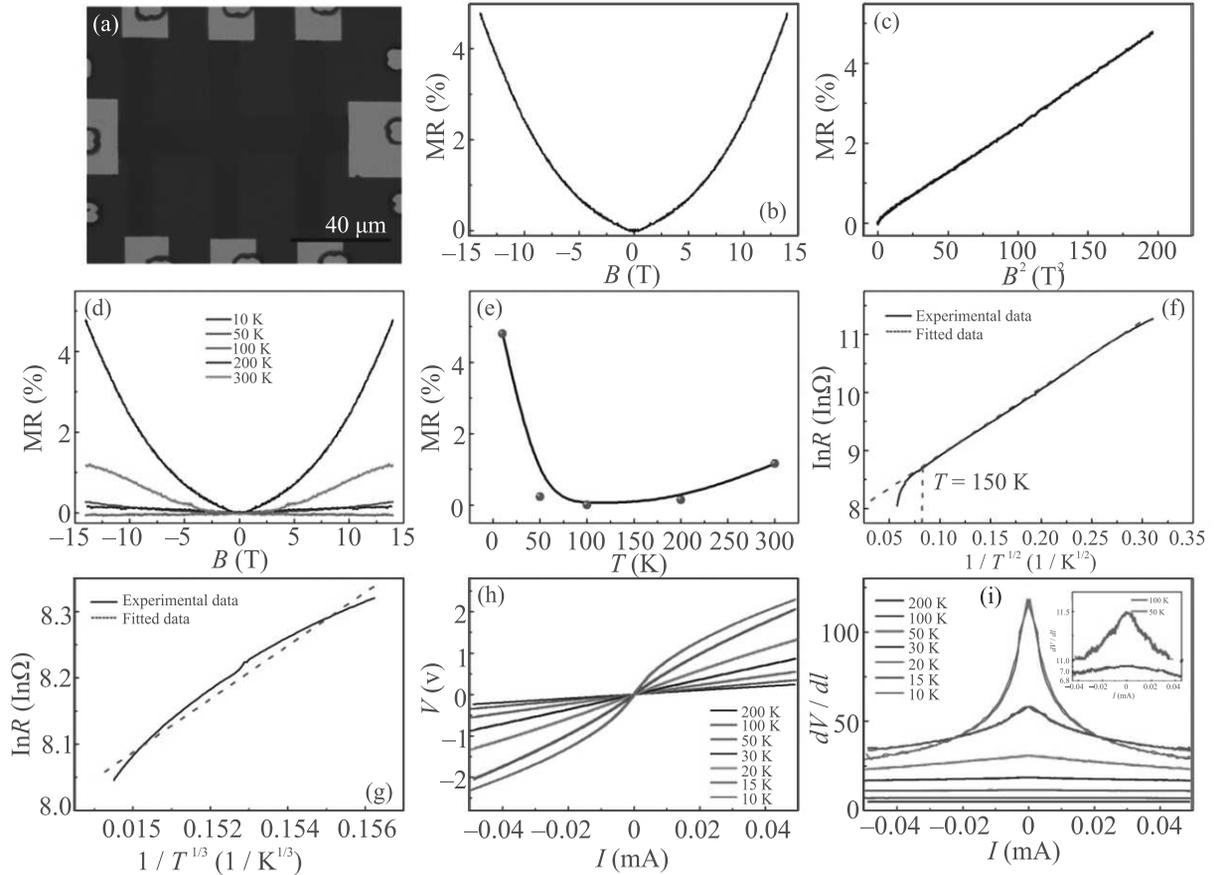


Рис. 8. (Цветной онлайн) (a) – Оптическое изображение графенового прибора Холла. (b) – Кривая МС, измеренная при 10 К в параллельном магнитном поле B . (c) – МС как функция B^2 . (d) – Температурная зависимость МС, измеренная в параллельном магнитном поле, направленном вдоль тока. (e) – МС как функция температуры. (f), (g) – Зависимость сопротивления R от температуры T . При низких температурах зависимость $\ln R(1/T^{1/2})$ линейная, что указывает на одномерную прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка. При высоких температурах (g) зависимость $\ln R(1/T^{1/3})$ близка к линейной, что предполагает двумерную прыжковую проводимость. (h) – $V(I)$ и (i) – dV/dI характеристики, измеренные при различных температурах [22]

эффектов может быть связано со структурой границ нанодоменов и различными механизмами транспорта при температурах ниже и выше 150 К. Рисунок 9 показывает, как присутствие границ в графене может модифицировать $\Delta\sigma(\mu)$ и МС графена. На рисунке 9 показаны результаты расчетов транспортных свойств графена, содержащего одну междоменную границу, выполненные с использованием метода неравновесных функций Грина (NEGF). На рисунке 9а схематически представлена моделируемая система, а на рис. 9б приведено рассчитанное МС графена с одной междоменной границей в параллельном магнитном поле. Расчеты демонстрируют положительное МС с линейной и квадратичной зависимостью от величины магнитного поля в слабых и сильных полях, соответственно, что согласуется с нашими экспериментальными данными.

На рисунке 9с представлена расчетная зависимость $\sigma(\mu)$ для $B = 4$ Т, которая демонстрирует нелинейное поведение $\sigma(\mu) \propto \mu^\alpha$ с коэффициентом $\alpha \approx 0.839$. Таким образом, теоретические расчеты подтверждают, что наблюдаемое положительное МС при низких температурах возникает преимущественно из-за наличия границ нанодоменов. На рисунке 9д показано распределение плотности заряда, рассчитанное для модели, показанной на рис. 9а, при различных напряжениях V . Вблизи границы заметно накопление носителей заряда, которые начинают пересекать границу при $V > 0.5$ В, что согласуется с экспериментом [11].

Кроме того, в графене на пластинах β -SiC/Si(001) наблюдается сильный изгиб слоя вблизи границ нанодоменов (рис. 7). Эти области похожи на углеродные нанотрубки с малым радиусом. Известно, что

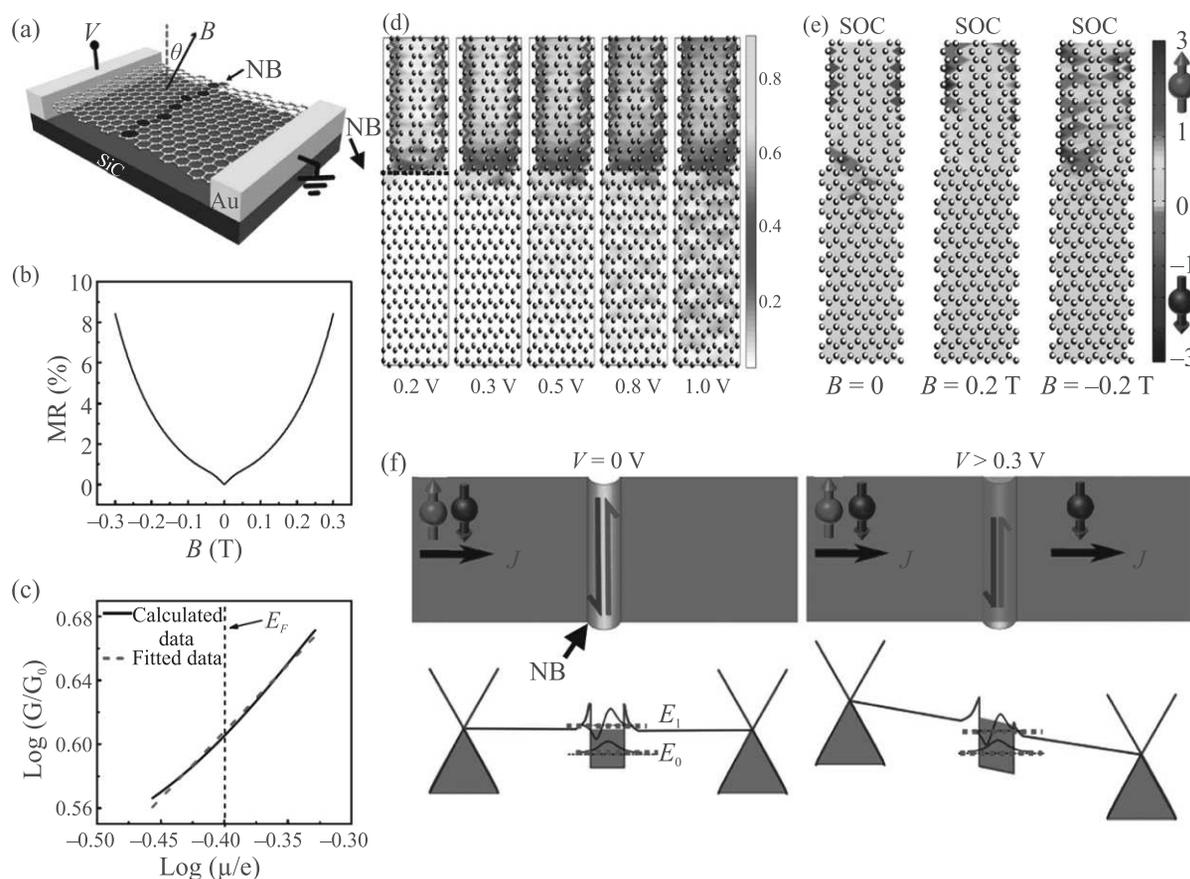


Рис. 9. (Цветной онлайн) Магнетосопротивление (MR) и эффект фильтрации спина в графене, содержащем одну границу (NB). (a) – Схема используемой модели. (b) – МС графена, содержащего одну границу, в параллельном магнитном поле, рассчитанное с использованием метода NEGF. (c) – Рассчитанная проводимость $G/G_0 \propto \sigma(\mu)$ как функция μ при величине поля 4 Т ($G_0 = 2e^2/h$). (d) – Распределение заряда при различных напряжениях смещения V , рассчитанное методом NEGF, демонстрирующее высокую плотность заряда вдоль границы. Напряжение приложено сверху вниз, а ток проходит через границу. Интенсивность цвета на рисунке показывает относительную величину плотности заряда. (e) – Распределение плотности спинов в направлении z (перпендикулярно плоскости графена) при $V = 0.4$ В, демонстрирующее эффект фильтрации спина из-за локализованных состояний на границе и спин-орбитального взаимодействия электронов в изогнутых участках поверхности графена вблизи границ. Знак указывает на ориентацию спинов. (f) – Схематическое изображение электронного транспорта и эффекта фильтрации спина [22]

спин-орбитальное взаимодействие электронов в углеродных нанотрубках зависит от их радиуса, и может достигать 3.5 мэВ при малых радиусах (≈ 2.5 нм), которые наблюдаются в экспериментальных СТМ-изображениях системы графен/ β -SiC/Si(001). Однако существуют области, где радиус кривизны больше 2.5 нм, в которых спин-орбитальное взаимодействие может быть на порядок слабее. Чтобы исследовать спин-зависимый транспорт поперек границы нанодоменов, предполагая слабое спин-орбитальное взаимодействие, были проведены расчеты спиновой плотности состояний для модели, показанной на рис. 9а. Рисунок 9е показывает результаты расчетов спи-

новой плотности состояний, выполненных при величине спин-орбитального взаимодействия, равной 0.1 мэВ и напряжении смещения $V = 0.4$ В. Как показывают расчеты (рис. 9е), при $V = 0.4$ В только электроны с одним направлением спина могут проходить через границу, подтверждая, что границы нанодоменов с изгибом слоя вблизи них могут работать как спиновые фильтры, а спин-орбитальное взаимодействие электронов вблизи границ приводит к расщеплению энергетических уровней. Если направление магнитного поля перпендикулярно границе, меньшее количество электронов может пересекать границу между доменами, вызывая по-

ложительное МС, что согласуется с результатами расчетов.

Чтобы оценить энергию, необходимую для перехода от 1D к 2D транспорту, рассмотрим графен с междоменной границей как квантовую яму, которая может быть преодолена с помощью либо приложенного напряжения V , либо теплового возбуждения. Такая квантовая яма имеет глубину 0.4–1 В, как следует из транспортных измерений [11], и ширину ~ 6 нм (рис. 6b). В образце графен/ β -SiC/Si(001) имеется несколько параллельных границ, разделенных нанодоменами графена шириной несколько нанометров. Для таких квантовых ям разность энергий между основным (E_0) и первым возбужденным состоянием (E_1) будет около 0.1 эВ. Под действием приложенного напряжения или термического возбуждения электроны могут перейти в первое возбужденное состояние, а волновые функции локализованных краевых состояний начинают перекрываться (рис. 9f). Когда перекрытие волновых функций соседних квантовых ям достаточно велико, электроны могут преодолевать энергетический барьер на границе и перемещаться из одного домена графена в другой. Из-за спин-орбитального взаимодействия глубина ямы будет различной для электронов с противоположными направлениями спина, локализованными вблизи междоменной границы. Следовательно, разность энергий основного и первого возбужденного состояния также зависит от направления спина. Как только температура повышается до 100 К, электроны независимо от ориентации спина могут перейти в возбужденные состояния, так как разность энергий между спиновыми состояниями мала по сравнению с $k_B T$. Локализация электронов вблизи междоменной границы при 100 К слабая. Как следствие, связанное с ней положительное МС уменьшается до нуля. При более высоких температурах электроны переходят в возбужденные состояния и перекрытие волновых функций приводит к 2D-транспорту. При включении параллельного магнитного поля, зеемановское расщепление повышает энергии уровней для одного из направлений спинов, что затрудняет их перескоки в возбужденные состояния. Следовательно, электроны с одним направлением спина оказываются локализованными вблизи границы. Такое разделение спинов эффектом Зеемана уменьшает электронный транспорт и приводит к положительному МС при температурах выше 100 К. Таким образом, можно предположить, что положительное МС при температурах ниже 100 К определяется структурой междоменной границы, а при температурах выше 100 К связано с уменьшением 2D транспорта электронов с

определенным направлением спина, которые оказываются локализованными на границе.

Для исследования влияния границ на транспортные свойства графена, выращенного на пластинах β -SiC/Si(001), исследованы несколько образцов, в которых расстояние между электрическими контактами было менее 30 нм (рис. 10). На рисунке 10а схематически показано типичное устройство с наноконтактами для измерения транспортных свойств графена. Зазор между контактами составлял ~ 28 нм, что соответствует протеканию тока через 1–3 границы. Напряжение в экспериментах было приложено перпендикулярно границам. На рисунке 10b показаны кривые МС в параллельном магнитном поле, измеренные при 10 и 300 К. При обеих температурах наблюдается положительное МС, что подтверждает определяющую роль структуры междоменной границы. На рисунке 10c–d показано сопротивление наноконтакта как функция температуры в нулевом магнитном поле. Температурные зависимости сопротивления соответствуют d -мерной модели ПППДП, в которой $R(T) \approx R_0 \exp[(C/k_B T)^{1/(d+1)}]$.

Аналогично измерениям с микроконтактами (рис. 8), кривые $R-T$ могут быть объяснены в рамках 1D модели ПППДП при низкой температуре (рис. 10c) и 2D модели ПППДП при $T > 80$ К (рис. 10d). Два механизма электронного транспорта при высоких и низких температурах аналогичны тем, которые обсуждались выше, но температура перехода составляет ~ 80 К. По сравнению с микроконтактными измерениями (рис. 8), температурная зависимость сопротивления устройства с нано-зазором при высокой температуре лучше соответствует 2D модели ПППДП, поскольку носителям легче преодолеть область нанометрового масштаба между электродами, содержащую малое количество междоменных границ. Для устройства с микроконтактами (рис. 8) требуется большее напряжение смещения или более высокая температура для преодоления границ, что может объяснять увеличение температуры перехода от 1D к 2D-транспорту при измерениях с использованием микроконтактов (рис. 8). При низких температурах кривая $R-T$, измеренная с использованием наноконтактов, достаточно хорошо аппроксимируется зависимостью $1/T^{1/2}$, что соответствует 1D-транспорту электронов вдоль границы (рис. 10c). Согласие теории и эксперимента не такое хорошее, как для микроконтактных измерений (рис. 8f). Это может быть связано с тем, что при измерении малого количества границ (1–3) напряжение приложено перпендикулярно границам нанодоменов (рис. 10), тогда как в случае микро-

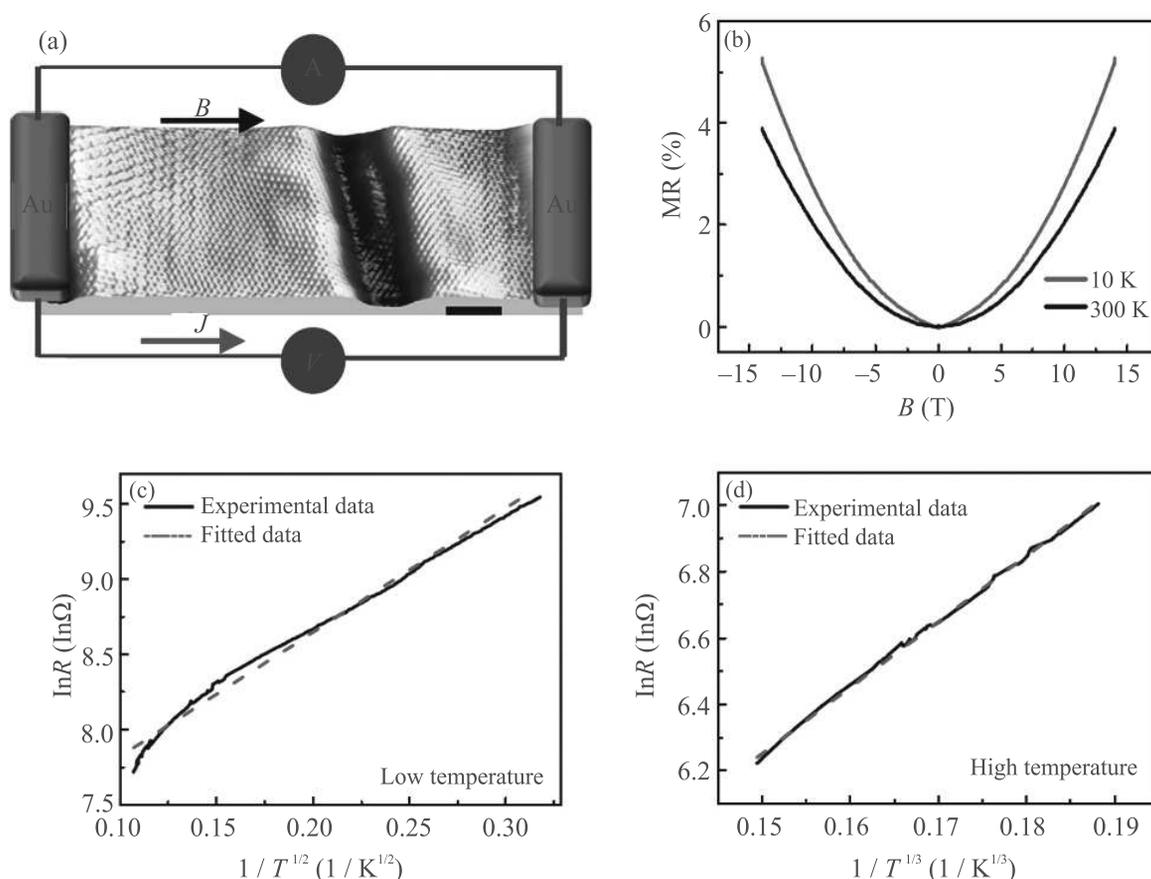


Рис. 10. (Цветной онлайн) Транспортные свойства графена на SiC(001), содержащего 1–3 междоменные границы. (а) – Схематическое изображение графенового устройства с наноконтактами. Расстояние между контактами около 28 нм. (b) – Кривые МС, измеренные при 10 и 300 К в магнитном поле, параллельном плоскости графена и направленном вдоль протекания тока ($\theta = 90^\circ$). (c) – Зависимость логарифма сопротивления $\ln(R)$ от $1/T^{1/2}$ линейная в интервале низких температур 10–80 К, что указывает на 1D транспорт. (d) – При повышении температуры до 300 К наблюдается линейная зависимость $\ln(R)$ от $1/T^{1/3}$, что предполагает 2D транспорт в рамках модели ПППДП [22]

контактных измерений в область между контактами могут попадать границы, ориентированные как параллельно, так и перпендикулярно приложенному напряжению смещения. В этом случае для части границ направления тока и приложенного напряжения будут совпадать.

Итак, исследования магнетотранспортных свойств трехслойного графена, синтезированного на пластинах β -SiC/Si(001), демонстрируют положительное МС с сильной температурной зависимостью в параллельном магнитном поле. Результаты экспериментов и теоретических расчетов показали, что наличие границ с сильным изгибом графенового слоя вблизи них приводит к положительному МС, которое может быть объяснено с учетом локализованных электронных состояний на границах и большого спин-орбитального взаимодействия в

изогнутом слое. Локализация электронов с одним направлением спина с помощью эффекта Зеемана, по всей видимости, отвечает за положительное МС, наблюдаемое при высоких температурах. Полученные результаты демонстрируют возможность использования наноструктурированного графена на пластинах β -SiC/Si(001) в качестве спинового фильтра.

Функционализация графена: модификация атомных и электронных свойств трехслойного графена на β -SiC/Si(001) с помощью органических покрытий. Одним из способов управления электронной структурой графена является химическая модификация методами ковалентной или нековалентной химической функционализации [52–62]. При этом важно найти простой, но эффективный метод однородной модификации, доступный *ex-situ*,

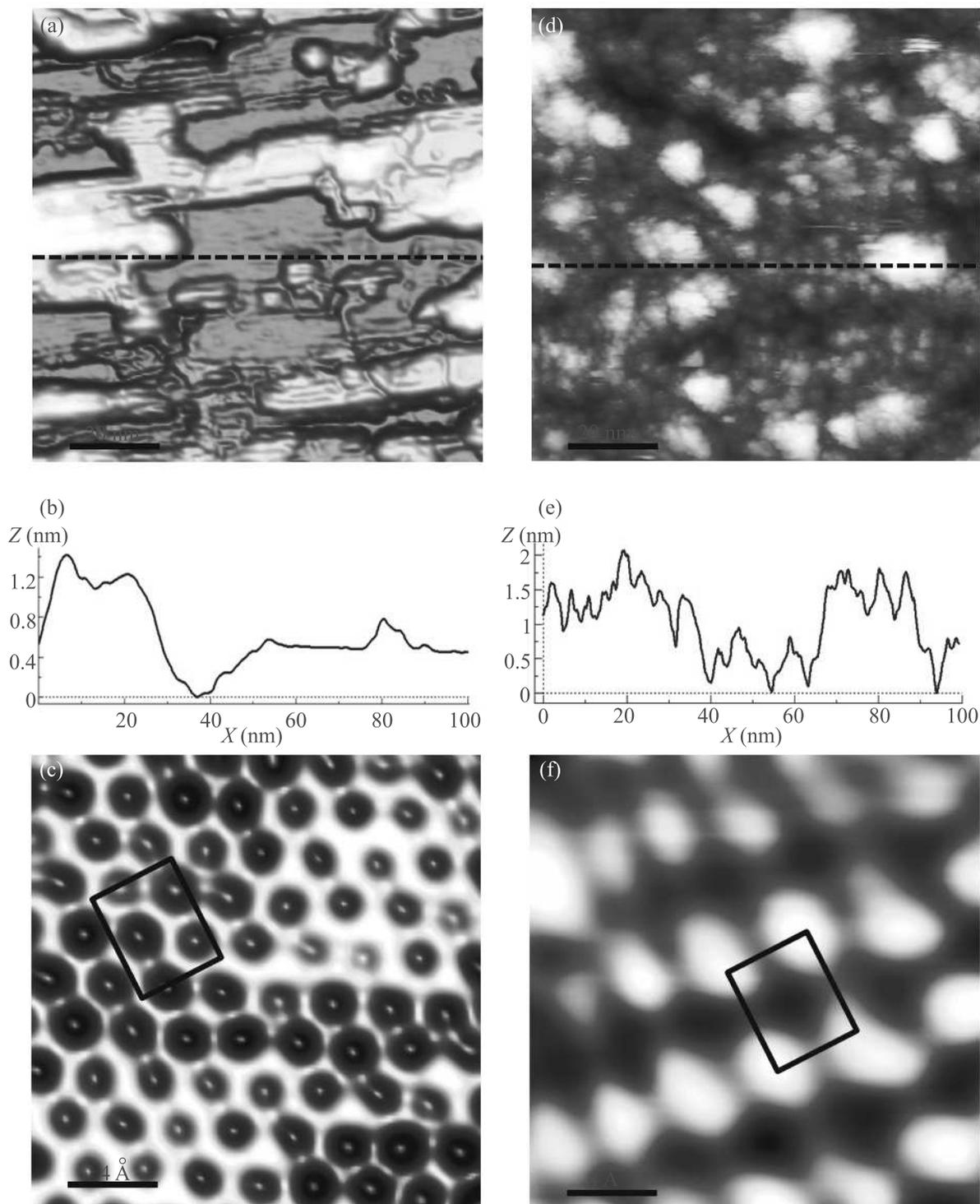


Рис. 11. (Цветной онлайн) СТМ-изображения структур графен/SiC(001) (а), (с) и феназин/графен/SiC(001) (d), (f). (b), (e) – Поперечные сечения СТМ-изображений вдоль штриховых линий, показанных на (а) и (d) соответственно. Элементарная ячейка верхнего слоя молекул выделена сплошной линией на (с) и (f) [23]

без использования сверхвысокого вакуума. В работе [23] мы показали возможность ковалентной модификации графена, выращенного на β -SiC/Si(001),

с использованием молекул феназина под воздействием светового излучения. Гибридная феназино-графеновая структура была синтезирована и изуче-

на с помощью СТМ, СТС, ТФП и рамановской спектроскопии [23].

Слои графена, как и в предыдущих экспериментах, были изготовлены на пластинах β -SiC/Si(001) в СВВ. Диазониевую соль феназина синтезировали в соответствии с опубликованной методикой [63]. Во время функционализации образцы графена помещались в спиртовой раствор диазониевой соли феназина и освещались белым светом, излучаемым светодиодом, для активации ковалентной связи молекул с графеном. После промывки образцов в этиловом спирте СТМ- и СТС-эксперименты были выполнены в СВВ при 78 К. ТФП-расчеты проводились с использованием пакета PWscf из программного обеспечения Quantum ESPRESSO в приближении локальной плотности состояний с параметризацией Пердюю–Цангера [64].

СТМ-изображения графена на пластинах β -SiC/Si(001) до функционализации демонстрировали типичную структуру нанодоменов шириной 5–30 нм и длиной 20–200 нм, вытянутых в направлениях $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$ решетки β -SiC (рис. 11а). СТМ-изображения с атомным разрешением (рис. 11с) показывают соттовую структуру решетки графена в центре доменов. Функционализация графена молекулами феназина приводит к существенным изменениям СТМ-изображений поверхности (рис. 11d). Тем не менее, наблюдаемые перепады высот на изображениях гибридной структуры сопоставимы с измеренными для чистого графена (рис. 11b и e), что говорит о достаточно равномерном покрытии поверхности молекулами феназина. СТМ-изображения небольших участков гибридной системы феназин/графен демонстрируют локальное упорядочение молекул на поверхности (рис. 11f). Молекулярный слой проявляет ближний порядок с прямоугольной элементарной ячейкой с параметрами $4 \times 5 \text{ \AA}$. С помощью данных СТМ высокого разрешения и ТФП-расчетов была предложена модель графена, модифицированного молекулами феназина (рис. 12). Согласно этой модели, молекулы ориентированы почти перпендикулярно поверхности графена, и каждая молекула присоединена к каждому восьмому атому углерода нанодомена графена, который меняет свою гибридизацию с sp^2 на sp^3 . Высокая плотность молекулярного слоя на поверхности графена, его адаптация к топологии поверхности графена и стабильность в процессе СТМ-измерений подтверждают предположение о ковалентной связи молекул с графеном.

Обработка ультразвуком в спиртовом растворе и/или отжиг образцов феназин/графен/SiC(001) в

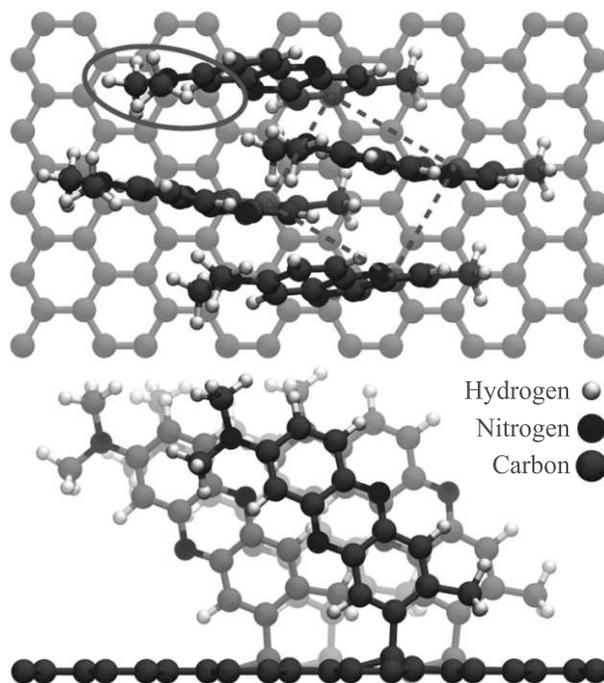


Рис. 12. (Цветной онлайн) Модель поверхности графена, модифицированной молекулами феназина (вид сверху и сбоку). Элементарная ячейка молекулярного верхнего слоя выделена пунктирной линией. Овал указывает на верхнюю часть молекулы феназина, которая видна на СТМ изображении [23]

СВВ при 200°C не меняет молекулярный состав на поверхности, подтверждая образование ковалентной связи между феназином и графеном. Предполагается, что при освещении фотоактивированный электрон графена перемещается к молекуле феназина и происходит формирование химической связи между молекулой и графеном. Тот факт, что освещение раствора диазониевой соли феназина (без графена) белым светом не приводило к реакции или разложению молекул, подчеркивает значение графена и его электронов для протекания фотохимической реакции. Установлено, что в темноте реакция между графеном и молекулами феназина не происходит. Исследования методом рамановской спектроскопии также свидетельствуют о ковалентной модификации поверхности графена молекулами феназина под влиянием света [63].

Электронные свойства феназин-графеновой гибридной системы были изучены с помощью сканирующей туннельной спектроскопии (рис. 13). СТС-спектры чистого графена до ковалентной модификации демонстрируют отсутствие запрещенной зоны, что типично для бесщелевого (не имеющего запрещенной зоны) материала. СТС-спектры модифи-

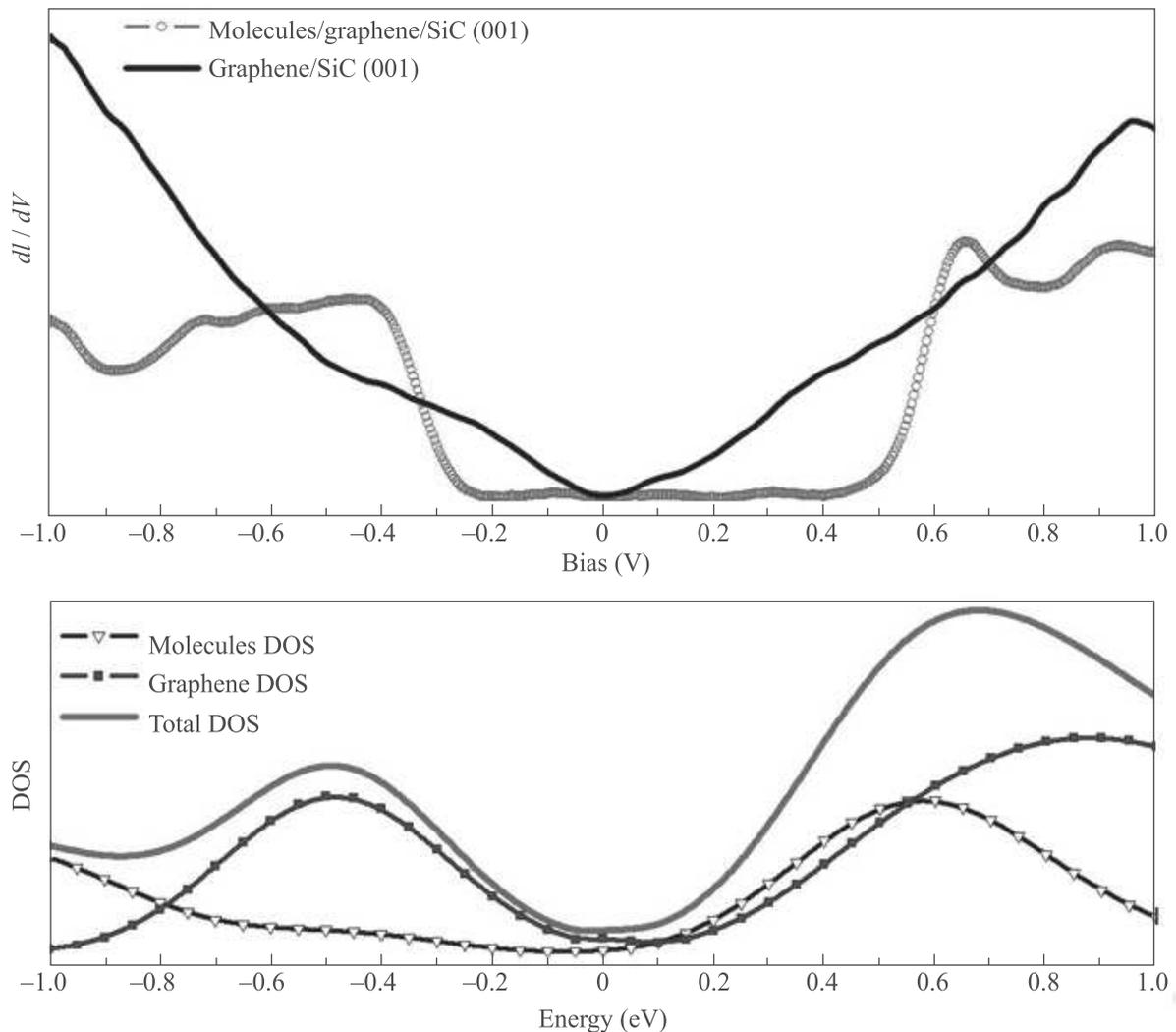


Рис. 13. (Цветной онлайн) СТС-спектры, измеренные для образцов графен/SiC(001) и феназин/графен/SiC(001) (вверху) и рассчитанная полная плотность состояний (DOS) для гибридной структуры феназин/графен (внизу, красная линия). Плотности состояний, отвечающие графену и молекулам в гибридной структуре, показаны синим и черным цветом соответственно [23]

цированного феназином графена, измеренные для структуры, показанной на рис. 11d и f, демонстрируют ширину запрещенной зоны ~ 0.8 эВ (рис. 13). ТФП-расчеты плотности состояний для молекул и графена в гибридной структуре показывают, что плотность занятых состояний вблизи уровня Ферми в основном определяется электронной структурой графена. В свою очередь, плотность незаполненных состояний вблизи уровня Ферми определяется электронной структурой как молекул, так и графена. Это подтверждает образование гибридной структуры феназин/графен с большой запрещенной зоной в результате ковалентной модификации графена молекулами феназина.

Стоит отметить, что большой интерес представляет модификация атомной и электронной структуры графена на SiC(001) с помощью соединений, использующихся в органической полупроводниковой микроэлектронике, например, в солнечных батареях, светодиодах, полевых транзисторах, лазерах и сенсорах. В частности, представляет интерес модификация графена молекулами фталоцианина F_xCuPc ($x = 0, 4, 16$), которые, согласно теоретическим расчетам [65], могут формировать планарные структуры на графене и изменять его свойства (например, перенос заряда может приводить к открытию щели в графене). Эти исследования важны, например, для разработки органических полевых транзисто-

ров и солнечных элементов [66] методом электронно-лучевой литографии на графеновой подложке.

Заключение. Изучен механизм послойного роста графена на технологичных пластинах β -SiC/Si(001). Продемонстрирован управляемый синтез одно-, двух- и трехслойного графена в условиях сверхвысокого вакуума. Показано, что синтез графенового покрытия может быть остановлен при достижении желаемой толщины графенового покрытия. Показано, что непрерывные системы нанополос графена с одним предпочтительным направлением границ могут быть синтезированы на вицинальных подложках с малыми (менее четырех градусов) углами отклонения от плоскости SiC(001).

Исследования транспортных свойств упорядоченных систем нанополос графена, синтезированных на вицинальных подложках, показали открытие транспортной щели, превышающей 1 эВ, при температурах ниже 100 К. Температурная зависимость сопротивления системы графен/ β -SiC/Si(001) может быть объяснена в рамках 1D и 2D модели прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка при температурах ниже и выше 100 К соответственно.

Результаты магнетотранспортных измерений и теоретических расчетов показали, что наличие границ с сильным изгибом графенового слоя вблизи них приводит к положительному магнетосопротивлению в графене, синтезированном на пластинах β -SiC/Si(001). Сильная зависимость магнетосопротивления от температуры может быть объяснена с учетом локализованных электронных состояний на границах и большого спин-орбитального взаимодействия в изогнутом слое вблизи границ нанодоменов.

Показано, что ковалентная модификация графена молекулами феназина приводит к образованию гибридной структуры феназин/графен с шириной запрещенной зоны ~ 0.8 эВ.

Полученные результаты демонстрируют возможность создания новых наноструктур на поверхности β -SiC для разработки приборов спинтроники и наноэлектроники на базе графена.

Работа выполнена в рамках госзадания Российской Федерации при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований # 17-02-01139, 17-02-01291 и 20-02-00489.

1. P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
3. A. J. van Bommel, J. E. Crombeen, and A. van Tooren, Surf. Sci. **48**, 463 (1975).

4. C. Berger, Z. Li, T. Song, X. Li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer, J. Phys. Chem. B **108**, 19912 (2004).
5. K. V. Emtsev, A. Bostwick, K. Horn, J. Jobst, G. L. Kellogg, L. Ley, J. L. McChesney, T. Ohta, S. A. Reshanov, J. Röhrhl, E. Rotenberg, A. K. Schmid, D. Waldmann, H. B. Weber, and T. Seyller, Nature Mater. **8**, 203 (2009).
6. M. Sprinkle, D. Siegel, Y. Hu et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **103**, 226803 (2009).
7. V. Yu. Aristov, G. Urbanik, K. Kummer, D. V. Vyalikh, O. V. Molodtsova, A. B. Preobrajenski, C. Hess, B. Büchner, I. Vobornik, J. Fujii, G. Panaccione, Yu. A. Ossipyan, and M. Knupfer, Nano Lett. **10**, 992 (2010).
8. A. N. Chaika, O. V. Molodtsova, A. A. Zakharov, D. Marchenko, J. Sánchez-Barriga, A. Varykhalov, I. V. Shvets, and V. Y. Aristov, Nano Res. **6**, 562 (2013).
9. A. N. Chaika, O. V. Molodtsova, A. A. Zakharov, D. Marchenko, J. Sánchez-Barriga, A. Varykhalov, S. V. Babenkov, M. Portail, M. Zielinski, B. E. Murphy, S. A. Krasnikov, O. Lübben, I. V. Shvets, and V. Y. Aristov, Nanotechnology **25**, 135605 (2014).
10. A. N. Chaika, V. Y. Aristov, and O. V. Molodtsova, Prog. Mater. Sci. **89**, 1 (2017).
11. H.-C. Wu, A. N. Chaika, T.-W. Huang et al. (Collaboration), ACS Nano **9**, 8967 (2015).
12. A. Ouerghi, M. Ridene, A. Balan, R. Belkhou, A. Barbier, N. Gogneau, M. Portail, A. Michon, S. Latil, P. Jegou, and A. Shukla, Phys. Rev. B **83**, 205429 (2011).
13. N. Gogneau, A. Balan, M. Ridene, A. Shukla, and A. Ouerghi, Surf. Sci. **606**, 217 (2012).
14. A. Ouerghi, A. Balan, C. Castelli, M. Picher, R. Belkhou, M. Eddrief, M. G. Silly, M. Marangolo, A. Shukla, and F. Sirotti, Appl. Phys. Lett. **101**, 21603 (2012).
15. S. Abe, H. Handa, R. Takahashi, K. Imaizumi, H. Fukidome, and M. Suemitsu, J. Appl. Phys. **50**, 70102 (2011).
16. E. Velez-Fort, M. G. Silly, R. Belkhou, A. Shukla, F. Sirotti, and A. Ouerghi, Appl. Phys. Lett. **103**, 83101 (2013).
17. N. Gogneau, A. Ben Gouider Trabelsi, M. G. Silly, M. Ridene, M. Portail, A. Michon, M. Oueslati, R. Belkhou, F. Sirotti, and A. Ouerghi, Nanotechnol. Sci. Appl. **7**, 85 (2014).
18. P. Hens, A. A. Zakharov, T. Iakimov, M. Syväjärvi, and R. Yakimova, Carbon **80**, 823 (2014).
19. M. Suemitsu, S. Jiao, H. Fukidome, Y. Tateno, I. Makabe, and T. Nakabayashi, J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 94016 (2014).
20. В. Ю. Аристов, УФН **171**, 801 (2001).

21. V. Yu. Aristov, A. N. Chaika, O. V. Molodtsova, S. V. Babenkov, A. Locatelli, T. O. Menteş, A. Sala, D. Potorochn, D. Marchenko, B. Murphy, B. Walls, K. Zhussupbekov, and I. V. Shvets, *ACS Nano* **13**, 526 (2019).
22. H.-C. Wu, A. N. Chaika, M.-C. Hsu et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **8**, 14453 (2017).
23. N. N. Sergeeva, A. N. Chaika, B. Walls, B. E. Murphy, K. Walshe, D. P. Martin, B. D. O. Richards, G. Jose, K. Fleischer, V. Yu. Aristov, O. V. Molodtsova, I. V. Shvets, and S. A. Krasnikov, *Nanotechnology* **29**, 275705 (2018).
24. B. Gupta, M. Notarianni, N. Mishra, M. Shafiei, F. Iacopi, and N. Motta, *Carbon* **68**, 563 (2014).
25. S. V. Babenkov, V. Y. Aristov, O. V. Molodtsova, L. Glaser, I. Shevchuk, F. Scholz, J. Seltmann, and J. Vieffhaus, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **777**, 189 (2015).
26. P. Y. Huang, C. S. Ruiz-Vargas, A. M. van der Zande, W. S. Whitney, M. P. Levendorf, J. W. Kevek, S. Garg, J. S. Alden, C. J. Hustedt, Y. Zhu, J. Park, P. L. McEuen, and D. A. Muller, *Nature* **469**, 389 (2011).
27. A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson, *Nature Mater.* **6**, 858 (2007).
28. H. Hibino, H. Kageshima, F. Maeda, M. Nagase, Y. Kobayashi, and H. Yamaguchi, *Phys. Rev. B* **77**, 75413 (2008).
29. C. Riedl, C. Coletti, T. Iwasaki, A. A. Zakharov, and U. Starke, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 246804 (2009).
30. S. Doniach and M. Šunjić, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **3**, 285 (1970).
31. D. A. Shirley, *Phys. Rev.* **55**, 4709 (1972).
32. C. J. Powell, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenomena* **47**, 197 (1988).
33. M. Krawczyk, L. Zommer, A. Kosinski, J. W. Sobczak, and A. Jablonski, *Surf. Interface Anal.* **38**, 644 (2006).
34. S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn, *Surf. Interface Anal.* **43**, 689 (2011).
35. E. L. Shirley, L. J. Terminello, A. Santoni, and F. J. Himpsel, *Phys. Rev. B* **51**, 13614 (1995).
36. S. Rusponi, M. Papagno, P. Moras, S. Vlaic, M. Etzkorn, P. M. Sheverdyeva, D. Pacilé, H. Brune, and C. Carbone, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 246803 (2010).
37. B. Gupta, E. Placidi, C. Hogan, N. Mishra, F. Iacopi, and N. Motta, *Carbon* **91**, 378 (2015).
38. I. Zutic, J. Fabian, and S. DasSarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
39. W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, *Nat. Nanotechnol.* **9**, 794 (2014).
40. N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Nature* **448**, 571 (2007).
41. B. Dlubak, M.-B. Martin, C. Deranlot, B. Servet, S. Xavier, R. Mattana, M. Sprinkle, C. Berger, W. A. de Heer, F. Petroff, A. Anane, P. Seneor, and A. Fert, *Nat. Phys.* **8**, 557 (2012).
42. M. V. Kamalakar, C. Groenvel, A. Dankert, and S. P. Dash, *Nat. Commun.* **6**, 6766 (2015).
43. H. Dery, P. Dalal, L. Cywiński, and L. J. Sham, *Nature* **447**, 573 (2007).
44. R. R. Nair, M. Sepioni, I.-L. Tsai, O. Lehtinen, J. Keinonen, A. V. Krashennnikov, T. Thomson, A. K. Geim, and I. V. Grigorieva, *Nat. Phys.* **8**, 199 (2012).
45. H. González-Herrero, J. M. Gómez-Rodríguez, P. Mallet, M. Moaied, J. J. Palacios, C. Salgado, M. M. Ugeda, J.-Y. Veullen, F. Yndurain, and I. Brihuega, *Science* **352**, 437 (2016).
46. Z. Wang, C. Tang, R. Sachs, Y. Barlas, and J. Shi, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 016603 (2015).
47. P. Ruffieux, S. Wang, B. Yang, C. Sánchez-Sánchez, J. Liu, T. Dienel, L. Talirz, P. Shinde, C. A. Pignedoli, D. Passerone, T. Dumslaff, X. Feng, K. Müllen, and R. Fasel, *Nature* **531**, 489 (2016).
48. Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature* **444**, 347 (2006).
49. D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, *Phys. Rev. B* **74**, 155426 (2006).
50. M. F. Craciun, S. Russo, M. Yamamoto, J. B. Oostinga, A. F. Morpurgo, and S. Tarucha, *Nat. Nanotechnol.* **4**, 383 (2009).
51. M. I. Katsnelson, *Graphene: carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (2012).
52. R. Balog, B. Jørgensen, L. Nilsson et al. (Collaboration), *Nature Mater.* **9**, 315 (2010).
53. M. Z. Hossain, M. A. Walsh, and M. C. Hersam, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 15399 (2010).
54. D. Haberer, D. V. Vyalikh, S. Taioli, B. Dora, M. Farjam, J. Fink, D. Marchenko, T. Pichler, K. Ziegler, S. Simonucci, M. S. Dresselhaus, M. Knupfer, B. Büchner, and A. Grüneis, *Nano Lett.* **10**, 3360 (2010).
55. R. Phillipson, C. J. Lockhart de la Rosa, J. Teyssandier, P. Walke, D. Waghray, Y. Fujita, J. Adisojoso, K. S. Mali, I. Asselberghs, C. Huyghebaert, H. Uji-i, S. De Gendt, and S. De Feyter, *Nanoscale* **8**, 20017 (2016).
56. M. Garnica, D. Stradi, S. Barja, F. Calleja, C. Diaz, M. Alcamí, N. Martin, A. L. Vázquez de Parga, F. Martin, and R. Miranda, *Nat. Phys.* **9**, 368 (2013).
57. K. S. Mali, J. Greenwood, J. Adisojoso, R. Phillipson, and S. De Feyter, *Nanoscale* **7**, 1566 (2015).
58. J. Greenwood, T. H. Phan, Y. Fujita, Z. Li, O. Ivasenko, W. Vanderlinden, H. van Gorp, W. Frederickx, G. Lu, K. Tahara, Y. Tobe, H. Uji-i, S. F. L. Mertens, and S. De Feyter, *ACS Nano* **9**, 5520 (2015).

59. G. Bottari, M. A. Herranz, L. Wibmer, M. Volland, L. Rodriguez-Perez, D. M. Guldi, A. Hirsch, N. Martin, F. D'Souza, and T. Torres, *Chem. Soc. Rev.* **46**, 4464 (2017).
60. S. Eigler and A. Hirsch, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **53**, 7720 (2014).
61. A. Criado, M. Melchionna, S. Marchesan, and M. Prato, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **54**, 10734 (2015).
62. Y.-F. Zhang, Y. Zhang, G. Li, J. Lu, Y. Que, H. Chen, R. Berger, X. Feng, K. Müllen, X. Lin, Y.-Y. Zhang, S. Du, S. T. Pantelides, and H.-J. Gao, *Nano Res.* **10**, 3377 (2017).
63. D. P. Martin, A. Tariq, B. D. O. Richards, G. Jose, S. A. Krasnikov, A. Kulak, and N. N. Sergeeva, *Chem. Commun.* **53**, 10715 (2017).
64. J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
65. J. Ren, S. Meng, Y.-L. Wang, X.-C. Ma, Q.-K. Xue, and E. Kaxiras, *J. Chem. Phys.* **134**, 194706 (2011).
66. J. L. Yang, S. Schumann, R. A. Hatton, and T. S. Jones, *Organic Electronics* **11**, 1399 (2010).

Proximity effect in heterostructures based on superconductor/half-metal system

A. A. Kamashev^{+*1)}, I. A. Garifullin⁺

⁺Zavoisky Physical-Technical Institute, Subdivision of the Federal Research Center “Kazan Scientific Center of Russian Academy of Sciences”, 420029 Kazan, Russian Federation

^{*}Kazan Federal University, 420008 Kazan, Russia

Submitted 27 November 2020
Resubmitted 22 December 2020
Accepted 25 December 2020

DOI: 10.31857/S1234567821030095

The study of two antagonistic phenomena in solids, superconductivity and magnetism, is a very actively studied problem in condensed matter physics. One important aspect of the research area is the interaction of these two phenomena in nanoscale heterostructures and multilayer structures in which the superconducting (S) and ferromagnetic (F) materials are in close contact with each other. These structures exhibit a so called S/F proximity effect, whose main properties have been studied for quite some time (for a review see, e.g., [1, 2]). Nevertheless, despite new activities in this area promise opening new frontiers in superconducting spin electronics (see, e.g., [3]), the proximity effect at the S/F interfaces is still far from being quantitatively understood. Furthermore, although in S/F heterostructures many combinations of materials are potentially possible to realize, the proximity effect at the interface between an S layer and the F layer made of a half-metallic ferromagnet (HMF), i.e., a ferromagnet with 100 % polarization of the conduction band, has not been experimentally studied so far to the best of our knowledge. This is quite striking since HMFs represent the class of materials which have recently attracted a considerable interest due to their possible applications in spin electronics.

The possibility to develop a superconducting spin valve (SSV) based on the S/F proximity effect has been theoretically substantiated in 1997 by Sanjiun Oh et al. [4]. They proposed the F1/F2/S layer scheme where an S film is deposited on top of two F-layers with decoupled magnetizations and concluded that temperature of superconducting transition (T_c) at the antiparallel (AP) mutual orientation of magnetization should be smaller than for the parallel (P) case. This is because the mean exchange field from two F layers acting on the Cooper pairs in the S layer is smaller for the AP configuration of the magnetizations of these layers compared to the P case. It took more than ten years before a full switching

between the normal and superconducting states of this device has been realized [5] meaning that the magnitude of the spin-valve effect $\Delta T_c = T_c^{AP} - T_c^P$ exceeds the width of the superconducting transition temperatures δT_c (here T_c^{AP} and T_c^P are the superconducting transition for AP and P mutual orientation of magnetizations of the F-layers, respectively).

At present, most of fundamental issues concerning the physics of the superconducting spin-valve effect seem to be clarified. Our recent studies as well as studies of other groups show that the use of elemental ferromagnets as construction materials for the superconducting spin-valve exhausts their functionality with regard to record parameters of the superconducting spin-valve. To overcome this limitation new unconventional ferromagnetic materials are required. We have concentrated our attention on the spin-valve construction containing the Heusler alloy (HA) $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}_y$ which in principle may have 100 % spin polarization of the conduction band for the optimal preparation conditions.

The major goals of the present work are: (a) understanding the processes taking place at the interface between a superconductor and a half-metallic ferromagnet; (b) a comprehensive study of the spin-valve effect and triplet pairing induced by the S/F proximity effect for F1/F2/S heterostructures containing the HA $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}_y$ as one of two ferromagnetic layers.

We used HA $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}_y$ as half-metallic ferromagnet in our research. The choice of HA is determined by the possibility to change easily the degree of the spin polarization (DSP) of the conduction band by changing, e.g., the substrate temperature during the growth of the HA film (see, e.g., [6]). It is suggested that for the optimal preparation conditions one can reach 100 % DSP in such a film (see, e.g., [7]). In fact, the maximal DSP in our samples amounted to 70 %. In particular, our experimental finding suggests that the superconducting Cooper pairs are predominantly reflected from the S/HMF interface thus favoring the theoretical con-

¹⁾e-mail: kamandi@mail.ru

cept by Takahashi et al. [8]. We demonstrated that with increasing the exchange splitting of the conduction band of a ferromagnet and, respectively, of the degree of the spin polarization, the probability of transmission of the superconducting Cooper pairs through the S/F interface decreases. We concluded that the spin imbalance plays a key role in the processes taking place at the interface between a superconductor and a ferromagnet with spin-polarized conduction electrons.

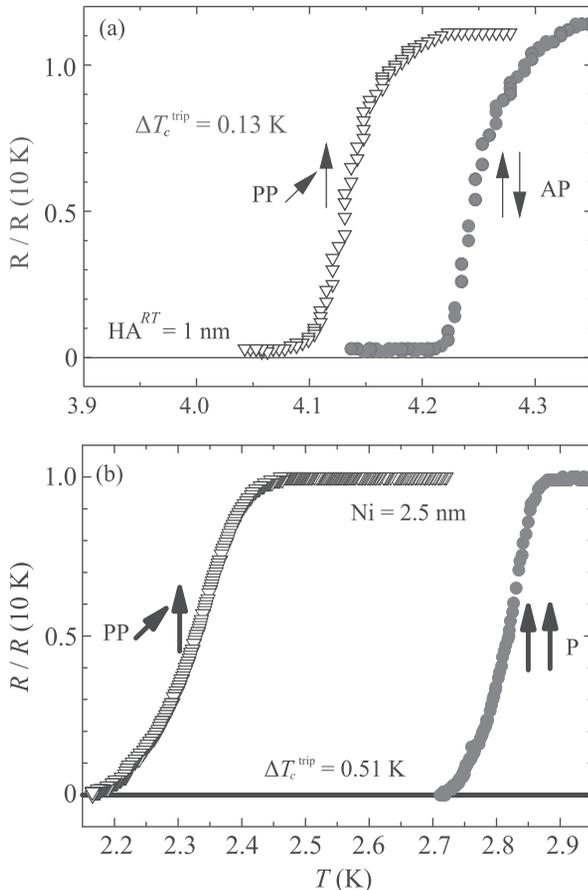


Fig. 1. Superconducting transition curves for different mutual orientations of the magnetizations of F layers in external magnetic field H_0 for two samples: (a) – sample $\text{CoO}_x(3.5\text{nm})/\text{Py}(5\text{nm})/\text{Cu}(4\text{nm})/\text{HA}^{RT}(1\text{nm})/\text{Cu}(2.5\text{nm})/\text{Pb}(80\text{nm})$ at $H_0 = 1.0\text{ kOe}$ (for AP and PP) and (b) – sample $\text{HA}^{\text{hot}}(20\text{nm})/\text{Cu}(4\text{nm})/\text{Ni}(2.5\text{nm})/\text{Cu}(1.5\text{nm})/\text{Pb}(105\text{nm})$ at $H_0 = 3.5\text{ kOe}$ (for P and PP)

In general, in order to get the maximal magnitude of the spin-valve effect ΔT_c and of the amplitude of the long-range triplet component (LRTC), two conditions should be fulfilled. The first and the main condition is that the thickness of the F2 layer d_{F2} proximate to the S layer should be smaller than the penetration depth of the Cooper pairs into the F2 layer $\xi_h = \sqrt{\hbar D_f / h}$ (where D_f is the diffusion constant of conduction electrons in the F layer and h is the exchange splitting of conduction

band of ferromagnet). This is necessary in order to have more Cooper pairs between the F1 and F2 layers, where the compensation of the exchange fields from F1 and F2 layers at the antiparallel mutual orientation of their magnetizations takes place. The condition $d_{F2} < \xi_h$ is not easy to fulfill. For elemental ferromagnets such as Fe, Co, Ni the value of h amounts approximately to 1 eV. This gives $\xi_h \leq 1\text{ nm}$. Fabrication of the continuous films with a thickness $d_{F2} < 1\text{ nm}$ is a complicated task. Therefore, one has to choose a ferromagnet with a much smaller value of h , i.e., this should be a weak ferromagnet with $h \ll 1\text{ eV}$. The second condition to be satisfied is that the DSP of the F1 layer should be as large as possible. The paper by Singh et al. [9] proposes a half-metallic ferromagnet as a highly efficient F1 layer. Both requirements for high performance of the F1/F2/S spin valve can be satisfied using a HA. We used HA in two roles: as a weak ferromagnet on the place of the F2 layer and as a half-metal on the place of the F1 layer. In the first case, we obtained the full switching between the normal and superconducting states that was realized with the dominant aid of the long-range triplet component of the superconducting pair condensate which occurs at the perpendicular mutual orientation of magnetizations (see Fig. 1a). In the second case, we observed separation between the superconducting transitions for perpendicular and parallel configurations of magnetizations reaching 0.5 K (see Fig. 1b).

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021030012

1. K. B. Efetov, I. A. Garifullin, A. F. Volkov, and K. Westerholt, *Proximity Effects in Ferromagnet/Superconductor Heterostructures: Magnetic Heterostructures. Advances and Perspectives in Spin-structures and Spintransport. Series Springer Tracts in Modern Physics*, Springer, Berlin (2007), v. 227, p. 251.
2. M. G. Blamire and J. W. A. Robinson, *J. Phys.: Condens. Matter.* **26**, 253201 (2014).
3. J. Linder and J. W. A. Robinson, *Nat. Phys.* **11**, 307 (2015).
4. S. Oh, D. Youm, and M. R. Beasley, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2376 (1997).
5. P. V. Leksin, N. N. Garif'yanov, I. A. Garifullin, J. Schumann, H. Vinzelberg, V. Kataev, R. Klingeler, O. G. Schmidt, and B. Büchner, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 102505 (2010).
6. N. I. Kourov, A. V. Korolev, N. V. Marchenkov, A. V. Lukojanov, and K. A. Belozerova, *Fizika Tverdogo Tela* **55**, 899 (2013) [*Phys. Sol. State* **55**, 927 (2013)].
7. I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *Phys. Rev. B* **66**, 174429 (2002).
8. S. Takahashi, H. Imamura, and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3911 (1999).
9. A. Singh, S. Voltan, K. Lahabi, and J. Aarts, *Phys. Rev. X* **5**, 021019 (2015).

Гибридная атомарно-оптическая квантовая гиromетрия

В. А. Томили¹⁾, Л. В. Ильичев

Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 15 ноября 2020 г.

После переработки 17 декабря 2020 г.

Принята к публикации 21 декабря 2020 г.

Предложена и исследована “гибридная” атомарно-оптическая схема интерферометра-гироскопа. Ее основой служит кольцевая конфигурация атомарного конденсата Бозе–Эйнштейна (БЕС), нарушенная в некотором участке дополнительным потенциальным барьером или ямой. Этот дефект кольцевой конфигурации создается пучком нерезонансного излучения, дисперсионно взаимодействующего с попадающими в его область атомами. Пучок распространяется по одному из путей интерферометра Маха–Цандера. Вращение системы отсчета гиromетра из-за наличия дефекта кольцевой структуры модифицирует состояние конденсата, а тот, в свою очередь, меняет условия интерференции излучения, взаимодействующего с атомами. В отличие от известных нам идей использования БЕС в гиromетрии, предусматривающих разрушение конденсата для непосредственного наблюдения его интерференции, предлагаемая схема в идеале функционирует без потери атомов конденсатом. Для реалистичных условий сделаны оценки эффективности схемы.

DOI: 10.31857/S1234567821030101

Введение. С развитием технологии создания и контроля атомарного конденсата Бозе–Эйнштейна (Bose–Einstein condensate – БЕС) [1] появилась возможность его использования в перспективных схемах квантовых гироскопов. В работе [2] предсказана прецессия конденсата с изначально приготовленным вихрем в результате вращения удерживающего потенциала. Вращение может приводить к наклону полос в картине интерференции фрагментов единого конденсата [3]. Взаимодействие между атомами в конденсате может оказаться не мешающим фактором, а основой достижения гейзенберговского предела в точности детектирования слабого вращения [4]. Достижение этого предела составляет главную цель квантовой метрологии [5]. В работе [6] исследуется возможность достижения гейзенберговского предела в БЕС-гиromетре за счет естественной многочастичной зацепленности в конденсате. Возможность создания суперпозиции встречных движений конденсата в кольцевом удерживающем потенциале также может оказаться перспективной в квантовой гиromетрии [7]. В [8] проведен сравнительный анализ различных экзотических состояний конденсата для повышения точности гиromетра. Обзор эффектов, связанных с коллективными возбуждениями бозе-конденсата в трехмерной и квази-двумерной геометрии, приведен в [9].

Во всех известных нам схемах атомарной квантовой гиromетрии присутствует прямая регистрация интерференции волн материи. Если в схеме фигурирует атомарный конденсат, это предполагает его разрушение и потерю атомов. Весьма желательно иметь альтернативную схему квантового гиromетра, использующую макроскопическую пространственную когерентность атомарного конденсата, но не разрушающую его в процессе регистрации вращения (термин “гиromетр” будет использоваться как синоним “гироскопа”). Такая схема предлагается в настоящей работе. Вращение системы отсчета гиromетра модифицирует состояние конденсата, а тот, в свою очередь, меняет условия интерференции излучения, нерезонансно взаимодействующего с атомами. Роль излучения при этом оказывается двойкой: оно не только позволяет определить угловую скорость вращения через модификацию картины интерференции, но и обеспечивает чувствительность конденсата к факту вращения через трансформацию удерживающего его потенциала.

Модель. Схема гибридного гиromетра приведена на рис. 1. В одном из плеч оптического интерферометра Маха–Цандера (Mach–Zehnder interferometer – MZI) размещен кольцевой резонатор, внутренний пучок которого пересекает торообразную ловушку с атомарным конденсатом. Присутствие резонатора помогает построению пучка нужной конфигурации и интенсивности. Способ формирования ловушки (на-

¹⁾e-mail: 8342tomilin@mail.ru

пример, средствами SLM-технологии [10]) не отражен в приведенной схеме. Будем пренебрегать радиусом образующей окружности тора по сравнению с расстоянием от ее центра до оси вращения, т.е. эффективно полагать его одномерным кольцом радиуса R . Атомарные бозе-конденсаты в одномерных и квазиодномерных потенциалах являются весьма популярной моделью при изучении свехтекучести в малоразмерных системах [11–15]. Кроме того, мотивация к изучению одномерных моделей продиктована также прогрессом в направлении их экспериментальной реализации [16–18]. Важно, что пучок резонатора вносит дополнительный вклад в потенциал ловушки [19]. В результате кольцо оказывается нарушенным потенциальным барьером или ямой. Этот дефект, как будет показано далее, делает состояние конденсата чувствительным к вращению системы отсчета всей установки²⁾. В схеме на рис. 1 плоскость

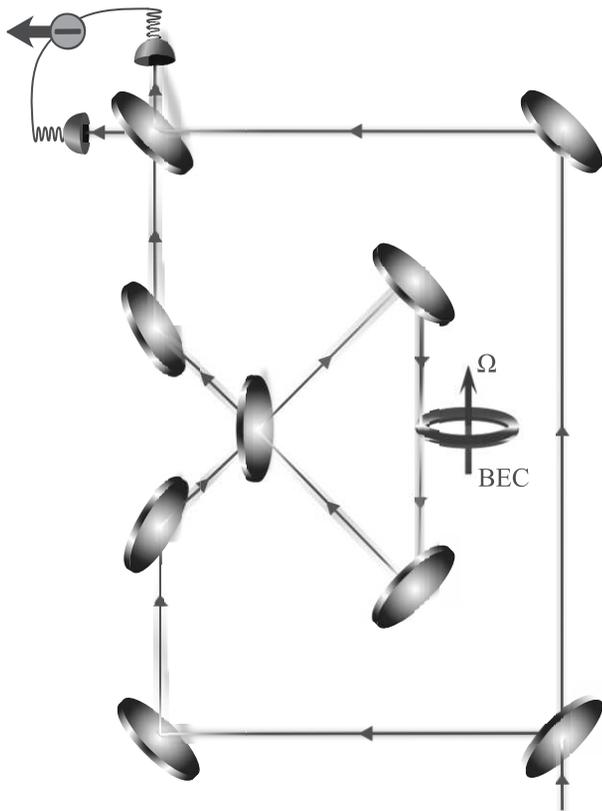


Рис. 1. (Цветной онлайн) Принципиальная схема атомно-оптического гиометра

²⁾ Детектором вращения оказывается ВЕС. Этим предлагаемая схема отличается от идеи гибридного гиометра [20], где регистрирующим элементом является оптическая петля Саньяка. Ансамбль атомов входит в конструкцию делителя/объединителя оптических пучков.

интерферометра и кольца с конденсатом ортогональны. Когда направление вектора Ω угловой скорости вращения нормально плоскости кольца, ожидаемый эффект максимален. Конденсат в настоящей работе полагается идеальным и описывается в терминах единой для всех атомов волновой функции частицы в кольце с дополнительным локализованным потенциалом. Он имеет конечный размер. Будет, однако, показано, что хорошим приближением может служить более простая модель с точечным сингулярным потенциалом. Уравнение для волновой функции стационарного состояния запишем в безразмерном виде:

$$\Psi''(\varphi) - 2i\xi\Psi'(\varphi) + \mathcal{E}\Psi(\varphi) = 0. \quad (1)$$

Здесь φ – угловая координата на одномерном кольце; \mathcal{E} – безразмерная энергия, а параметр $\xi = = mR^2\Omega/\hbar$ учитывает вращение. Уравнение (1) записано во вращающейся системе отсчета. Известно, что в этом случае к гамильтониану атома на кольце добавляется слагаемое $-\hat{\mathbf{M}} \cdot \Omega$, где $\hat{\mathbf{M}}$ – оператор углового момента [21]. Это породило второй член в левой части (1). Сингулярный потенциал локализован в точке $\varphi = 0$. Он непосредственно не входит в (1), где предполагается, что $0 < \varphi < 2\pi$. Наличие сингулярного потенциала следует учесть в рамках известного приема [22], полагая непрерывность волновой функции в нуле: $\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \Psi(\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \Psi(2\pi - \varepsilon) \doteq \Psi(0)$, и заданную величину скачка ее первой производной: $\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (\Psi'(\varepsilon) - \Psi'(2\pi - \varepsilon)) = u\Psi(0)$. В последнее соотношение входит параметр u , характеризующий величину потенциала ($u > 0$ в случае барьера и $u < 0$ в случае ямы).

Изменение числа атомов в области потенциала, определяющее сдвиг выходного сигнала MZI из-за вращения, пропорционально разности

$$\Delta(\xi, u) \doteq |\Psi(0)|^2 \Big|_{\xi \neq 0} - |\Psi(0)|^2 \Big|_{\xi = 0}. \quad (2)$$

Фундаментальной системой решений (1) являются плоские волны

$$\Psi(\varphi) = \Psi_+ e^{i\kappa_+ \varphi} + \Psi_- e^{i\kappa_- \varphi} \quad (3)$$

с волновыми векторами

$$\kappa_{\pm} = \xi \pm \sqrt{\mathcal{E} + \xi^2}. \quad (4)$$

Возможны два режима, соответствующие положительному или отрицательному знаку подкоренного выражения: $\mathcal{E} > -\xi^2$ или $\mathcal{E} < -\xi^2$. Второй имеет место при достаточно глубокой яме.

Приведенные далее выражения записаны для случая $\mathcal{E} > -\xi^2$. Переход ко второму случаю

осуществляется формальной заменой $\sqrt{\mathcal{E} + \xi^2} \rightarrow i\sqrt{-\mathcal{E} - \xi^2}$. Из условий в точке $\varphi = 0$ возникает уравнение на \mathcal{E} :

$$u \sin 2\pi\sqrt{\mathcal{E} + \xi^2} = 2\sqrt{\mathcal{E} + \xi^2} (\cos 2\pi\xi - \cos 2\pi\sqrt{\mathcal{E} + \xi^2}). \quad (5)$$

Нас интересует энергия основного состояния атомов. Зависимость этой энергии от величины потенциального барьера (ямы) приведена на рис. 2. Расчет

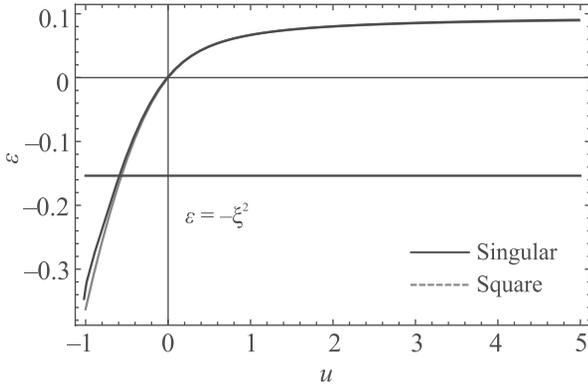


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость энергии основного состояния от параметра потенциала u при $\xi = 0.392$ в случае сингулярного (сплошная линия) и прямоугольного (пунктир) потенциалов. В последнем случае угловой размер области потенциала $2\delta = 0.1$ и его величина $U = u/2\delta$

выполнен для атома ^{87}Rb , $R = 0.2$ см и угловой скорости $\Omega = 0.727 \cdot 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ вращения Земли вокруг своей оси. Параметр ξ оказывается равным 0.392 . Выделенная на рис. 2 точка $\mathcal{E} = -\xi^2$ соответствует пограничному значению между режимами и имеет место при

$$u_* = \frac{1}{\pi} \cdot (\cos 2\pi\xi - 1). \quad (6)$$

Для вычисления $|\Psi(0)|^2$ необходимо знание \mathcal{E} и нормировки волновой функции. Универсальное (справедливое для всех режимов) выражение в терминах κ_{\pm} имеет вид

$$|\Psi(0)|^2 = \frac{1 - \cos 2\pi(\kappa_+ - \kappa_-)}{2\pi} \times \left[(1 - \cos 2\pi\kappa_-) \cdot \left(1 + \frac{\sin 2\pi\kappa_+}{2\pi(\kappa_+ - \kappa_-)}\right) + (1 - \cos 2\pi\kappa_+) \cdot \left(1 + \frac{\sin 2\pi\kappa_-}{2\pi(\kappa_- - \kappa_+)}\right) \right]^{-1}. \quad (7)$$

Целесообразно искать экстремальное значение величины $\Delta(\xi, u)$ из (2) как функции u для получения наибольшего сдвига на выходе MZI. Такой оптимум действительно существует и при выбранном значении ξ располагается вблизи $u \sim -1$ (см. рис. 3). Тот

факт, что оптимум имеет место для ямы, согласуется с простыми физическими соображениями³⁾. Проход кривой на рис. 3 через начальную точку осей демонстрирует отмеченное во Введении появление чувствительности конденсата к вращению только при ненулевом значении u .

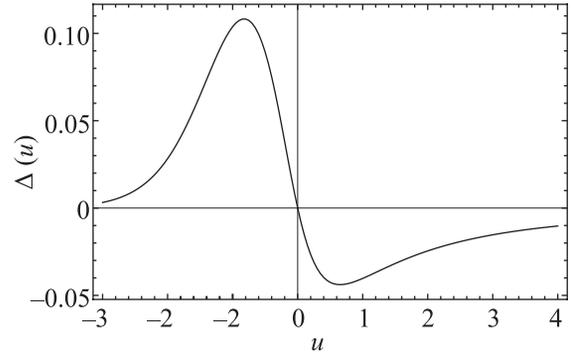


Рис. 3. Разность плотностей $\Delta(\xi, u)$ в месте разрыва кольцевой конфигурации как функция от u при $\xi = 0.392$

Модель сингулярного потенциала является идеализацией случая распределенного потенциала. Его простейший вариант – прямоугольный потенциал величины U на интервале $-\delta < \varphi < \delta$. Теперь вместо (2) необходимо знать величину

$$\tilde{\Delta}(\xi, U, \delta) = \frac{1}{2\delta} \cdot \int_{-\delta}^{\delta} \left[|\Psi(\varphi)|^2 \Big|_{\xi \neq 0} - |\Psi(\varphi)|^2 \Big|_{\xi=0} \right] d\varphi. \quad (8)$$

Задача сводится к сшивке решений уравнения Шредингера внутри и снаружи области потенциала. Условие непрерывности волновой функции и ее первой производной на границах области потенциала дает

$$(2(\xi^2 + \mathcal{E}) - U) \cdot \frac{\sin[2(\delta - \pi)\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E}}]}{\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E}}} \times \frac{\sin[2\delta\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E} - U}]}{\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E} - U}} = 2 \cos 2\pi\xi - 2 \cos[2(\delta - \pi)\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E}}] \cdot \cos[2\delta\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E} - U}]. \quad (9)$$

Вычисление интересующей нас вероятности (8) не представляет принципиальной сложности, однако

³⁾Если оптимум есть, то он, скорее всего, должен отвечать яме, притягивающей атомы; однако, глубина этой ямы не может быть слишком большой, поскольку тогда основная часть атомов окажется локализованной, и утратится чувствительность к вращению. Характерным масштабом глубины ямы является, очевидно, u_* , поскольку эта величина, согласно (6), отделяет режим глубокой ямы от неглубокой.

приводит к весьма громоздким выражениям. Когда ширина рассматриваемого потенциала достаточно мала, $0 < \delta \ll 1$, соотношение (9) можно привести к виду

$$\begin{aligned} & \delta(U - 2(\xi^2 + \mathcal{E})) \cdot \sin 2\pi\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E}} = \\ & = \sqrt{\xi^2 + \mathcal{E}} \cdot (\cos 2\pi\xi - \cos 2\pi\sqrt{\xi^2 + \mathcal{E}}). \end{aligned} \quad (10)$$

Если предположить, что $\xi^2 + \mathcal{E} \ll U$ для основного уровня энергии, то полученное уравнение оказывается идентичным уравнению (5) для случая сингулярного потенциала при условии $2\delta U = u$. Обоснованность сделанных приближений можно проверить, сравнив энергии основных состояний в случае сингулярного и прямоугольного потенциалов, рассчитанные согласно выражениям (5) и (9) соответственно, при соблюдении упомянутого условия (рис. 2). Как видно, практически полное совпадение графиков гарантирует возможность использовать более простые соотношения, полученные для сингулярного потенциала для анализа достаточно узкого потенциала прямоугольной формы. Это позволяет полагать

$$\tilde{\Delta}(\xi, \frac{u}{2\delta}, \delta) = \Delta(\xi, u). \quad (11)$$

В приведенных ниже оценках $2\delta = 0.1$, и используется модель с сингулярным потенциалом.

Обсуждение. Интерферометр должен обнаружить фазовый сдвиг, вносимый кольцевым резонатором, чья мода взаимодействует с конденсатом. Точнее, должна быть зарегистрирована реакция этого фазового сдвига на вращение. Рассмотрим условия этой регистрации. В отсутствие конденсата амплитуда моды резонатора α_{int} связана с α_0 , амплитудой волны, падающей на зеркало входа-выхода резонатора, соотношением

$$\alpha_{\text{int}} = \frac{\sqrt{T}\alpha_0}{1 - \sqrt{1 - T}e^{i\phi}}, \quad (12)$$

где T – коэффициент пропускания зеркала, $\phi = 2\pi l/\lambda$ (l – длина резонатора, λ – длина волны излучения). Для амплитуды волны α_1 между резонатором и выходным делителем пучка MZI имеем

$$\alpha_1 = \frac{e^{i\phi} - \sqrt{1 - T}}{1 - \sqrt{1 - T}e^{i\phi}}\alpha_0. \quad (13)$$

Видно, что помимо набега фазы из-за тривиального удлинения пути пучка при его распространении в резонаторе (к этому все сведется при $T = 1$, т.е. при убранном зеркале входа-выхода резонатора), амплитуда α_1 относительно α_0 несет дополнительную фазу

$$\Theta(\phi) = 2 \arg \left(1 - \sqrt{1 - T}e^{-i\phi} \right). \quad (14)$$

Рассмотрим модификацию α_{int} из-за взаимодействия резонаторной моды с конденсатом. Для простоты будем далее полагать $\exp(i2\pi l/\lambda) = 1$. В модели фотонной моды резонатора, возбуждаемой классическим гармоническим источником и контролируемой спонтанной потерей фотонов со скоростью ν , дисперсионное взаимодействие с конденсатом сводится к замене $\nu \mapsto \nu + i\mu$, где $\mu = NU/\hbar$ и N – число атомов в области пучка резонатора [23–25]. Частота ν связана с коэффициентом отражения зеркала входа-выхода резонатора:

$$\sqrt{1 - T} = e^{-\nu l/c}. \quad (15)$$

Предполагая универсальность преобразования $\nu \mapsto \nu + i\mu$, мы приходим к соотношению (13) с $\phi = -\mu l/c$.

Интерферометр должен быть способен зарегистрировать разницу $\Theta(\phi_\xi) - \Theta(\phi_0)$ (эффект вращения можно включать и выключать выбором ориентации нормали к плоскости кольцевой ловушки с конденсатом относительно Ω). При

$$\mu \lesssim \nu \ll \frac{c}{l} \quad (16)$$

из (14) и (15) следует $\Theta \simeq -2NU/\hbar\nu$. Часть параметров можно конкретизировать. При оптимальном значении $u \simeq -1$ и $\delta = 0.05$ необходимая интенсивность поля резонаторной моды такова, что $|U| \sim 5\hbar^2/2mR^2$. Для конденсата атомов ^{87}Rb и выбранного значения R получаем $|U|/\hbar \sim 0.4 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Вычисления дают для атомов в области потенциала $N \sim 10^{-1}N_{\text{tot}}$. Будем ориентироваться на $N_{\text{tot}} \sim 10^6$. Такое число атомов в конденсате уверенно достигается в современных экспериментах. Левое условие (16) оказывается выполненным при $\nu \gtrsim 10^2 \text{ с}^{-1}$. Верхнюю границу ν (помимо правого неравенства в (16), требующего достаточную малость коэффициента пропускания T) можно оценить из условия надежной регистрации вращения. Если Θ_{min} – минимальная обнаружимая разность фаз, необходимо $\Theta_{\text{min}} \lesssim |U|N\Delta/\hbar\nu$. Из рисунка 3 следует $\Delta \simeq 0.1$. Получаем $\nu \lesssim 4/\Theta_{\text{min}} \text{ с}^{-1}$. Множество допустимых значений ν не является пустым при $\Theta_{\text{min}} \lesssim 0.04$.

Отметим используемые приближения. Как уже подчеркивалось, отброшено межатомное взаимодействие в конденсате. Усложнив модель, его можно учесть в рамках подхода Гросса–Питаевского. Серьезным упрощением является подход к конденсату как к чисто динамической (изолированной) системе. Несмотря на то, что непосредственно наблюдаемой является оптическая интерференция, атомарный конденсат через взаимодействие с излучением приобретает черты открытой квантовой системы.

Возникает обмен информации конденсата с окружением. Конденсат не теряет атомы, как в других схемах гиromетров на волнах материи, но его макроскопическая пространственная когерентность модифицируется и в общем случае деградирует, т.е. оказывается ресурсом. В приведенном выше рассмотрении важную роль играет комбинация интегральных величин (8). В терминах одноатомной волновой функции это разница вероятностей того, что атом окажется внутри области потенциала с вращением и без него. В произведении с N_{tot} получается разность соответствующих средних чисел атомов в этой области. Для описания процесса декогеренции следует заменить эти средние на операторы. А именно, последовательное введение операторов \hat{b} и \hat{b}^\dagger , уничтожающих и рождающих атом в области потенциала, позволяет не только построить оператор числа атомов в этой области, но и описать их миграцию внутри кольца и модификацию этой миграции при вращении. Примечательно, что как амплитуда моды резонатора, так и амплитуды пучков на выходе интерферометра приобретают через фазовый сдвиг, пропорциональный $\hat{b}^\dagger \hat{b}$, операторную природу по отношению к состоянию конденсата. В других отношениях оптические поля остаются классическими. Такой подход использован в [26–28]. Более последовательная модель должна изначально формулироваться в терминах квантованного светового поля, как это сделано в [25].

Заметим, что поскольку величина потенциала U пропорциональна $|\alpha_{\text{int}}|^2$, соотношение (12) с $\phi = -NU/c\hbar$ формально является неявным уравнением на $|\alpha_{\text{int}}|$. В определение ϕ входит также число N , которое, в свою очередь, определяется из решения уравнения Шредингера с потенциалом U . Поэтому, строго говоря, вся модель гиromетра предполагает поиск согласованного решения. Однако, при условии (16) это обстоятельство можно не принимать во внимание.

Отмеченная выше необходимость построения кинетической модели с картиной миграции атомов конденсата диктуется также потребностью исследовать параметры стабильности гибридного гиromетра (рассчитать девиацию Аллана). В рамках представленной модели гиromетра можно сделать только простейшие оценки его точности и чувствительности. Наиболее интересным в физическом плане источником шума являются флуктуации числа атомов в пучке. Среднее число атомов, как указывалось, $N \sim 0.1N_{\text{tot}}$, т.е. под действием потенциала область пучка на окружности эффективно увеличилась с $2\delta = 0.1$ до 0.2π радиан. Предполагая пуассонову

статистику числа атомов в области, для используемых значений Δ и N_{tot} имеем $SNR \sim 30$ (отношение индуцированного вращением сдвига картины интерференции к шуму). Величина $|\partial\Delta/\partial\Omega|$, взятая для используемых в работе параметров, дает относительную ошибку измерения угловой скорости вращения Земли: $\delta\Omega/\Omega \simeq 0.08$. В контексте обсуждения точности и чувствительности различных схем гиromетрии на основе ВЕС следует упомянуть работу [29]. В ней экспериментально исследована возможность достижения чувствительности системы к вращению за счет интерференции звуковых волн, распространяющихся в противоположных направлениях в тороидальном конденсате. Как и в настоящей работе, схема [29] не предполагает потерю атомов конденсата при измерении вращения. Наиболее корректно сравнивать оценки, полученные из математических моделей обеих схем. Относительная ошибка при измерении угловых скоростей вращения $\sim 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ (как и в нашей работе), полученная в модели [29], составляет ~ 1 . В эксперименте ошибка оказалась еще больше. Однако, более объективное сравнение достоинств и недостатков двух схем гиromетрии следует проводить при близких радиусах ловушек и близких числах атомов в конденсате (обе эти величины в упомянутой работе на два порядка меньше, чем в нашей).

Закключение. Предложена схема оптико-атомарного гиromетра. Чувствительным к вращению элементом схемы служит тороидальная структура атомарного конденсата, нарушенная дополнительным оптическим потенциалом. Потенциал создается полем моды кольцевого резонатора. Система “резонатор + конденсат” помещена в интерферометр Маха–Цандера. Интерферометр служит для извлечения информации о реакции конденсата на вращение – об изменении числа атомов в области дополнительного потенциала через изменение вносимого ими фазового сдвига. Природа конденсата как протяженной когерентной квантовой системы явлена в использовании волнового уравнения (1) для описания реакции атомов на вращение. Оценки показывают возможность обнаружения суточного вращения Земли при диаметре тороидальной структуры конденсата всего 0.4 см.

Авторы признательны Д. В. Бражникову и О. Н. Прудникову за полезные обсуждения.

Работа выполнена в рамках Государственного задания (проект АААА-А17-117052210003-4, внутренний номер ФАСО 0319-2016-0002) в Институте автоматизации и электрометрии СО РАН. Участие Л. В. Ильичева поддержано Российским научным фондом (грант 20-12-00081).

1. Л. П. Питаевский, УФН **176**, 345 (2006).
2. S. Stringari, Phys. Rev. Lett. **86**, 4725 (2001).
3. O. I. Tolstikhin, T. Morishita, and S. Watanabe, Phys. Rev. A **72**, 051603R (2005).
4. S. Ragole and J. M. Taylor, Phys. Rev. Lett. **117**, 203002 (2016).
5. V. Giovannetti, S. Lloyd, and L. Maccone, Science **306**, 1330 (2004).
6. Ch. Luo, J. Huang, X. Zhang, and Ch. Lee, Phys. Rev. A **95**, 023608 (2017).
7. G. Pelegr, J. Mompart, and V. Ahufinger, New J. Phys. **20**, 103001 (2018).
8. L. Shao, W. Li, and X. Wang, arXiv:2006.05794v1[quant-ph] (2020).
9. М. Ю. Каран, А. В. Турлапов, УФН **189**, 225 (2019).
10. D. McGloin, G. C. Spalding, H. Melville, W. Sibbett, and K. Dholakia, Opt. Express **11**, 158 (2003).
11. M. Cazalilla, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 1 (2004).
12. R. Citro, A. Minguzzi, and F. W. J. Hekking, Phys. Rev. B **79**, 172505 (2009).
13. N. Didier, A. Minguzzi, and J. Hekking, Phys. Rev. A **79**, 063633 (2009).
14. D. W. Hallwood, T. Ernt, and J. Brand, Phys. Rev. A **82**, 063623 (2010).
15. S. Eckel, J. G. Lee, F. Jendrzejewski, N. Murray, C. W. Clark, C. J. Lobb, W. D. Phillips, M. Edwards, and G. K. Campbell, Nature **506**, 200 (2014).
16. A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
17. S. Gupta, K. W. Murch, K. L. Moore, T. P. Purdy, and D. M. Stamper-Kurn, Phys. Rev. Lett. **95**, 143201 (2005).
18. С. Руч, P. W. Blackburn, A. A. Blinova, and M. G. Boshier, Phys. Rev. Lett. **111**, 205301 (2013).
19. R. Grimm, M. Weidemuller, and Y. B. Ovchinnikov, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **42**, 95 (2000).
20. Y. Wu, J. Guo, X. Feng, L. Q. Chen, Ch.-H. Yuan, and W. Zhang, arXiv:2009.06166v1[quant-ph] (2020).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Физматлит, М. (2004).
22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, М. (2004).
23. L. V. P'ichev, Письма в ЖЭТФ **106**, 14 (2017).
24. Л. В. Ильичев, П. Л. Чаповский, Квантовая электроника **47**, 463 (2017).
25. T. S. Yakovleva, A. M. Rostom, V. A. Tomilin, and L. V. P'ichov, Opt. Commun. **436**, 52 (2019).
26. Л. В. Ильичев, П. Л. Чаповский, Письма в ЖЭТФ **102**, 18 (2015).
27. V. A. Tomilin and L. V. P'ichov, Annalen der Physik **528**, 619 (2016).
28. В. А. Томили, Л. В. Ильичев, Квантовая электроника **50**, 537 (2020).
29. G. E. Marti, R. Olf, and D. M. Stamper-Kurn, Phys. Rev. A **91**, 013602 (2015).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 113

Выпуск 4

25 февраля 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>

© Российская академия наук, 2021

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2021

Search for new heavy Higgs bosons in ATLAS and CMS experiments at LHC

(Mini-review)

Yu. G. Naryshkin¹⁾

Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Center “Kurchatov Institute”,
188300 Gatchina, Russia

Submitted 15 December 2020
Resubmitted 29 December 2020
Accepted 29 December 2020

DOI: 10.31857/S1234567821040017

Discovery of Higgs boson in 2012 by the ATLAS [1] and CMS [2] experiments finally confirm the truthiness of the Standard Model (SM), but there are still remain many open questions, e.g., SM does not explain the neutrino oscillation and baryon asymmetry, the problem of the particle mass hierarchy etc. This gave rise to the development of new theories which extend the SM – Beyond Standard Models (BSM), in particular, its Higgs sector. These models include the Two Higgs Doublet Model (2HDM) [3], the Minimal Supersymmetric Standard Model (MSSM) [4, 5] and its extension: Next to MSSM (NMSSM) [6], Higgs Triplet Model (HTM) [7], Left Right Symmetric Model (LRSM) [8], the little Higgs model [9], the Georgi–Machacek model [10], scalar singlet dark matter [11] etc. At present, the 2HDM and MSSM are the most used models for the interpretation of the LHC data. These models predicts several particles in the extended Higgs sector, e.g., in 2HDM the electroweak symmetry breaking leads to five Higgs particles: two neutral Higgs bosons that are CP-even (scalar) h , H , one is neutral and CP-odd (pseudoscalar) A , and charged Higgs boson H^\pm . The model is parametrized by the following parameters, Higgs masses: m_h , m_H , m_A , m_{H^\pm} , ratio of vacuum expectation values of the two Higgs doublets: $\tan\beta = \frac{v_1}{v_2}$ and the mixing angle α which diagonalizes the mass matrix of the CP even Higgs bosons.

The searches for a new particles from extended Higgs sector were carried out earlier in e^+e^- collisions at LEP [12] and in proton-antiproton collisions at the Tevatron [13, 14]. An intensive searches of the Heavy neutral Higgs bosons (H/A), Charged Higgs boson and Double charged Higgs bosons were performed by the ATLAS and CMS experiments in a wide range of possible values of the resonance masses and for different decay channels and final states. Data collected for LHC Run I and Run II with pp interactions at the center of mass energy $\sqrt{s} = 7, 8, 13$ TeV were used. Searches of the

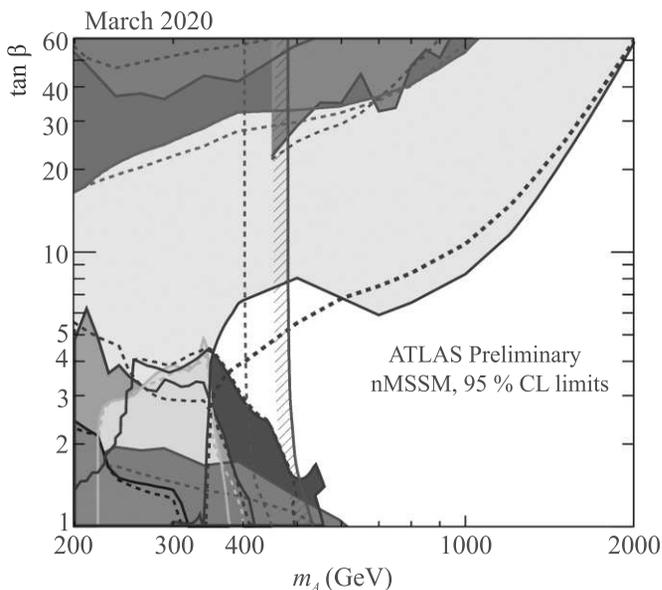


Fig. 1. (Color online) Regions of the $[m_A, \tan\beta]$ plane excluded in the hMSSM model via direct searches for heavy Higgs bosons and fits to the measured rates of observed Higgs boson production and decays [26]. Limits are quoted at 95% CL and indicated for the data (solid lines) and for the expectation for the SM Higgs sector (dashed lines). The light shaded or hashed regions indicate the observed exclusions obtained in ATLAS experiment: $H/A \rightarrow \tau\tau$ [18] (light grey), $H^+ \rightarrow \tau\nu$ [21] (cyan), $H^+ \rightarrow tb$ [22] (dark cyan), $Hb \rightarrow bbb$ [27] (dark grey), $H \rightarrow ZZ \rightarrow 4l/l\nu\nu$ [16] (light red), $gg \rightarrow A \rightarrow Zh$ [28] (yellow), $H \rightarrow WW \rightarrow l\nu l\nu$ [17] (blue), decay channels combination $H \rightarrow hh \rightarrow 4b, bbWW, bb\tau\tau, 4W, bb\gamma\gamma, WW\gamma\gamma$ [29] (green) and pink line show the limit obtained with the fits to the measured rates of SM Higgs boson production and decay [30]

heavy neutral resonances (H/A) were performed in the decay channels: $H/A \rightarrow VV$ ($V = Z, W, \gamma$), $\mu\mu$, $\tau\tau$, t, \bar{t} etc., see, e.g., [15–19]. Charged Higgs boson (H^\pm) were searched in the decays: $H^\pm \rightarrow \tau\nu, tb, cb, cs, WZ$

¹⁾e-mail: yury.naryshkin@cern.ch

etc., see, e.g., [20–23]. The searches of double charged Higgs boson $H^{\pm\pm}$ were carried out in its decays to the pair of same sign same flavor particles: leptons e^\pm, e^\pm or μ^\pm, μ^\pm or electroweak gauge bosons, e.g., W^\pm, W^\pm , see, e.g., [24, 25]. The experimental spectra of the kinematic variables (e.g., missing transverse energy or transverse mass) were compared with the SM prediction. No statistically significant deviation of the experimental observations from SM backgrounds were found and the upper limits on the cross section times branching fraction or limits for the resonance mass were derived. Interpretation of the obtained results were performed with different BSM scenarios (2HDM, MSSM, HTM etc.) and the limits on the models parameters were derived.

Summary plot with the constrains on hMSSM parameters $\tan\beta$ and m_A obtained in the ATLAS experiment is presented on the Fig. 1 [26]. Region with the not excluded parameters space is shown with the white color. As it is follows from the results based on these searches for different decay channels the region with $m_A < 340$ GeV is excluded. The analysis of the decay channel $A/H \rightarrow \tau\tau$ [18] excludes the region with high $\tan\beta$ values ($\tan\beta \gtrsim 6$). Mass region $m_A < 500$ GeV is indirectly excluded by the measurement of the Higgs boson production and decay rates (shown with violet curve) [30].

In future, LHC Run III followed by the High Luminosity LHC (HL-LHC) will provide much more data and significantly improve the potential to discover a new additional Higgs bosons.

This work was supported by Russian Foundation for Basic Research grant 18-02-00118A.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021040019

1. G. Aad, T. Abajyan, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Phys. Lett. B* **716**, 1 (2012).
2. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan et al. (CMS Collaboration), *Phys. Lett. B* **716**, 30 (2012); e-Print: 1207.7235.
3. G. Branco, P.M. Ferreira, L. Lavoura, M.N. Rebelo, M. Sher, and J.P. Silva, *Phys. Rep.* **516**, 1 (2012); arXiv: 1106.0034.
4. S.P. Martin, *Adv. Ser. Direct. High Energy Phys.* **21**, 1 (2010).
5. S.P. Martin, *Adv. Ser. Direct. High Energy Phys.* **18**, 1 (1998).
6. M. Maniatis, *Int. J. Mod. Phys. A* **25**, 3505 (2010).
7. F. Arbabifar, S. Bahrami, and M. Frank, *Phys. Rev. D* **87**(1), 015020 (2013); e-Print: 1211.6797.
8. G. Barenboim, M. Gorbahn, U. Nierste, and M. Raidal, *Phys. Rev. D* **65**, 095003 (2002); e-Print: hep-ph/0107121.
9. N. Arkani-Hamed, A.G. Cohen, E. Katz, A.E. Nelson, T. Gregoire, E. Katz, A.E. Nelson, and J.G. Wacker, *JHEP* **08**, 021 (2002); e-Print: hep-ph/0206020.
10. H. Georgi and M. Machacek, *Nucl. Phys. B* **262**, 463 (1985).
11. S. Bhattacharya, S. Jana, and S. Nandi, *Phys. Rev. D* **95**(5), 055003 (2017); e-Print: 1609.03274.
12. S. Schael, R. Barate, R. Brunelière et al. (ALEPH and DELPHI and L3 and OPAL and LEP Working Group for Higgs Boson Searches Collaborations), *Eur. Phys. J. C* **47**, 547 (2006); e-Print: hep-ex/0602042.
13. V.M. Abazov, B. Abbott, B.S. Acharya et al. (D0 Collaboration), *Phys. Lett. B* **698**, 97 (2011); e-Print: 1011.1931.
14. T. Aaltonen, B. Álvarez González, S. Amerio et al. (CDF Collaboration), *Phys. Rev. D* **85**, 032005 (2012); e-Print: 1106.4782.
15. G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah et al. (ATLAS Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **76**(1), 45 (2016); e-Print: 1507.05930.
16. M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **78**(4), 293 (2018); e-Print: 1712.06386.
17. M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **78**(1), 24 (2018); e-Print: 1710.01123.
18. G. Aad, B. Abbott, D.C. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **125**, 051801 (2020); e-Print: 2002.12223.
19. A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam et al. (CMS Collaboration), *JHEP* **04**, 171 (2020); e-Print: 1908.01115.
20. ATLAS Collaboration, ATLAS-CONF-2020-039, <https://cds.cern.ch/record/2727860/files/ATLAS-CONF-2020-039.pdf>.
21. M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *JHEP* **09**, 139 (2018); e-Print: 1807.07915.
22. M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *JHEP* **11**, 085 (2018); e-Print: 1808.03599.
23. A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam et al. (CMS Collaboration), *JHEP* **01**, 096 (2020); e-Print: 1908.09206.
24. M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **78**(3), 199 (2018); e-Print: 1710.09748.
25. A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam et al. (CMS Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **120**(8), 081801 (2018); e-Print: 1709.05822.
26. ATLAS Collaboration, Summary plots from the ATLAS Higgs physics group, <https://atlas.web.cern.ch/Atlas/GROUPS/PHYSICS/CombinedSummaryPlots/HIGGS/>.
27. G. Aad, B. Abbott, D.C. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Phys. Rev. D* **102**(3), 032004 (2020); e-Print: 1907.02749.
28. M. Aaboud, G. Aad, B. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *JHEP* **03**, 174 (2018); *JHEP* **11**, 051 (2018) (erratum); e-Print: 1712.06518.
29. G. Aad, B. Abbott, D.C. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Phys. Lett. B* **800**, 135103 (2020); e-Print: 1906.02025.
30. G. Aad, B. Abbott, D.C. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *Phys. Rev. D* **101**(1), 012002 (2020); e-Print: 1909.02845.

Использование новых кристаллических устройств на ускорителе У-70

А. Г. Афонин, В. Т. Баранов, Е. В. Барнов, Г. И. Бритвич, И. С. Лобанов, И. В. Полуэктов, С. Ф. Решетников,
Д. А. Савин, Ю. Е. Сандомирский, Д. С. Смаглюк, В. И. Терехов, М. Ю. Чесноков, Ю. А. Чесноков¹⁾,
П. Н. Чирков, А. А. Янович

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт” – Институт физики высоких энергий,
142281 Протвино, Россия

Поступила в редакцию 17 декабря 2020 г.

После переработки 2 января 2021 г.

Принята к публикации 4 января 2021 г.

На основе успешного опыта по генерации вторичного пучка пионов и каонов с помощью фокусирующего кристалла предложено создать на У-70 канал вторичных частиц нового типа – не потребляющий электрической энергии. Экспериментально показано, что с помощью многополоскового кристаллического устройства можно защитить выводной септум-магнит от радиации путем затенения токовой перегородки кристаллом, используемым для отклонения частиц режим объемного отражения. Указанные применения кристаллов являются новыми в мировой практике ускорителей.

DOI: 10.31857/S1234567821040029

На ускорителе У-70 применяется метод формирования пучков частиц с помощью каналирования в изогнутых кристаллах [1]. Общий недостаток метода – кристаллы отклоняют пучки частиц с малой угловой расходимостью, в пределах угла Линдхарда. В ходе выполнения работ по теме разработаны новые кристаллические устройства – фокусирующие элементы и многополосковые структуры, которые расширяют границы метода, кратно увеличивая угловую аксептанс кристаллической системы. Благодаря этому решаются новые ускорительные задачи – формирование пучков вторичных частиц, а также защита септум магнитов, предназначенных для вывода циркулирующего пучка, с помощью кристаллов.

Канал частиц нового типа для положительного заряженных пионов на основе фокусирующего кристалла. Получение вторичных частиц на протонных ускорителях является сложной научно-технической задачей. Для этого применяются протяженные магнитооптические каналы, насыщенные электромагнитами [2, 3]. Мы предлагаем революционный способ получения пионного пучка с помощью внутренней мишени, кольцевого магнита и фокусирующего кристалла. Созданные в ИФВЭ фокусирующие кристаллы, способные не только отклонять, но и фокусировать пучок частиц за счет скошенного входного торца, были неоднократно тестированы

на протонных пучках (см. [4] и ссылки). Недавно был проведен демонстрационный опыт по формированию пучка пионов и каонов кристаллом на канале 4А ускорителя ИФВЭ [5].

Схема опыта представлена на рис. 1а. В этом опыте был создан точечный источник расходящегося пучка вторичных частиц с помощью активной мишени в виде тонкой пластины (толщиной 150 мкм, длиной 20 мм и высотой 10 мм) из тяжелого сцинтиллятора CsI. Фокусирующий кристалл из кремния ориентации (111) имел ширину 2 мм, рабочую высоту 20 мм и длину 25 мм).

Вертикально-отклоняющий магнит V_m отделял пионы от протонов, которые не провозимодействовали в мишени, и выделял интервал импульсов (25 ± 2) ГэВ/с. В этих условиях мы определили эффективность получения пучка вторичных частиц. Она измерялась как отношение тройного совпадения CsI, счетчика S и ячеек годоскопа H с пиком сигнала при каналировании, к двойному совпадению CsI и общего счетчика пучка перед мишенью.

Оказалось, мы отклонили кристаллом пучок интенсивностью $\sim 0.001\%$ на каждый падающий на мишень протон, что соответствует расчету работы [6]. Эта величина примерно на порядок уступает магнитооптическим каналам У-70. Но это объясняется неоптимальностью кристаллической оптики для относительно низкой энергии первичного пучка протонов 50 ГэВ, когда размер кристалла мал, чтобы захватить в каналирование заметную часть вторичных

¹⁾e-mail: Yury.Chesnokov@ihep.ru

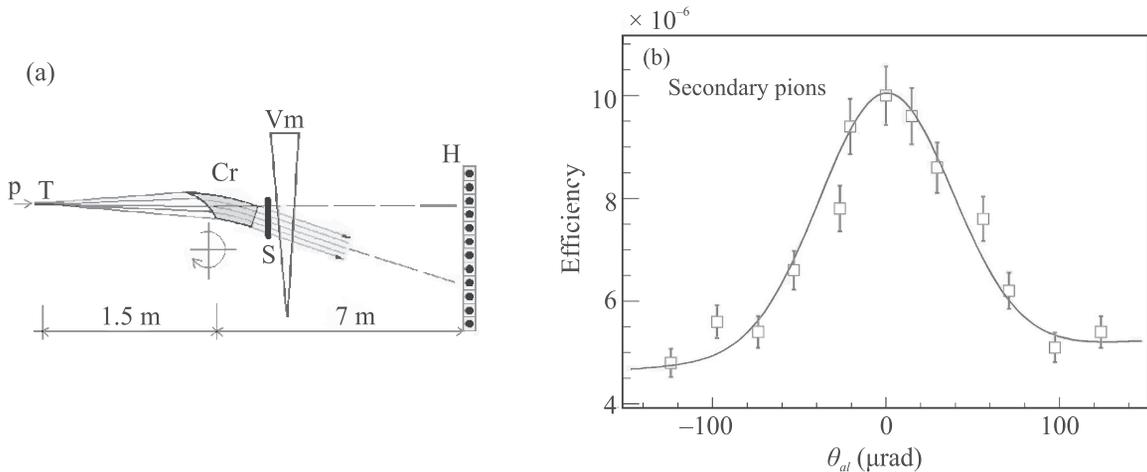


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) Схема опыта: Т – мишень из CsI; Cr – кристалл в гониометре; S – миниатюрный сцинтиллятор; Vm – вертикально-отклоняющий магнит; H – сцинтилляционный годоскоп. (б) – Зависимость интенсивности пучка вторичных пионов от ориентации фокусирующего кристалла

частиц, разлетающихся на десятки миллирадиан с мишени.

С использованием этого метода на ускорителе У-70 предложено построить тестовый канал вторичных частиц (положительно заряженных пионов) нового типа, который не потребляет электрической энергии. Перед кольцевым магнитом открытого типа устанавливается внутренняя мишень (рис. 2). Положительно заряженные пионы отклоняются по

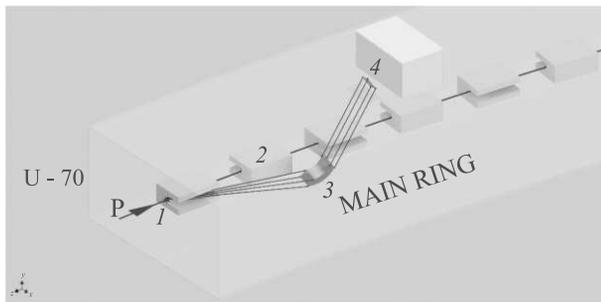


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема формирования пучка вторичных положительно заряженных пионов с помощью внутренней мишени и фокусирующего кристалла Вставка редактора. У-70 главное кольцо: 1 – мишень; 2 – магнит; 3 – фокусирующий кристалл; 4 – физическая установка

горизонтали магнитом во внутреннюю часть кольцевого зала ускорителя, фокусируются и отклоняются по вертикали фокусирующим кристаллом в зону физической установки. Кристалл действует на пучок локально, не имеет обратных полей, как у магнитов, поэтому на короткой базе обеспечивает очистку от нежелательных фоновых частиц, что делает возмож-

ным вывод пучка из кольцевого зала через небольшое отверстие в защите.

Ключевым моментом для реализации такого канала является создание фокусирующего кристалла, который должен иметь большой угол изгиба, порядка 100 мрад (чтобы вывести пучок за защиту на короткой базе), и ощутимый поперечный размер. Для этого предложена новая схема кристалла, показанная на рис. 3. Применяется целая стопка кристаллов

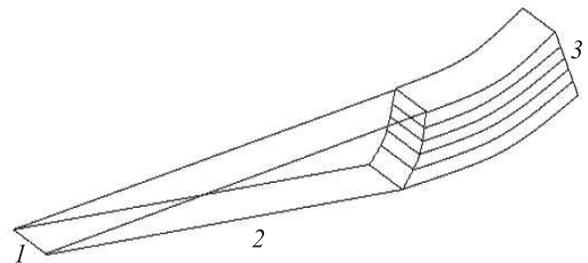


Рис. 3. Схема фокусирующего кристаллического устройства на основе массива изогнутых кристаллов: 1 – мишень; 2 – траектории частиц; 3 – массив изогнутых кристаллических пластин

вместо одного. Это и позволяет решить сразу две задачи – увеличить угол изгиба за счет применения тонких пластин, и увеличить количество отклоненных частиц за счет большего размера, образованного массивом кристаллов. В реальном устройстве мы использовали 7 кристаллических пластин толщиной 0.4 мм. Такое кристаллическое устройство имеет угловой захват около 1 мрад по вертикали и 3 мрад по горизонтали.

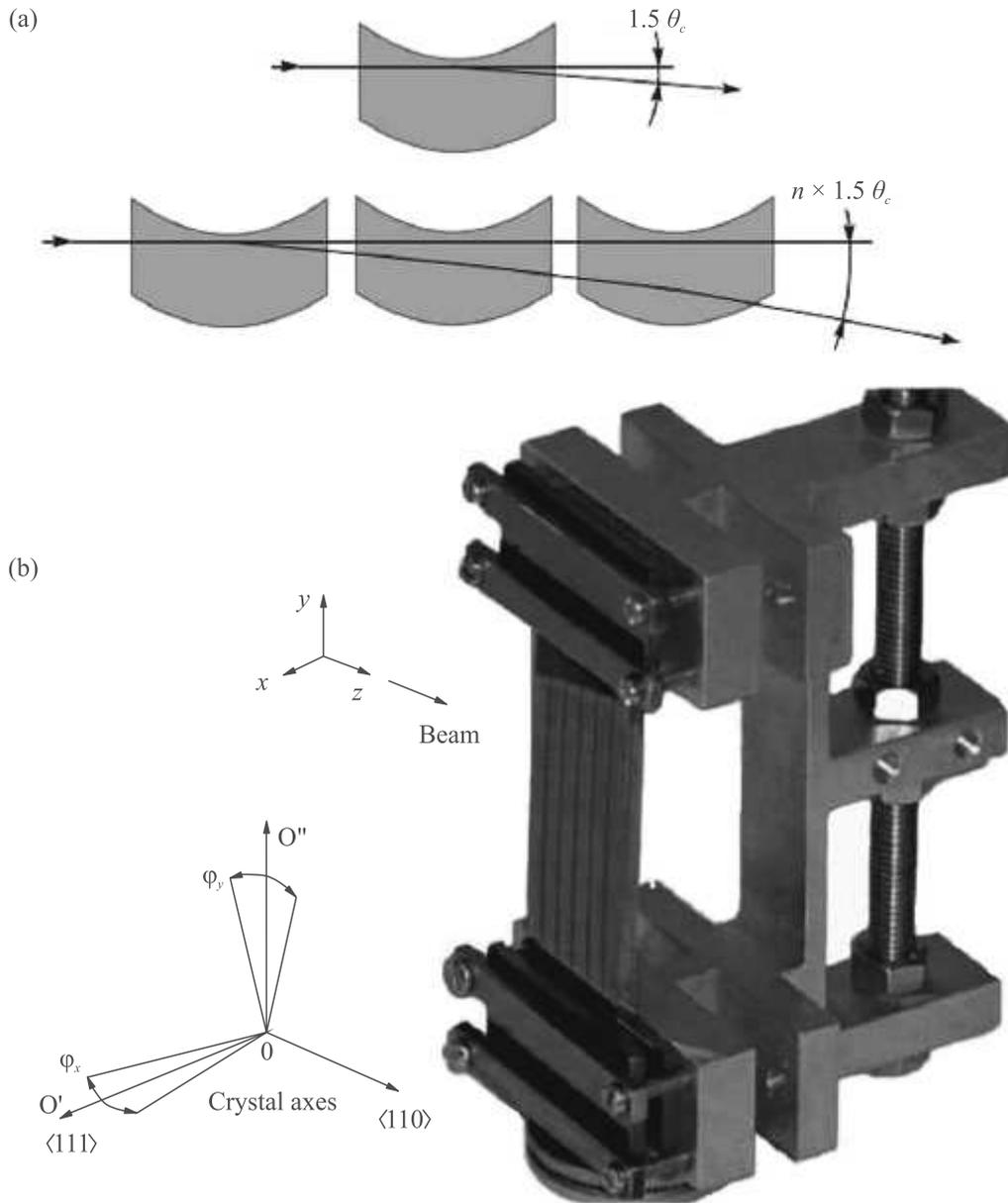


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Принцип работы многополоскового кристаллического устройства; (б) – его внешний вид

Ширина импульсного интервала будет равна отношению поперечного размера кристалла к линейной дисперсии, создаваемой магнитом, как обычно в магнитной оптике [3]: $\frac{\Delta p_0}{p_0} = \frac{H_{\text{cryst}}}{d_{13}}$, где H_{cryst} – это размер кристалла по горизонтали, линейная дисперсия $d_{13} = \alpha_{\text{bend}} D$ для системы из дипольного магнита и свободного промежутка [3], где α_{bend} – угол поворота пионов в магните, D – расстояние между центром магнита и кристаллом.

Если мы фиксируем импульс пионов $p_0 = 25 \text{ ГэВ}/c$, то при значении магнитного поля в У-70 $B = 0.86 \text{ Тл}$ и длине пути в магните до выхода из вакуумной камеры $l = 5 \text{ м}$ угол поворота составит $\alpha_{\text{bend}} = \frac{303Bl}{p_0} = 50 \text{ мрад}$ (см. [3]). Для кристалла, который имеет ширину $H_{\text{cryst}} = 10 \text{ мм}$, установленного в 5 м от центра поворота в магните, выделяемый импульсный интервал составит $\frac{\Delta p_0}{p_0} = \frac{1}{25} = 4 \%$.

Если мы применим нитевидную внутреннюю мишень, на которую наводится 10^{12} протонов в цикле, интенсивность пучка вторичных пионов составит $\sim 10^5$ частиц за цикл, с учетом экспериментальных данных на рис. 1b и потерь частиц в сильно изогнутом кристалле (эффективность поворота пучка сильно изогнутым кристаллом рассчитана в [1]). Опыты с пучком начнутся сразу после модернизации У-70.

Предложенный способ получения вторичного пучка пионов с помощью фокусирующих кристаллов перспективен также для развития программы “физики за пределами коллайдеров” [7], которая может быть реализована на пучках, выведенных из кольца БАК.

Применение многополосковых кристаллов для защиты септум-магнитов. Актуальной задачей на крупных ускорителях является организация вывода пучка частиц высокой интенсивности для задач физики высоких энергий (пучки нейтрино), нейтронные источники и т.д. При интенсивности пучка 10^{13} – 10^{14} частиц в секунду возникает проблема радиационной защиты электростатических и магнитных септумов [8]. Эта задача может быть решена с помощью изогнутых кристаллов путем затенения кристаллическим рассеятелем перегородки септума. О первых результатах по защите электростатического септума ускорителя СПС в ЦЕРН коротким кристаллом в режиме каналирования сообщается в [8]. Для У-70 более актуальна защита магнитного септума SM24 с токовой перегородкой 2 мм, которая значительно толще вольфрамовых проволок на электростатическом септуме СПС. Для решения этой задачи предложен другой путь.

Для радиационной защиты токовой перегородки выводного септум-магнита предлагается устройство для кратного отклонения протонного пучка несколькими изогнутыми полосками кремния в режиме объемного отражения (рис. 4а). Объемное отражение обусловлено взаимодействием налетающего протона с потенциалом изогнутой атомной решетки и происходит на малой длине в области касательной к изогнутой атомной плоскости [9–12]. Вероятность однократного отражения высока и при энергиях около 100 ГэВ приближается к единице. Для увеличения угла отражения и практического применения объемного отражения необходимо увеличить значение угла отклонения заряженных частиц. Это делается с помощью взаимно ориентированных с высокой точностью кристаллов, расположенных последовательно.

Для защиты септум-магнита У-70 с токовой перегородкой 2 мм нами разработано устройство “бутерброд” (рис. 4б). Устройство содержит 24 изогнутых

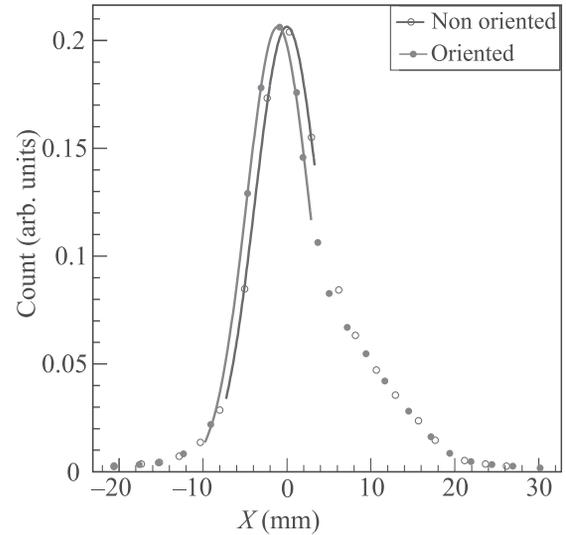


Рис. 5. (Цветной онлайн) Профиль пучка протонов 50 ГэВ, измеренный для ориентированного и разориентированного случая с помощью сканирующего счетчика

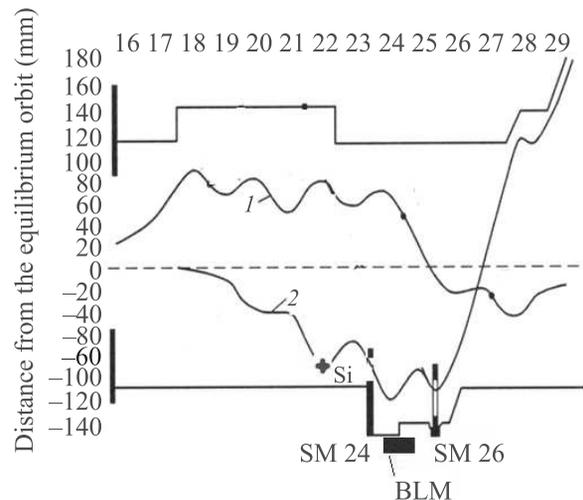


Рис. 6. (Цветной онлайн) Расположение кристалла Si в 22 магнитном блоке У-70 для защиты септум-магнита SM24. BLM – монитор потерь; кривая 1 – циркулирующий пучок; 2 – выводимый пучок; SM26 – следующий магнит по трассе вывода

кристалла в виде изогнутых полосок. Метод изгиба нескольких полосок в одном держателе был развит в экспериментах по объемному отражению протонных пучков [13]. Шесть полосок вдоль пучка длиной 2.5 мм каждая усиливают эффект отражения, а четыре слоя по 0.5 мм поперек пучка обеспечивают необходимый поперечный размер 2 мм (толстые кристаллы не могут изгибаться на нужные углы, поэтому необходим такой сэндвич). В результате опти-

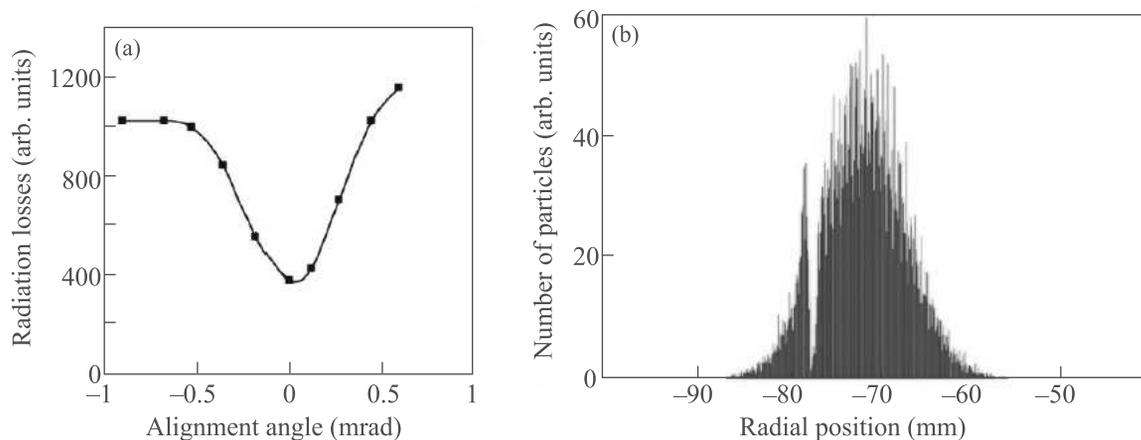


Рис. 7. (Цветной онлайн) (a) – Измеренные монитором ВЛМ потери частиц на септуме СМ24 в зависимости от ориентации кристалла. (b) – Расчетный профиль выводимого пучка перед септумом; провал в левой части профиля, как раз на координате токовой перегородки, образован тенью от ориентированного кристалла

ческой проверки было установлено, что угол изгиба каждой полоски равен 1.1 мрад. Он заметно больше, чем расходимость пучка в точке установки кристалла в ускоритель (~ 0.1 мрад), поэтому эффективно должны отклоняться все падающие на кристалл частицы.

Высокие цифры по эффективности отклонения ($> 90\%$) были получены при проверке кристаллического устройства на выведенном пучке канала частиц 4А ускорителя ИФВЭ (рис. 5).

Угол отклонения пучка 0.2 мрад совпал с ожидаемым. Проверенное на выведенном пучке многополосковое устройство было установлено в 22 магнитном блоке У-70 для защиты септума СМ24 с токовой перегородкой 2 мм (рис. 6).

В первых ускорительных тестах мы просто направляли пучок на септум быстрым кикермагнитом. С помощью штатных мониторов потерь [14] мы измерили, как уменьшаются потери частиц на септуме для оптимальной ориентации кристалла (рис. 7а). Измеренное уменьшение радиационных потерь на септуме составляет 60%. Это подтверждается расчетами Монте-Карло (рис. 7b), использующими модель взаимодействия частиц с многополосковым кристаллом [15]. Движение частиц от кристалла до септума описывалось матрицей перехода, с учетом геометрии опыта и структурных функций ускорителя.

Эти результаты оказались еще более оптимистичны, чем результаты, полученные в ЦЕРНе [8] на ускорителе СПС (уменьшение потерь на электростатическом септуме 40%), где вместо многополосковой структуры была использована одиночная изогнутая кристаллическая полоска, в которой использовался режим каналирования. В дальнейшем планируется

использовать многополосковое устройство для затенения перегородки не в экспериментальном режиме, а в интенсивном пучке медленного резонансного вывода интенсивностью 10^{13} частиц в одном цикле ускорения.

Аналогичные задачи могут быть решены с помощью нашей методики и на других крупных ускорителях, таких как СПС (ЦЕРН), Главный инжектор (Фермилаб), АГС (Брукхэйвен), Японский ускорительный комплекс в г. Токай.

Отметим, что кристаллы кремния в качестве защитного элемента обладают достаточной радиационной и тепловой стойкостью. В штатной работе медленного вывода протонов потери частиц на септуме СМ24 ускорителя У-70 не превышают 10^{11} частиц в секунду [16]. В экспериментах ИФВЭ [17] по выводу циркулирующего пучка показано, что кристаллы кремния длительное время выдерживают потоки $\simeq 10^{12} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$, а радиационный предел для каналирования составляет 10^{20} см^{-2} частиц. Это значит, что кристаллический прибор простоят несколько лет при непрерывной работе У-70 (вполне приемлемый срок).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 17-12-01532.

1. V. M. Biryukov, V. I. Kotov, and Yu. A. Chesnokov, *Phys.-Uspekhi* **37**, 937 (1994).
2. K. G. Steffen, *High Energy Beam Optics*, Interscience, N.Y. (1965), v. 17.
3. V. P. Kartashev and V. I. Kotov, *Methods of Particle Beams Formation in High-Energy Accelerators*, Energoatomizdat, M. (1989) [in Russian].

4. A. G. Afonin, G. I. Britvich, A. P. Bugorskii, M. K. Bulgakov, A. A. Durum, M. Yu. Kostin, A. V. Lutchev, V. A. Maisheev, Yu. E. Sandomirskiy, V. I. Pitalev, I. V. Poluektov, Yu. A. Chesnokov, P. N. Chirkov, and A. A. Yanovich, *JETP Lett.* **104**, 12 (2016).
5. G. I. Britvich, A. A. Durum, M. Y. Kostin, V. A. Maisheev, Y. A. Chesnokov, and A. A. Yanovich, *JETP* **129**(2), 229 (2019)
6. V. A. Maisheev, Y. A. Chesnokov, and P. N. Chirkov, *Nucl. Instrum. Methods B* **355**, 360 (2015).
7. C. Barschel, *Report from the LHC Fixed Target working group of the CERN Physics Beyond Colliders Forum*, Tech. Rep. CERN-PBC-REPORT-2019-001, CERN, Geneva (2019).
8. F. M. Velotti, L. S. Esposito, M. A. Fraser, V. Kain, S. Gilardoni, B. Goddard, M. Pari, J. Prieto, R. Rossi, W. Scandale, L. S. Stoel, F. Galluccio, M. Garattini, and Yu. Gavrikov, *Phys. Rev. AB* **22**, 093502 (2019).
9. Y. M. Ivanov, A. A. Petrunin, V. V. Skorobogatov et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **97**, 144801 (2006).
10. W. Scandale, D. Still, A. Carnera et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **98**, 154801 (2007).
11. A. M. Taratin and S. A. Vorobiev, *Phys. Lett. A* **119**, 425 (1987).
12. V. A. Maisheev, *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **10**, 084701 (2007).
13. W. Scandale, G. Arduini, Yu. A. Chesnokov et al. (Collaboration), *JETP Lett.* **101**, 679 (2015).
14. A. G. Afonin, V. T. Baranov, E. V. Barnov et al. (Collaboration), *Nucl. Instrum. Meth. B* **457**, 10 (2019)
15. V. A. Maisheev and M. Yu. Chesnokov, *Technical Physics* **65**, 820 (2020).
16. S. V. Ivanov and O. P. Lebedev, *Instrum. Exp. Tech.* **49**, 157 (2006) [*Prib. Tekh. Eksp.* **49**, 14 (2006)].
17. A. G. Afonin, V. T. Baranov, E. V. Barnov, G. I. Britvich, Yu. A. Chesnokov, P. N. Chirkov, V. A. Kalinin, V. A. Maisheev, S. F. Reshetnikov, D. A. Savin, and V. I. Terekhov, *Int. J. Mod. Phys. A* **33**, 1850138 (2018).

Измерение S-фактора реакции $T(^1H, \gamma)^4He$ в астрофизической области энергий

В. А. Варлачев⁺, Г. Н. Дудкин⁺, Б. А. Нечаев⁺, Ф. М. Пеньков^{*×}, М. Филипович[°], А. В. Филиппов^{∇1)},
Д. С. Флусова⁺, Д. К. Чумаков⁺, Е. Н. Шувалов⁺

⁺Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

^{*}Институт ядерной физики Министерства энергетики, 050032 Алматы, Казахстан

[×]Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, 050040 Алматы, Казахстан

[°]Факультет энергетики и топлива, Университет науки и технологий, 30-050 Краков, Польша

[∇]Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 23 декабря 2020 г.

После переработки 25 января 2021 г.

Принята к публикации 25 января 2021 г.

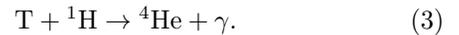
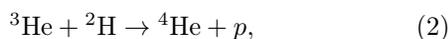
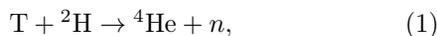
Реакция $T(^1H, \gamma)^4He$ впервые исследована в энергетическом диапазоне $E_{\text{лаб}} = 12 \div 34$ кэВ в лабораторной системе координат ($E = 7.8 \div 20.1$ кэВ в с.д.м.). Интерес к изучению этой реакции обусловлен как ее участием в первичном нуклеосинтезе 4He , так и ее важностью для теории малонуклонных систем. В результате настоящего эксперимента, точность экспериментального определения S-фактора реакции $T(^1H, \gamma)^4He$ улучшена в несколько раз. При этом теоретические расчеты S-фактора реакции $T(^1H, \gamma)^4He$ по-прежнему отличаются от экспериментальных значений примерно в два раза.

DOI: 10.31857/S123456782104011X

1. Введение. Интерес к изучению реакции $T(^1H, \gamma)^4He$ определяется в основном задачами ядерной астрофизики и физикой малого числа нуклонов.

В основе современных представлений о характере эволюции Вселенной лежит стандартная космологическая модель Большого взрыва (*Lambda Cold Dark Matter* – Λ CDM). Экспериментальную основу этой модели составляют: наблюдаемое на базе красного смещения расширение Вселенной, примордиальный синтез легких элементов и космическое микроволновое фоновое излучение. Считается, что космологический ядерный синтез легких элементов (стандартная модель *Big bang nucleosynthesis* (SBBN)) начался примерно через 2 с после Большого Взрыва [1] и происходил последовательно в энергетическом интервале $400 \div 10$ кэВ с образованием ядер: дейтерия 2H , трития 3H , гелия – 3He , 4He , лития – 6Li , 7Li [2].

Производство 4He в примордиальном синтезе обеспечивается тремя основными реакциями:



Вклады этих реакций в образование 4He различны, что отражает их последовательность записи (1)–(3) (наибольшая у первой реакции) [3]. Тем не менее, для обеспечения согласия предсказаний SBBN модели с результатами наблюдательной оптической астрономии необходимо учитывать вклады всех трех реакций. Так на сегодняшний день установлены следующие величины для концентрации 4He : результат наблюдательной оптической астрономии – $Y_p = 0.2449 \pm 0.0040$ [4] и результат SBBN модели – $Y_p = 0.24705 \pm 0.00019$ полученный на основе последних результатов Planck collaboration [5]. Видно, что результаты наблюдательной оптической астрономии и предсказаний в рамках SBBN модели согласуются друг с другом в пределах ошибки экспериментальных наблюдений, но предсказание SBBN модели более чем на порядок точнее экспериментального результата оптической астрономии. При этом, чтобы повлиять на результаты, получаемые в SBBN модели, необходимо знание скоростей реакций (1)–(3) с точностью $< 1\%$ [4]. Кроме того, большую роль в точности определения распространенности гелия-4 в рамках SBBN модели играет также точность в определении времени жизни нейтрона [6, 7].

¹⁾e-mail: philippov@jinr.ru

Здесь необходимо отметить, что планируется к созданию новый наземный оптический телескоп CMB-S4 [8], который будет определять численность ${}^4\text{He}$ с точностью на порядок лучше, чем предоставляемой современными средствами наблюдения. Это должно обеспечить новый и ключевой тест физики BBN и Стандартной модели. В свою очередь требуется и уточнения скоростей реакций (1)–(3) [9, 10]. В работе [11] учитываются даже QED – поправки к скоростям реакций радиационного захвата эпохи SBBN, в частности для реакции $T({}^1\text{H}, \gamma){}^4\text{He}$, а в работе [12] указывается на возможность реакции ${}^3\text{H}(p, e^+e^-){}^4\text{He}$ за счет гипотетической частицы X17 [13].

В ядерной физике малого числа тел, четырехнуклонная ($4N$) система в последние годы является объектом интенсивных исследований [14]. Эта система особенно интересна как “теоретическая лаборатория” для проверки точности наших современных знаний о нуклон-нуклонных (NN) и трехнуклонных (3N) взаимодействиях. Это требует, в свою очередь, высокой точности экспериментальных данных.

Скорости ядерных реакций типа (1)–(3) в плазме определяются сечениями неупругих процессов при низких энергиях столкновения E . Эти сечения описываются формулой Гамова–Солпитера [15],

$$\sigma(E) = \frac{S(E)}{E} e^{-2\pi\eta}, \quad (4)$$

со слабо зависящим от энергии астрофизическим S-фактором и параметром Зоммерфельда – $\eta(E)$, численное значение которого можно записать в форме: $2\pi\eta = 31.29Z_1Z_2\sqrt{\mu/E}$, где Z_1 и Z_2 – заряды сталкивающихся ядер, а μ – их приведенная масса в единицах а.е.м.

Зависимости сечения и S-фактора реакции $T({}^1\text{H}, \gamma){}^4\text{He}$ от энергии были исследованы достаточно давно в работах [16–18]. По совокупности экспериментального материала трех экспериментов в [18] была получена следующая аппроксимация поведения S-фактора реакции от энергии вида:

$$S(E) = S_0 + S_1 \cdot E + S_2 \cdot E^2 \quad (5)$$

с параметрами:

$$\begin{aligned} S_0 &= 2.0 \pm 0.2 \text{ кэВ} \cdot \text{мб}, \\ S_1 &= (1.6 \pm 0.4) \cdot 10^{-2} \text{ мб}, \\ S_2 &= (1.1 \pm 0.3) \cdot 10^{-4} \text{ мб/кэВ}, \end{aligned} \quad (6)$$

где линейная часть параметризации, по сути, определяется двумя экспериментальными точками работы [18]. При этом в теоретической работе [19] была

получена зависимость S-фактора от энергии с параметрами, заметно отличающимися от (6).

$$S_0 = 0.87 \text{ кэВ} \cdot \text{мб},$$

$$S_1 = 4.086 \cdot 10^{-2} \text{ мб}, \quad (7)$$

$$S_2 = 6.424 \cdot 10^{-5} \text{ мб/кэВ}.$$

В этой работе для расчета S-фактора была использована двухчастичная модель взаимодействия, с определением параметров парных потенциалов гауссова вида в S и P волнах из экспериментальных данных по $p{}^3\text{H}$ рассеянию и энергии связи ${}^4\text{He}$.

Малое количество экспериментальных точек [18] в линейной части S-фактора и чрезмерная простота расчетной модели [19] не позволяют определить с хорошей точностью истинное поведение S-фактора $T({}^1\text{H}, \gamma){}^4\text{He}$ реакции.

Две, обозначенные выше проблемы, побудили нас исследовать реакцию $T({}^1\text{H}, \gamma){}^4\text{He}$ более детально.

2. Экспериментальная установка. Реакция $T({}^1\text{H}, \gamma){}^4\text{He}$ исследована в энергетическом диапазоне $12 \div 34$ кэВ в лабораторной системе координат ($7.8 \div 20.1$ кэВ в с.ц.м.) на импульсном ускорителе Холловского типа (Томск, ТПУ), с использованием твердотельной тритиевой мишени, рис. 1а, б. Гамма-кванты с энергией 19.8 МэВ детектировались сборкой из 8-ми NaI(Tl) детекторов.

Ускоритель Холла достаточно подробно описан в работе [20]. Для измерения напряжения V , приложенного к анодно-катодному (ускоряющему) промежутку, и тока мишени I_m применялся осциллограф DPO-2024 (рис. 1а). Погрешность измерения ускоряющего напряжения в диапазоне $10 \div 40$ кВ составляет $\leq 1\%$. Уровень рабочего вакуума в измерительной камере составлял $< 10^{-7}$ мм. рт. ст. Число ускоренных ионов водорода ${}^1\text{H}^+$, падающих на мишень из тритида титана, составляло в импульсе длительностью 10 мкс до $5 \cdot 10^{14}$. Количество ионов водорода ${}^1\text{H}^+$ в каждом импульсе определялось интегрированием тока мишени (3, рис. 1б). Погрешность определения количества ионов ${}^1\text{H}^+$ составляет $\leq 1\%$. Для подавления эмиссии электронов из мишени перед ней, на расстоянии 1 см, устанавливалась металлическая сетка 2 с прозрачностью 93%, находившаяся под потенциалом -150 В, рис. 1б. Ранее в отдельном эксперименте было определено значение относительного вклада ионов молекулярного водорода H_2^+ в потоке ускоренных ионов: $N(\text{H}_2^+) = 9.8 \pm 2\%$. Верхняя граница относительного содержания нейтральных атомов водорода в потоке ускоренных ионов водорода определена $< 1.1\%$,

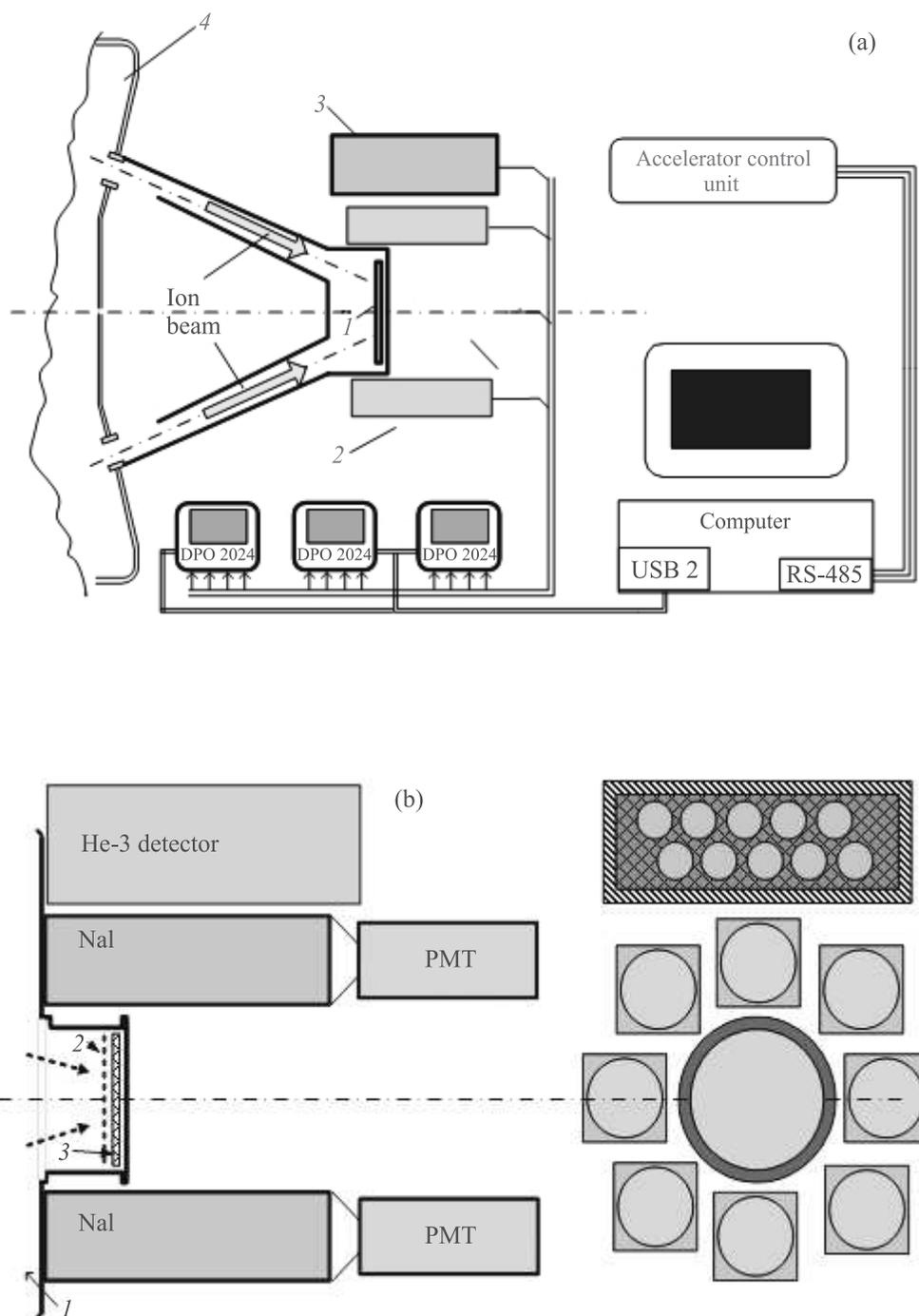


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схема эксперимента. 1 – тритиевая мишень; 2 – NaI(Tl) детекторы γ -квантов; 3 – He-3 детектор нейтронов; 4 – ионный ускоритель Холла. (б) – Расположение детекторов. 1 – ионный ускоритель Холла; 2 – сетка; 3 – мишень

с вероятностью $P = 0.95$. Эти данные учитываются при обработке результатов эксперимента. Длительность импульса ускорения равная 10 мкс, позволяет подавить регистрацию фоновых событий, обусловленных космическим излучением и есте-

ственной радиоактивностью окружающей среды в 10^5 раз.

2.1. Тритиевая мишень. Реакция $T(^1H, \gamma)^4He$ исследовалась на мишенях из тритида титана (TiT). Измерение распределения плотности атомов трития

по глубине мишени проводилось методом ERD (метод ядер отдачи) с использованием пучка альфа-частиц с энергией 2.3 МэВ, создаваемого с помощью ускорителя Ван де Граафа (ОИЯИ, Дубна). Результаты исследования дали стехиометрию мишени – $Ti_{1.5}$. Кроме того, равномерность насыщения слоя титана тритием по площади и по глубине мишени (площадь равна 74 см^2) исследовалась с помощью метода электронно-флуоресцентного анализа. Регистрировалось характеристическое рентгеновское излучение атомов титана $K_{\alpha 1}$, $K_{\beta 1}$ с энергиями $E_r = 4.51, 4.93 \text{ кэВ}$, возникающее в титане под действием β^- -частиц распада трития. Неравномерность насыщения тритием титановой подложки составляет не более 5%. Кроме того, этот метод позволял контролировать обеднение мишени тритием в процессе эксперимента. Текущий выход трития из мишени за счет ион-ионной эмиссии контролировался в эксперименте с помощью квадрупольного масс-спектрометра Extorr XT-100.

2.2. Детекторы γ -квантов. Регистрация γ -квантов из реакции осуществлялась с помощью восьми сцинтилляционных детекторов, на основе кристаллов $NaI(Tl)$ большой площади ($100 \times 100 \times 400 \text{ мм}$), расположенных вокруг мишени из тритида титана (TiT). Сигналы с $NaI(Tl)$ детекторов с ФЭУ Hamamatsu R1307 оцифровывались на 2-х запоминающих четырехканальных осциллографах Tektronix DPO 2024, рис. 1а. Для экспериментального определения эффективности регистрации γ -квантов с энергией $E_\gamma = 19.8 \text{ МэВ}$ нет источников с близкими энергиями. Это потребовало создания симуляции системы детекторов для расчета на основе метода Монте-Карло в инструментарии Geant4 эффективности регистрации. Результат расчета дал эффективность регистрации γ -квантов, равную $\varepsilon = 0.38$, при пороге регистрации $E_\gamma = 14 \text{ МэВ}$.

3. Измерения.

3.1. Проблема фона. При исследовании реакции $T(^1H, \gamma)^4He$ ($E_\gamma = 19.8 \text{ МэВ}$), ввиду малости сечения этой реакции огромное значение приобретают сопровождающие ее фоновые процессы и методы их минимизации. Импульсный характер работы плазменного ускорителя Холла позволяет в течение эксперимента непрерывно проводить измерения фона, обусловленного космическим излучением и окружающей естественной радиоактивностью. Другой источник фона, это γ -излучение, возникающее как результат реакции упругого рассеяния ионов $^1H^+$ на атомах трития, с передачей энергии ядрам трития и последующими реакциями взаимодействия ядер три-

тия, получивших импульс, с другими ядрами трития мишени: $T(T, nn)^4He$ $Q = 11.33 \text{ МэВ}$, $T(T, n_1)^5He^*$ $Q = 9.24 \text{ МэВ}$, $T(T, n_0)^5He$ $Q = 10.4 \text{ МэВ}$. Соотношение сечений этих реакций, в процентах: 70:20:10, соответственно. В этих реакциях образуются коррелированные во времени пары нейтронов, с распределением по энергии от 1 до 9 МэВ [21]. Далее протекают реакции (n, n') , $(n, n'\gamma)$ на окружающих мишень материалах, с образованием фоновых γ -квантов большой энергии. Кроме того, дополнительным источником фоновых нейтронов- γ -квантов, является реакция $T(^2H, n)^4He$, возникающая за счет естественной примеси дейтерия в высокочистом газе H_2 , содержащейся на уровне $1.35 \cdot 10^{-4}$. Расчет, проведенный с целью оценки фоновых условий по методу, изложенному в работе [22], дал следующие результаты, выход нейтронов фоновых реакций в 100 раз больше, чем выход γ -квантов исследуемой реакции.

3.2. Измерение выхода реакции. Проблема в измерении выхода реакции заключалась в том, что не удавалось выделить события обусловленные протеканием реакции $T(^1H, \gamma)^4He$, от событий, обусловленных фоном. Типичная гистограмма распределения γ -квантов по энергии выглядела, как это показано на рис. 2 (верхний спектр А).

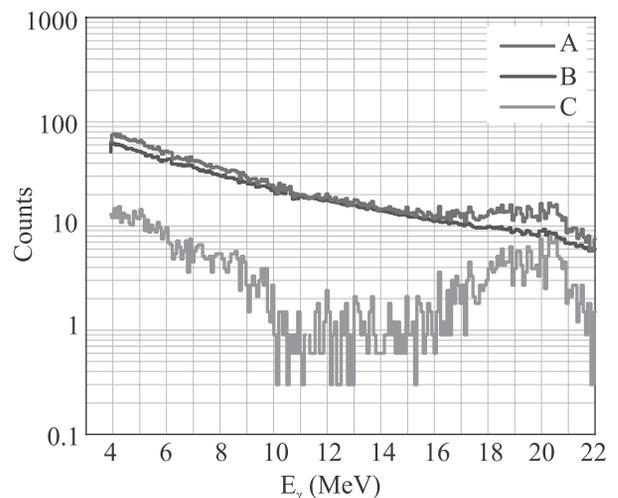


Рис. 2. (Цветной онлайн) Энергетические спектры γ -квантов: верхний спектр (А) – выход реакции $T(^1H, \gamma)^4He$; средний спектр (В) – выход реакции $T(^4He, \gamma)X$ за счет вторичных процессов; нижний спектр (С) – разность спектров

Анализ причин показал, что проблема выделения событий из фона обусловлена коррелированными во времени нейтронами, которые появляются из фоновой реакции $T(T, nn)^4He$, а также спецификой работы импульсного холловского ускорителя (импульс-

ный режим). В результате импульсного режима работы ускорителя возможно наложение импульсов от NaI(Tl) детекторов и тогда программа “on-line” обработки осциллограмм принимает два импульса за один импульс большой амплитуды, что приводит к значительному искажению распределения событий по энергии.

Для того, чтобы отделить события от фона, был применен метод вычитания фона, с нормировкой на выход фоновых нейтронов. Для регистрации фоновых нейтронов был применен детектор нейтронов на основе 3He счетчиков, изображенный на рис. 1. Детектор нейтронов, представляет собой сборку из 10 счетчиков, в виде трубок диаметром 3 см и длиной 50 см, наполненных смесью $^3He + Ar + CO_2$ при давлении 4 атм, расположенных в замедлителе из полиэтилена. Собственная эффективность регистрации нейтронов, испускаемых источником AmBe, составляет 15%. Характерной особенностью таких детекторов является их слабая чувствительность к γ -квантам.

Этот метод был разработан при исследовании реакции $^2H(^4He, \gamma)^6Li$ [23]. Параллельно с набором статистики γ -квантов с помощью NaI(Tl) детекторов, во время сеансов измерений выхода реакции $T(^1H, \gamma)^4He$, определялось количество нейтронов, зарегистрированных 3He детектором нейтронов. Затем в ионном источнике газ водород H_2 заменялся газом 4He и измерялся фон γ -квантов, сопутствующий реакции $T(^4He, \gamma)^7Li$ за счет образовавшихся во вторичной реакции коррелированных нейтронов, с нормировкой на количество нейтронов, зарегистрированных в реакции $T(^1H, \gamma)^4He$. Эта процедура повторялась для каждой энергии ионов водорода $^1H^+$. Результат, в виде разности энергетических спектров γ -квантов, полученных в экспериментах с водородом и гелием, показан на рис. 2 для энергии ионов водорода $^1H^+$ $E_{lab} = 12$ кэВ. Таким образом были получены экспериментальные выходы реакции N_{exp} для всего энергетического диапазона.

4. Обработка результатов измерений. Упомянутый выше ERD-анализ плотности трития в мишени дает ее толщину в 8000 атомных слоев (1 атомный слой определяется как 10^{15} атомов/см²), тогда как расчеты показывают, что выходы гамма-квантов определяются глубиной мишени не более 2000 атомных слоев при максимальной энергии эксперимента. Поэтому при обработке эксперимента толщина мишени полагается бесконечной. В этом случае с учетом распределения по энергии протонов ($FWHM_E = 16\%$), ожидаемые выходы γ -квантов с энергией $E_\gamma = 19.8$ МэВ могут быть записаны в виде:

$$Y^{calc}(E_0) = Q\varepsilon \int_0^\infty F(E'; E_0) dE' \int_0^\infty n_T(x) \sigma(E(x, E')) dx, \quad (8)$$

где Q – количество частиц, упавших на мишень, ε – эффективность детектора, $n_T(x)$ – концентрация трития на глубине мишени x , а $E(x, E')$ – энергия падающей частицы на глубине x , если ее начальная энергия была E' . Функции торможения протонов в мишени, рассчитывались по программе SRIM [24]. Для определения экспериментального значения S-фактора выражение (8) после замены переменных x на E и смены порядка интегрирования удобно представить в форме

$$Y^{calc}(E_0) = Q\varepsilon \int_0^\infty \frac{S(E)}{E} e^{-\frac{27.195}{\sqrt{E}}} \left(-\frac{dE}{dx}\right)^{-1} \times \\ \times dE \left(\int_E^\infty n_T(x, (E, E')) F(E'; E_0) dE' \right). \quad (9)$$

Схема извлечения экспериментального значения S-фактора из выражений типа (9) была определена ранее [25] и многократно использовалась (например, [24]). Сравнивая расчетный набор выходов $Y^{calc}(E_i)$ со значениями $N_{exp}(E_i)$, можно получить $S_{exp}(\bar{E})$ при средней энергии \bar{E} , определяемой выражением типа (9) [26]. Такая процедура является абсолютно точной при линейной зависимости S-фактора от энергии. Заметим, что S-факторы в области энергий нашего эксперимента существенно линейны. Так, вклад квадратичных слагаемых в S-факторы по (6) и (7) не превышает 2%.

Экспериментальные значения S-фактора при расчетных энергиях приведены в табл. 1.

Здесь приведены только статистические ошибки. Полная систематическая ошибка определения S_{exp} зависит от ошибок определения: полной эффективности регистрации γ -квантов – 3%; количества атомов трития в мишени – 5%; количества ионов $^1H^+$, падающих на мишень, – 1%. Тогда общая ошибка равна квадратному корню из суммы квадратов ошибок и равна 6% и она не зависит от энергии.

5. Результаты и обсуждения. В узком диапазоне энергий 7.83 ÷ 20.14 кэВ (в с.д.м.), как отмечалось выше, поведение S-фактора существенно линейно. Тем не менее, в более широком диапазоне энергий до 200 кэВ S-факторы описываются квадратичной зависимостью (5) [18]. Для определения поведения зависимости S-фактора в диапазоне энергий до 200 кэВ мы включили в наши расчеты экспериментальные значения из [16–18]. Для того, чтобы полу-

Таблица 1. Экспериментальные значения S-фактора при энергии столкновения \bar{E}

E_{lab} , кэВ	12	14	16	20	24	28	30	32	34
\bar{E} , кэВ	7.83	9.01	10.18	12.47	14.71	16.91	18.00	19.08	20.14
S_{exp} , кэВ · мб	2.01 ± 0.29	2.11 ± 0.26	2.11 ± 0.25	2.18 ± 0.23	2.24 ± 0.23	2.24 ± 0.19	2.28 ± 0.14	2.34 ± 0.12	2.28 ± 0.10

чить значения параметров (6) для всех экспериментальных значений S-фактора, был построен функционал

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(S_{\text{exp}}(\bar{E}_i) - S(\bar{E}_i; S_0, S_1, S_2))^2}{(\Delta S_{\text{exp}}(\bar{E}_i))^2}, \quad (10)$$

а его минимизация позволила определить S_0 , S_1 , S_2 и минимальное значение χ^2 . Здесь, $\Delta S_{\text{exp}}(\bar{E}_i)$ – ошибка определения S-фактора при энергии \bar{E}_i . Итак:

$$\begin{aligned} S_0 &= (2.033 \pm 0.059) \text{ кэВ} \cdot \text{мб}; \\ S_1 &(1.076 \pm 0.279) \cdot 10^{-2} \text{ мб}; \\ S_2 &= (1.313 \pm 0.149) \cdot 10^{-4} \text{ мб/кэВ}. \end{aligned} \quad (11)$$

При этом $\chi^2 = 0.34$ при 15 степенях свободы показывает хорошее соответствие квадратичной модели и эксперимента.

Для наглядности, S-фактор модели с параметрами (11) и его экспериментальные значения из таблицы 1 представлены на рис. 3. На этом же рисунке показаны S-факторы из работ [16–18].

Отметим, что измеренные нами S-факторы реакции $T(^1\text{H}, \gamma)^4\text{He}$, объединенные с экспериментальными данными в более широком энергетическом диапазоне, позволили существенно увеличить точность параметров S-фактора: для S_0 – в 3.4 раза, для S_1 – в 1.4 и для S_2 – в 2 раза.

Необходимо отметить, что результаты расчета S-фактора реакции $T(^1\text{H}, \gamma)^4\text{He}$, проведенного в 2019 г. [27], как и ранние результаты, полученные в [19], значительно отличаются от экспериментальных значений как работы [18], так и результатов настоящей работы. По всей видимости, требуется новое теоретическое рассмотрение обсуждаемой реакции на основании корректных схем получения волновых функций четырех-нуклонной системы [14] или в рамках кластерных моделей [28].

Авторы благодарят А. П. Кобзева за измерения концентрации атомного трития, титана и примесей в мишенях из тритида титана.

Экспериментальные измерения проводились в Томском политехническом университете в рамках Программы повышения конкурентоспособности Томского политехнического университета, грант ТПУ СЕР-2020.

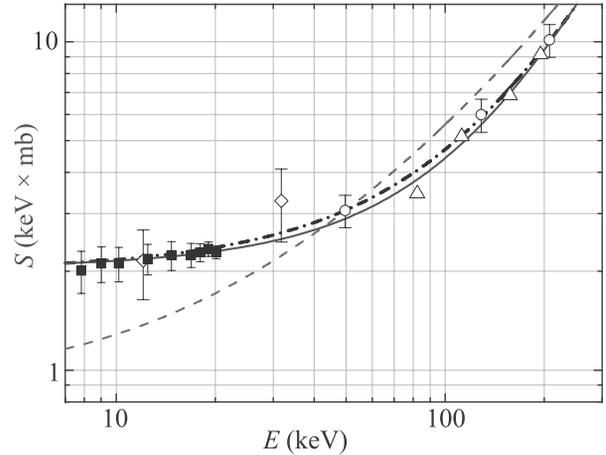


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость S-фактора ядерной реакции $T(^1\text{H}, \gamma)^4\text{He}$ от энергии. Закрашенные квадраты – настоящий эксперимент; пустые треугольники – данные из [16]; пустые кружки – данные из [17]; пустые ромбы – экспериментальные данные из [18]; сплошная линия – S-фактор с параметрами (11); штрихпунктирная линия – S-фактор с параметрами (6) [16]; пунктирная линия – расчетный S-фактор с параметрами (7) [19]

1. C. A. Bertulani and T. Kajino, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **89**, 56 (2016).
2. R. H. Cyburt, B. D. Fields, K. A. Olive, and T. H. Yeh, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 015004 (2016).
3. P. D. Serpico, S. Esposito, F. Iocco, G. Mangano, G. Miele, and O. Pisanti, *JCAP*, **2004**(12), 010 (2004).
4. B. D. Fields, K. A. Olive, T. H. Yeh, and Ch. Young, *JCAP* **2020**(03), 010 (2020).
5. Planck collaboration, Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters, <https://arXiv.org/abs/1807.06209>.
6. A. P. Serebrov, E. A. Kolomenskiy, A. K. Fomin et al. (Collaboration), *JETP Lett.* **106**, 623 (2017).
7. V. E. Ezhov, A. Z. Andreev, G. Ban, B. A. Bazarov, P. Geltenbort, A. G. Glushkov, V. A. Knyazkov, N. A. Kovrizhnykh, G. B. Krygin, O. Naviliat-Cuncic, and V. L. Ryabov, *JETP Lett.* **107**, 671 (2018).
8. CMB-S4 collaboration, *CMB-S4 Science Book, First Edition*, 2016. e-Print: 1610.02743 [astro-ph.CO]
9. R. S. de Souza, Ch. Iliadis, and A. Coc, *Astrophys. J.* **872**, 75 (2019).
10. R. S. de Souza, S. Reece Boston, A. Coc, and Ch. Iliadis, *Phys. Rev. C* **99**, 014619 (2019).

11. C. Pitrou and M. Pospelov, *Phys. Rev. C* **102**, 015803 (2020).
12. D. S. Firak, A. J. Krasznahorkay, M. Csatlós, L. Csige, J. Gulyás, M. Koszta, B. Szihalmi, J. Timar, Á. Nagy, N. J. Sas, and A. Krasznahorkay, *EPJ Web of Conferences* **232**, 04005 (2020).
13. A. J. Krasznahorkay, M. Csatlós, L. Csige, Z. Gácsi, J. Gulyás, M. Hunyadi, I. Kuti, B. M. Nyakó, L. Stuhl, J. Timár, T. G. Tornyi, Zs. Vajta, T. J. Ketel, and A. Krasznahorkay, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 042501 (2016).
14. M. Viviani, L. Girlanda, A. Kievsky, and L. E. Marcucci, *Phys. Rev. C* **102**, 034007 (2020).
15. E. E. Salpeter, *Phys. Rev.* **88**, 547 (1952).
16. J. E. Perry and S. J. Bame, *Phys. Rev.* **99**, 1368 (1955).
17. K. I. Hahn, C. R. Brune, and R. W. Kavanagh, *Phys. Rev. C* **51**(4), 1624 (1995).
18. R. S. Canon, S. O. Nelson, K. Sabourov, E. Wulf, H. R. Weller, R. M. Prior, M. Spraker, J. H. Kelley, and D. R. Tilley, *Phys. Rev. C* **65**, 044008 (2002).
19. B. Dubovichenko, A. V. Dzhazairov-Kakhramanov, and N. V. Afanasyeva, *Nucl. Phys. A* **963**, 52 (2017).
20. V. M. Bystritsky, V. V. Gerasimov, A. R. Krylov, S. S. Parzhitskii, P. S. Anan'in, G. N. Dudkin, V. L. Kaminskii, B. A. Nechaev, V. N. Padalko, A. V. Petrov, G. A. Mesyats, M. Filipowicz, J. Wozniak, and Vit. M. Bystritskii, *Eur. Phys. J. A* **36**, 151 (2008).
21. C. R. Brune, J. A. Caggiano, D. B. Sayre, A. D. Bacher, G. M. Hale, and M. W. Paris, *Phys. Rev. C* **92**, 014003 (2015).
22. V. M. Bystritsky, V. A. Varlachev, G. N. Dudkin, A. S. Nurkin, B. A. Nechaev, V. N. Padalko, F. M. Pen'kov, Yu. Zh. Tuleushev, M. Filipowicz, and A. V. Philippov, *JETP* **125**, 741 (2017).
23. V. M. Bystritsky, G. N. Dudkin, A. R. Krylov, S. Gazi, J. Huran, B. A. Nechaev, V. N. Padalko, A. B. Sadovsky, Yu. Zh. Tuleushev, M. Filipowicz, and A. V. Philippov, *NIM A* **825**, 24 (2016).
24. J. F. Ziegler and J. P. Biersack, Computer code SRIM (2011), www.srim.org.
25. V. M. Bystritsky and F. M. Pen'kov, *Physics of Atomic Nuclei* **66**, 75 (2003).
26. V. M. Bystritsky, D. K. Chumakov, G. N. Dudkin, M. Filipowicz, A. R. Krylov, B. A. Nechaev, A. Nurkin, V. N. Padalko, F. M. Pen'kov, A. V. Philippov, Yu. Zh. Tuleushev, V. A. Varlachev, and E. A. Zhakanbaev, *Eur. Phys. J. A* **56**, 60 (2020).
27. S. Dubovichenko, A. Dzhazairov-Kakhramanov, and N. Burkova, *Int. J. Mod. Phys. E* **28**, 1930004 (2019).
28. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuil'sky, *JETP Lett.* **109**, 425 (2019).

Light-transmitting measurements through starch-coated cobalt ferrite ferrofluids exposed to an external magnetic field

M. Šuljagić⁺, L. Andjelković⁺, P. Iskrenović^{*}, A. S. Nikolić[×], M. R. Milenković^{×1)}

⁺ University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, 11000 Belgrade, Republic of Serbia

^{*} Faculty of Physics, University of Belgrade, 11000 Belgrade, Serbia

[×] University of Belgrade, Faculty of Chemistry, 11000 Belgrade, Republic of Serbia

Submitted 18 December 2020
Resubmitted 30 December 2020
Accepted 31 December 2020

DOI: 10.31857/S1234567821040030

Considering a need for magnetic materials that exhibit improved properties for magnetic resonance imaging (MRI) and AC magnetic field-assisted tumor therapy, we have recently investigated the magnetic behavior of starch-coated cobalt ferrites prepared by coprecipitation, mechanochemical, ultrasonically assisted coprecipitation, microemulsion, and microwave-assisted hydrothermal methods. The choice of the synthesis procedure determines the magnetic properties of cobalt ferrites [1]. As a continuation of previous research [1], to examine the behavior and agglomeration of possible MRI contrast agents based on the synthesized starch-coated cobalt ferrites, the transmitted light measurements at the 655 nm wavelength were performed through the ferrofluid suspensions exposed to the external magnetic field of 200–400 mT. The optical analysis of the external magnetic field influence on starch-coated cobalt ferrite nanoparticles in ferrofluid was conducted using a laboratory-designed apparatus [2]. Ferrofluid suspensions were prepared from starch-coated cobalt ferrite powders [1]. 0.50 g of each starch-coated CoFe_2O_4 was dispersed in 50 mL of deionized water followed by ultrasonically treatment (15 min at 80 °C). According to their optical behavior, the investigated samples can be classified into the two groups. The samples synthesized by ultrasonically assisted coprecipitation and coprecipitation procedures (group I) showed more pronounced effects of agglomeration and sedimentation under the influence of an external magnetic field in comparison to the samples synthesized by microemulsion, microwave-assisted hydrothermal method, and mechanochemical method (group II). Among all investigated samples, the samples from group II showed the lowest rate of chain formation and sedimentation. Since all the samples have the same chemical composition, the choice of synthesis method may have significant impact on their magnetic properties, as well as the further selection of possible MRI contrast agents.

This work was financially supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development (Grant # 451-03-68/2020-14/200026, 451-03-68/2020-14/200168, and 451-03-68/2020-14/200162).

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021040056

1. M. Šuljagić, P. Vulić, D. Jeremić, V. Pavlović, S. Filipović, L. Kilanski, S. Lewinska, A. Slawska-Waniewska, M. R. Milenković, A. S. Nikolić, and L. Andjelković, *Mater. Res. Bull.* **134**, 111117 (2021).
2. M. M. Kuraica, P. Iskrenović, M. Perić, I. Krstić, and A. S. Nikolić, *Chemical Papers* **72**, 1535 (2018).

¹⁾e-mail: mrm@chem.bg.ac.rs

Генерация предельно коротких аттосекундных и терагерцовых импульсов на основе коллективного спонтанного излучения тонкой резонансной среды (Миниобзор)

Р. М. Архипов^{+*×1}), М. В. Архипов^{+*1}), А. В. Пахомов⁺¹), М. О. Жукова^{*1}), А. Н. Цыпкин^{*1}),
Н. Н. Розанов^{*×1})

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

^{*} Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

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

Поступила в редакцию 6 января 2021 г.

После переработки 6 января 2021 г.

Принята к публикации 7 января 2021 г.

Приведен обзор предложенных недавно авторами и изученных теоретически методов генерации предельно коротких импульсов, основанных на коллективном спонтанном излучении тонкого слоя резонансной среды, возбуждаемой парой высокочастотных (по отношению к частоте перехода среды) импульсов. Источником генерируемого излучения является импульс резонансной поляризации среды (“импульс оставленной поляризации”), возбуждаемой и выключаемой парой световых импульсов накачки. Данный метод позволяет получать импульсы аттосекундной длительности в оптическом и ультрафиолетовом диапазонах, а также фемтосекундные импульсы в терагерцовом диапазоне частот. Обсуждается роль эффекта сверхизлучения в генерации. Использование когерентных и коллективных процессов позволяет добиться высокой эффективности генерации терагерцового излучения. Предложенный метод является альтернативным способом получения предельно коротких импульсов, по сравнению с хорошо разработанными на сегодняшний день методами, такими как генерация гармоник высокого порядка и др.

DOI: 10.31857/S1234567821040042

Введение. Получение предельно коротких импульсов аттосекундной и фемтосекундной длительности в дальнем ультрафиолетовом (XUV), оптическом и терагерцовом диапазонах является в последнее время одним из актуальнейших направлений исследований в современной физике [1–8]. Периоды резонансных переходов электронов в атомах лежат в аттосекундном диапазоне, и следовательно, аттосекундные импульсы являются уникальным инструментом для исследования и управления сверхбыстрыми процессами в атомах, молекулах, твердых телах [8–10] и наноструктурах [11–12]. А частоты колебаний многих молекул и элементарных возбуждений в твердых телах и диэлектриках лежат в терагерцовом (ТГц) диапазоне частот. Поэтому импульсы ТГц излучения находят различные применения в спектроскопии [13–16], а также имеют много других

приложений в медицине, построении изображения и пр. [6–7].

Для экспериментального получения аттосекундных импульсов используется метод генерации гармоник высокого порядка (ГГВП) и его различные модификации. Высшие гармоники возникают при взаимодействии инфракрасных фемтосекундных лазерных импульсов с различными веществами [1–4], что может быть объяснено на основе “трехступенчатой модели” (*three-step model*) [1, 2]. На первом этапе происходит ионизация электрона в лазерном поле фемтосекундного импульса, на втором этапе ускорение свободного электрона полем, а на третьем этапе его рекомбинация с родительским ионом. При этой рекомбинации и происходит излучение XUV фотонов. Когерентное сложение генерируемых нечетных гармоник центральной частоты ИК возбуждающего фемтосекундного импульса по аналогии с синхронизацией мод в лазерах и приводит к генерации последовательности аттосекундных импульсов. Для практических приложений необходима генерация одиночно-

¹)e-mail: arkhipovrostislav@gmail.com; m.arkhipov@klrnran.ru; antpakhom@gmail.com; mozhukova@itmo.ru; tsypkinan@itmo.ru; nnrosanov@mail.ru

го аттосекундного импульса. Для этой цели разработаны различные модификации метода ГГВП, такие как метод стробирования (“*gating technique*”), основанный на подавлении ГГВП с использованием циркулярно поляризованного импульса возбуждения [3, 4].

Помимо методов, основанных на ГГВП, известны и другие способы получения аттосекундных импульсов. Так, в [9, 17] был осуществлен метод генерации полупериодных аттосекундных импульсов на основе фурье-синтеза разделенных в пространстве отдельных спектральных компонент суперконтинуума. Авторами [18, 19] предложены способы получения аттосекундных импульсов при торможении ускоренных лазерным импульсом электронов в тонкой мишени. В [20] рассмотрена возможность генерации таких импульсов в ондуляторе. При этом авторы [9, 18, 19] предложили фактически способ получения квазиуниполярного оптического аттосекундного импульса, содержащего всплеск поля одной полярности с большой амплитудой и длинный затухающий хвост противоположной полярности. В [21] показана возможность получения полуцикловатого аттосекундного импульса при отражении падающего фемтосекундного импульса от тонкого слоя металлической или диэлектрической пленки за счет ускорения и последующего торможения электронов в пленке. Сходные идеи получения полуцикловатого аттосекундного импульса при ускорении электронов в плазме представлены в [22].

Отметим, что получение квазиуниполярных и униполярных импульсов в оптическом и примыкающих диапазонах с ненулевой постоянной составляющей поля является предметом активного обсуждения в литературе, см. обзоры [23–25] и приведенную литературу. В виду наличия мощного всплеска поля одной полярности и ненулевой электрической площади (интеграл от напряженности электрического поля по времени $S_E = \int E(t)dt$) они могут найти применение для эффективного управления динамикой населенностей в атомных системах [26–30], ускорения заряженных частиц [31], управление спином [32] и голографической записи информации об объекте [33]. Помимо практического интереса следует отметить также фундаментальный интерес к униполярному свету, связанному, например, с обнаруженным недавно правилом сохранения электрической площади импульса [34] и дискуссии вокруг возможности наблюдения оптического эффекта Ааронова–Бома на основе униполярных импульсов [35].

Методы генерации ТГц импульсов также хорошо разработаны на сегодняшний день и основаны

на создании кратковременного импульса тока (или поляризации) при облучении вещества фемтосекундным лазерным импульсом [5–8]. К ним можно отнести возникновение кратковременной фотопроводимости в полупроводниках (*photoconductive switch*) [7], плазменная нелинейность [5, 6], метод оптического выпрямления [8, 36], а также за счет возникновения солитонов самоиндуцированной прозрачности и в квадратично-нелинейной среде [37, 38] и т.д.

Разработанные методы получения аттосекундных и ТГц импульсов и их применения в современной физике являются предметом многих обзоров [1–17]. В данной работе приводится краткий обзор недавно предложенных нами иных методов получения предельно коротких аттосекундных и ТГц фемтосекундных импульсов. Эти методы базируются на когерентном контроле нелинейной поляризации резонансной среды, последовательно включаемой и выключаемой парой возбуждающих фемтосекундных лазерных импульсов, следующих с периодом, равным половине периода колебаний какого-либо резонансного перехода среды. При этом данные процессы являются когерентными, так как происходят на временах, меньших времен релаксации инверсии T_1 и поляризации T_2 в среде. И все атомы вносят одинаковый когерентный вклад в излучающий дипольный момент среды. А излучение остановленной поляризации среды происходит в промежутке между возбуждающими импульсами, т.е. в отсутствие внешнего поля.

В этом смысле можно говорить, что излучение в нашем случае происходит за счет коллективного спонтанного излучения тонкого слоя атомарной среды, возбуждаемой парой фемтосекундных импульсов. При этом инверсия среды может как изменяться, так и не изменяться. Исторически коллективное спонтанное излучение инвертированного тонкого слоя частиц (атомов, молекул, спинов) принято называть сверхизлучением [39]. Данный термин был введен Дике в середине прошлого столетия [39]. На сегодняшний день сверхизлучение изучено в различных средах (см. обзоры [39–48] и приведенную литературу) и, в частности, в квантовых точках [49–52]. Поэтому в данной работе мы будем применять термин “сверхизлучение” в тех случаях, когда происходит изменение инверсии среды. Там, где изменение инверсии не происходит, мы будем говорить о коллективном спонтанном излучении импульса остановленной поляризации. В первоначальных исследованиях данный метод изучался нами применительно к генерации униполярных импульсов [53–56] и резюмирован в обзорах авторов [23–25]. Ниже будут приведены последние результаты в данной области, вклю-

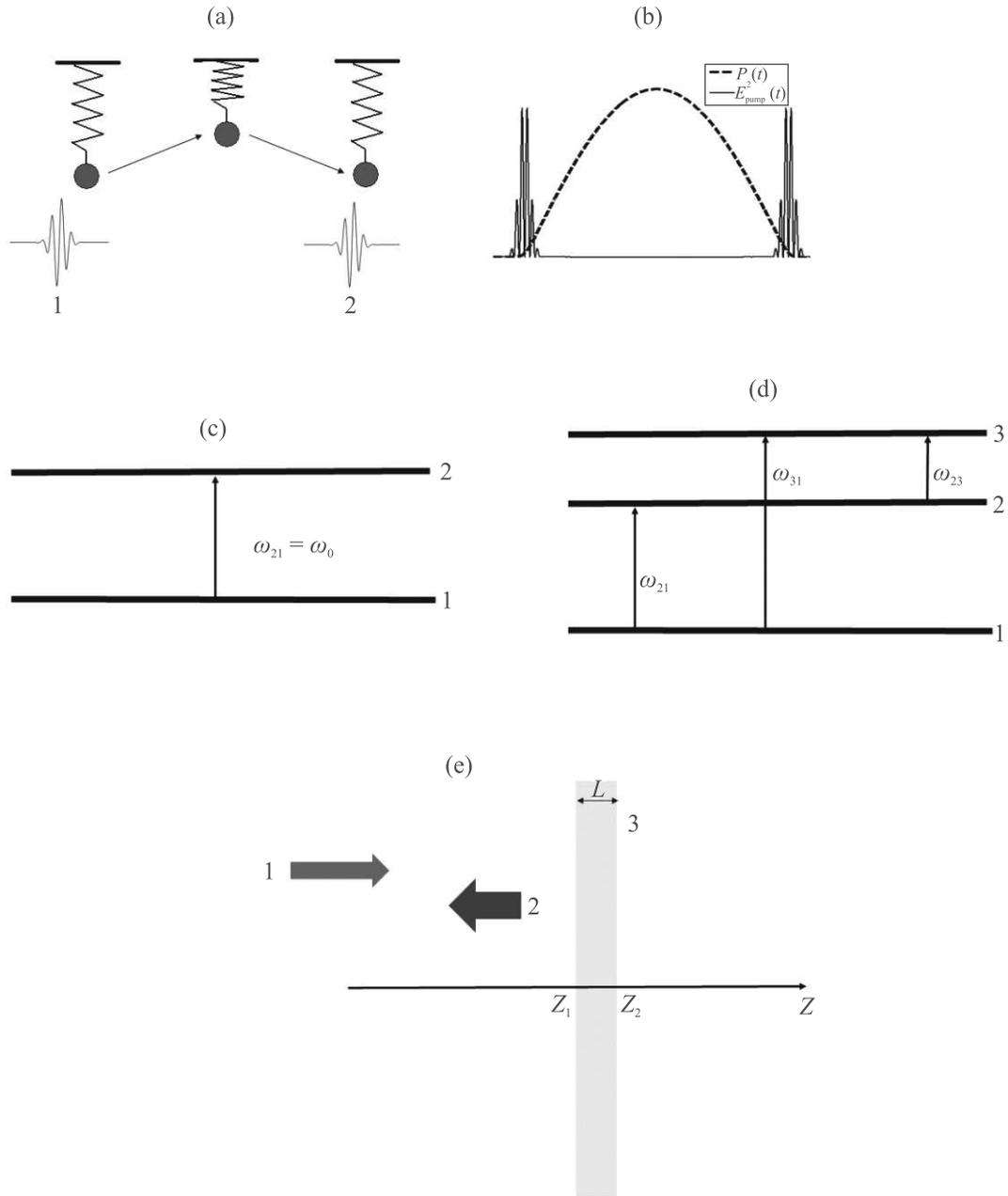


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схема генерации предельно коротких импульсов за счет создания импульса остановленной поляризации в резонансной среде с помощью пары импульсов 1 и 2 возбуждения-остановки. Импульс 1 создает осцилляции поляризации среды на собственной частоте ω_0 , импульс 2, приходящий спустя интервал времени $T_0/2$ ($T_0 = 2\pi/\omega_0$ – останавливает эти колебания). (б) – Квадрат электрического поля импульсов (сплошная линия) возбуждения и импульс остановленной поляризации (пунктирная линия) в случае комбинационно-активной среды (КАС), поляризация, которой описывается уравнением $\ddot{P} + \gamma\dot{P} + \omega_0^2 P = g_0 E^2$ [53–58]. (в), (д) – Модели используемых резонансных сред – двухуровневая и трехуровневая среда. (е) – Схема генерации, 1 – импульсы возбуждения, освещающие тонкую пленку резонансной среды 3 с толщиной $L \ll \lambda_0$. 2 – отраженный от среды генерируемый импульс сверхизлучения

чающие в себя возможность получения аттосекундных и ТГц импульсов за счет сверхизлучения [57–62].

Физическая картина генерации предельно коротких импульсов за счет коллективного спонтанного излучения резонансной среды.

Рисунок 1 иллюстрирует идею метода получения предельно коротких импульсов в нашем случае. Резонансная среда возбуждается парой коротких высокочастотных импульсов (по отношению к частоте перехода среды) с периодом $T_0/2$, равным по-

ловине периода собственных колебаний резонансной поляризации среды. В этих условиях первый импульс возбуждает колебания поляризации среды, а второй останавливает их. В случае комбинационно-активной среды (КАС) амплитуда колебаний низкочастотной поляризации пропорциональна квадрату возбуждающего поля (см. рис. 1b). Форма импульса остановленной поляризации представляет собой полуволну, схематически изображенную на рис. 1b. Данный импульс остановленной поляризации является источником ТГц или аттосекундных импульсов. Схема генерации изображена на рис. 1e, на котором показана тонкая пленка резонансной среды, возбуждаемая парой импульсов, как на рис. 1a, b. Помимо комбинационно-активной среды (КАС), как мы увидим ниже, предложенный метод применим также в случае двухуровневых и трехуровневых атомарных и молекулярных сред, которые схематически изображены на рис. 1c, d соответственно.

Данная идея генерации предельно короткого импульса может быть легко проиллюстрирована с помощью простейшей модели двухуровневой среды (рис. 1d) и вытекающей из нее модели классических гармонических осцилляторов, взаимодействующих с парой возбуждающих импульсов [59]:

$$E_e(t) = E_{0e}e^{-t^2/\tau^2} \cos(\omega_e t + \phi) + E_{0e}e^{-t^2/\tau^2} \cos(\omega_e[t - T_d] + \phi). \quad (1)$$

Здесь ω_e – частота импульсов, ϕ – фаза (*carrier envelope phase*, CEP), T_d – задержка между импульсами. Система уравнений Максвелла–Блоха для поляризации P , разности населенностей (инверсии) $N = N_0 n$ (n – инверсия в расчете на единичный атом, N_0 – концентрация частиц двухуровневой среды) и электрического поля E имеют вид [63]:

$$\ddot{P} + \frac{2}{T_2} \dot{P} + \omega_0^2 P = \frac{2\omega_0 d_{12}^2}{\hbar} E(t) N(t), \quad (2)$$

$$\dot{N} + \frac{N - N_0}{T_1} = -\frac{2}{\hbar\omega_0} E(t) \dot{P}(t), \quad (3)$$

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

Здесь d_{12} – дипольный момент перехода, T_1 – время релаксации разности населенностей, T_2 – время релаксации поляризации, ω_0 – частота резонансного перехода, c – скорость света в вакууме. Пусть возбуждающие импульсы (1) имеют длительности много короче периода резонансного перехода в двухуровневой среде $T_0 = 2\pi/\omega_0$, $\omega_0\tau \ll 1$ и периода осцилляций Раби. В этом предположении можно пренебречь

изменением инверсии N и в правой части уравнения (3) и заменить ее на равновесное значение $N(t) \sim N_0$. Тогда в пренебрежении затуханием осциллятора вместо уравнения (2) имеем уравнение для линейного гармонического осциллятора:

$$\ddot{P} + \omega_0^2 P = \frac{2\omega_0 d_{12}^2}{\hbar} N_0 E(t). \quad (5)$$

В нашем случае рис. 1a, в предположении, что система возбуждается парой квазиуниполярных импульсов с периодом $T_0/2$ и длительностью $\omega_0\tau \ll 1$, выражение для полуволны поляризации между импульсами имеет вид синусоиды [55]:

$$P(t) = \sin \omega_0 t, \quad A \equiv \frac{2d_{12}^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} E_e(t) \cos \omega_0 t dt. \quad (6)$$

В рассматриваемом случае тонкой пленки (рис. 1e) решение одномерного волнового уравнения (4) для поля генерируемых импульсов выражается через первую производную наведенной поляризации и имеет вид [21]:

$$E_g(z, t) = -\frac{2\pi}{c} \int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial}{\partial t} P \left(z', t - \frac{|z - z'|}{c} \right) dz'. \quad (7)$$

Если толщина среды много меньше длины волны генерируемого излучения $L \ll \lambda$ (как на рис. 1c), то (7) упрощается [59–61]:

$$E_a(t) = -\frac{2\pi}{c} L \frac{\partial}{\partial t} P(t). \quad (8)$$

Соответственно в одномерном случае генерируемый импульс может быть описан одним циклом колебаний косинусоиды:

$$\dot{P} = \omega_0 A \cos \omega_0 t, \quad (9)$$

Хоть приведенные выше рассуждения и являются сильно упрощенными, но они являются универсальными, справедливыми как для двухуровневой среды (рис. 1c), так и для многоуровневой среды (рис. 1d) и даже при учете изменения инверсии среды. В этой универсальности заключается и достоинство предложенного метода.

Формулы (7) и (8) справедливы в одномерном случае, когда регистрация излучения происходит вблизи среды. В дальней зоне далеко от среды генерируемое поле пропорционально второй производной наведенной поляризации

$$E_g(z, t) \sim \int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} P \left(z', t - \frac{|z - z'|}{c} \right) dz'. \quad (10)$$

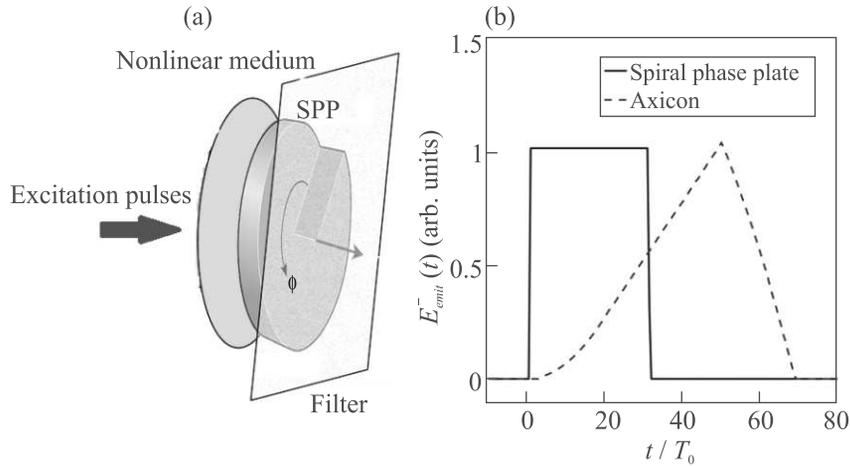


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Идея получения квазиуниполярных импульсов с помощью ДОЭ (на рисунке обозначен как SPP – *spiral phase plate*). (б) – форма получаемых импульсов при использовании двух различных типов ДОЭ – SPP и аксикона

В случае тонкого слоя, согласно (10), генерируемый импульс представляет собой полудвухцикловый униполярный импульс. Данная идея лежит в основе получения униполярных импульсов управляемой формы и была развита в работах [53–56] и резюмирована в обзорах [23–25]. Ниже будут рассмотрены последние результаты, не вошедшие в данные работы. Краткое описание некоторых из изложенных ниже результатов приведено также в материалах конференции [62].

Генерация предельно коротких импульсов ТГц излучения за счет коллективного спонтанного излучения тонкого слоя нелинейной среды. Частоты низкочастотных колебаний в КАС могут лежать в ТГц диапазоне частот. Поэтому использование комбинационно-активных сред (см. пред. раздел и рис. 1а, б) может быть перспективным для генерации ТГц импульсов. Действительно, в работе [57] в трехмерной геометрии была показана возможность генерации квазиуниполярных импульсов ТГц излучения необычной формы (прямоугольной и треугольной) с помощью дифракционно-оптических элементов (ДОЭ). Схема приведена на рис. 2а.

Пара фемтосекундных импульсов (рис. 1а) возбуждают нелинейную среду (например, КАС). Каждый элемент среды генерирует полуволну поляризации, т.е. полудвухцикловый ТГц импульс (рис. 1б). Затем генерируемые полуволны проходят через линию задержки ДОЭ – фазовую пластинку, толщина которой и, следовательно, время прохождения растут линейно с ростом полярного угла φ . Расчеты, проведенные в [57] на основе теории дифракции Фраунгфера, показывают, что в этом случае возможна генерация ТГц импульсов необычной формы – прямоугольной и

треугольной, схематически показанных на рис. 2б. В действительности импульсы содержат хвост противоположной полярности, но его амплитуда легко регулируется фильтром, поэтому данный хвост не показан на рис. 2б. Расчеты показали сравнительно высокую эффективность генерации, порядка 10^{-4} . Это связано с коллективным механизмом генерации, при котором все атомы среды вносят одинаковый когерентный вклад в гигантский дипольный момент среды, и когерентность среды не успевает разрушиться.

В одномерной задаче напряженность поля генерируемых ТГц импульсов, согласно (8)–(10), пропорциональна первой производной полуволны поляризации. Поэтому в одномерном случае предложенный метод позволяет генерировать ТГц импульсы, имеющие одноцикловую форму. Действительно, расчеты, проведенные в [58], показывают возможность получения ТГц импульса одноцикловой формы при возбуждении среды парой фемтосекундных лазерных импульсов. На рисунке 3 показаны пара фемтосекундных импульсов возбуждения и рассчитанная форма ТГц импульса и их спектры.

В качестве уравнения для поляризации среды использовалось осцилляторное уравнение, приведенное на рис. 1б. Однако оно не учитывает колебания высокочастотного осциллятора электронов, которое может возбуждаться в комбинационно-активной молекуле. Для учета движения электронов в работе [58] была также использована простейшая модель КАС – уравнения Платоненко–Хохлова, описывающие колебания двух связанных осцилляторов. Формы ТГц импульса, рассчитанные по двум разным моделям, совпадают друг с другом, если излучение высокочас-

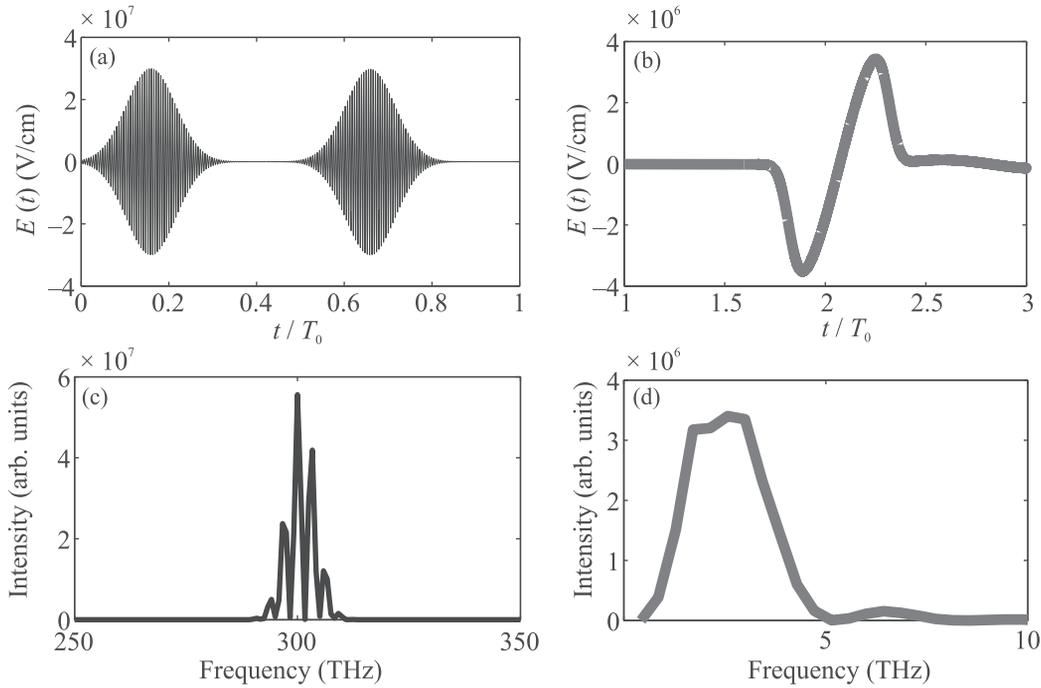


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Пара возбуждающих фемтосекундных импульсов; (с) – их спектр; (b) – импульс ТГц излучения и его спектр (d). Толщина среды 8 мкм

точного осциллятора обрезать фильтром. При этом численные оценки, проведенные в [58], также показали сравнительно высокую эффективность генерации, которая может достигать значений порядка 10^{-4} .

Выше рассматривались осцилляторные модели среды, которые не учитывают возможность изменения инверсии среды и, следовательно, термин “сверхизлучение” к ним не применялся. Однако, возможность изменения населенностей уровней среды можно учесть. В работе [61] была рассмотрена возможность генерации ТГц импульсов в трехуровневой среде (рис. 1e), имеющей эквидистантные уровни, как в квантовом осцилляторе и частоту перехода в ТГц диапазоне. Среда возбуждалась парой квазиуниполярных оптических импульсов с длительностью порядка 1 фс. Остановимся подробнее на описании результатов работы [61].

Взаимодействие пары импульсов возбуждения (1) с трехуровневой средой может быть описано системой уравнений для элементов матрицы плотности [64, 65]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{21} &= -i\omega_{21}\rho_{21} - i\frac{d_{12}}{\hbar}E(\rho_{22} - \rho_{11}) - \\ &\quad - i\frac{d_{13}}{\hbar}E\rho_{23} + i\frac{d_{23}}{\hbar}E\rho_{31}, \quad (11) \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_{32} &= -i\omega_{32}\rho_{32} - i\frac{d_{23}}{\hbar}E(\rho_{33} - \rho_{22}) - \end{aligned}$$

$$- i\frac{d_{12}}{\hbar}E\rho_{31} + i\frac{d_{13}}{\hbar}E\rho_{21}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{31} &= -i\omega_{31}\rho_{31} - i\frac{d_{13}}{\hbar}E(\rho_{33} - \rho_{11}) - \\ &\quad - i\frac{d_{12}}{\hbar}E\rho_{32} + i\frac{d_{23}}{\hbar}E\rho_{21}, \quad (13) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{11} = i\frac{d_{12}}{\hbar}E(\rho_{21} - \rho_{21}^*) - i\frac{d_{13}}{\hbar}E(\rho_{13} - \rho_{13}^*), \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{22} = -i\frac{d_{12}}{\hbar}E(\rho_{21} - \rho_{21}^*) - i\frac{d_{23}}{\hbar}E(\rho_{23} - \rho_{23}^*), \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{33} = +i\frac{d_{13}}{\hbar}E(\rho_{13} - \rho_{13}^*) + i\frac{d_{23}}{\hbar}E(\rho_{23} - \rho_{23}^*), \quad (16)$$

$$p(z, t) = 2d_{12}\Re\rho_{12} + 2d_{13}\Re\rho_{13} + 2d_{23}\Re\rho_{23}. \quad (17)$$

Уравнения (11)–(13) описывают эволюцию недиагональных элементов матрицы плотности ρ_{21} , ρ_{32} , ρ_{31} . Они связаны с поляризацией единичной молекулы $p = P/N_0$ (18). Уравнения (14)–(16) описывают эволюцию диагональных элементов ρ_{11} , ρ_{22} , ρ_{33} , имеющих смысл заселенностей 1-го, 2-го и 3-го состояний среды соответственно. Остальные параметры: d_{12} , d_{13} , d_{23} – дипольные моменты соответствующих переходов среды, ω_{21} , ω_{32} , ω_{31} – частоты переходов, \hbar – приведенная постоянная Планка. В виду малой длительности возбуждающих импульсов релаксационными членами пренебрегается.

Примеры формы генерируемого ТГц сверхизлучения в зависимости от начального значения населенностей уровней среды приведены на рис. 4. Период следования возбуждающих импульсов равен

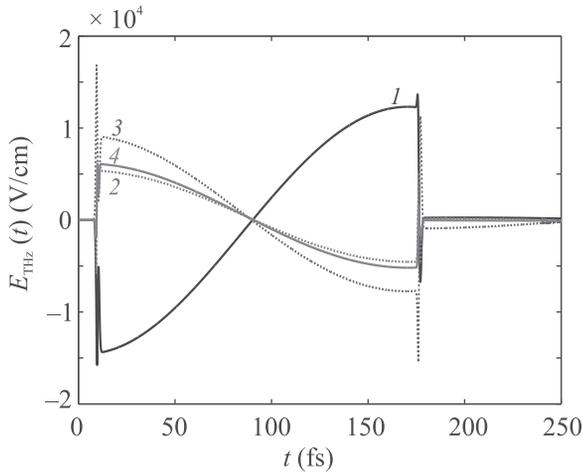


Рис. 4. (Цветной онлайн) Временной профиль импульсов ТГц сверхизлучения при различных начальных значениях населенностей уровней среды. Кривая 1 – $\rho_{11}(0) = 1, \rho_{22}(0) = 1, \rho_{33}(0) = 0$; кривая 2 – $\rho_{11}(0) = 0, \rho_{22}(0) = 1, \rho_{33}(0) = 0$; кривая 3 – $\rho_{11}(0) = 0, \rho_{22}(0) = 0, \rho_{33}(0) = 1$; кривая 4 – $\rho_{11}(0) = 0, \rho_{22}(0) = 0.8, \rho_{33}(0) = 0.2$. Амплитуда поля возбуждающих импульсов $E_{0e} = 7.5 \cdot 10^6$ В/см, длительность $\tau = 1$ фс. Частота резонанса среды $\omega_{21} = \omega_{31} = \omega_0 = 2\pi \cdot 3$ ТГц. Толщина среды $L = 100$ нм. Остальные параметры приведены в [61]

$T_0/2$ – половине периода резонансного перехода 12. Видно, что при учете изменения населенностей уровней среды также возможна генерация ТГц импульсов одноциклового формы. Но форма генерируемого импульса и его амплитуда зависят от начальной инверсии среды. И в этом случае расчеты показали высокую энергетическую эффективность генерации $\frac{\int E_{THz}^2(t)dt}{E_{exc}^2(t)dt}$ порядка 10^{-4} .

В случае двухуровневой среды нетрудно получить плотность энергии генерируемого импульса сверхизлучения (в обе стороны оси z в расчете на единичную площадку поперек нее в единицах эрг/см²) [60]:

$$W = \frac{\pi^3 L^2 N_0^2 A^2}{2\lambda_0}. \quad (18)$$

Она пропорциональна квадрату концентрации числа частиц N_0^2 , что имеет место при коллективных процессах сверхизлучательного типа.

Особо следует отметить, что приведенная выше картина формирования полуволны остановленной поляризации среды, как следует из расчетов

[60, 61], сохраняется и в трехуровневой среде. Действительно, как показано в этих работах, вклад перехода 23 и 13 в импульс остановленной поляризации заключается лишь в наличии хвоста, амплитуда которого на порядки меньше амплитуды поляризации, возникающей на основном переходе 12.

Таким образом, результаты, представленные выше, позволяют сделать вывод о возможности высокоэффективной генерации ТГц импульсов за счет коллективного спонтанного излучения импульса остановленной поляризации. Это подтверждается при использовании как классических осцилляторных моделей сред, так и квантовых двухуровневых и трехуровневых моделей, учитывающих изменение населенностей состояний среды.

Генерация аттосекундных импульсов за счет коллективного спонтанного излучения атомов гелия и водорода, возбуждаемых парой квазиуниполярных импульсов. Изложенные выше идеи могут быть применены для генерации УФ и оптических аттосекундных импульсов в атомных средах. Действительно, частоты переходов во многих атомах лежат в УФ и оптическом диапазонах. Следовательно, при возбуждении атомарной среды парой высокочастотных импульсов, расстояние между которыми равно половине периода какого-либо резонансного перехода в атоме $T_0/2$, следует ожидать генерации аттосекундного импульса с длительностью порядка $T_0/2$.

Возможность получения аттосекундных импульсов в тонких слоях атомов гелия и водорода была проиллюстрирована в работах [59, 60] соответственно. При этом атом гелия в [59] моделировался в двухуровневом приближении (рис. 1c), а атом водорода в трехуровневом приближении (рис. 1d) [59]. И система возбуждалась парой квазиуниполярных рентгеновских импульсов в форме (1) с длительностью порядка 3 ас.

Применимость двухуровневого приближения для гелия связана со следующим [59]. Известно, что атом гелия обладает резонансным переходом из основного состояния (1^1S_0) в первое возбужденное (2^1S_0) с длиной волны 60 нм [66, 67]. Остальные энергетические уровни гелия лежат относительно близко к первому возбужденному, и расстояние между уровнями быстро уменьшается с ростом главного квантового числа. Поэтому, как уже упоминалось в конце предыдущего раздела, вклад остальных уровней в колебания поляризации будет заключаться лишь в наличии хвоста малой амплитуды. И поэтому его можно не учитывать. Более того, в [59] отмечалось, что вероятность ионизации атома в поле таких ультракорот-

ких импульсов, рассчитанная путем прямой симуляции временного уравнения Шредингера, очень мала (порядка 10^{-11}), несмотря на то, что энергия фотонов больше потенциала ионизации. Это не удивительно, поскольку используемые импульсы возбуждения являются очень короткими, с длительностью, много меньшей периода осцилляций Раби рассматриваемого перехода. Данный факт является еще одним аргументом в пользу рассматриваемой модели. Расчеты, проведенные в [59], показали возможность генерации XUV импульсов с длительностью порядка 100 ас одноциклового формы, схожей с изображенной на рис. 4.

Возможность генерации аттосекундных импульсов сохраняется и в трехуровневой среде. Это было продемонстрировано в работе [60]. Параметры трехуровневой среды (частоты переходов и дипольные моменты переходов) соответствовали атому водорода. Среда также возбуждалась парой квазиуниполярных рентгеновских аттосекундных импульсов, задержка между которыми равнялась половине периода перехода атома водорода из основного состояния в первое возбужденное (главная линия серии Лаймана) $T_0/2$ ($T_0 = 405$ ас) с длиной волны перехода 121.6 нм. Численные расчеты выполнялись с помощью системы уравнений (8) и (11)–(16). Примеры рассчитанной формы аттосекундных импульсов при различной фазе (СЕР) возбуждающих импульсов приведены на рис. 5.

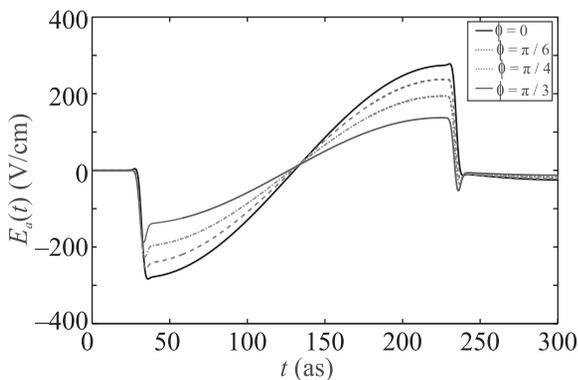


Рис. 5. (Цветной онлайн) Рассчитанные формы УФ аттосекундных импульсов излучения E_a при различных значениях фазы СЕР накачки ϕ . Амплитуда рентгеновских импульсов $E_{0X} = 3 \cdot 10^7$ В/см, длительность $\tau = 3$ ас. Остальные параметры приведены в [60]

Приведенные расчеты показывают, что генерируемый импульс также имеет одноцикловую форму, а его амплитуда слабо зависит от СЕР импульсов возбуждения. Согласно приведенным расчетам энерге-

тическая эффективность генерации $\frac{\int E_a^2(t)dt}{\int E_x^2(t)dt}$ составляет 10^{-9} , а длительность импульсов генерации порядка 200 ас. А максимальная амплитуда порядка 100 В/см. Расчеты показали, что энергия генерируемого излучения согласно (18) пропорциональна квадрату концентрации числа атомов. Это говорит о коллективной природе рассматриваемого процесса.

Из расчетов следует, что форма импульсов сильно зависит от толщины слоя, и импульс в толстом слое отличается от одноциклового. Но рассмотрение поведения системы в оптически толстом слое выходит за рамки данного исследования.

Закключение. В данной работе проведен обзор недавно предложенных авторами способов получения предельно коротких импульсов аттосекундной длительности и терагерцовых импульсов на основе коллективного спонтанного излучения оптически тонкой резонансной среды. Источником излучения является импульс свободной поляризации (или остановленной поляризации) среды, возникающий при возбуждении и последующем деовозбуждении (остановке) колебаний атомных диполей с помощью пары фемтосекундных униполярных или аттосекундных униполярных рентгеновских импульсов. Генерация ТГц и аттосекундного импульса происходит коллективно при участии всех частиц среды в тонком образце и в отсутствие возбуждающего поля. Интенсивность генерируемых импульсов пропорциональна квадрату концентрации частиц в слое, что типично для коллективных процессов сверхизлучательного типа. При этом показана возможность генерации ТГц излучения в нелинейной среде в одномерной и трехмерной геометрии. Расчеты показывают, что данная генерация возможна при использовании различных моделей среды (осцилляторная модель без учета возможности изменения населенностей уровней, а также для двухуровневой и трехуровневой моделей). При этом в случае трехуровневой среды возможна генерация ТГц импульса за счет сверхизлучения при учете изменения населенностей уровней среды.

Показана также возможность генерации одиночного УФ аттосекундного импульса в двухуровневой и трехуровневой средах, параметры которых соответствуют переходам в атоме гелия и водорода. При этом система возбуждалась парой квазиуниполярных рентгеновских импульсов. Расчеты показывают, что учет дополнительных уровней не влияет на эффективность генерации, а также, что возможно пренебречь ионизацией атомов. Это подчеркивает достоинство и универсальность предложенного метода.

Отметим, что возможность генерации униполярных импульсов в оптике и их применение для эффективного контроля атомных систем привлекает активное внимание исследователей в последнее время, см. обзоры [23–25]. Разобранные выше методы генерации предельно коротких импульсов за счет коллективного спонтанного излучения атомов среды могут служить альтернативным методом по отношению к известным на сегодняшний день методам получения таких импульсов. Они показывают возможность применения униполярного света для генерации аттосекундных и ТГц импульсов, что тем самым расширяет возможности его применения в физике.

Авторы выражают благодарность Вл. В. Кочаровскому, Е. Р. Кочаровской, С. А. Пулькину и И. В. Бабушкину за полезные обсуждения и ценные замечания.

Исследования возможности генерации ТГц импульсов с помощью ДОЭ и за счет сверхизлучения в трехуровневой среде, а также изучение возможности генерации аттосекундных импульсов в водороде выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта # 17-19-01097-П. Исследования возможности получения аттосекундных импульсов в гелии и ТГц импульсов в тонкой пленке нелинейной среды (рис.3) поддержаны грантом Российского фонда фундаментальных исследований 20-32-70049. Исследование применений униполярного света в оптике поддержано грантом Российского фонда фундаментальных исследований 19-02-00312. Работа М. В. Архипова продержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований 20-02-00872 А.

1. P. B. Corkum and F. Krausz, *Nature Phys.* **3**, 381 (2007).
2. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
3. M. Nisoli and G. Sansone, *Progress in Quantum Electronics* **33**, 17 (2009).
4. F. Calegari, G. Sansone, S. Stagira, C. Vozzi, and M. Nisoli, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **49**, 062001 (2016).
5. H. G. Roskos, M. D. Thomson, M. Kress, and T. Loeffler, *Laser Photon. Rev.* **1**, 349 (2007).
6. E. A. Ponomareva, A. O. Ismagilov, S. E. Putilin, A. N. Tsypkin, S. A. Kozlov, and X. C. Zhang, *Communications Physics* **4**, 1 (2021).
7. S. Lepeshov, A. Gorodetsky, A. Krasnok, E. Rafailov, and P. Belov, *Laser Photonics Rev.* **11**, 1770001 (2017).
8. J. A. Fülöp, S. Tzortzakis, and T. Kampfrath, *Adv. Opt. Mater.* **8**, 1900681 (2020).
9. M. T. Hassan, T. T. Luu, A. Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Nature* **530**, 66 (2016).
10. K. Ramasesha, S. R. Leone, and D. M. Neumark, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **67**, 41 (2016).
11. M. Krüger, C. Lemell, G. Wachter, J. Burgdörfer, and P. Hommelhoff, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **51**, 172001 (2018).
12. M. Garg and K. Kern, *Science* **367**, 411 (2020).
13. B. Ferguson and X. C. Zhang, *Nature Mater.* **1**, 26 (2002).
14. P. U. Jepsen, D. G. Cooke, and M. Koch, *Laser Photonics Rev.* **5**, 124 (2011).
15. E. P. Parrott and J. A. Zeitler, *Appl. Spectrosc.* **69**, 1 (2015).
16. Шю Джингджю, Чжан Си-Чен, *Терагерцовая фотоника*, Ижевский институт компьютерных исследований, М., Ижевск (2016) [X.-C. Zhang and J. Xu, *Introduction to THz wave photonics*, Springer, N.Y. (2010).
17. G. M. Rossi, R. E. Mainz, Y. Yang, F. Scheiba, M. A. Silva-Toledo, S. H. Chia, P. D. Keathley, S. Fang, O. D. Mücke, C. Manzoni, G. Cerullo, G. Cirimi, and F. X. Kartner, *Nature Photon.* **14**, 629 (2020).
18. H.-C. Wu and J. Meyer-ter-Vehn, *Nature Photon.* **6**, 304 (2012).
19. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, *Sci. Rep.* **8**, 2669 (2018).
20. Z. Tibai, G. Tóth, A. Nagyvárad, A. Gyöngy, J. A. Fülöp, J. Hebling, and G. Almási, *Frontiers in Physics* **6**, 140 (2018).
21. M. V. Arkhipov, R. M. Arkhipov, A. V. Pakhomov, I. V. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Opt. Lett.* **42**, 2189 (2017).
22. Z. Xu, B. Shen, L. Zhang, J. Xu, and W. Gong, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **63**, 035013 (2021).
23. Р. М. Архипов, А. В. Пахомов, М. В. Архипов, И. Бабушкин, Ю. А. Толмачев, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 388 (2017) [R. M. Arkhipov, A. V. Pakhomov, I. Babushkin, Yu. A. Tolmachev, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **105**, 408 (2017)].
24. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 9 (2019) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. A. Shimko, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **110**, 15 (2019)].
25. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, *Квантовая электроника* **50**, 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, *Quantum Electron.* **50**, 801 (2020)].
26. X. Chai, X. Ropagnol, S. M. Raeis-Zadeh, M. Reid, S. Safavi-Naeini, and T. Ozaki, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 143901 (2018).

27. Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **124**, 75 (2018) [N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **124**, 72 (2018)].
28. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Opt. Lett.* **44**, 1202 (2019).
29. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, A. Demircan, U. Morgner, N. Rosanov, and I. Babushkin, *Opt. Express* **28**, 17020 (2020).
30. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, I. Babushkin, and N. N. Rosanov, *Laser Phys. Lett.* **17**, 105301 (2020).
31. Н. Н. Розанов, Н. В. Высотина, *ЖЭТФ* **157**, 63 (2020) [N. N. Rosanov and N. V. Vysotina, *JETP* **130**, 52 (2020)].
32. Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 157 (2021).
33. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 586 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **111**, 484 (2020)].
34. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, *УФН* **188**, 1347 (2018) [N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, and M. V. Arkhipov, *Phys. Usp.* **61**, 1227 (2018)].
35. М. В. Архипов, Р. М. Архипов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 794 (2020) [M. V. Arkhipov, R. M. Arkhipov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **111**, 668 (2020)].
36. А. Н. Бугай, С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 260 (2010) [A. N. Bugay and S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **92**, 232 (2010)].
37. С. В. Сазонов, Н. В. Устинов, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 30 (2020) [S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, *JETP Lett.* **112**, 24 (2020)].
38. С. В. Сазонов, А. П. Сухоруков, Н. В. Устинов, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 703(2014) [S. V. Sazonov, A. P. Sukhorukov, and N. V. Ustinov, *JETP Lett.* **100**, 620 (2015)].
39. R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).
40. N. E. Rehler and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **3**, 1735 (1971).
41. R. Bonifacio and L. Lugiato, *Phys. Rev. A* **11**, 1507 (1975).
42. J. C. MacGillivray and M. S. Feld, *Phys. Rev. A* **14**, 1169 (1976).
43. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, М. (1978) [L. Allen and J. H. Eberly, *Optical resonance and two-level atoms*, Wiley, N.Y. (1975)].
44. M. Gross and S. Haroche, *Phys. Rep.* **93**, 301 (1982).
45. А. В. Андреев, В. И. Емельянов, Ю. А. Ильинский, *Кооперативные явления в оптике: Сверхизлучение. Бистабильность. Фазовые переходы*, Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., М. (1988) [A. V. Andreev, V. I. Emel'yanov, and Yu. A. P'inskii, *Collective Effects in Optics: Superradiance and Phase Transitions*, Institute of Physics Publishing, Bristol (1993)].
46. M. G. Benedict, A. M. Ermolaev, V. A. Malyshev, I. V. Sokolov, and E. D. Trifonov, *Super-radiance Multiatomic Coherent Emission*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia (1996).
47. В. В. Железняков, В. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский, *УФН* **159**, 193 (1989) [V. V. Zheleznyakov, V. V. Kocharovskii, and V. V. Kocharovskii, *Sov. Phys. Usp.* **32**, 835 (1989)].
48. В. В. Кочаровский, В. В. Железняков, Е. Р. Кочаровская, В. В. Кочаровский, *УФН* **187**, 367 (2017) [V. V. Kocharovskii, V. V. Zheleznyakov, E. R. Kocharovskaya, and V. V. Kocharovskii, *Phys. Usp.* **60**, 345 (2017)].
49. V. V. Temnov and U. Woggon, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 243603 (2005).
50. V. I. Yukalov and E. P. Yukalova, *Phys. Rev. B* **81**, 075308 (2010).
51. M. Scheibner, T. Schmidt, L. Worschech, A. Forchel, G. Bacher, T. Passow, and D. Hommel, *Nature Phys.* **3**, 106 (2007).
52. W. Zhang, E. R. Brown, A. Mingardi, R. P. Mirin, N. Jahed, and D. Saedkia, *Applied Sciences* **9**, 3014 (2019).
53. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, P. A. Belov, Y. A. Tolmachev, and I. Babushkin, *Laser Phys. Lett.* **13**, 046001 (2016).
54. R. M. Arkhipov, A. V. Pakhomov, I. V. Babushkin, M. V. Arkhipov, Yu. A. Tolmachev, and N. N. Rosanov, *JOSA B* **33**, 2518 (2016).
55. A. V. Pakhomov, R. M. Arkhipov, I. V. Babushkin, M. V. Arkhipov, Yu. A. Tolmachev, and N. N. Rosanov, *Phys. Rev. A* **95**, 013804 (2017).
56. D. O. Ziguleva, R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, I. Babushkin, and N. N. Rosanov, *Opt. Commun.* **424**, 170 (2018).
57. A. V. Pakhomov, R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Sci. Rep.* **9**, 7444 (2019).
58. R. M. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. V. Arkhipov, A. Demircan, U. Morgner, N. N. Rosanov, and I. Babushkin, *Phys. Rev. A* **101**, 043838 (2020).
59. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, И. Бабушкин, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **128**, 541 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **128**, 529 (2020)].
60. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, И. Бабушкин, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **128**, 1723 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **128**, 1857 (2020)].
61. Р. М. Архипов, Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **129**, 319 (2021) [R. M. Arkhipov and N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **129** (2021), in press].

62. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *J. Phys. Conf. Ser.* **1571**(1), 012009 (2020).
63. С. А. Ахманов, С. Ю. Никитин, *Физическая оптика*, Наука, М. (2004) [S. A. Akhmanov and S. Y. Nikitin, *Physical optics*, Clarendon Press, Oxford (1997)].
64. А. Ярив, *Квантовая электроника*, Сов. радио, М. (1980) [A. Yariv, *Quantum electronics*, Wiley, N.Y., Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore (1989)].
65. Н. Н. Розанов, *Диссипативные оптические солитоны. От микро- к нано- и атто*, Физматлит, М. (2011).
66. С. Э. Фриш, *Оптические спектры атомов*, Государственное издательство физико-математической литературы, М.-Л. (1963).
67. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Наука, М. (1977).

Источник неразличимых одиночных фотонов на основе эпитаксиальных InAs/GaAs квантовых точек для интеграции в схемы квантовых вычислений

А. И. Галимов, М. В. Рахлин, Г. В. Климов, Ю. М. Задиранов, Ю. А. Гусева, С. И. Трошков, Т. В. Шубина, А. А. Торопов

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

Поступила в редакцию 12 января 2021 г.

После переработки 13 января 2021 г.

Принята к публикации 14 января 2021 г.

Исследованы характеристики одиночных фотонов, излучаемых столбчатыми микроструктурами, изготовленными на основе эпитаксиальных микрорезонаторных гетероструктур с распределенными брэгговскими отражателями, включающих самоорганизованные квантовые точки InAs/GaAs и характеризующихся сравнительно малой добротностью в диапазоне 2000–3000. В условиях когерентной резонансной линейно-поляризованной оптической накачки π -импульсом показана возможность инициализации в одиночной квантовой точке состояния с заданной спиновой конфигурацией: экситон с определенной поляризацией или трион. Эксперимент по измерению двухфотонной интерференции в схеме Хонга–У–Мандела продемонстрировал степень неразличимости последовательно излученных одиночных фотонов 97 % при величине задержки 2 нс и 93 % при 250 нс. Очерчены перспективы применения таких источников в оптических квантово-вычислительных схемах.

DOI: 10.31857/S1234567821040054

1. Введение. Самоорганизованные квантовые точки (КТ), выращенные эпитаксиальным методом, рассматриваются как основа для различных приложений в квантовой фотонике из-за их уникальных свойств, таких как малая спектральная ширина линии излучения, быстрое время радиационного распада и высокая квантовая эффективность [1–3]. Среди таких приложений – генерация одиночных фотонов с высокой степенью неразличимости, что необходимо для реализации линейных оптических схем квантовых вычислений [4–6].

Большинство современных квантово-вычислительных протоколов требует максимально большое число параллельных каналов с взаимно неразличимыми фотонами. Одним из подходов к их формированию является использование одной КТ, излучающей с высокой эффективностью последовательность однофотонных импульсов, которые затем демультимплексируются по N параллельным каналам [7]. Реализация квантовых схем в этой конфигурации требует генерации последовательности неразличимых одиночных фотонов, разнесенных во времени на десятки и сотни наносекунд. На сегодняшний день удалось продемонстрировать близкую к 100 % степень неразличимости фотонов при строго резонансном когерентном оптическом возбуждении КТ, вставленной в столбчатую микрорезонаторную

структуру с высокой добротностью, для фотонов разнесенных во времени на интервал порядка 2 нс [8–11]. Увеличение интервала между фотонами до сотен наносекунд [12] и, тем более, до 15 мкс [13] уменьшает степень неразличимости до 90 % и менее.

Наиболее вероятной причиной этого является спектральное уширение линии излучения КТ вследствие различных механизмов фазовой и спектральной диффузии, т.е. изменения фазы и частоты электромагнитного излучения во времени. Такие процессы обычно вызываются взаимодействием с фононами, а также наличием зарядовых и спиновых флуктуаций в среде, окружающей КТ [14, 15], и характеризуются определенной временной шкалой в зависимости от конкретных свойств используемых материалов и условий роста [16–18]. В большинстве ранее проведенных исследований влияние этих процессов на степень неразличимости фотонов ослаблялось за счет значительного (на порядок и более) увеличения скорости излучательной рекомбинации в КТ в результате действия эффекта Парселла в высокодобротной резонаторной структуре [14, 16].

Другой подход основан на использовании нескольких независимых КТ, настроенных на одинаковую длину волны излучения. Следует отметить, что к настоящему времени измеренная степень взаимной неразличимости фотонов, излученных двумя

независимыми КТ, вставленными в оптический микрорезонатор с распределенными брэгговскими отражателями (РБО), не превышала 47% [19]. Дополнительная сложность такого подхода заключается в необходимости независимой подстройки длины волны излучения КТ и соответствующего резонанса микрорезонатора для всех излучающих структур. Варьирование длины волны излучения отдельных КТ в уже изготовленных микрорезонаторах может осуществляться разными способами, например, при приложении внешнего электрического поля [11, 20], магнитного поля [21, 22], локального нагрева [10] или упругих деформаций [23, 24]. Возможности независимой подстройки положения спектрального резонанса для уже изготовленного монолитного оптического микрорезонатора существенно ограничены [25, 26], а с учетом наличия неизбежного пространственного градиента толщин/состава составляющих гетероструктуру эпитаксиальных слоев изготовление идентичных микрорезонаторов в пределах одной гетероструктуры представляется исключительно сложной задачей. В связи с этим особую актуальность приобретает вопрос о возможности достижения достаточно высокой степени неразличимости одиночных фотонов, излученных КТ, помещенной в оптический микрорезонатор с относительно низкой добротностью, в котором спектральная ширина резонанса существенно превосходит ширину линии излучения квантовой точки.

В настоящей работе проведены исследования, показывающие возможность объединения двух вышеописанных подходов в результате создания однофотонных источников, принципиально допускающих интеграцию в пределах однокристального полупроводникового чипа и независимую точную настройку длины волны излучения при условии, что каждый источник в отдельности обеспечивает степень неразличимости излученных одиночных фотонов, пригодную для выполнения квантовых вычислений ($> 90\%$ [27]) на достаточно большом временном интервале.

С этой целью были изготовлены структуры с самоорганизованными InAs КТ, встроенными в матрицу GaAs и помещенными в столбчатые микрорезонаторы с РБО со сравнительно низкой добротностью, что привело к увеличению спектральной ширины оптической моды до значений, превышающих ширину на полувысоте линии люминесценции КТ более чем в 100 раз. Несмотря на сравнительно малую величину фактора Парселла (порядка 2–3), достигаемую в изготовленных микрорезонаторных структурах, эксперимент по измерению двухфотонной интерференции, выполненный в схеме Хонга–У–Мандела [28]

при различных задержках между двумя последовательно излученными фотонами, показал в условиях резонансного когерентного возбуждения возможность достижения степени неразличимости вплоть до 93% при величине задержки 250 нс.

2. Образцы и экспериментальные методики. Исследуемая в данной работе гетероструктура была изготовлена с помощью молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках GaAs:Si (001) с буферным слоем GaAs толщиной 500 нм. Поверх буферного слоя выращивались 25(15) пар $\lambda/4$ слоев $Al_{0.9}Ga_{0.1}As/GaAs$, которые формировали нижние (верхние) РБО. Между ними располагался GaAs λ -резонатор толщиной 266 нм, в центре которого помещался массив InAs КТ с поверхностной плотностью в диапазоне 10^9 – 10^{10} см⁻², сформированных по механизму роста Странского–Крастанова.

Ранее аналогичная конструкция хорошо зарекомендовала себя при разработке эффективных отдельно стоящих излучателей неразличимых одиночных фотонов [10]. В настоящей работе акцент делается на определении возможности достижения необходимой степени неразличимости фотонов при использовании микрорезонаторных структур со сравнительно малой добротностью, определяемой, в первую очередь, точностью изготовления периодической структуры РБО и планарностью составляющих их слоев. Калибровочные процедуры, необходимые для достижения максимальной добротности, при росте исследуемой гетероструктуры преднамеренно не проводились, что автоматически обеспечивало сравнительно малую величину добротности в диапазоне 2000–3000.

В спектре отражения гетероструктуры, отобранной для изготовления столбчатых микрорезонаторов, наблюдается “провал”, соответствующий резонансной оптической моде (рис. 1). Из спектра отражения видно, что полуширина провала составляет 490 мкэВ, что соответствует добротности резонатора, равной 2700. Это значение оказывается в 4–5 раз меньше типичных добротностей микрорезонаторов, обычно используемых для изготовления источников одиночных фотонов с высокой степенью неразличимости, тогда как спектральная ширина резонанса заведомо перекрывает возможные непреднамеренные вариации спектрального положения резонанса в пределах одной эпитаксиально-выращенной гетероструктуры.

С помощью реактивного ионно-плазменного травления методами стандартной контактной фотолитографии (365 нм) с использованием негативного фоторезиста изготавливались цилиндрические меза-

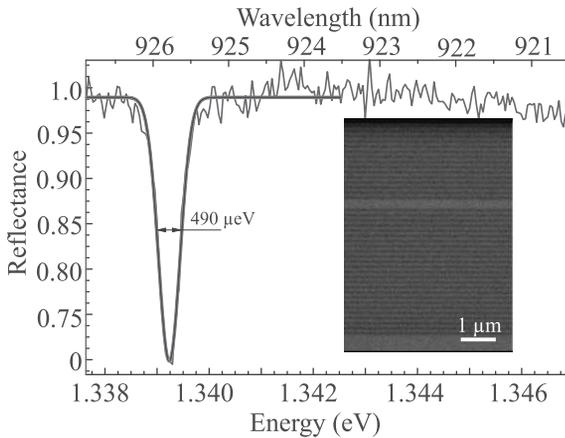


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектр отражения микрорезонаторной гетероструктуры с РБО при 77 К. На вставке: изображение центральной части образца, полученное на растровом электронном микроскопе

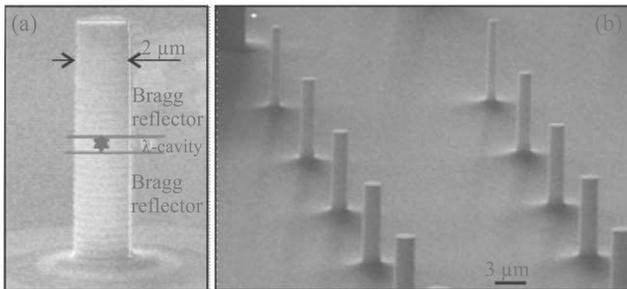


Рис. 2. (Цветной онлайн) Изображения: (a) – одного столбчатого микрорезонатора и (b) – регулярного массива таких микрорезонаторов, полученные с помощью растрового электронного микроскопа

структуры с диаметром от 0.8 до 2.5 мкм (рис. 2). При таком подходе пространственное совпадение положения квантовой точки и центра полости микрорезонатора является случайным событием, так же, как и спектральное совпадение линии излучения КТ и положения оптического резонанса, что требует проведения тщательного отбора микрорезонаторной структуры с оптимальными характеристиками в результате оптических измерений.

Для измерений образец с микрорезонаторами помещался в гелиевый криостат проточного типа (рис. 3). Лазерные импульсы длительностью 5 пс с частотой следования 80 МГц, генерируемые перестраиваемым по длине волны титан-сапфировым лазером с синхронизацией мод, проходят через линейный поляризатор (LP1) и поляризующий светоделитель (PBS) и с помощью объектива микроскопа (МО) с числовой апертурой $NA = 0.76$ фокусируются в пределах вершины выбранного столбчатого микро-

резонатора. Объектив микроскопа собирает однофотонное излучение, а второй линейный поляризатор (LP2), ориентированный перпендикулярно поляризации лазера, позволяет совместно с PBS подавить лазерное излучение, отраженное от вершины микрорезонатора с КТ, с коэффициентом экстинкции порядка 10^6 .

Полуволновая пластина (HWP) и четвертьволновая пластина (QWP) используются совместно для управления направлением вектора поляризации линейно-поляризованного возбуждающего света по отношению к направлениям $[110]$ и $[1\bar{1}0]$ кристаллических слоев, составляющих микрорезонатор, а также для корректировки паразитной эллиптичности поляризации, вносимой элементами оптической схемы. Выделенное в кросс-поляризационной схеме однофотонное излучение фокусируется на торец одномодового оптического волокна, что обеспечивает дополнительную пространственную фильтрацию. Непрерывный мониторинг спектра излучения на тройном решеточном спектрометре с охлаждаемой ПЗС камерой позволяет совмещать спектральное положение лазерной линии с длиной волны излучения КТ с точностью порядка нескольких пикометров.

Степень неразличимости однофотонных состояний измерялась в интерферометре Хонга-У-Мандела, который представляет собой разбалансированный интерферометр Маха-Цендера с задержкой между плечами, равной временному интервалу между одиночными фотонами [28]. Для обеспечения необходимой пространственной точности и стабильности измерений во времени и пространстве сигналы на входе интерферометра собираются в одномодовые оптические волокна, проходят через поляризаторы LP3 и LP4 и интерферируют на неполяризующем светоделителе BS. Сигналы на выходе интерферометра детектируются сверхпроводниковыми однофотонными детекторами с временным разрешением порядка 40 пс и подаются на электронную схему “старт-стоп”, обеспечивающую регистрацию гистограммы совпадений моментов регистрации одиночных фотонов в зависимости от величины временной задержки. Волоконные четвертьволновые (FQWP) и полуволновые (FHWP) фазовращатели позволяют скомпенсировать эллиптичность и поворот поляризации, индуцируемые прохождением излучения в оптическом волокне.

3. Результаты и обсуждение. Предварительный отбор микрорезонаторных структур осуществлялся в условиях надбарьерного возбуждения с энергией фотона вблизи края поглощения материала ба-

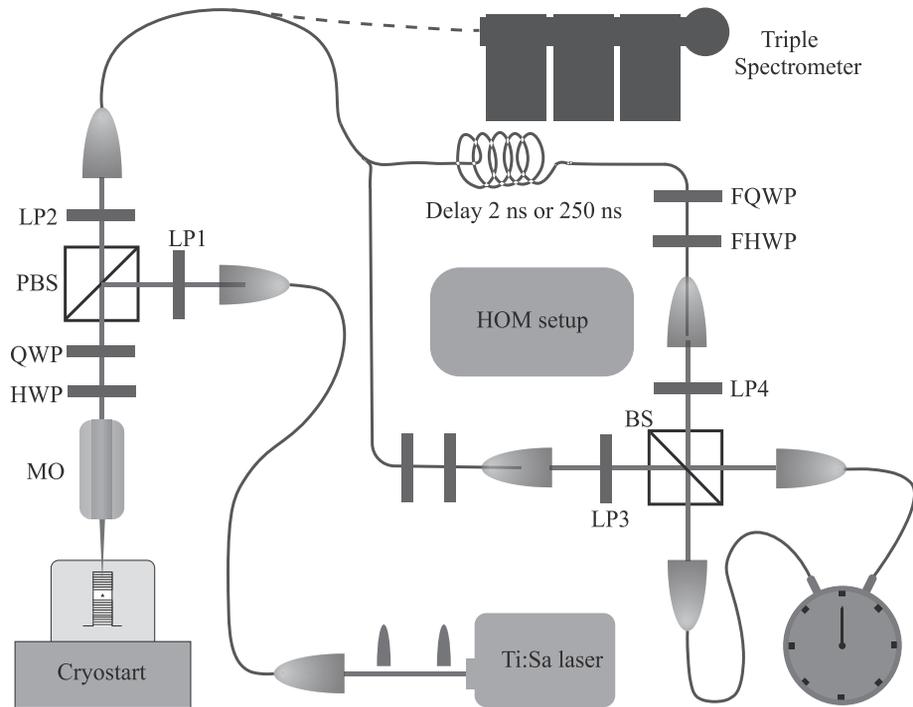


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема установки кросс-поляризационного возбуждения/детектирования для измерений резонансной флуоресценции и анализа статистики одиночных фотонов

рьерных слоев (GaAs). Были отобраны микрорезонаторные структуры, демонстрирующие наличие в пределах оптического резонанса интенсивной отдельной линии фотолюминесценции одиночной КТ. В различных микрорезонаторах наблюдались линии двух типов: одиночная линия с измеренной шириной ~ 4 мкэВ, определяемой спектральным разрешением используемого трехрешеточного спектрометра (рис. 4а), и дублет линий, линейно поляризованных вдоль кристаллографических направлений $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$ с величиной расщепления порядка нескольких микроэлектронвольт (рис. 4б). В первом случае спектр соответствует рекомбинации синглетного состояния заряженного экситона (триона), тогда как наблюдение дублетной линии может быть объяснено расщеплением дважды вырожденного “светлого” состояния нейтрального экситона с проекцией углового момента ± 1 в результате действия анизотропной части электрон-дырочного обменного взаимодействия в КТ с предположительной точечной симметрией C_{2v} или C_2 [29, 30].

Предложенная интерпретация природы линий была проверена с помощью измерения кинетики излучения в условиях когерентного возбуждения п-импульсом света, соответствующих наблюдению первого максимума осциллирующей зависимости интен-

сивности излучения от мощности накачки при строго резонансном возбуждении. На рисунке 4 показаны типичные кривые затухания интенсивности люминесценции для синглетного (рис. 4с) и дублетного (рис. 4д) состояний, измеренные в условиях линейно-поляризованного накачивающего излучения с поляризацией, повернутой на 45° по отношению к направлению $[110]$. В соответствии с предложенной интерпретацией наблюдаются строго экспоненциальная кривая затухания для синглетного трионного состояния и осциллирующая кривая, демонстрирующая квантовые биения в трехуровневой системе светлых экситонов, расщепленных в результате действия электрон-дырочного обменного взаимодействия [31].

Исследования статистических характеристик однофотонного излучения и степени неразличимости фотонов проводились в структуре с синглетным (трионным) состоянием, спектр и кривая затухания излучения которого показаны на рис. 4а, с. Сравнение среднего времени жизни возбужденного состояния триона ($T_1 = 427$ пс), полученного в результате аппроксимации кривой затухания экспонентой, с характерными временами жизни трионных состояний в аналогичных КТ, находящихся в объемном материале (~ 1 нс [32]) позволяет оценить фактор Парселла как величину порядка 2, что хорошо согласуется с

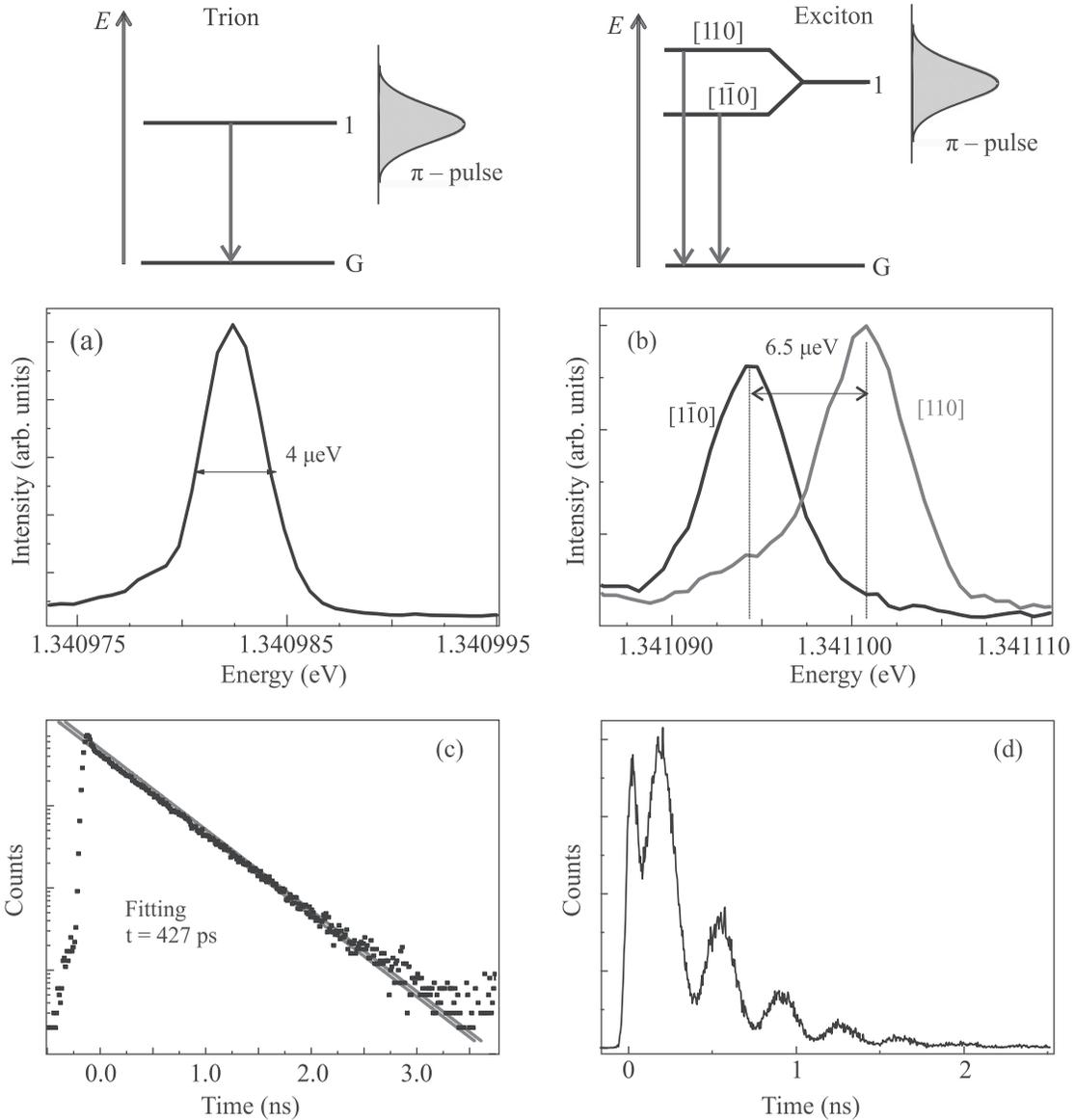


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сверху: схема когерентного возбуждения квантовых уровней триона и экситона. (а), (б) – Спектры микро-фотолюминесценции триона (а) и экситона (б), измеренные на тройном решеточном спектрометре при $T = 10\text{ K}$ в условиях надбарьерного возбуждения. (с), (д) – Соответствующие кривые затухания, измеренные в условиях когерентного возбуждения π -импульсом

малой добротностью изготовленного микрорезонатора, тогда как соответствующая Фурье-ограниченная ширина линии ($\Gamma_0 = \hbar/T_1$) составляет 1.5 мкэВ .

Для модельной двухуровневой излучающей системы характерное время когерентности T_2 определяется как

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{T_2^*}, \tag{1}$$

где T_2^* – характерное время дефазировки. В пределе Фурье-ограниченной ширины линии $T_2 = 2T_1$. В этом случае процессы дефазировки отсутствуют (беско-

нечно большое время T_2^*), и профиль волнового пакета одиночных фотонов во времени полностью определяется Фурье-преобразованием спектра излучения. Недостаточное спектральное разрешение используемого спектрометра ($\sim 4\text{ мкэВ}$ в данной спектральной области) не позволяет сделать достоверное заключение о величине эффектов фазовой и спектральной диффузии и их вкладе в ширину линии излучения непосредственно из результатов спектральных измерений. Тем не менее, некоторые оценки могут быть выполнены, исходя из результатов измерения степе-

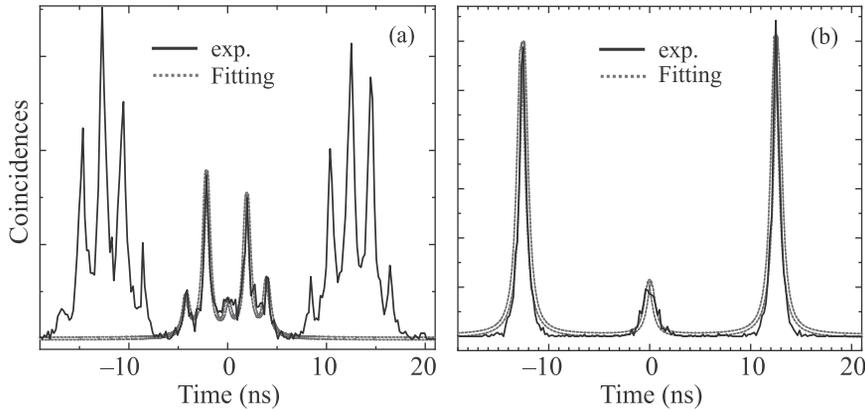


Рис. 5. (Цветной онлайн) Гистограмма двухфотонной интерференции при температуре 15 К, измеренная в схеме Хонга–У–Мандела при задержке между фотонами (а) 2 нс и (б) 250 нс

ни неразличимости последовательно излученных фотонов P , которая в пренебрежении эффектом спектральной диффузии соотносится с временами T_1 и T_2 как [16]

$$P = \frac{T_2}{2T_1}. \quad (2)$$

Для определения степени неразличимости был проведен эксперимент по исследованию двухфотонной интерференции в схеме Хонга–У–Мандела для фотонов, разнесенных по времени на 2 нс (рис. 5а) и 250 нс (рис. 5б). Показанные на рис. 5 результаты теоретической подгонки получены согласно модели, предложенной в работе [33]. При расчетах использовался параметр $g^{(2)}(0) = 0.05$, экспериментально измеренный нами в корреляционной схеме Хэнбери Брауна–Твисса [34]. Результаты подгонки показывают, что при задержке 2 нс степень неразличимости равна 0.97 (97%), тогда как при увеличении задержки до 250 нс неразличимость падает до 0.93 (93%).

Если предположить, что при малых задержках отличие измеренной степени неразличимости от 100% определяется сравнительно быстрыми процессами фазовой диффузии, то использование экспериментально измеренных значений $T_1 = 427$ пс и $P = 0.97$, а также выражений (1) и (2) позволяет оценить характерное время дефазировки T_2^* как 28 нс. Уменьшение степени неразличимости до 0.93 при увеличении временного интервала между измеряемыми фотонами до 250 нс свидетельствует о наличии дополнительного и более медленного механизма уменьшения степени неразличимости фотонов, связанного, вероятно, с процессами спектральной диффузии, определяемыми наличием зарядовых и спиновых флуктуаций в окружающем КТ материале. Сравнительно небольшой вклад таких процессов сви-

детельствует в первую очередь о достаточно малой концентрации дефектов в эпитаксиальных слоях, составляющих микрорезонаторную структуру.

4. Заключение. Для микрорезонаторных структур со сравнительно малой добротностью (менее 3000), включающих одиночную КТ InAs/GaAs, экспериментально показана возможность детерминированной генерации одиночных фотонов с неразличимостью 93% на интервале времени 250 нс, что допускает эффективное демультимплексирование сигнала по нескольким параллельным каналам в перспективных схемах линейных оптических квантовых вычислений. Возможность достижения высокой степени неразличимости фотонов, излучаемых КТ в микрорезонаторной структуре с малым фактором Парселла (порядка 2) определяется низкой эффективностью механизмов, вызывающих спектральную диффузию линии излучения одиночной квантовой точки, что свидетельствует о высоком структурном качестве эпитаксиальных слоев, составляющих микрорезонаторную гетероструктуру. Предполагается, что использование подобных микрорезонаторных структур с малой добротностью и достаточно широким спектральным резонансом упростит реализацию точной настройки длины волны однофотонной генерации, что позволит увеличивать число параллельных каналов в схемах оптических квантовых компьютеров, интегрируя в пределах однокристалльного чипа несколько независимых источников неразличимых фотонов со степенью неразличимости, достаточной для реализации эффективного демультимплексирования потока фотонов, излучаемого каждым источником.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследова-

дований в рамках научного проекта # 18-02-01212 и Росатома.

М. В. Рахлин благодарит Совет по грантам Президента Российской Федерации. А. И. Галимов и Т. В. Шубина благодарят Российский научный фонд (грант # 20-42-01008) за поддержку исследования свойств экситонных и трионных состояний в одиночных квантовых точках.

1. M. D. Eisama, J. Fan, A. Migdall, and S. V. Polyakov, *Rev. Sci. Instrum.* **82**, 071101 (2011).
2. M. Rakhlin, K. Belyaev, S. Sorokin, I. Sedova, D. Kirilenko, A. Mozharov, I. Mukhin, M. Kulagina, Yu. Zadiranov, S. Ivanov, and A. Toropov, *JETP Lett.* **108**, 201 (2018).
3. M. Rakhlin, K. Belyaev, G. Klimko, I. Sedova, M. Kulagina, Y. Zadiranov, S. Troshkov, Y. Guseva, Y. Terentev, S. Ivanov, and A. Toropov, *JETP Lett.* **109**, 145 (2019).
4. P. Kok, W. J. Munro, K. Nemoto, T. C. Ralph, J. P. Dowling, and G. J. Milburn, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 135 (2007).
5. K. Balygin, V. Zaitsev, A. Klimov, S. Kulik and S. Molotkov, *JETP Lett.* **106**, 470 (2017).
6. K. Balygin, A. Klimov, S. Kulik, and S. Molotkov, *JETP Lett.* **106**, 120 (2017).
7. H. Wang, Y. He, Y. H. Li, Z. E. Su, B. Li, H. L. Huang, X. Ding, M. C. Chen, C. Liu, J. Qin, J. P. Li, Y. M. He, C. Schneider, M. Kamp, C. Z. Peng, S. Höfling, C. Y. Lu, and J. W. Pan, *Nature Photon.* **11**, 361 (2017).
8. Y.-M. He, Y. He, Y.-J. Wei, D. Wu, M. Atature, C. Schneider, S. Höfling, M. Kamp, C.-Y. Lu, and J.-W. Pan, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 213 (2013).
9. Y.-J. Wei, Y.-M. He, M.-C. Chen, Y.-N. Hu, Y. He, D. Wu, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, C.-Y. Lu, and J.-W. Pan, *Nano Lett.* **14**, 6515 (2014).
10. X. Ding, Y. He, Z.-C. Duan, N. Gregersen, M.-C. Chen, S. Unsleber, S. Maier, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, C.-Y. Lu, and J.-W. Pan, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 020401 (2016).
11. N. Somaschi, V. Giesz, L. D. Santis, J. C. Loredó, M. P. Almeida, G. Hornecker, S. L. Portalupi, T. Grange, C. Antón, J. Demory, C. Gómez, I. Sagnes, N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Lemaitre, A. Auffeves, A. G. White, L. Lanco, and P. Senellart, *Nat. Photonics* **10**, 340 (2016).
12. J. C. Loredó, N. A. Zakaria, N. Somaschi, C. Anton, L. de Santis, V. Giesz, T. Grange, M. A. Broome, O. Gazzano, G. Coppola, I. Sagnes, A. Lemaitre, A. Auffeves, P. Senellart, M. P. Almeida, and A. G. White, *Optica* **3**, 433 (2016).
13. H. Wang, Z.-C. Duan, Y.-H. Li, S. Chen, J.-P. Li, Y.-M. He, M.-C. Chen, Y. He, X. Ding, C.-Z. Peng, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, C.-Y. Lu, and J.-W. Pan, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 213601 (2016).
14. H. Vural, S. L. Portalupi, and P. Michler, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 030501 (2020).
15. S. Gerhardt, J. Iles-Smith, D. P. S. McCutcheon, Y.-M. He, S. Unsleber, S. Betzold, N. Gregersen, J. Mørk, S. Höfling, and C. Schneider, *Phys. Rev. B* **97**, 195432 (2018).
16. J. Bylander, I. Robert-Philip, and I. Abram, *Eur. Phys. J. D* **22**, 295 (2003).
17. A. J. Bennett, D. C. Unitt, A. J. Shields, P. Atkinson, and D. A. Ritchie, *Opt. Express* **13**, 7772 (2005).
18. J. Houel, A. V. Kuhlmann, L. Greuter, F. Xue, M. Poggio, B. D. Gerardot, P. A. Dalgarno, A. Badolato, P. M. Petroff, A. Ludwig, D. Reuter, A. D. Wieck, and R. J. Warburton, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 107401 (2012).
19. E. B. Flagg, A. Muller, S. V. Polyakov, A. Ling, A. Migdall, and G. S. Solomon, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 137401 (2010).
20. T. Heindel, C. Schneider, M. Lerner, S. H. Kwon, T. Braun, S. Reitzenstein, S. Höfling, M. Kamp, and A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 011107 (2010).
21. S. Reitzenstein, S. Munch, P. Franek, A. Rahimi-Iman, T. Heindel, A. Löffler, S. Höfling, L. Worschech, A. Forchel, I. V. Ponomarev, and T. L. Reinecke, *J. Phys.: Conf. Ser.* **334**, 012011 (2011).
22. P. Hilaire, C. Millet, J. Loredó, C. Antón, A. Harouri, A. Lemaitre, I. Sagnes, N. Somaschi, O. Krebs, P. Senellart, and L. Lanco, *Phys. Rev. B* **102**, 195402 (2020).
23. J. Martin-Sanchez, R. Trotta, A. Mariscal, R. Serna, G. Piredda, S. Stroj, J. Edlinger, C. Schimpf, J. Aberl, T. Lettner, J. Wildmann, H. Huang, X. Yuan, D. Ziss, J. Stangl, and A. Rastelli, *Semicond. Sci. Technol.* **33**, 013001 (2017).
24. M. Moczala-Dusanowska, L. Dusanowski, S. Gerhardt, Y. M. He, M. Reindl, A. Rastelli, R. Trotta, N. Gregersen, S. Höfling, and C. Schneider, *ACS Photonics* **6**, 2025 (2019).
25. S. Gerhardt, M. Moczala-Dusanowska, D. Łukasz, T. Huber, S. Betzold, J. Martin-Sánchez, R. Trotta, A. Predojević, S. Höfling, and C. Schneider, *Phys. Rev. B* **101**, 245308 (2020).
26. H. Wang, Y.-M. He, T.-H. Chung, H. Hu, Y. Yu, S. Chen, X. Ding, M.-C. Chen, J. Qin, X. Yang, R.-Z. Liu, Z.-C. Duan, J.-P. Li, S. Gerhardt, K. Winkler, J. Jurkat, L.-J. Wang, N. Gregersen, Y.-H. Huo, Q. Dai, S. Yu, S. Höfling, C.-Y. Li, and J.-W. Pan, *Nature Photon.* **13**, 770 (2019).
27. T. M. Zhao, Y. Chen, Y. Yu, Q. Li, M. Davanco, and J. Liu, *Adv. Quantum Technol.* **3**, 1900034 (2020).
28. C. K. Hong, Z. Y. Ou, and L. Mandel, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2044 (1987).

29. M. Bayer, G. Ortner, O. Stern, A. Kuther, A. A. Gorbunov, A. Forchel, P. Hawrylak, S. Fafard, K. Hinzer, T. L. Reinecke, S. N. Walck, J. P. Reithmaier, F. Klopff, and F. Schäfer, *Phys. Rev. B* **65**, 195315 (2002).
30. A. Gaisler, I. Derebezov, V. Gaisler, D. Dmitriev, A. Toropov, A. Kozhukhov, D. Shcheglov, A. Latyshev, and A. Aseev, *JETP Lett.* **105**, 103 (2017).
31. H. Ollivier, I. M. B. Wenniger, S. Thomas, S. C. Wein, A. Harouri, G. Coppola, P. Hilaire, C. Millet, A. Lemaitre, I. Sagnes, O. Krebs, L. Lanc, J. C. Lored, C. Anton, N. Somaschi, and P. Senellart, *ACS Photonics* **7**, 1050 (2020).
32. G. Wang, S. Fafard, D. Leonard, J. E. Bowers, J. L. Merz, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2815 (1994).
33. C. Santori, D. Fattal, J. Vuckovic, G. S. Solomon, and Y. Yamamoto, *Nature* **419**, 594 (2002).
34. R. Brouri, A. Beveratos, J.-P. Poizat, and P. Grangier, *Opt. Lett.* **25**, 1294 (2000).

Инициирование взрывной электронной эмиссии и убегание электронов при импульсном пробое плотных газов

Н. М. Зубарев¹⁾, Г. А. Месяц

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

Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 24 декабря 2020 г.

После переработки 31 декабря 2020 г.

Принята к публикации 1 января 2021 г.

Предлагается механизм инициирования взрывной электронной эмиссии на границе катода и плотного газа, основанный на накоплении у естественных выступов микронного размера положительных ионов, образующихся в результате ионизации газа автоэмиссионными электронами. Расстояние, на котором рождаются ионы, падает с ростом плотности газа, что приводит к увеличению их кулоновского поля на эмитирующей поверхности. В итоге для газа высокого – в десятки атмосфер – давления происходит взрывной рост плотности эмиссионного тока, приводящий за десятки пикосекунд к образованию множества взрывоэмиссионных центров. Они дают старт развитию плазменных каналов, прорастающих в сторону анода. На вершинах плазменных острий генерируются убегающие электроны, которые ионизируют газ, обеспечивая его субнаносекундной пробой. Такой сценарий развития пробоя может реализовываться в условиях критически низкого приведенного электрического поля (т.е. отношения его напряженности к давлению), когда характерное время лавинного размножения тепловых электронов больше длительности импульса напряжения.

DOI: 10.31857/S1234567821040066

Убегающие (непрерывно ускоряющиеся в газовой или плазменной среде в достаточно сильном электрическом поле [1, 2]) электроны (УЭ) играют важную роль в процессах импульсного пробоя газа [3–6]. Они, пересекая промежуток за времена, сопоставимые со временем распространения света, ионизируют его, обеспечивая условия для зажигания объемного разряда [7, 8]. Проводимые в последнее время активные экспериментальные и теоретические исследования позволили дать объяснение целому ряду явлений, связанных с УЭ. Были описаны сценарии формирования двух импульсов тока УЭ [9–11]; сформулированы условия убегания в резко неоднородном поле [12, 13]; определен механизм прерывания потока УЭ, обеспечивающий его пикосекундную длительность [14–17]. При этом до сих пор не было дано удовлетворительного объяснения причин генерации УЭ в газах высокого – в десятки атмосфер – давления (p) в условиях однородного поля (E_0) в промежутке, когда значение приведенного поля E_0/p , во-первых, на порядок ниже требуемого для перехода тепловых электронов в режим убегания и, во-вторых, настолько мало, что характерное время лавинного размножения тепло-

вых электронов больше длительности импульса напряжения.

В экспериментальной работе [18] в широком диапазоне давлений (выше 1 атм) исследовался импульсный пробой заполненного азотом межэлектродного промежутка с близким к однородному распределению электрического поля. Амплитудное значение импульса напряжения на промежутке (на холостом ходу, с учетом удвоения напряжения при отражении импульса) составляло ~ 200 кВ; полная ширина на полувысоте импульса ~ 450 пс. Была проведена серия экспериментов с зазором шириной 1.65 мм. Пробой наблюдался в диапазоне $p = 1 - 40$ атм; при давлениях, превышающих 40 атм, пробой не происходил. Среднее напряжение пробоя газового промежутка при максимальном давлении в 40 атм составляло ~ 185 кВ, т.е., фактически, определялось амплитудным значением импульса напряжения (пробой при больших давлениях потребовал бы увеличения амплитуды). Значение напряженности электрического поля, рассчитываемое по напряжению пробоя, составляет ~ 1.1 МВ/см; приведенная напряженность поля при максимальном давлении минимальна и оценивается в ~ 37 В/(см · Торр).

Ключевым результатом работы [18] является регистрация убегающих электронов за анодом посред-

¹⁾e-mail: nick@iep.uran.ru

ством люминофора во всем диапазоне давлений, где наблюдался пробой. Указанное предельное значение E_0/p на порядок меньше требуемого для убегания электронов. Действительно, по данным [19] функция потерь энергии $L(w) \equiv -(1/n)dw/dz$ для азота имеет максимум $L_{\max} \approx 10^{-14}$ эВ·см² при энергии электрона $w_0 \approx 110$ эВ (n – концентрация газа, w – кинетическая энергия движущегося вдоль направления z электрона). Критическое поле убегания оценивается как $E_{\text{cr}} = nL_{\max}/e$, где e – элементарный заряд; при выполнении условия $E > E_{\text{cr}}$ электрон будет получать от поля больше энергии, чем теряет в неупругих столкновениях с молекулами газа и, как следствие, непрерывно ускоряться. При нормальных условиях (концентрация газа тогда равна $n_0 \approx 2.7 \cdot 10^{19}$ см⁻³) эта оценка дает для азота поле в ~ 270 кВ/см. Критическое приведенное поле убегания тогда составляет $E_{\text{cr}}/p \approx 356$ В/(см·Торр) [4, 6]. Для интересующего нас предельного случая $p = 40$ атм пороговое для убегания поле E_{cr} оценивается в 11 МВ/см, т.е. оно в 10 раз превышает среднее поле $E_0 \approx 1.1$ МВ/см в промежутке. В такой ситуации объяснить появление УЭ, не рассматривая перераспределение исходно однородного поля за счет появления объемного электрического заряда ионов и электронов, невозможно.

В настоящей работе мы предлагаем механизм генерации УЭ, в котором роль “усилителя” поля играют плазменные выступы, развивающиеся с катода в результате инициирования на нем взрывной электронной эмиссии (ВЭЭ) [20, 21]. Если такой выступ обеспечит усиление внешнего поля E_0 до критического значения E_{cr} , то на его вершине часть тепловых электронов перейдет в режим убегания. Однако для убегания не только в ограниченной области усиленного поля вблизи вершины, но и во всем межэлектродном промежутке, необходимо, чтобы электроны, попадая в область слабого среднего поля, уже набрали достаточно высокую энергию. В противном случае они термализуются.

Используя формулу Бете [22], функцию потерь $L(w)$ при $w \gg w_0$ можно записать как

$$L(w) = L_{\max} \frac{w_0}{w} \ln \left(\frac{ew}{w_0} \right), \quad (1)$$

где $e = 2.718$ – основание натурального логарифма. Поскольку потери в области $w > w_0$ убывают, электроны с достаточно высокой начальной энергией могут убегать и в докритическом поле. Как следует из (1), эта энергия должна превышать пороговое значение w_{cr} , определяемое из равенства $L(w_{\text{cr}})/L_{\max} = E_0/E_{\text{cr}}$. Для рассматриваемого случая $w_{\text{cr}} \approx 5$ кэВ.

Определим, какой должна быть высота выступа z_{cr} , чтобы в его окрестности свободный электрон мог набрать требуемую энергию w_{cr} . Оценка снизу для энергии, набираемой электроном (без учета потерь на трение в газе), дается произведением размера выступа на величину невозмущенного поля. Находим $z_{\text{cr}} \approx w_{\text{cr}}/(eE_0)$, что дает 46 мкм.

В условиях субнаносекундного пробоя основными источниками свободных электронов в газе являются эмиссионные процессы на катоде и ударная ионизация молекул газа в промежутке. При атмосферном давлении эмиссия даже единственного электрона может в результате его ионизационного размножения привести к формированию критической (т.е. обладающей собственным электрическим полем, сравнимым с внешним) лавины, ее трансформации в стример и, тем самым, обеспечить развитие пробоя [3, 23–25]. С увеличением p пробой будет происходить при больших напряженностях поля E_0 и при меньших приведенных полях E_0/p [26, 27]. Это, с одной стороны, приведет к возрастанию роли процессов автоэлектронной эмиссии (АЭЭ) и, с другой стороны, замедлению процессов ударной ионизации, определяя тем самым специфику пробоя газа высокого – в десятки атмосфер – давления. Сделаем оценки для обобщаемого случая с $p = 40$ атм и $E_0 = 1.1$ МВ/см.

Считаем, что иницирующие пробой электроны эмитируются с естественных микроострий на катоде, причем локальное поле на их вершинах превышает макроскопическое поле E_0 в β_g раз (β_g – геометрический коэффициент усиления поля), т.е. дается выражением $E_{\text{loc}} = \beta_g E_0$. Плотность тока АЭЭ j_{FE} [А/см²] для локального поля E_{loc} [В/см] рассчитывается по формуле Фаулера–Нордгейма [20]:

$$j_{\text{FE}} = F(\varphi) E_{\text{loc}}^2 \exp(-G(\varphi)/E_{\text{loc}}), \quad (2)$$

$$F \approx \frac{1.55 \cdot 10^{-6}}{\varphi} \exp\left(\frac{9.25}{\varphi^{1/2}}\right), \quad G \approx 6.51 \cdot 10^7 \varphi^{3/2},$$

где φ [эВ] – работа выхода (для расчетов возьмем характерное для металлов значение $\varphi = 4.5$ эВ). Частота АЭЭ (число частиц, эмитируемых за единицу времени с отдельного микроострия) оценивается как $\nu_{\text{FE}} = s j_{\text{FE}}/e$, где s – площадь эмитирующей поверхности. Примем $\beta_g = 54$ (см. анализ ниже) и $s = 10^{-12}$ см². Получим $\nu_{\text{FE}} \approx 2 \cdot 10^{13}$ с⁻¹.

Частоту ионизации (число актов ионизации, осуществляемых тепловым электроном за единицу времени) определим из соотношения $\nu_i = \alpha V$, где α – коэффициент ударной ионизации, а V – скорость дрейфа электронов в газе. Для азота в диапазоне приведенных полей $E/p = 27 - 200$ В/(см·Торр) зависимость α [1/см] от давления p [Торр] и поля E [В/см]

можно аппроксимировать как $\alpha = A p \exp(-Bp/E)$, где $A = 8.8 (\text{см} \cdot \text{Торр})^{-1}$ и $B = 275 \text{ В}/(\text{см} \cdot \text{Торр})$ [24]. Для скорости V [см/с] в азоте при $E/p = = 10\text{--}130 \text{ В}/(\text{см} \cdot \text{Торр})$ можно использовать линейную аппроксимацию $V = \mu E$, где $\mu = K/p$ – подвижность электронов, $K = 3.3 \cdot 10^5 \text{ см}^2 \cdot \text{Торр}/(\text{с} \cdot \text{В})$ [20, 24]. Получим в итоге $\nu_i \approx 2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, что в 10^4 раз меньше частоты АЭЭ. Выполняется неравенство $\nu_{\text{FE}} \gg \nu_i$, которое можно интерпретировать как условие доминирования эмиссионных процессов над ионизационными. Отметим, что субнаносекундный пробой газов атмосферного давления реализуется, как правило, при противоположном неравенстве $\nu_{\text{FE}} \ll \nu_i$.

Поскольку пробой в [18] в анализируемой крайней точке ($p = 40$ атм и $E_0 = 1.1 \text{ МВ}/\text{см}$) происходил при амплитудном значении импульса напряжения, то можно приближенно считать, что указанное значение напряженности не менялось в течение, судя по форме импульса, примерно 150 пс. Вследствие сильной зависимости как ν_{FE} , так и ν_i от поля, все основные процессы развития пробоя происходят на этом временном интервале вблизи максимума импульса напряжения, и можно взять это время в качестве оценки для времени формирования пробоя: $t_f \approx 150$ пс. Интервал между эмиссией отдельных электронов $1/\nu_{\text{FE}}$ составляет 0.05 пс, что обеспечивает эмиссию с отдельного микроострия как минимум 3000 электронов за время t_f (это – без учета влияния объемного заряда ионов; с учетом, как будет показано ниже, число электронов взрывным образом увеличится). Время между актами ударной ионизации $1/\nu_i$ оценивается в 540 пс, что превышает не только время t_f , но и длительность импульса на половине высоты ~ 450 пс. Таким образом, если считать, что поле в промежутке остается однородным, то ионизационные процессы в газе с участием тепловых электронов практически не происходят.

Ионизация газового зазора в рассматриваемых условиях может осуществляться быстрыми электронами, которые регистрировались в экспериментах [18]. Их появление мы связываем с возникновением на катоде плазменных выступов, обеспечивающих выполнение условий убегания электронов. Исходя из сравнения частот ν_{FE} и ν_i , формирование этих выступов должно “запускаться” АЭЭ. При этом мы считаем, что единственным процессом, который позволит обеспечить достаточно высокую плотность тока эмиссии электронов с катода для образования плазменных областей масштаба $z \geq z_{\text{cr}}$ и выравнивания их потенциала с катодом (т.е., фактически, формирования виртуальных острий на катоде) в условиях

радикального замедления процессов ионизационного размножения тепловых электронов в газе с давлением в десятки атмосфер, является ВЭЭ.

Определим сначала, какие условия необходимы для иницирования ВЭЭ за времена меньше t_f без учета влияния объемного заряда в газе, т.е. в вакуумном приближении. Воспользуемся простейшим критерием иницирования ВЭЭ, основанном на оценке времени (t_{EEE}), за которое в вещество катода вкачивается энергия, достаточная для его перехода в плазменное состояние [20, 21]:

$$\int_0^{t_{\text{EEE}}} j_{\text{FE}}^2 dt = \bar{h}, \quad (3)$$

где \bar{h} – так называемое удельное действие, составляющее для металлов примерно $2 \cdot 10^9 \text{ А}^2 \text{ с}/\text{см}^4$ [21]. Возьмем для определенности $t_{\text{EEE}} = 50$ пс (оставляем время $t_f - t_{\text{EEE}} = 100$ пс на последующие стадии развития пробоя); получим тогда, что условие (3) выполняется при довольно высоком значении коэффициента $\beta_g \approx 125$. Считается [28], что при средней шероховатости поверхности катода плотность микровыступов с $\beta_g > 100$ составляет $\sim 10 \text{ см}^{-2}$. В экспериментах [18] катод представлял собой шар радиусом 1 см, а площадь его активной поверхности равнялась примерно 0.03 см^2 (ее радиус ~ 1 мм). Тогда вероятность существования дефекта поверхности с $\beta_g = 125$ оценивается в ~ 0.3 , т.е. она меньше единицы. В такой ситуации на катоде за десятки пикосекунд могут образовываться, самое большее, единичные взрывоэмиссионные центры.

Вспомним теперь, что мы имеем дело не с вакуумом, а плотным газом, в котором может возникать и накапливаться объемный заряд положительных ионов. Такой заряд, при нахождении вблизи поверхности катода, будет усиливать на ней локальное поле и, как следствие, плотность тока АЭЭ. Механизм перехода от АЭЭ в ВЭЭ под влиянием потока дрейфующих к катоду ионов предлагался в [20, 29]. Он дает нижнюю оценку для времени иницирования ВЭЭ в $1/(V_+ \alpha)$, где V_+ – скорость дрейфа ионов. В интересующем нас случае с $p = 40$ атм и $E_0 = 1.1 \text{ МВ}/\text{см}$ аналогичная величина для электронов $1/\nu_i = 1/(V \alpha)$ уже вычислялась; она составляет 540 пс. Скорость ионов на несколько порядков меньше скорости электронов, так что время $1/(V_+ \alpha)$ попадет в не имеющий смысл в контексте настоящей работы временной масштаб. Однако в условиях давления в десятки атмосфер может реализовываться принципиально другой механизм формирования области положительного объемного заряда, обеспечивающий переход от АЭЭ к ВЭЭ за десятки пикосекунд.

кунд для микроострий с весьма умеренными коэффициентами усиления поля $\beta_g = 50-60$.

Учтем, что локальное поле на эмитирующей поверхности катода должно включать в себя поле E_i , создаваемое положительными ионами (оно определяется законом Кулона):

$$E_{loc} = \beta_g E_0 + E_i, \quad E_i = eN_i(t)/(4\pi\epsilon_0 r^2). \quad (4)$$

Здесь ϵ_0 – электрическая постоянная, N_i – число ионов, r – их характерное расстояние от вершины эмиттера. На приведенной в [30] фотографии поверхности катода, использовавшегося в экспериментах [18], видны многочисленные выступы микронного масштаба, так что для вероятного размера эмитирующих электроны острий возьмем величину $l = 1$ мкм.

Ионы возникают в результате ионизации газа автоэмиссионными электронами, которые при инжекции в газ попадают в усиленное поле вблизи вершины микроострия. До накопления существенного объемного заряда оно равно $\beta_g E_0$, что для значений β_g в 50–60 единиц дает ~ 60 МВ/см. Это в 5.5 раз превышает порог убегания и тем самым обеспечивает бесстолкновительное движение электронов в области усиленного поля. В ней автоэмиссионный электрон наберет энергию $w_l \approx e l E_0 \approx 110$ эВ, что совпадает с энергией w_0 , для которой максимальна функция потерь $L(w)$. Размер r_0 бесстолкновительной области можно оценить как масштаб, в котором работа, совершаемая действующей на электрон силой $e\beta_g E_0$, равна w_l . Получим $r_0 \approx l/\beta_g$, что составляет ~ 0.02 мкм. После области усиленного поля электрон попадет в область слабого среднего поля E_0 , где его динамику будет определять сила трения в газе, оцениваемая сверху как nL_{max} . Электрон с начальной энергией $w_l = 110$ эВ потеряет ее на масштабе от 0.1 мкм, став обычным тепловым электроном с энергией в единицы электронвольт. При этом часть энергии он потратит на ионизацию газа, совершив несколько актов ионизации (энергия ионизации молекул азота $eU_i = 15.6$ эВ в 7 раз меньше w_l). Нас будет интересовать первый такой акт, поскольку, в силу быстрого затухания кулоновского поля с расстоянием, основной вклад в усиление поля на катоде будут вносить наиболее близко расположенные к нему частицы. Среднее расстояние, проходимое электроном до момента ионизации, оценим как $r_1 = 1/(n\sigma_i(w))$, где σ_i – сечение ионизации. Максимум сечения ионизации азота (см. [19]) приходится примерно на ту же энергию, что и максимум функции потерь, т.е. на ~ 110 эВ, и состав-

ляет $\sigma_{max} \approx 3 \cdot 10^{-16}$ см². Оценим по нему: $r_1 \approx 1/(n\sigma_{max}) \approx 0.03$ мкм.

Искомое расстояние r от ионов до вершины острия складывается из двух масштабов r_0 и r_1 , что дает оценку $r \approx 0.05$ мкм. Это расстояние оказывается достаточно малым, чтобы обеспечить заметное влияние ионов на распределение поля на катоде. Критически важным для рассматриваемого эффекта является то, что мы имеем дело с плотным газом с $p = 40$ атм. При уменьшении давления до 1 атм масштаб r_1 увеличится в 40 раз. Электрическое поле ионов, спадающее с расстоянием по закону $1/r^2$, станет на эмитирующей поверхности пренебрежимо малым и эффект пропадет.

Число ионов, которое можно считать равным числу автоэмиссионных электронов, дается интегралом

$$N_i(t) = \frac{s}{e} \int_0^t j_{FE}(t) dt.$$

Согласно (4) локальное поле тогда есть

$$E_{loc} = \beta_g E_0 + \frac{s}{4\pi\epsilon_0 r^2} \int_0^t j_{FE} dt.$$

Дифференцируя это выражение по времени t и используя формулу Фаулера–Нордгейма (2), придем к нелинейному обыкновенному дифференциальному уравнению, описывающему самосогласованный рост локального поля на катоде за счет накопления ионов у его поверхности:

$$\frac{dE_{loc}}{dt} = \frac{sFE_{loc}^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \exp\left(-\frac{G}{E_{loc}}\right).$$

Его интегрирование с начальным условием $E_{loc}(0) = \beta_g E_0$ дает:

$$E_{loc}(t) = G \left[\ln \left(\exp\left(\frac{G}{\beta_g E_0}\right) - \frac{sFGt}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) \right]^{-1}. \quad (5)$$

Согласно этому решению поле будет взрывным образом (т.е. быстрее, чем экспоненциально) нарастать со временем, формально обращаясь в бесконечность в момент

$$t_0 \approx \frac{4\pi\epsilon_0 r^2}{sFG} \exp\left(\frac{G}{\beta_g E_0}\right), \quad (6)$$

когда выражение под знаком логарифма в (5) станет равным единице и знаменатель обратится в нуль. Такое сингулярное поведение поля обусловлено тем, что его рост вызывает рост тока АЭЭ. Это, в свою очередь, приводит к увеличению темпа генерации ионов и, следовательно, дальнейшему росту поля, тем самым обеспечивая положительную обратную связь.

Покажем, что условие (3) иницирования ВЭЭ будет выполнено в результате взрывного роста локального поля, т.е. сингулярность в решении (5) обеспечит расходимость интеграла действия. Разложение (5) вблизи момента $t = t_0$ дает в основном порядке:

$$E_{\text{loc}} \approx \frac{4\pi\varepsilon_0 r^2}{sF(t_0 - t)}.$$

Для плотности тока, в свою очередь, имеем:

$$j_{\text{FE}} \approx \frac{16\pi^2\varepsilon_0^2 r^4}{s^2 F(t_0 - t)^2}.$$

Тогда для интеграла действия вблизи особой точки будет: $\int j_{\text{FE}}^2 dt \propto (t_0 - t)^{-3}$, т.е. он расходится, автоматически обеспечивая выполнение неравенства $\int_0^{t_0} j_{\text{FE}}^2 dt > \bar{h}$. В такой ситуации можно считать момент формирования особенности моментом иницирования ВЭЭ, т.е. принять $t_{\text{ЕЕЕ}} = t_0$.

Оценим времена $t_{\text{ЕЕЕ}}$ по формуле (6). В диапазоне $\beta_g = 50-60$ (средний уровень шероховатости поверхности [28]) время запаздывания ВЭЭ снижается от 114 до 16 пс, т.е. укладываются в требуемый интервал $t_f = 150$ пс. Взятые нами выше за основу время $t_{\text{ЕЕЕ}} = 50$ пс соответствует $\beta_g = 54$. Понятно, что число острий с $\beta_g = 50-60$ будет на порядок больше, чем с $\beta_g = 125$ (значение коэффициента усиления поля, требуемое для иницирования ВЭЭ без учета влияния ионов), что обеспечит образование значительного числа взрывоэмиссионных центров.

В результате электрического взрыва вершины микроострия возникает катодный факел – расширяющаяся со скоростью $(1-2) \cdot 10^6$ см/с сферическая область плотной плазмы, эмитирующая в газ поток электронов, ограничиваемый только их объемным зарядом [20, 21]. Иницирование ВЭЭ создаст условия для формирования на катоде плазменного выступа – канала, прорастающего от взрывоэмиссионного центра в сторону анода. Действительно, на полюсах сферической проводящей области во внешнем однородном поле происходит трехкратное усиление его напряженности [31]. Такое усиление, в силу высокой чувствительности частоты ионизации к величине поля, приведет к резкому уменьшению времени $1/\nu_i$ с ~ 540 пс до ~ 1 пс, т.е. до значений, при которых ионизационные процессы “включатся” и обеспечат генерацию плазмы при распространении потока взрывоэмиссионных электронов в сторону анода. Принципиально важно, что такой поток будет выравнивать потенциал плазмы с катодом, что позволяет рассматривать развивающийся плазменный выступ как виртуальное острие на катоде.

Движение границы плазменного выступа будет определяться дрейфом электронов в электрическом поле, являющемся суперпозицией внешнего поля и собственного поля плазменной области. Такая модель эволюции плазменного канала описана, например, в [23]. Важным свойством решений соответствующих уравнений является постоянство радиуса кривизны головки развивающегося канала. Аппроксимируем форму плазменного выступа на катоде половиной вытянутого вдоль направления внешнего поля эллипсоида вращения. Его геометрия тогда будет определяться двумя параметрами – увеличивающейся со временем длиной $z_{\text{pl}}(t)$ и радиусом скругления вершины r_{pl} , который мы будем считать, как и в [23], постоянным. Коэффициент усиления поля на выступе обозначим за β_{pl} . Он зависит только от отношения размеров $x \equiv z_{\text{pl}}/r_{\text{pl}}$:

$$\beta_{\text{pl}}(x) = \frac{(x-1)\sqrt{1-1/x}}{\operatorname{artanh}\sqrt{1-1/x} - \sqrt{1-1/x}} \quad (7)$$

(эта зависимость является следствием решения для распределения поля вокруг проводящего эллипсоида [31]). Скорость прорастания канала определяется уравнением $dz_{\text{pl}}/dt = \mu E_0 \beta_{\text{pl}}(z_{\text{pl}}/r_{\text{pl}})$ с начальным условием $z_{\text{pl}}(0) = r_{\text{pl}}$. Его решение дает с хорошей точностью при $z/r_{\text{pl}} > 10$ выражение для времени, за которое граница плазмы продвигается до точки z :

$$T \approx \frac{r_{\text{pl}}}{\mu E_0} + \frac{r_{\text{pl}}}{\mu E_0} \left[\ln \left(\frac{2}{e} \sqrt{\frac{z}{r_{\text{pl}}}} \right) \right]^2. \quad (8)$$

Видно, что время T существенно зависит от радиуса r_{pl} . Как отмечалось в [23, 25], радиус головки плазменного канала в значительной степени определяется масштабом “зародыша”, из которого он развивается; в нашем случае эту роль играет взрывоэмиссионная плазма. Оценим r_{pl} , принимая во внимание то, что для рассматриваемого сценария развития пробоя длительность этой стадии не должна превышать ~ 100 пс. За, например, 30 пс взрывная плазма (для скорости разлета плазмы возьмем характерное значение $1.5 \cdot 10^6$ см/с [21]) расширится на ~ 0.45 мкм. Параллельно, по закону $\sqrt{6Dt}$ будет происходить диффузионное расширение облака эмитировавших из взрывной плазмы в газ электронов [24]. Здесь $D = 2\mu U_T/3e$ – коэффициент диффузии; U_T [эВ] – тепловая энергия электронов, которая оценивается в 2.2 эВ по формуле $U_T \approx 0.2(E/p)^{2/3}$ [32]. Тогда за те же 30 пс диффузионное расширение даст масштаб ~ 0.5 мкм, близкий к радиусу разлета взрывоэмиссионной плазмы. Наконец, на размер головки начнут оказывать влияние ионизационные процессы. Как мы уже указывали, сферическая

проводящая область обеспечивает трехкратное усиление поля: $\beta_{pl}(1) = 3$ согласно (7). В таком случае характерный ионизационный масштаб $1/\alpha$ резко (в ~ 150 раз) уменьшится до значения в ~ 0.5 мкм. Таким образом, пространственный масштаб для сразу трех разных процессов практически совпадает, что дает нам основание для выбора этого масштаба в качестве радиуса головки канала: $r_{pl} \approx 0.5$ мкм.

Сделаем оценки для времени развития канала T для $z = 1.65$ мм, что соответствует межэлектродному расстоянию. По формуле (8) находим $T \approx 70$ пс, что в сумме со временем в 30 пс на формирование “зародыша” канала и временем $t_{EEE} \approx 50$ пс запаздывания ВЭЭ складывается в требуемые ~ 150 пс на формирование пробоя. До длины в $z_{cr} \approx 46$ мкм, необходимой для массового перехода тепловых электронов в режим убегания, плазменный канал разовьется за 24 пс. К этому моменту будет выполнен энергетический критерий убегания $w > w_{cr}$. Отметим, что полевое условие убегания электронов $E_0\beta_{pl} > E_{cr}$ будет выполнено раньше, за время ~ 10 пс (к моменту, когда $z_{pl} \approx 10r_{pl} \approx 5$ мкм).

Итак, предложенный в настоящей работе механизм иницирования ВЭЭ на катоде, граничащем с плотным газом, обеспечит появление множества плазменных каналов, генерирующих УЭ на пути $z > z_{cr}$ их прорастания к аноду. Без этого механизма, основанного на накоплении положительных ионов у микроострий с умеренными коэффициентами усиления поля $\beta_g = 50-60$, будут развиваться в лучшем случае единичные плазменные каналы, стартовые с микроострий с $\beta_g > 125$, существование которых на порядки менее вероятно. УЭ, пересекая промежуток за малые времена ~ 13 пс (эта оценка соответствует движению электрона от прикатодной области до анода в вакуумном приближении), будут его ионизовать. Важно, что эффективность ионизации линейно растет с ростом плотности газа, так что при прочих равных рост давления от 1 до 40 атм приведет к кратному увеличению образовавшихся электрон-ионных пар. В итоге мы получим равномерную ионизацию всего промежутка и сопутствующее диффузное свечение за времена до 100 пс. В рамки этого сценария развития разряда вполне вписываются наблюдения эволюции свечения, сопровождающего пробой газа высокого давления, методом электронно-оптической хронографии (с использованием высокоскоростной стрик-камеры) [27]. Для азота под давлением в 40 атм при ширине зазора 1.42 мм за время примерно в 80 пс возникало однородное свечение всего промежутка, что можно интерпретировать как зажигание объемного разря-

да в результате ионизации газового зазора посредством УЭ.

Следует отметить, что генерация УЭ и сопутствующего рентгеновского излучения наблюдалась в условиях низкого среднего приведенного электрического поля, сопоставимого с реализуемым в [18], при пробое воздуха атмосферного давления с использованием длинных – субмикросекундных – импульсов напряжения: см., например, [33] и ссылки там. Механизм появления УЭ в таких условиях требует отдельного рассмотрения, в котором важно знать детали распределения поля в промежутке. В отличие от [18], поле в экспериментах [33] не было однородным – его напряженность на катоде (использовались катоды различных конфигураций с сильно отличающимися радиусами кривизны) могла существенно превышать среднее по зазору значение.

Работа Н. М. Зубарева выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 20-08-00172). Работа Г. А. Месяца выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (проект # 19-79-30086).

1. H. Dreicer, Phys. Rev. **115**, 238 (1959).
2. А. В. Гуревич, ЖЭТФ **39**, 1296 (1960).
3. Г. А. Месяц, Ю. И. Бычков, В. В. Кремнев, УФН **107**(6), 201 (1972).
4. Л. П. Бабич, Т. В. Лойко, В. А. Цукерман, УФН **160**(7), 49 (1990).
5. Ю. Л. Станкевич, В. Г. Калинин, ДАН СССР **177**(1), 72 (1967).
6. L. P. Babich, *High-Energy Phenomena in Electric Discharges in Dense Bases*, Futurepast, Arlington (2003).
7. Г. А. Месяц, М. И. Яландин, УФН **189**, 747 (2019).
8. V. Tarasenko, Plasma Sources Sci. Technol. **29**, 034001 (2020).
9. 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**, 085002 (2012).
10. M. I. Yalandin, A. G. Sadykova, K. A. Sharypov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, O. V. Zubareva, and N. M. Zubarev, Phys. Plasmas **27**, 103505 (2020).
11. Д. В. Белоплотов, В. Ф. Тарасенко, Д. А. Сорокин, В. А. Шкляев, ЖТФ **91**(4), 589 (2021).
12. Н. М. Зубарев, Г. А. Месяц, М. И. Яландин, Письма в ЖЭТФ **105**(8), 515 (2017).
13. N. M. Zubarev, M. I. Yalandin, G. A. Mesyats, S. A. Barenholts, A. G. Sadykova, K. A. Sharypov, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, and O. V. Zubareva, J. Phys. D: Appl. Phys. **51**, 284003 (2018).
14. С. Я. Беломытцев, И. В. Романченко, В. В. Рыжов, В. А. Шкляев, Письма в ЖТФ **34**(9), 10 (2008).

15. D. Levko, S. Yatom, V. Vekselman, J.Z. Gleizer, V. Tz. Gurovich, and Ya. E. Krasik, *J. Appl. Phys.* **111**, 013303 (2012).
16. G. A. Mesyats, M. I. Yalandin, N. M. Zubarev, A. G. Sadykova, K. A. Sharyпов, V. G. Shpak, S. A. Shunailov, M. R. Ulmaskulov, O. V. Zubareva, A. V. Kozyrev, and N. S. Semeniuk, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 063501 (2020).
17. N. M. Zubarev, V. Yu. Kozhevnikov, A. V. Kozyrev, G. A. Mesyats, N. S. Semeniuk, K. A. Sharyпов, S. A. Shunailov, and M. I. Yalandin, *Plasma Sources Sci. Technol.* **29**, 125008 (2020).
18. S. N. Ivanov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46**, 285201 (2013).
19. L. R. Peterson and A. E. S. Green, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **1**(6), 1131 (1968).
20. Ю. Д. Королев, Г. А. Месяц, *Автоэмиссионные и взрывные процессы в газовом разряде*, Наука, Новосибирск (1982).
21. Г. А. Месяц, *Взрывная электронная эмиссия*, Физматлит, М. (2011).
22. H. Bethe, *Ann. Phys.* **397**(3), 325 (1930).
23. Э. Д. Лозанский, О. Б. Фирсов, *Теория искры*, Атомиздат, М. (1964).
24. Ю. Д. Королев, Г. А. Месяц, *Физика импульсного пробоя газов*, Наука, М. (1991).
25. Э. М. Базелян, Ю. П. Райзер, *Искровой разряд*, Изд-во МФТИ, М. (1997).
26. Yu. D. Korolev and N. M. Bykov, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **40**(10), 2443 (2012).
27. S. N. Ivanov and V. V. Lisenkov, *J. Appl. Phys.* **124**, 103304 (2018).
28. А. В. Козырев, Ю. Д. Королев, Г. А. Месяц, *ЖТФ* **57**(1), 58 (1987).
29. Г. А. Месяц, *Письма в ЖТФ* **1**(19), 885 (1975).
30. В. В. Лисенков, С. Н. Иванов, Ю. И. Мамонтов, И. Н. Тихонов, *Известия вузов. Физика* **61**(9-2), 180 (2018).
31. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред*, Наука, М. (1982), т. 8.
32. H. Schlumbohm, *Z. Phys.* **184**, 492 (1965).
33. D. A. Sorokin, V. F. Tarasenko, Ch. Zhang, I. D. Kostyrya, J. Qiu, P. Yan, E. Kh. Baksht, and T. Shao, *Laser and Particle Beams* **36**(2), 186 (2018).

Influence of nanoscale parameters on solid-solid phase transformation in Octogen crystal: multiple solution and temperature effect¹⁾

A. M. Roy²⁾

University of Michigan, Materials Science and Engineering, Ann Arbor, MI 48109, USA

Submitted 25 November 2020
Resubmitted 30 December 2020
Accepted 11 January 2021

DOI: 10.31857/S1234567821040078

Phase-field (PF) approach [1, 2] has been widely used to capture various phase transitions (PTs) [3–10]. Recently, it has been realized that the finite width of the interface is an important aspect to discover new phenomena [11–14] and can be used to control PTs for different material systems [15–19]. However, for most of the cases, such scale parameters have been ignored, and corresponding various scale effects and phenomena could not be studied systematically. In the present study, solid-solid PTs via interfacial molten phase have been considered where solid δ -Octogen (O_1) phase partially or completely melts and re-solidifies into solid β -Octogen (O_2) phase in a propagating solid-melt-solid interface [20–24]. Since the transitional molten interface is metastable and temporary, that is why it is called as a virtual melt [17, 25–29]. During virtual melting, two different important dimensionless nanoscale parameters can be defined, e.g., ratios of width and energy of two different interfaces, $\xi_\delta = \delta^{21}/\delta^{s0}$ and $\xi_\Psi = \Psi^{21}/\Psi^{s0}$ which significantly affect the formation of interfacial melt in Octogen [30–32]. These nanoscale parameters ξ_Ψ and ξ_δ can be explicitly defined and easily controlled in our multiphase phase-field (MPF) theory [30–33]. In our current work, we have extended our previous parametric study [31, 32] for different range of nanoscale parameters (ξ_Ψ , ξ_δ) and a MPF parameter Υ_{12} characterizing the interaction of two solid-melt interfaces on the formation of propagating interfacial melt which reveals multiple solutions of barrierless nucleated melt nanostructure and nontrivial nanoscale effects.

Different scale effects and non-trivial phase transformation mechanism has been observed when the solution of Ω has been studied for nanoscale parameters ξ_Ψ and ξ_δ for broad range of non-equilibrium temperature as shown in Fig. 1. For different critical values of the parameters (i.e., ξ_Ψ and ξ_δ) and depending on the energy barrier of the solid-melt interface Υ_{12} , the appearance

of propagating interfacial melt can be either continuous-reversible without the hysteresis or jump-like first-order discontinuous transformation with hysteresis.

Our MPF model and simulation results present a new point of view on solid-solid phase transformation describing the transitive interfacial molten phase for Octogen crystal. The resulted interesting non-trivial evidence of the existence of molten layer in the solid-solid transition way below the melting temperature indicates the general applicability of our MPF model for the case of first-order-like solid-solid transformations and deposition. Additionally, this approach can be utilized to capture PTs in metallic and amorphous systems [34–36] as well as grain-boundary melting [37–39]. Our developed approach is applicable to various PTs [40] such as surface-induced melting [41], martensitic PTs [42–44] and precipitate evolution [45] etc.

The support of LANL (Contract # 104321) and National Science Foundation (Grant # CMMI-0969143) are gratefully acknowledged. The author is grateful to Dr. V. I. Levitas from Iowa State University for his kind guidance and discussion.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021040032

1. L. Q. Chen, *Annu. Rev. Mater. Res.* **32**, 113 (2002).
2. I. Steinbach, *Model. Sim. Mat. Sci. Eng.* **17**, 073001 (2009).
3. A. Artemev, Y. Jin, and A. G. Khachaturyan, *Acta Mater.* **49**, 1165 (2001).
4. A. Basak and V. I. Levitas, *Acta Mater.* **139**, 174 (2017).
5. V. I. Levitas, A. M. Roy, and D. L. Preston, *Phys. Rev. B* **88**, 054113 (2013).
6. A. M. Roy, *JETP Lett.* **112**, 173 (2020).
7. A. M. Roy, *App. Phys. A* **126**, 576 (2020).
8. V. I. Levitas and M. Javanbakht, *Phys. Rev. B* **86**, 140101 (2012).
9. A. Basak and V. I. Levitas, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 201602 (2018).
10. V. I. Levitas and K. Samani, *Phys. Rev. B* **89**, 075427 (2014).

¹⁾Supplementary materials are available for this article at DOI: 10.1134/S0021364021040032 and are accessible for authorized users.

²⁾e-mail: e-mail: arunabhr.umich@gmail.com

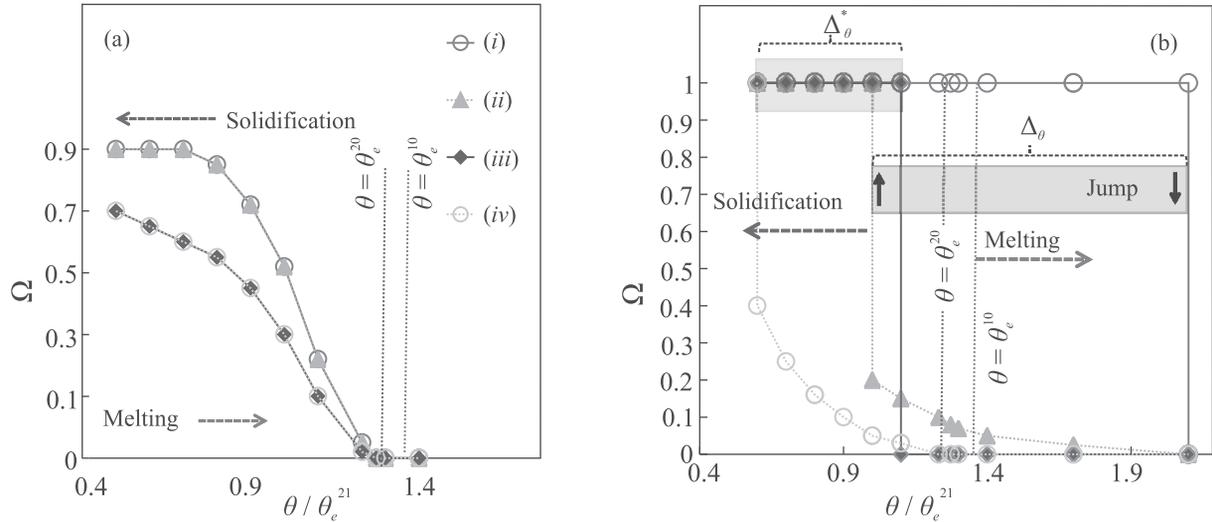


Fig. 1. (Color online) Stationary value of Ω is plotted as a function of θ/θ_e^{21} in the range $0.5 \leq \theta/\theta_e^{21} \leq 2.4$ for (a) – $\xi_\delta = 0.5$, $\Upsilon_{12} = 1$ and (b) – $\xi_\delta = 1.4$, $\Upsilon_{12} = 10$ for (i) $\xi_\Psi = 2.2$ ($O_1O_0O_2$), (ii) $\xi_\Psi = 2.2$ (O_1O_2), (iii) $\xi_\Psi = 3.7$ ($O_1O_0O_2$), and (iv) $\xi_\Psi = 3.7$ (O_1O_2). Continuous and reversible solution occurs for $\xi_\delta = 0.5$, $\Upsilon_{12} = 1$; while the solution for $\xi_\delta = 1.4$, $\Upsilon_{12} = 10$ represents jump-like first-order transformation with hysteresis loops. All the values of Υ_{12} are in $\text{kg}/(\text{nm}\cdot\text{s}^2)$

11. V. I. Levitas, *Scr. Mater.* **149**, 155 (2018).
12. V. I. Levitas and K. Samani, *Nat. Commun.* **2**, 1 (2011).
13. V. I. Levitas and M. Javanbakht, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 175701 (2011).
14. A. Basak and V. I. Levitas, *J. Mech. Phys. Sol.* **113**, 162 (2018).
15. M. A. Caldwell, R. D. Jeyasingh, H. P. Wong, and D. J. Milliron, *Nanoscale* **4**, 4382 (2012).
16. S. Sinha-Ray, R. P. Sahu, and A. L. Yarin, *Soft Matter* **7**, 8823 (2011).
17. V. I. Levitas, Z. Ren, Y. Zeng, Z. Zhang, and G. Han, *Phys. Rev. B* **85**, 220104(R) (2012).
18. V. I. Levitas, *Philos. Trans. R. Soc. A* **371**, 20120215 (2013).
19. V. I. Levitas, B. F. Henson, L. B. Smilowitz, D. K. Zerkle, and B. W. Asay, *J. Appl. Phys.* **102**, 113502 (2007).
20. V. I. Levitas, B. F. Henson, L. B. Smilowitz, and B. W. Asay, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 235702 (2004).
21. V. I. Levitas, B. F. Henson, L. B. Smilowitz, and B. W. Asay, *Phys. Chem. B* **20**, 10105 (2006).
22. B. F. Henson, L. B. Smilowitz, B. W. Asay, and P. M. Dickson, *J. Chem. Phys.* **117**, 3780 (2002).
23. L. B. Smilowitz, B. F. Henson, B. W. Asay, and P. M. Dickson, *J. Chem. Phys.* **117**, 3789 (2002).
24. P. Bowlan, B. F. Henson, L. Smilowitz, V. I. Levitas, N. Suvorova, and D. Oswald, *J. Chem. Phys.* **150**, 064705 (2019).
25. S. L. Randzio and A. J. Kutner, *Phys. Chem. B* **112**, 1435 (2008).
26. V. I. Levitas, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 075701 (2005).
27. V. I. Levitas and R. Ravelo, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **109**, 13204 (2012).
28. P. Ball, *Nature Mater.* **11**, 747 (2012).
29. Y. Peng, F. Wang, Z. Wang, A. M. Alsayed, Z. Zhang, A. G. Yodh, and Y. Han, *Nature Mater.* **14**, 101 (2015).
30. V. I. Levitas and A. M. Roy, *Acta Mater.* **105**, 244 (2016).
31. A. M. Roy, *J. Appl. Phys.* **129**, 025103 (2021); doi: 10.1063/5.0025867.
32. A. M. Roy, *Materialia* **15**, 101000 (2021); doi:10.1016/j.mtla.2021.101000.
33. V. I. Levitas and A. M. Roy, *Phys. Rev. B* **91**, 174109 (2015).
34. J. Luo, *CRC Crit. Rev. Solid State* **32**, 67 (2007).
35. J. Luo and Y.-M. Chiang, *Annu. Rev. Mater. Res.* **38**, 227 (2008).
36. M. Baram, D. Chatain, and W. D. Kaplan, *Science* **332**, 206 (2011).
37. M. Tang, W. C. Carter, and R. M. Canon, *Phys. Rev. B* **73**, 024102 (2006).
38. T. W. Heo, S. Bhattacharyya, and L.-Q. Chen, *Acta Mater.* **59**, 7800 (2011).
39. J. Mellenthin, A. Karma, and M. Plapp, *Phys. Rev. B* **78**, 184110 (2008).
40. V. I. Levitas, *Int. J. Plasticity* **102914** (2020); DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102914.
41. V. I. Levitas and K. Samani, *Phys. Rev. B* **84**, 140103 (2011).
42. V. I. Levitas and M. Javanbakht, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 165701 (2010).
43. A. M. Roy, *Mat. Sci. Res. India* **17**, 03-06 Special Issue (2020).
44. A. M. Roy, *Doctoral dissertation*, **14635**, Iowa State University, Ames (2015).
45. E. Solomon, A. Natarajan, A. M. Roy, V. Sundararaghavan, A. van der Ven, and E. Marquis, *Acta Mater.* **166**, 148 (2019).

To the inhomogeneous bulk state of the $\text{Bi}_{1.08}\text{Sn}_{0.02}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ topological insulator as revealed by ESR of the charge carriers

V. Sakhin, E. Kukovitsky, Yu. Talanov, G. Teitelbaum¹⁾

Kazan E. K. Zavoisky Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, 420029 Kazan, Russia

Submitted 31 December 2020

Resubmitted 8 January 2021

Accepted 9 January 2021

DOI: 10.31857/S123456782104008X

Studies of topological insulators (TI) are currently marked by a growing interest to the origin of strong impact of various defects and local charge inhomogeneities existing in the insulating region between conducting surfaces or edges on the fundamental properties of surface current carriers. Much of this interest is due to the intriguing results obtained for two-dimensional TI, which reveal the failure of conductance quantization [1–4] in two-dimensional topological insulators despite of topological protection and the absence of magnetic impurities.

One of the possible ways to explain the spoiling of conductance quantization and the emergency of backscattering in 2D topological insulators is the coupling of edge modes to charge puddles, naturally present in real samples [5, 6]. The edge current carriers can penetrate into these puddles due to tunneling and interact inelastically with current carriers located in them. Then, after spending some time there, they can tunnel back to the edge which, undoubtedly, should affect their transport properties and, in particular, lead to non-zero backscattering.

An important issue is the detection and analysis of similar inhomogeneities in real three-dimensional TIs, where their presence seems also to be very probable. One of the promising tools for solving such problems is spin resonance of current carriers, which can be used to study local inhomogeneities in the distribution of charge and spin excitations.

The main aim of the present paper is the study of electron spin resonance (ESR) of the bulk charge carriers in one of the most perfect 3D topological insulator $\text{Bi}_{1.08}\text{Sn}_{0.02}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ in order to elucidate the electronic properties and local charge inhomogeneities in the insulating region between conducting surfaces of this compound.

1. In topological insulators, spin excitations, as well as charge ones, can be divided into two types: surface and bulk. The corresponding Hamiltonians were obtained in [7]. The adjustment of these general expressions for the needs of spin-based experiments was carried out in [8, 9]. An important feature of surface spin excitations is that, due to the “spin-momentum locking” effect, even in zero magnetic field, the spin sublevels are split at a distance of the order of hundreds of meV comparable with a bulk gap value, and the observation of spin resonance with a standard ESR spectrometer is impossible. Nevertheless, interesting physical properties as well as some parameters of the Hamiltonian [7–9] can be determined from analysis of the spin resonance on bulk current carriers, which will be presented below.

The spin splitting for them is proportional to the applied magnetic field and may be described by a corresponding effective g -factor in the Zeeman term. The total g -factor includes three contributions. The main contribution results from the strong spin-orbit coupling in TI, which is inherently included within the Hamiltonian [7, 8]. Second (minor) correction come from the free electron g -factor and the third one is due to perturbative contribution from remote energy bands [7].

2. Our investigations of electron spin resonance in the topological insulators were carried out for the isostructural version of Bi telluride compound $\text{Bi}_{1.08}\text{Sn}_{0.02}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ (BSSTS). The studied single crystals were grown using the procedure described in [10]. It is necessary to indicate that the compensation for the last of native defects present was achieved through 1% Sn substitution for Bi. The comprehensive characterization of the grown single crystals revealed [11, 12] that their structure, transport and magnetotransport properties were similar to that published in [10].

3. ESR spectra were recorded using the standard X-band ($9.2 \div 9.6$ GHz) spectrometer Bruker BER-418s in the temperature range from 1.4 up to 100 K. The weak spin resonance signals were observed in fields of

¹⁾e-mail: grteit@kfti.knc.ru; grteit@yahoo.com

150–250 Oe at temperatures below 15 K. ESR in such weak magnetic fields corresponds to unusually large values of the g -factors of current carriers, which indicates a strong spin-orbit interaction characteristic of topological insulators. While the positions of the observed ESR signals are independent on the orientation of external field in the ab plane they strongly depend on its orientation relative to the crystal axis c normal to surface of the crystalline sample.

It should be noted that in some samples we observed two ESR signals at the fields in the vicinity of 150 and 170 Oe correspondingly. The positions of these signals strongly depend on the orientation of the magnetic field relative to the basal ab plane of the crystal. We assign them to holes and to electrons correspondingly.

4. Let us turn now to the angular dependence of the spin resonance spectra on the orientation of the magnetic field relative to the c axis (characterized by the angle θ) for samples which clearly reveal the superposition of two different ESR lines corresponding to holes and to electrons. From the analysis of the observed spectra using for the angular dependence of g -factor of each superimposed line the standard expression $g^2 = g_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + g_{\perp}^2 \sin^2 \theta$ it follows that for holes $g_{\perp} = 28.3 \pm 1$; $g_{\parallel} = 47.4 \pm 1$ and for electrons $g_{\perp} = 26.4 \pm 1$; $g_{\parallel} = 44.7 \pm 1$. The strong temperature dependence of the lines should be noted, the intensity of which rapidly decreased with increasing temperature. At temperatures above 15 K, the lines became unobservable.

The analysis of the integral ESR signal intensity reveals very interesting circumstance. Instead of the temperature independence expected in accordance with the Pauli law, the integral intensity of the spin resonance signal from the current carriers grows rapidly upon lowering temperature in a way similar to Curie-like dependence. For the system without any local magnetic moments such an unusual behaviour may be considered as an indication that the bulk charge carriers are arranged into the ensemble of nanosized metal particles (droplets) randomly distributed in the bulk of sample. Indeed, as it was shown by Gor'kov and Eliashberg [14], that if the size of droplets is small enough to lead to discreteness of the energy levels of the quasiparticles forming them, then at temperatures smaller than the spacing between the levels, their magnetic susceptibility obeys the Curie law.

5. The droplets can appear due to compensating doping of topological insulators, which suppresses bulk conductivity. As a result, charged defects appear in the

TI structure giving rise to local distortions of the forbidden gap, which are anomalously strong when the screening is suppressed due to the small number of current carriers [13].

It is not excluded that such droplets when residing near the surface may influence the surface current carriers.

The authors are grateful to Russian Foundation for Basic Research for the partial support of our work through grant # 20-02-00910.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021040044

1. M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Bühmann, L.W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 5851 (2007).
2. A. Roth, C. Brune, H. Bühmann, L.W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **325**, 5938 (2009).
3. L. Du, I. Knez, G. Sullivan, and R.R. Du, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 096802 (2015).
4. S. Wu, V. Fatemi, Q.D. Gibson, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. J. Cava, and P. Jarillo-Herrero, *Science* **359**, 76 (2018).
5. J.I. Väyrynen, M. Goldstein, and L.I. Glazman, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 216402 (2013).
6. J.I. Väyrynen, M. Goldstein, Y. Gefen, and L.I. Glazman, *Phys. Rev. B* **90**, 115309 (2014).
7. Ch.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Zh. Fang, and Sh.-Ch. Zhang, *Phys. Rev. B* **82**, 045122 (2010).
8. M. Orlita, B. A. Piot, G. Martinez, N. K. Sampath Kumar, C. Faugeras, M. Potemski, C. Michel, E. M. Hankiewicz, T. Brauner, S. Schreyeck, C. Brüne, H. Bühmann, and L.W. Molenkamp, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 186401 (2015).
9. O. Ly and D.M. Basko, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 155801 (2016).
10. S.K. Kushwaha, I. Pletikosić, T. Liang et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **7**, 11456 (2016); doi: 10.1038/ncomms11456.
11. V. Sakhin, E. Kukovitskii, N. Garifyanov, R. Khasanov, Yu. Talanov, and G. Teitel'baum, *J. Magn. Magn. Mater.* **459**, 290 (2018).
12. V. Sakhin, E. Kukovitsky, A. Kiiamov, R. Khasanov, Yu. Talanov, and G. Teitel'baum, *JETP Lett.* **109**(7), 465 (2019).
13. B.I. Shklovskii and A.L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, N.Y., Tokyo (1984).
14. L.P. Gor'kov and G.M. Eliashberg, *JETP* **48**, 1407 (1965).

Влияние электронной делокализации на поглощение “без отдачи” γ -квантов в варвиките $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$

Ю. В. Князев⁺¹⁾, О. А. Баюков⁺, М. С. Шустин⁺, Д. В. Балацкий*, Н. А. Бельская[×], С. А. Громилов[°],
А. С. Сухих[°], В. В. Руденко⁺, Н. В. Казак⁺¹⁾

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

*Институт химии Дальневосточного отделения РАН, 690022 Владивосток, Россия

[×]СибГУ им. М. Ф. Решетнева, 660037 Красноярск, Россия

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

Поступила в редакцию 25 декабря 2020 г.

После переработки 12 января 2021 г.

Принята к публикации 13 января 2021 г.

Метод мессбауэровской спектроскопии использован для исследования динамических особенностей кристаллической решетки порошка монокристаллов варвикита $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ в температурном интервале 4.2–505 К. По температурной зависимости вероятности эффекта Мессбауэра в приближении тонкого поглотителя определена температура Дебая ($\Theta_D = 260$ К). Обнаружено, что в области температур 260–505 К происходит электронная делокализация, которая обусловлена быстрым электронным обменом между соседними катионами Fe^{3+} и Fe^{2+} . В результате образуются катионы железа со смешанной валентностью ($\text{Fe}^{2.5+}$). Этот процесс коррелирует с изменением упругих свойств решетки. Такая корреляция приводит к резкому уменьшению эффекта поглощения без отдачи γ -квантов кристаллической решеткой в области 260–400 К.

DOI: 10.31857/S1234567821040091

I. Введение. В первые десятилетия после открытия Р. Мессбауэром эффекта поглощения гамма-квантов без отдачи [1, 2] проводилось большое число экспериментов по изучению динамики кристаллической решетки твердых тел [3–7]. Прямая взаимосвязь фононного спектра вещества и вероятности поглощения без отдачи гамма-квантов кристаллической решеткой описывается моделью Дебая и может быть выражена с помощью известного соотношения [8]:

$$f = \exp \left[- \frac{3}{4} \frac{E_\gamma^2}{Mc^2 k_B \Theta_D} \times \left(1 + 4 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^2 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x dx}{e^x - 1} \right) \right], \quad (1)$$

M – масса атома ^{57}Fe , c – скорость света в вакууме, k_B – постоянная Больцмана, E_γ – энергия гамма-излучения (14.4 кэВ для ^{57}Fe), Θ_D – температура Дебая, $x = h\omega/k_B T$ (h – постоянная Планка, ω – частота упругих колебаний). С учетом того, что в выражение вероятности эффекта входит температура Дебая (Θ_D), мессбауэровская спектроскопия может

быть использована для анализа структурных фазовых переходов различного рода.

Наиболее известным примером применения мессбауэровской спектроскопии для анализа локальных динамических процессов является исследование вблизи сегнетоэлектрического перехода в BaTiO_3 со структурой перовскита [9]. Было показано, что резкое изменение вероятности процесса без отдачи вблизи температуры фазового перехода происходит в результате небольшого смещения атомов Ti внутри кислородного октаэдра, которое приводит к появлению поперечных фононных мод, энергия которых аномально мала. Рост вероятности возбуждения таких фононных колебаний и приводит к уменьшению вероятности эффекта Мессбауэра [3, 10].

Несколько меньшее распространение получили работы, посвященные изучению явления поглощения без отдачи в области магнитного перехода [11–13]. Благодаря использованию эффекта Мессбауэра в металллическом железе [11] удалось впервые показать, как магнитные взаимодействия между атомами железа приводят к уменьшению среднеквадратичного смещения атомов и резкому увеличению вероятности поглощения без отдачи.

¹⁾yuk@iph.krasn.ru; nat@iph.krasn.ru

Несмотря на вышесказанное, в недавней работе [14] авторами было отмечено, что “мессбауэровская спектроскопия на волне развития других методов изучения локальной структуры вещества оказалась незаслуженно забытой при изучении динамических процессов кристаллической решетки в твердом теле”. Дальнейшее развитие методики ядерного гамма-резонанса связано с появлением источников синхротронного излучения [15, 16]. Например, неупругое ядерное рассеяние позволяет детально изучить упругие свойства вещества путем прямого измерения фоновых спектров [17–19].

В данной работе мы исследовали особенности динамики кристаллической решетки порошка монокристаллов $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ со структурой варвикита методом мессбауэровской спектроскопии в интервале температур 4.2–505 К. Особенностью этого материала является наличие двух кристаллографически неэквивалентных позиций, занятых атомами переходных металлов. Поскольку степень искажения локального окружения в этих позициях различна, их вклады в упругие свойства кристалла могут сильно отличаться.

С прикладной точки зрения исследуемый образец имеет перспективу использования в накопителях энергии. Изучение электрохимических свойств показало высокую эффективность композитов на основе FeVO_4 для применения в качестве анода [20]. В работе [21] проведена характеристика магнитных и электрических свойств монокристаллов с малой степенью замещения $\text{Fe}_{1.91}\text{V}_{0.09}\text{VO}_4$. С помощью мессбауэровской спектроскопии при комнатной температуре обнаружены катионы железа со смешанным зарядовым состоянием $\text{Fe}^{2.5+}$, аналогично Fe_2VO_4 [22]. Здесь важно отметить, что незамещенный Fe_2VO_4 изучен достаточно подробно [22–27] и обладает весьма интересными электронными и магнитными свойствами. Ниже $T = 317$ К в Fe_2VO_4 электроны локализуются на катионах железа с формированием двух зарядовых состояний Fe^{3+} и Fe^{2+} . При этом катионы Fe^{2+} предпочитают кристаллографические позиции сжатого октаэдра (M2), а катионы Fe^{3+} располагаются в позициях M1 (рис. 1). Это предпочтение разновалентных катионов к неэквивалентным позициям рассматривается как зарядовое упорядочение [22, 25]. В результате формируется несоразмерная сверхструктура, состоящая из электрических диполей [25, 26]. Поскольку известно, что зарядовое упорядочение при определенных условиях может являться причиной сегнетоэлектричества [28], то динамика кристаллической решетки подобных материалов заслуживает более тщательного исследования.

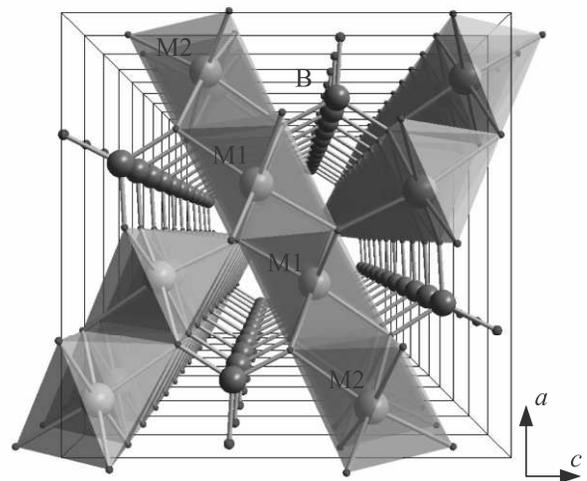


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кристаллическая структура варвикита $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ в проекции на ac -плоскость. Неэквивалентные кристаллографические узлы M1 и M2 и атомы бора обозначены. Атомы кислорода находятся в вершинах октаэдров

II. Образцы и методы. Монокристаллы варвикита $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ были получены раствор-расплавным методом. Синтез подробно описан в работе [21]. Рентгеноструктурный анализ проведен на дифрактометре *BRUKER X8* (MoK α -излучение, графитовый монохроматор, CCD-детектор ApexII) при температурах 100 и 390 К. Температура образца контролировалась при помощи потокового азотного криостата *Cryostream 800Plus (Oxford Cryosystems)*. Стратегия съемки состояла из стандартных $0.5^\circ \phi$ - и ω -сканов. Сбор первоначальных данных, уточнение параметров элементарной ячейки, интегрирование и введение поправки на поглощение были выполнены в пакете программ *Bruker Apex2 V.2013.6-2 (Bruker Advanced X-ray Solutions, Madison, Wisconsin, USA)*. Полученный массив данных обрабатывался в программе *Olex2 v.1.2.10* [29] с использованием *SHELXT 2014/5* [30] для расшифровки и *SHELXL 2018/3* [30] для уточнения кристаллической структуры.

Мессбауэровские спектры измерены на порошке монокристаллов варвикита $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ с плотностью 7–10 мг/см² по содержанию железа. Измерения в интервале 4.2–300 К выполнены на спектрометре MC-1104Ем (НИИ физики ЮФУ) в геометрии пропускания с радиоактивным источником $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$ (АО “Ритверц”) с использованием криостата *CFSG-311-MESS* с образцом в обменном газе на базе криорефрижератора замкнутого цикла Гиффорда–

МакМагона. Съемка мессбауэровских спектров в высокотемпературной области (350–505 К) выполнена на спектрометре *Wissel MB-550* (Германия), в геометрии пропускания с источником γ -излучения $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$. В качестве нагревательного элемента выступала печь *Wissel MBF-1100*. Контроль температуры осуществлялся с помощью контроллера *TR-55*. Запрессованный образец помещался между двумя керамическими пластинами (BN) и располагался в стеклянной трубке печи.

Обработка спектров была выполнена в два этапа. На первом этапе определялись возможные неэквивалентные позиции железа в образце с помощью расчета распределений вероятностей квадрупольных расщеплений и сверхтонких полей. В соответствии с полученными результатами формировался предварительный модельный спектр. На следующем этапе модельный спектр подгонялся к экспериментальному при варьировании всего набора сверхтонких параметров методом наименьших квадратов в линейном приближении. Величины химических сдвигов приведены относительно металлического железа (αFe).

III. Результаты. Кристаллическая решетка образца показана на рис. 1. Параметры решетки и объем элементарной ячейки приведены в табл. 1. Полный набор кристаллографических данных де-

Таблица 1. Параметры элементарной ячейки монокристалла $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ при температурах 100 и 390 К

T , К	100	390
a , Å	9.2410 (11)	9.255 (10)
b , Å	3.1672 (3)	3.1786 (14)
c , Å	9.3833 (12)	9.401 (4)
V , Å ³	274.63 (5)	276.6 (2)
Пространственная группа	$Pnma$	$Pnma$
Z	4	4

понирован в Кембриджской базе структурных данных (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures>), номера CCDC 2051305 (100 К) и CCDC 2051306 (390 К). Здесь отметим, что $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ не испытывает структурных переходов, и ромбическая симметрия (пространственная группа $Pnma(62)$) сохраняется в интервале 390–100 К. Уточнение заселенностей показало, что узлы M1 и M2 совместно заняты катионами железа и вандия в следующих соотношениях: M1(0.87Fe+0.13V) и M2(0.88Fe+0.12V).

Мессбауэровские спектры $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$, полученные в интервале 4.2–505 К, показаны на рис. 2. Измерения в широком интервале температур позволяют исследовать динамику кристаллической решетки.

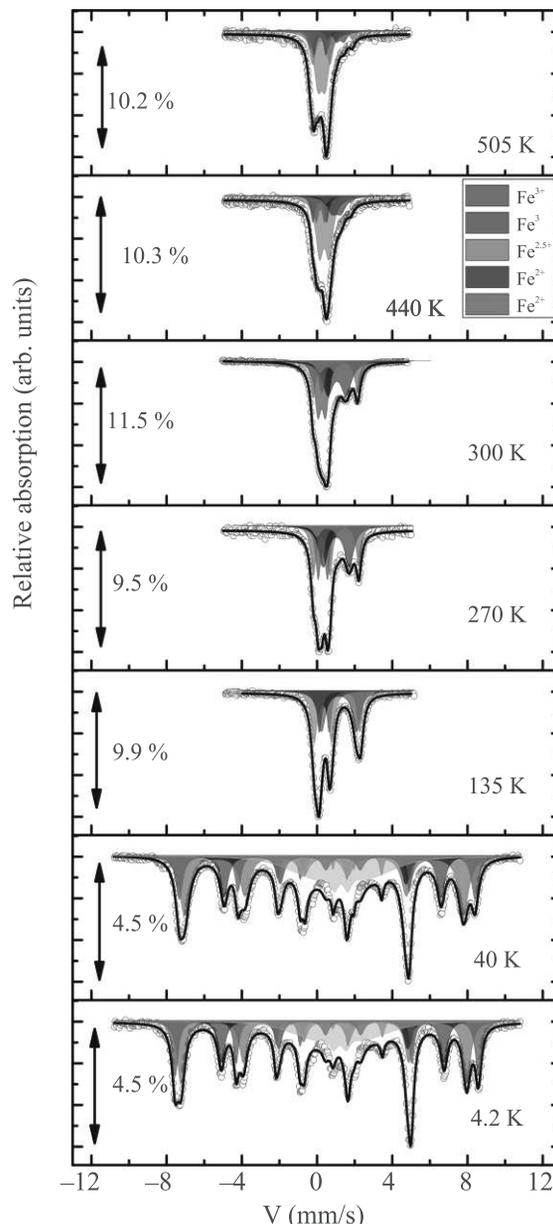


Рис. 2. (Цветной онлайн) Мессбауэровские спектры $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ в интервале 4.2–505 К. Кружками показаны экспериментальные данные. Сплошной линией показан результат обработки спектров

ки. Однако сначала рассмотрим некоторые аспекты тонкой структуры образца.

Зеemanовские секстеты, обусловленные магнитным упорядочением, сохраняются в интервале 4.2–125 К. Это согласуется с температурой ферромагнитного упорядочения ($T_N = 130$ К), определенной по данным магнитометрических измерений [21]. При $T = 4.2$ К спектр состоит из четырех секстетов, попарно относящихся к двух- ($IS \approx 1.2$ мм/с) и трех-

валентным катионам железа ($IS \approx 0.5$ мм/с), занимающих две кристаллографически неэквивалентные позиции [31]. Кроме этого, наблюдается секстет двухвалентного железа с сильно уширенными линиями и низкой величиной сверхтонкого поля $H_{hf} = 140$ кЭ. Подобное значение сверхтонкого поля наблюдалось в незамещенном Fe_2VO_4 [22, 32]. Состояние железа с такой низкой величиной сверхтонкого поля может быть как проявлением сильных ковалентных эффектов [33], так и следствием геометрической фрустрации, которой сильно подвержена структура варвикита [34]. Фрустрация является свойством самой кристаллической структуры варвикита и может приводить к потере дальнего магнитного порядка при определенных условиях [31, 35].

Далее мы сосредоточимся на взаимосвязи зарядовой и колебательной подсистем $Fe_{1.75}V_{0.25}VO_4$. Выше 135 К вид мессбауэровских спектров указывает на парамагнитное состояние вещества. В интервале 135–260 К спектры состоят из четырех дублетов, которые по величине химического сдвига соответствуют двух- и трехвалентным катионам железа в октаэдрическом кислородном окружении. Дальнейший рост температуры приводит к возникновению состояния железа со смешанной валентностью $Fe^{2.5+}$ ($IS \approx 0.5–0.7$ мм/с). Это объясняется коллективизацией электрона между двумя соседними катионами железа в позициях M1 и M2. По нашим данным, такое состояние существует во всем интервале температур выше 260 К. Если сравнивать это явление с переходом Вервея в магнетите [36] и с “зарядовым упорядочением” в Fe_2VO_4 [22, 32], то можно отметить, что переход Вервея и “зарядовое упорядочение” в Fe_2VO_4 сопровождаются аномалиями электропроводности, что в замещенном варвиките не было обнаружено [21].

Площадь спектра при данной температуре эквивалентна величине эффекта Мессбауэра, поэтому для оценки ее величины использовано интегрирование накопленного сигнала резонансных γ -квантов по всем каналам анализатора мессбауэровского спектрометра с учетом спектрального фона. Нормируя полученные значения на значение площади при 4.2 К (A_0), мы получили температурную зависимость относительной величины эффекта A/A_0 , которая показана в виде кружков на рис. 3. Логарифмируя выражение (1) в области температур $T > \Theta_D/2$, получаем выражение для определения температуры Дебая [37, 7, 38]:

$$\frac{d \ln f}{dT} \propto \frac{d \ln A}{dT} = -\frac{3E_\gamma^2}{Mc^2 k_B \Theta_D^2}. \quad (2)$$

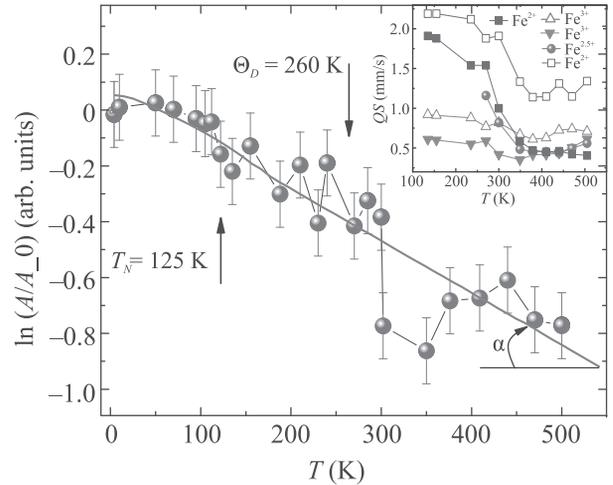


Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурная зависимость вероятности эффекта Мессбауэра в логарифмическом масштабе. Сплошная линия показывает зависимость в соответствии с моделью Дебая. Значение Θ_D определено по углу наклона сплошной линии $\text{tg}(\alpha) = \frac{d \ln A}{dT} = 0.00201$. На вставке показана температурная зависимость квадрупольного расщепления спектральных компонент

Тогда температура Дебая, полученная согласно (2), составляет $\Theta_D = 260$ К. Эта величина несколько меньше Θ_D для других кристаллов со структурой варвикита [39, 40]. Таким образом, происходит некоторое “размягчение” решетки, в отличие, например, от замещения Se атомами серы в $FeSe_{0.91}S_{0.09}$, которое привело к двукратному росту Θ_D [41].

Используя значение Θ_D , можно оценить некоторые параметры, характеризующие упругие свойства кристалла. Так, по определению Θ_D максимальная частота фононных колебаний составляет $\omega_m = k_B \Theta_D / h = 3.62 \cdot 10^{13}$ Гц. Оценка скорости упругих колебаний в среде, V_m , может быть вышолнена с помощью выражения $\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3q N_A \rho}{4\pi M} \right]^{1/3} \cdot V_m$ [42]. Здесь q – количество атомов в элементарной химической формуле (для $Fe_{1.75}V_{0.25}VO_4$ $q = 7$), N_A – постоянная Авогадро, ρ – плотность среды (для $Fe_{1.75}V_{0.25}VO_4$ по данным рентгеновской дифракции $\rho = 4.448$ г/см³), M – молярная масса (186 г/моль). Для рассматриваемого образца скорость распространения упругих колебаний составляет 1880 м/с, что несколько меньше, чем в веществах с ромбической кристаллической решеткой [42].

В высокотемпературной области наблюдается сильное уменьшение поглощения без отдачи с дальнейшим возвращением на линейную зависимость. Этот процесс проявляется в области 260–505 К и может быть разделен на два температурных интер-

вала: 1) 260–400 К, когда степень делокализации электрона растет медленно, и коррелирует с поведением зависимости $QS(T)$, показанной на вставке к рис. 3; 2) 400–505 К с резким ростом степени делокализации общего для атомов железа электрона. Это хорошо иллюстрируется температурной зависимостью заселенности компонент спектров с разными зарядовыми состояниями на рис. 4.

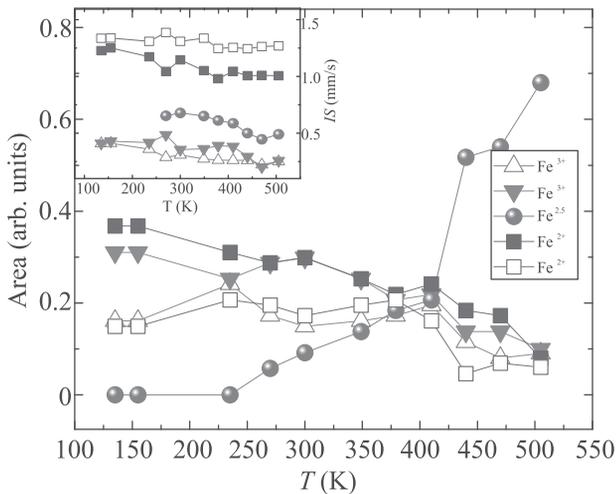


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурная зависимость заселенности зарядовых состояний катионов железа в $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$. На вставке показана температурная зависимость изомерного сдвига спектральных компонент

В первом интервале наблюдается существенное отклонение зависимости $\ln(A/A_0)(T)$ от линейной, предсказываемой в рамках модели Дебая. Подобное поведение величины эффекта Мессбауэра характерно для сегнетоэлектриков в области сегнетоэлектрического перехода вследствие появления мягких фоновых мод и ангармонизма колебаний атомов в решетке [9, 14]. Поскольку в $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ структурный переход в интервале 100–390 К не наблюдается, то причиной резкого уменьшения вероятности поглощения без отдачи γ -квантов, возможно, является сильная связь электронной и фоновых подсистем. По всей видимости, в этой области происходит перестройка спектра колебательных мод совместно с изменением электронной структуры при коллективизации электронов и образования состояний $\text{Fe}^{2.5+}$.

Во втором выделенном интервале соответствие между экспериментальной и теоретической зависимостями поглощения без отдачи восстанавливается. По всей видимости, в этом интервале происходит возбуждение всех колебательных мод в системе. Это позволяет предположить, что существенные отклонения зависимости $\ln(A/A_0)(T)$ от линейной

при температурах 260–400 К связаны с перестройкой колебательных спектров. Качественное понимание особенностей перестройки фоновых спектров можно получить, аппроксимируя различные температурные области интервала 260–505 К линейными зависимостями, которые бы характеризовали упругие параметры системы на каждом интервале. В таком подходе, увеличение угла наклона (α) функции $\ln(A/A_0)(T)$ в области 260–400 К указывает на уменьшение жесткости решетки. Таким образом, вклад быстрого электронного обмена имеет признаки фазового перехода без изменения симметрии решетки и требует дополнительного изучения. По всей видимости, электронная делокализация приводит к увеличению заселенности низкоэнергетических фоновых мод, которые определяют упругие свойства решетки на этом интервале.

Отметим, что в процессе взаимной перестройки электронной структуры и колебательных характеристик в температурном интервале 260–505 К возможно влияние электронной и фоновых подсистем друг на друга. С одной стороны, делокализация электрона может приводить к изменению упругих свойств решетки. С другой стороны, колебания (в том числе ангармонические) катионов могут приводить к выравниванию энергий электрона на соседних катионах и способствовать коллективизации электронов.

IV. Заключение. Таким образом, по данным мессбауэровской спектроскопии определена температура Дебая для монокристаллов $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ $\Theta_D = 260$ К. Наблюдаемое увеличение степени делокализации электрона между соседними катионами железа, вероятно, связано с температурным уменьшением порога возбуждения быстрого электронного обмена. Обнаруженная взаимосвязь электронной и колебательной подсистем может быть обусловлена, как изменением упругих связей пар катионов железа при обобществлении электрона, так и сильным электрон-фононным взаимодействием в системе. В первом случае изменение спектра фоновых мод происходит исключительно за счет особенностей локализованных электронных состояний, чего, как уже было отмечено, не наблюдалось, тогда как второй случай затрагивает зонные состояния электронов и, как ожидается, должен приводить к модификации проводящих свойств соединения. Поэтому мы считаем, что сильная связь электронной и фоновых подсистем в интервале температур $T = 260$ –400 К обусловлена изменением упругих свойств решетки, вследствие делокализации электронов. Отметим, что возможно и обратное влияние:

возбужденные колебания в решетке (в том числе ангармонические) могут способствовать уменьшению энергетического барьера между разными электронными состояниями и выравниванию энергий двух соседних узлов и, как следствие, коллективизации электронов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (проект МК-2339.2020.2) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ-20-02-00559-а).

1. R. L. Mössbauer, *Naturwissenschaften* **45**, 538 (1958).
2. R. L. Mössbauer, *Z. Phys.* **151**, 124 (1958).
3. Č. Muzikář, V. Janovec, and V. Dvořák, *Physica Status Solidi B. Basic Solid State Physics* **3**, K9 (1963).
4. V. A. Bokov and V. P. Romanov, and V. V. Chekin, *Fizika Tverdogo Tela* **7**, 1886 (1965).
5. V. Chekin, V. Romanov, B. Verkin, and V. Bokov, *Pis'ma v ZhETF* **2**, 186 (1965).
6. T. Kobayashi and K. Fukumura, *Nuclear Instruments and Methods* **180**, 549 (1981).
7. R. D. Ernst, D. R. Wilson, and R. Herber, *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 1646 (1984).
8. M. Eibschütz, S. Shtrikman, and D. Treves, *Phys. Rev.* **156**, 562 (1967).
9. V. Bhide and M. Multani, *Physical Review* **139**, A1983 (1965).
10. A. Jain, S. Shringi, and M. Sharma, *Phys. Rev. B* **2**, 2756 (1970).
11. B. Kolk, A. Bleloch, and D. Hall, *Hyperfine Interactions* **29**, 1377 (1986).
12. J. Fontcuberta, *Physica Status Solidi (b)* **139**, 379 (1987).
13. K. Sharma, V. R. Reddy, A. Gupta, S. Kaushik, and V. Siruguri, *J. Phys. Condens. Matter* **24**, 376001 (2012).
14. M. Podgórna, J. Żukrowski, I. Jankowska-Sumara, A. Majchrowski, and K. Berent, *Physica Status Solidi (b)* **254**, 1700137 (2017).
15. I. S. Lyubutin, S. Starchikov, A. G. Gavriliuk, I. Troyan, Y. A. Nikiforova, A. Ivanova, A. Chumakov, and R. Rüffer, *JETP Lett.* **105**, 26 (2017).
16. Y. V. Knyazev, A. Chumakov, A. Dubrovskiy, S. V. Semenov, S. S. Yakushkin, V. Kirillov, O. N. Martyanov, and D. A. Balaev, *JETP Lett.* **110**, 613 (2019).
17. V. Belyakov, *Pis'ma v ZhETF* **67**, 9 (1998).
18. A. Chumakov, A. Barla, R. Rüffer, J. Metge, H. Grünsteudel, H. Grünsteudel, J. Plessel, H. Winkelmann, and M. Abd-Elmeguid, *Phys. Rev. B* **58**, 254 (1998).
19. R. Pradip, P. Piekarz, D. G. Merkel, J. Kalt, O. Waller, A. I. Chumakov, R. Rüffer, A. M. Oleś, K. Parlinski, T. Baumbach, and S. Stankov, *Nanoscale* **11**, 10968 (2019).
20. M. Dong, Q. Kuang, X. Zeng, L. Chen, J. Zhu, Q. Fan, Y. Dong, and Y. Zhao, *J. Alloys Compd.* **812**, 152165 (2020).
21. A. Balaev, O. Bayukov, A. Vasilev, D. Velikanov, N. Ivanova, N. Kazak, S. Ovchinnikov, M. Abd-Elmigid, and V. Rudenko, *ZhETF* **124**, 1103 (2003).
22. A. Douvalis, V. Papaefthymiou, A. Moukarika, T. Bakas, and G. Kallias, *J. Phys. Condens. Matter* **12**, 177 (2000).
23. N. Suda, K. Kohn, and S. Nakamura, *Ferroelectrics* **286**, 155 (2003).
24. M. Sánchez-Andújar, J. Mira, B. Rivas-Murias, S. Yáñez-Vilar, N. Biskup, J. Rivas, and M. A. Señaris-Rodríguez, *IEEE Transactions on Magnetics* **44**, 2989 (2008).
25. M. Angst, P. Khalifah, R. Hermann, H. Xiang, M.-H. Whangbo, V. Varadarajan, J. W. Brill, B. C. Sales, and D. Mandrus, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 086403 (2007).
26. S. Bland, M. Angst, S. Adiga, V. Scagnoli, R. Johnson, J. Herrero-Martin, and P. Hatton, *Phys. Rev. B* **82**, 115110 (2010).
27. H. Yang, H. Tian, Y. Song, Y. Qin, Y. Zhao, C. Ma, and J. Li, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 016406 (2011).
28. J. van Den Brink and D. I. Khomskii, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 434217 (2008).
29. O. Dolomanov, L. Bourhis, R. Gildea, J. Howard, and H. Puschmann, *J. Appl. Crystallogr.* **42**, 339 (2009).
30. G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr. A* **71**, 3 (2015).
31. I. Lyubutin, N. Y. Korotkov, K. Frolov, N. Kazak, M. Platunov, Y. V. Knyazev, L. Bezmaternykh, S. Ovchinnikov, A. Arauzo, and J. Bartolomé, *J. Alloys Compd.* **642**, 204 (2015).
32. A. Douvalis, V. Papaefthymiou, A. Moukarika, and T. Bakas, *Hyperfine Interactions* **126**, 319 (2000).
33. G. Abramova, Y. Knyazev, O. Bayukov, and S. Kubrin, *Fizika Tverdogo Tela* **63**, 69 (2021).
34. A. Akrap, M. Angst, P. Khalifah, D. Mandrus, B. C. Sales, and L. Forró, *Phys. Rev. B* **82**, 165106 (2010).
35. Y. V. Knyazev, N. Kazak, M. Platunov, N. Ivanova, L. Bezmaternykh, A. Arauzo, J. Bartolomé, and S. Ovchinnikov, *J. Alloys Compd.* **642**, 232 (2015).
36. E. Verwey, *Nature* **144**, 327 (1939).
37. R. H. Herber and D. Johnson, *Inorg. Chem.* **18**, 2786 (1979).

38. R. Giovanelli and A. Orefice, *Phys. Lett. A* **298**, 279 (2002).
39. M. Continentino, A. Pedreira, R. Guimaraes, M. Mir, J. Fernandes, R. Freitas, and L. Ghivelder, *Phys. Rev. B* **64**, 014406 (2001).
40. N. V. Kazak, M. S. Platunov, Y. V. Knyazev, N. B. Ivanova, O. A. Bayukov, A. D. Vasiliev, L. N. Bezmaternykh, V. I. Nizhankovskii, S. Y. Gavrilkin, K. V. Lamonova, and S. G. Ovchinnikov, *J. Magn. Mater.* **393**, 316 (2015).
41. K. V. Frolov, I. S. Lyubutin, D. A. Chareev, and M. Abdel-Hafiez, *JETP Lett.* **110**, 562 (2019).
42. O. L. Anderson, *J. Phys. Chem. Solids* **24**, 909 (1963).

Holographic model of exciton condensation in double monolayer Dirac semimetal

A. Pikalov¹⁾

Moscow Institute of Physics and Technology, 141700 Dolgoprudny, Russia

Institute for Theoretical and Experimental Physics, 117259 Moscow, Russia

Submitted 21 December 2020
Resubmitted 21 December 2020
Accepted 31 December 2020

DOI: 10.31857/S1234567821040108

We consider a holographic model of exciton condensation in double monolayer Dirac semimetal. Exciton is a bound states of an electron and a hole. Being Bose particles, excitons can form a Bose–Einstein condensate. Exciton condensation might be easier to achieve in case we have electrons and holes in different layers of a double layer two dimensional structure. An insulator between the layers prevents electron and holes from annihilation thus increasing exciton lifetime. There are two possible types of condensates. In first case both the electron and the hole forming the exciton are in the same layer (intralayer condensate), in the second case the electron and the hole are in different layers (interlayer condensate). The exciton condensation in double layer systems in magnetic field has been extensively discussed in condensed matter literature (see, for example, [1–3]). In case the electron quasiparticles can be described as massless (gapless) Dirac fermions, exciton condensation is similar to the spontaneous chiral symmetry breaking in Quantum Chromodynamics. The condensate breaks the chiral symmetry of massless fermions creating an energy gap in the spectrum. From this point of view the chiral symmetry of graphene was discussed in [4]. This analogy allows to test some basic notions of Quantum Chromodynamics in condensed matter systems.

We study how the condensates depend on the distance between layers and the mass of the quasiparticles in presence of a strong magnetic field. The electrons and holes in the layers have quasirelativistic dispersion law $\epsilon(p) \sim \sqrt{m^2 + p^2}$. In order to take into account possible strong Coulomb interaction between electrons we use holographic approach. The holographic model consists of two $D5$ branes embedded into anti de Sitter space. This model was introduced in [5] for zero temperature and mass case. Finite temperature was discussed in [6]. The condensates are described by geometric configuration of

the branes. We show that the distance between layers at which interlayer condensate disappears decreases with quasiparticle mass.

The model consists of large number N of $D3$ branes that create $AdS_5 \times S^5$ geometry with metric

$$ds^2 = \frac{d\rho^2}{\rho^2} + \rho^2 (-dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2) + d\psi^2 + \sin^2 \psi d\hat{\Omega}_2^2 + \cos^2 \psi d\hat{\Omega}'_2^2. \quad (1)$$

Here AdS_5 stands for a five-dimensional anti de Sitter space while S^5 is a five dimensional sphere. The two layers of Dirac semimetal are modeled by two $D5$ branes embedded into this geometry. We treat them in probe approximation that is we do not consider the $D5$ branes back-reaction on the geometry. AdS_5 geometry is dual to the $\mathcal{N} = 4$ super Yang–Mills (SYM) theory. Each of the $D5$ branes supports massless Dirac fermions and connected brane configuration gives the fermions mass. The $\mathcal{N} = 4$ SYM leads to the electron interaction energy proportional to $1/r$ and does not take into account screening.

$D5$ branes are stretched along x, y, ρ, t directions and also wrapped around of the two dimensional sphere. Separation between branes and the radius of the sphere depends on the radial coordinate ρ . The energy of the $D5$ brane system is given by Dirac–Born–Infeld action. There is magnetic field B perpendicular to the branes.

Formation of interlayer condensate corresponds to the connected configuration of branes. We compare energies of connected and disconnected branes. The lowest energy configuration corresponds to the equilibrium state of the system. Our numerical analysis yields phase diagram in coordinates m – mass of the quasiparticles, L – layer separation. We find that for large enough separation $L > L_c$ interlayer condensate disappears. Critical layer separation decreases with mass. The results are summarized in Fig. 1. Above the yellow line there is no solution with interlayer condensate and above the blue

¹⁾e-mail: arseniy.pikalov@phystech.edu

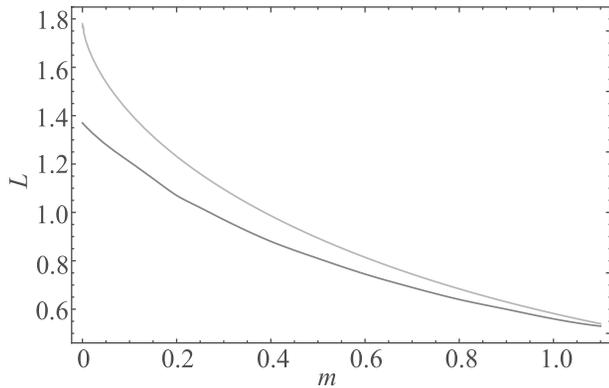


Fig. 1. (Color online) Phase diagram. Above the upper line solution with interlayer condensate does not exist. Below the lower line solution with interlayer condensate has lower energy

(lower) line phase with interlayer condensate is energetically disfavored. As the mass increases, the two lines become closer. Values of mass are given in dimensional units. Units of mass are proportional to \sqrt{B} while units of length are proportional to $1/\sqrt{B}$.

This results cannot be checked directly against experiment because we have not identified the parameters of holographic model in terms of physical parameters of the system. However, the model has some method-

ological value enabling us to access the properties of the system in strong coupling regime. The holographic model confirms that exciton condensate exists for the finite fermion mass even for the strong coupling case.

The author is grateful to Alexander Gorsky for suggesting the problem and numerous discussions. The work of the author was supported by Basis Foundation fellowship and Russian Foundation for Basic Research grant 19-02-00214.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021040020

1. O. L. Berman, R. Ya. Kezerashvili, and Yu. E. Lozovik, *Nanotechnology* **21**, 134019 (2010).
2. C. H. Zhang and Y. N. Joglekar, *Phys. Rev. B* **77**, 233405 (2008).
3. K. Moon, H. Mori, K. Yang, S. M. Girvin, A. H. MacDonald, L. Zheng, D. Yoshioka, and Sh.-Ch. Zhang, *Phys. Rev. B* **51**, 5138 (1994).
4. G. W. Semenoff, *Phys. Scr.* **146** 014016 (2012).
5. G. Grignani, N. Kim, A. Marini, and G. W. Semenoff, *JHEP* **12**, 091 (2014).
6. G. Grignani, A. Marini, A. Pigna, and G. W. Semenoff, *JHEP* **06**, 141 (2016).

Текущий авторский указатель томов 112–113 ¹⁾

- Abbad A. **112**, 387 (364)
 Afashokov Yu. Z. **112**, 797 ()
 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 ()
 Dzhappuev D. D. **112**, 499 (463)
 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)
 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 ()
 Kurenya 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 ()
 Mokaddem A. **112**, 617 (568)
 Msezane A. Z. **112**, 700 (657)
 Ogloblin A. A. **112**, 499 (463)
 Petkov V. B. **112**, 797 ()
 Remil G. **112**, 313 (290)
 Ricard G. **112**, 799 ()
 Romanenko V. S. **112**, 797 ()
 Roy A. M. **112**, 187 (173)
 Rubtsov G. I. **112**, 797 ()
 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)
 Starastsin V. I. **112**, 499 (463)
 Streltsov S. V. **112**, 686 (642)
 Surovtsev E. V. **112**, 820 ()
 Tadjer A. **112**, 617 (568)
 Taldenkov A. N. **112**, 112 (106)
 Tan Q. **112**, 172 (157)
 Troitsky S. V. **112**, 797 ()
 Trzaska W. H. **112**, 499 (463)
 Unatlokov I. B. **112**, 797 ()
 Ushakov A. V. **112**, 686 (642)
 Volovik G. E. **112**, 539 (505)
 Voronkov 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 ()
 Артемов В. В. **112**, 374 (352)
 Артемьев А. А. **112**, 291 (263)
 Асадчиков В. Е. **113**, 161 ();
113, 175 ()
 Ахматханов А. Р. **112**, 644 (602)
 Ашитков С. И. **113**, 84 ()
 Бабиченко В. С. **112**, 618 (577)
 Бабунц 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)
 Банников М. И. **112**, 263 (246)
 Барабанов А. Л. **112**, 343 (323)
 Баранов П. Г. **112**, 813 ()
 Барецки Б. **112**, 45 (37);
112, 275 (257)
 Баркалова А. С. **112**, 88 (84)
 Баулин Р. А. **113**, 175 ()
 Бекиров А. Р. **112**, 361 (341)
 Белавин А. **112**, 388 (370)
 Белозеров Е. И. **112**, 516 (485)
 Белоплатов Д. В. **113**, 133 ()
 Белотелов В. И. **112**, 314 (299);
 Белотелов В. И. **112**, 749 ();
112, 759 ()
 Белых В. В. **112**, 650 (607)
 Бельтюков Я. М. **112**, 547 (513)
 Бен Хамида 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)
 Бразжкин В. В. **112**, 787 ()
 Бреев И. Д. **112**, 813 ()
 Буздин А. И. **113**, 38 ();
113, 102 ()
 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)
 Вайшнене Л. А. **112**, 343 (323)
 Валуев К. А. **113**, 68 ()
 Ванчо П. **112**, 328 (305)
 Ваньков А. Б. **112**, 62 (53);
113, 112 ()
 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)

¹⁾В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 112(1)–112(10).

- 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)
 гальперин Ю. М. **112**, 54 (45)
 Гартман А. Д. **112**, 730 ()
 Гижа С. С. **112**, 774 ()
 Глазков В. Н. **112**, 688 (647)
 Глазов М. М. **113**, 10 ()
 Глек П. Б. **112**, 22 (17)
 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)
 Гудков В. В. **113**, 52 ()
 Гуров Ю. Б. **113**, 147 ()
 Гуцин М. Е. **113**, 96 ()
 Давыдов М. А. **112**, 437 (399)
 Данилов М. В. **112**, 484 (452)
 Данилов П. А. **112**, 579 (533)
 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)
 Дулебо А. И. **112**, 650 (607)
 Дьячкова И. Г. **113**, 161 ()
 Дюгаев А. М. **112**, 107 (101)
 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 ()
 Жевстовских И. В. **113**, 52 ()
 Желтиков А. М. **113**, 3 ()
 Желтиков А. М. **112**, 22 (17)
 Жигадло Н. Д. **112**, 523 (491)
 Жилияева Е. И. **112**, 623 (582)
 Жолудев М. С. **112**, 541 (508)
 Журавлев А. С. **112**, 516 (485)
 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 ()
 Зудин И. Ю. **113**, 96 ()
 Зыбцев С. Г. **112**, 93 (88)
 Зябловский А. А. **112**, 725 ()
 Ивченко Е. Л. **113**, 10 ()
 Игнатюв А. И. **113**, 84 ()
 Игнатъева Д. О. **112**, 759 ()
 Иконников А. В. **112**, 541 (508)
 Ильичев Л. В. **113**, 212 ()
 Иногамов Н. А. **113**, 84 ()
 Ионин А. А. **112**, 579 (533)
 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)
 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)
 Князев Г. А. **112**, 314 (299);
112, 749 ()
 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)
 Комельков А. С. **112**, 774 ()
 Конарев П. В. **112**, 632 (591)
 Кондорский А. Д. **112**, 736 ()
 Кон И. А. **112**, 93 (88)
 Консежо К. **112**, 541 (508)
 Константинова Е. А. **112**, 562 (527)
 Константинов Д. **112**, 101 (95)
 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)
 Крейнес 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)
 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)
 Кыгина Е. В. **112**, 562 (527)
 Лапушкин С. В. **113**, 147 ()
 Ларюшин И. Д. **112**, 81 (77)
 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 ()
 Лозин О. И. **112**, 114 (112)
 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 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 ()
 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)
 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)
 Найденов 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)
 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 ()
 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)
 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 И. Я. **112**, 618 (577)
 Пополитова Д. В. **112**, 702 (666)
 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)
 Рахманов А. Л. **112**, 693 (651);
112, 764 ()
 Родный П. А. **112**, 240 (225)
 Роевко А. А. **112**, 9 (6)
 Рожков А. В. **112**, 693 (651);
112, 764 ()
 Рожко М. В. **112**, 22 (17)
 Розанов Н. Н. **113**, 157 ()
 Розенбаум В. М. **112**, 341 (316)
 Ромашевский С. А. **113**, 84 ()
 Ромшин А. М. **112**, 17 (13)
 Роцин Б. С. **113**, 175 ()
 Рубан В. П. **112**, 554 (520)
 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 ()
 Савченко Е. Н. **112**, 644 (602)
 Савченко М. Л. **112**, 174 (161)
 Садовников С. И. **112**, 203 (193)
 Садовский М. В. **112**, 603 (555)
 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)
 Сандомирский Ю. Е. **112**, 3 (1)
 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)
 Сидоров-Бирюков Д. А. **112**,
 22 (17)
 Сеницын 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)
 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 И. Б. **112**, 374 (352)
 Стрыгин И. С. **112**, 475 (437)
 Суворов Э. В. **113**, 161 ()
 Султанов В. Д. **112**, 297 (269)
 Суриков В. Т. **113**, 52 ()
 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 ()
 Тепл Ф. **112**, 541 (508)
 Тимеркаев Б. А. **112**, 443 (405)
 Тихонова О. В. **112**, 702 (666)
 Ткаченко В. А. **112**, 196 (186)
 Ткаченко О. А. **112**, 196 (186)
 Томили В. А. **113**, 212 ()
 Тонкаев П. **112**, 658 (615)
 Торопов А. А. **112**, 17 (13)
 Торужева С. А. **112**, 623 (582)
 Трахтенберг Л. И. **112**, 341 (316)
 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)
 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 ()
 Филиппов В. Б. **112**, 451 (413)
 Фишман Р. И. **112**, 774 ()
 Фортов В. Е. **113**, 92 ()
 Форш П. А. **112**, 379 (357)
 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 ()
Хмельницкий Р. А. **112**, 579 (533)
Холин А. А. **112**, 314 (299)
Хорошилов А. Л. **112**, 451 (413)
Хохлов В. А. **113**, 84 ()
Хохлов Д. А. **112**, 764 ()
Хохлов Д. Р. **112**, 263 (246)
Цой К. В. **112**, 275 (257)
Цымбаленко В. Л. **113**, 33 ()
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)
Чесноков Ю. А. **112**, 3 (1)
Чижов М. В. **112**, 147 (133)
Чичков В. И. **112**, 743 ()
Чумаков А. И. **113**, 175 ()
Шавров В. Г. **112**, 458 (420)
Шакуров Г. С. **113**, 52 ()
Шаңдаров 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 ()
Шур В. Я. **112**, 644 (602)
Щербаков О. А. **112**, 343 (323)
Эркенов Ш. А. **112**, 743 ()
Юанов Ю. В. **112**, 725 ()
Ягупов С. В. **112**, 374 (352)
Язынин И. А. **112**, 3 (1)
Янович А. А. **112**, 3 (1)
Янушкевич К. И. **112**, 680 (636)
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.
- Мини-обзоры 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 мини-обзора, 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 (.psx), 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 возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в “Письмах в ЖЭТФ” расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале “JETP Letters”.

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — *Учреждения, где работают авторы (включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов)*

Дата поступления

Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. V. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP **71**, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из “Писем в ЖЭТФ” в “JETP Letters” все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторы, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются “on-line” в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилиевой 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>

Мини-обзоры

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 мини-обзоры 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>

Мини-обзор, 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 3
Поля, частицы, ядра

Гуров Ю.Б., Лапушкин С.В., Леонова Т.И., Сандуковский В.Г., Телькушев М.В., Чернышев Б.А. Образование ^8He в реакциях поглощения остановившихся пионов $^9\text{Be}(\pi^-, p)X$ и $^{10}\text{B}(\pi^-, pp)X$ 147

Оптика, лазерная физика

Газизов А.Р., Харитонов А.В., Харинцев С.С. Эффекты усиления вынужденного комбинационного рассеяния света в средах с близким к нулю показателем преломления 152

Розанов Н.Н. Электрон в поле встречных импульсов излучения 157

Конденсированное состояние

Золотов Д.А., Асадчиков В.Е., Бузмаков А.В., Дьячкова И.Г., Суворов Э.В. Необычные X-образные дефекты в монокристалле кремния, возникающие под действием четырехлопастного изгиба 161

Кудасов Ю.Б. Геликоидальное магнитное упорядочение и аномальная электропроводность PdCrO_2 168

Баулин Р.А., Андреева М.А., Чумаков А.И., Бессас Д., Рощин Б.С., Каримов Д.Н., Асадчиков В.Е. Скошенное магнитное межслоевое упорядочение в $[\text{Fe}(3.0 \text{ нм})/\text{Cr}(1.2 \text{ нм})]_{10}$ структуре, выявленное методом синхротронной мессбауэровской рефлектометрии с поляризационным анализом 175

Подливаев А.И., Гришаков К.С., Катин К.П., Маслов М.М. Межслоевая теплопроводность и термическая устойчивость деформированного двухслойного графена 182

Аристов В.Ю., Чайка А.Н., Молодцова О.В., Аристова И.М., Поторочин Д.В. Наноструктурированный графен на $\beta\text{-SiC}/\text{Si}(001)$: атомная и электронная структура, магнитные и транспортные свойства (Миниобзор) 189

Kamashev A.A., Garifullin I.A. Proximity effect in heterostructures based on superconductor/half-metal system 210

Разное

Томилин В.А., Ильичев Л.В. Гибридная атомарно-оптическая квантовая гиометрия 212

Содержание

Том 113, выпуск 4

Поля, частицы, ядра

Naryshkin Yu.G. Search for new heavy Higgs bosons in ATLAS and CMS experiments at LHC (Mini-review) 221

Афонин А.Г., Баранов В.Т., Барнов Е.В., Бритвич Г.И., Лобанов И.С., Полуэктов И.В., Решетников С.Ф., Савин Д.А., Сандомирский Ю.Е., Смаглюк Д.С., Терехов В.И., Чесноков М.Ю., Чесноков Ю.А., Чирков П.Н., Янович А.А. Использование новых кристаллических устройств на ускорителе У-70 223

Варлачев В.А., Дудкин Г.Н., Нечаев Б.А., Пеньков Ф.М., Филипович М., Филиппов А.В., Флусова Д.С., Чумаков Д.К., Шувалов Е.Н. Измерение S-фактора реакции $T(^1\text{H}, \gamma)^4\text{He}$ в астрофизической области энергий 229

Оптика, лазерная физика

Šuljagić M., Andjelković L., Iskrenović, Nikolić A.S., Milenković M.R. Light-transmitting measurements through starch-coated cobalt ferrite ferrofluids exposed to an external magnetic field 236

Архипов Р.М., Архипов М.В., Пахомов А.В., Жукова М.О., Цыпкин А.Н., Розанов Н.Н. Генерация предельно коротких аттосекундных и терагерцовых импульсов на основе коллективного спонтанного излучения тонкой резонансной среды (Миниобзор) 237

Галимов А.И., Рахлин М.В., Клишко Г.В., Задиранов Ю.М., Гусева Ю.А., Трошков С.И., Шубина Т.В., Торопов А.А. Источник неразличимых одиночных фотонов на основе эпитаксиальных InAs/GaAs квантовых точек для интеграции в схемы квантовых вычислений 248

Плазма, гидро- и газодинамика

Зубарев Н.М., Месяц Г.А. Иницирование взрывной электронной эмиссии и убегание электронов при импульсном пробое плотных газов 256

Конденсированное состояние

Roy A.M. Influence of nanoscale parameters on solid-solid phase transformation in Octogen crystal: multiple solution and temperature effect 263

Sakhin V., Kukovitsky E., Talanov Yu., Teitel'baum G. To the inhomogeneous bulk state of the $\text{Bi}_{1.08}\text{Sn}_{0.02}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ topological insulator as revealed by ESR of the charge carriers 265

Князев Ю.В., Баюков О.А., Шустин М.С., Балацкий Д.В., Бельская Н.А., Громилов С.А., Сухих А.С., Руденко В.В., Казак Н.В. Влияние электронной делокализации на поглощение “без отдачи” γ -квантов в варвиките $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ 267

Методы теоретической физики

Pikalov A. Holographic model of exciton condensation in double monolayer Dirac semimetal	274
Текущий авторский указатель томов 112–113	276
Информация для авторов	280

