

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 160, ВЫПУСК 5 (11)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

НОЯБРЬ 2021

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Особенности совместного влияния движения атомов и сверхтонкого расщепления возбужденного состояния на форму резонанса когерентного пленения населенностей в разреженном газе Баранцев К. А., Курапцев А. С., Литвинов А. Н. 611
- Эффект ударно-индуцированного «пыления» и способы его подавления Огородников В. А., Ерунов С. В., Бликов А. О., Кулаков Е. В., Чудаков Е. А., Антипов М. В., Панов К. Н., Сырунин М. А., Князев В. Н., Давыдов Н. Б., Георгиевская А. Б., Яговкин А. О., Юртов И. В., Замыслов Д. Н., Ковалев А. Е., Котин А. В., Блинов И. А., Новиков М. Г. 621
- Устойчивая генерация боковой полосы второго порядка в оптомеханической фотон-молекулярной системе с накачкой фононами Хуа-Цзюнь Чен, Юн-Лэй Чен, Пхэн-Цзие Чжу, Бао-Чхэн Хоу 631

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Испарение первичных черных дыр, барионная асимметрия и темная материя Чаудхури А., Долгов А. 643

© Российская академия наук, 2021

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2021

**ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

Низкочастотная динамика носителей в полупроводнике CuAlO_2 по данным ЯМР	
..... Оглобличев В. В., Смольников А. Г., Бузлуков А. Л., Пискунов Ю. В., Арапова И. Ю., Садыков А. Ф., Матухин В. Л.	661
Исследование одноионной магнитной анизотропии иона Fe^{3+} методом ЭПР в диамагнитном кристалле PbGaVO_4	
..... Воротынов А. М., Панкрац А. И., Колков М. И.	670
Магнитооптический параметр Q для структур с одноосной оптической анизотропией	
..... Максимова О. А., Лященко С. А., Варнаков С. Н., Овчинников С. Г.	678
Фазовые переходы в фрустрированных кобальтатах $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ ($x = 0-0.06$) при небольшом отклонении от стехиометрии	
..... Казей З. А., Снегирев В. В., Столяренко М. С.	689

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Особенности осцилляционных явлений при перестройках топологической структуры электронных траекторий на сложных поверхностях Ферми	
..... Мальцев А. Я.	699

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

Динамические свойства модели формирования мнения в мультиагентной системе с изменяющейся структурой связей в условиях информационного давления Савицкая Н. Е., Федорова Т. А.	714
Большие числа, порождаемые дзета-функцией Римана	
..... Овчинников Ю. Н.	730
Сжимаемость неидеальной плазмы дейтерия и гелия до 20 ТПа	
..... Мочалов М. А., Ильяев Р. И., Фортов В. Е. , Ерунов С. В., Аринин В. А., Бликов А. О., Комраков В. А., Максимкин И. П., Огородников В. А., Рыжков А. В., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Левашов П. Р., Лавриненко Я. С., Морозов И. В., Минаков Д. В., Парамонов М. А., Шутов А. В.	735

ОСОБЕННОСТИ СОВМЕСТНОГО ВЛИЯНИЯ ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ И СВЕРХТОНКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ НА ФОРМУ РЕЗОНАНСА КОГЕРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В РАЗРЕЖЕННОМ ГАЗЕ

*К. А. Баранцев, А. С. Курапцев, А. Н. Литвинов**

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 25 марта 2021 г.,
после переработки 24 мая 2021 г.
Принята к публикации 24 мая 2021 г.

Исследовано совместное влияние движения атомов и сверхтонкого расщепления на форму резонанса когерентного пленения населенностей (КПН) в разреженном газе. Показано, что при наличии сверхтонкой структуры возбужденного уровня движение атомов приводит к световому сдвигу КПН-резонанса. Получено аналитическое выражение этого сдвига для отдельных скоростных групп атомов. Обнаружено, что имеет место дополнительный КПН-резонанс, возникающий вследствие взаимодействия с нерезонансным возбужденным сверхтонким уровнем. Рассмотрено влияние величины сверхтонкого расщепления основного и возбужденного состояний, а также температуры на величину сдвига КПН-резонанса.

DOI: 10.31857/S0044451021110018

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди двухфотонных резонансов в газах, которые позволяют избавиться от доплеровского уширения, особое место занимает явление когерентного пленения населенностей (КПН) [1–4]. При взаимодействии бихроматического лазерного поля с трехуровневой (в простейшем случае) квантовой системой возникает такое квантовое суперпозиционное состояние, которое не взаимодействует с излучением. В эксперименте это проявляется как возникновение пика пропускания в спектре поглощения излучения, причем ширина этого пика может быть на несколько порядков уже, чем естественная ширина линии оптического перехода. В случае, когда имеют место данные особенности, говорят о явлении КПН. Возбуждение эффекта КПН подразумевает, чтобы оба оптических поля были сопоставимы по интенсивностям. Однако резонанс КПН может также иметь место, когда одно поле является сильным, а другое пробным. Такой тип возбуждения и воз-

никающее просветление среды принято ассоциировать с эффектом электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) [5, 6]. Характерные особенности, присущие эффектам КПН и ЭИП, позволяют их использовать в таких приложениях, как квантовые стандарты частоты [7–10], спектроскопия сверхвысокого разрешения [11, 12], лазеры без инверсии [13–15], квантовые магнитометры [16, 17], устройства записи и обработки квантовой информации [18–21]. Исторически так сложилось, что преобладающая часть работ по исследованию явления КПН была выполнена в ячейках, содержащих активные атомы и буферный газ. В таких ячейках давление паров буферного газа для снижения длины свободного пробега щелочных атомов примерно на шесть (и более) порядков превосходит давление паров щелочного металла. В этом случае негативное влияние стенок существенно снижается, и в эксперименте наблюдается сужение резонанса КПН. С другой стороны, в отсутствие буферного газа атомы щелочного металла могут двигаться практически без столкновений. В этом случае движение атомов приводит к иным эффектам по сравнению со случаем наличия буферного газа.

* E-mail: andrey.litvinov@mail.ru

При формировании КПН-резонанса возникает ряд нетривиальных особенностей. В частности, в разреженном газе движение приводит к сужению двухфотонного резонанса [22]. Авторами работы [22] было теоретически рассмотрено возбуждение Λ -схемы методом спектроскопии пробного поля (интенсивность пробной волны много меньше интенсивности сильного поля) и показано, что при движении атомов КПН-резонанс испытывает существенное сужение по сравнению со случаем неподвижных атомов. В работе [23] продемонстрировано, что при относительно небольшой величине вынуждающего поля ширина линии ЭИП пропорциональна квадратному корню из интенсивности и не зависит от доплеровской ширины. Данный эффект был также рассмотрен для Λ -схемы. Наблюдаемый эффект схож с эффектом лазерно-индуцированного сужения [24]. В работе [25] были экспериментально подтверждены особенности, обнаруженные в работах [22, 23]. Рассмотренные выше особенности линии КПН-резонанса были выполнены в модели Λ -схемы, а в качестве возбуждения использовался метод спектроскопии пробного поля (возбуждался ЭИП-резонанс). В работах [26, 27] обнаружено, что наличие сверхтонкого расщепления возбужденного уровня может приводить к искажению крыльев ЭИП-резонанса. Экспериментальные подтверждения данных особенностей были исследованы в работе [28]. В случае, когда частоты Раби возбуждающих полей примерно равны (имеет место эффект КПН), форма КПН-резонанса также искажается. Кроме того, в ячейках с буферным газом это также приводит к сдвигу КПН-резонанса [29, 30]. Можно ожидать, что в разреженном газе эффект, связанный с совместным влиянием движения атомов и сверхтонкого расщепления возбужденного уровня, должен значительно усилиться.

Настоящая работа посвящена исследованию совместного влияния движения атомов и сверхтонкого расщепления возбужденного состояния на форму резонанса КПН в разреженном газе. Главный результат работы — установление факта появления светового сдвига КПН-резонанса в такой системе. В разд. 2 подробно рассматривается теоретическая модель, выводятся основные уравнения для матрицы плотности в адиабатическом приближении. Получено алгебраическое уравнение, позволяющее найти световой сдвиг КПН-резонанса для конкретной скоростной группы. В разд. 3.1 представлена форма резонанса КПН для каждой скоростной группы атомов. Подробно рассматривается влияние сверхтонкой структуры возбужденного уровня. В разд. 3.2

анализируются суммарный сигнал резонанса КПН (проинтегрированный по скоростям) и зависимость его формы от температуры, величины сверхтонкого расщепления основного и возбужденного состояний. В конце этого раздела приводятся зависимости светового сдвига КПН-резонанса от величины сверхтонкого расщепления для различных частот Раби.

В данной работе мы ограничимся рассмотрением только D_1 -линии щелочных атомов, поскольку она состоит из двух уровней, что позволяет наиболее ярко и физически прозрачно наблюдать особенности, связанные с совместным влиянием движения атомов и наличия сверхтонкой структуры возбужденного уровня. При этом стоит отметить, что для D_2 -линии картина более сложная ввиду наличия большего количества сверхтонких подуровней, что приводит к ухудшению контраста резонансов КПН, как показано в работах [31, 32]. Полученные результаты, в первую очередь, несут фундаментальный характер и позволяют понять, как формируется сигнал КПН-резонанса каждой скоростной группой атомов при наличии сверхтонкого расщепления возбужденного уровня. Здесь важно отметить, что движение атомов является дополнительной степенью свободы, поэтому приводит к новым физическим явлениям.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим ансамбль щелочных атомов при ненулевой температуре в поле плоской электромагнитной волны с двумя несущими частотами (рис. 1). Волна распространяется вдоль оси z , и вектор ее напряженности может быть записан следующим образом:

$$\mathbf{E}(z, t) = \mathbf{e}_1 E_1 \exp[-i(\omega_1 t - k_1 z)] + \mathbf{e}_2 E_2 \exp[-i(\omega_2 t - k_2 z)] + \text{с.с.}, \quad (1)$$

где E_j , \mathbf{e}_j , k_j — в общем случае комплексная амплитуда напряженности электрического поля, единичный вектор вдоль направления поляризации электрического поля и волновое число ($j = 1, 2$).

Разобьем нашу систему на две подсистемы. Одна соответствует атомам, двигающимся вдоль направления распространения электромагнитной волны, а другая — в противоположном. Будем рассматривать модель, в которой атомы имеют четыре энергетических уровня: два основных, $|1\rangle$ и $|2\rangle$, соответствующих сверхтонкому расщеплению s -состояния, и два возбужденных, $|3\rangle$ и $|4\rangle$, соответствующих расщеплению p -состояния (см. рис. 1). Частоты поля ω_1 и ω_2 близки к частотам переходов $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$

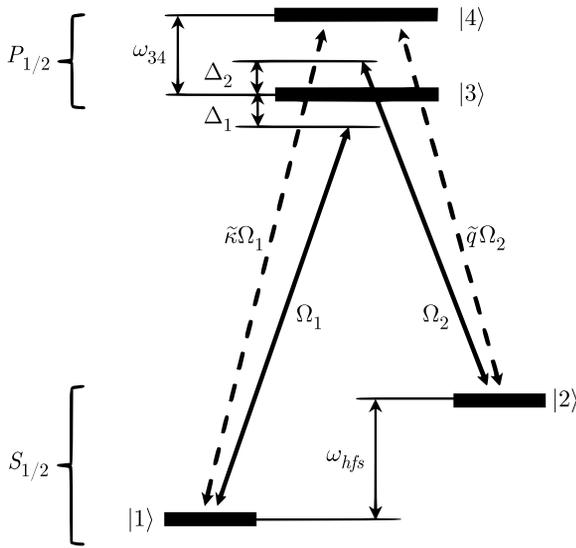


Рис. 1. Схема энергетических уровней активных атомов и возбуждаемые переходы; ω_{hfs} и ω_{34} — частоты сверхтонкого расщепления соответственно основного и возбужденного уровней

с отстройками соответственно Δ_1 и Δ_2 , ω_{34} — частота сверхтонкого перехода между уровнями возбужденного состояния $|3\rangle$ и $|4\rangle$

Атомный ансамбль считаем разреженным. Коллективными эффектами, обусловленными резонансным диполь-дипольным межатомным взаимодействием, будем пренебрегать [33, 34]. Состояние ансамбля будем описывать с помощью одноатомной матрицы плотности $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$, которая в представлении Вигнера по поступательным степеням свободы атома удовлетворяет следующему квантовому кинетическому уравнению:

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

где $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ — импульс атома, m — масса атома, \hat{H} — гамильтониан, учитывающий взаимодействие атома с внешним полем, \hat{R} — оператор релаксации.

Гамильтониан представим в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где

$$\hat{H}_0 = \sum \varepsilon_n |n\rangle \langle n|, \quad n = 1, \dots, 4 \quad (3)$$

— гамильтониан системы в отсутствие поля, а \hat{V} — оператор взаимодействия с полем, в дипольном приближении имеющий вид

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} = \hbar\Omega_1 \exp[-i(\omega_1 t - k_1 z)] |3\rangle \langle 1| + \hbar\Omega_2 \exp[-i(\omega_2 t - k_2 z)] |3\rangle \langle 2| + \hbar\tilde{\kappa}\Omega_1 \exp[-i(\omega_1 t - k_1 z)] |4\rangle \langle 1| + \hbar\tilde{q}\Omega_2 \exp[-i(\omega_2 t - k_2 z)] |4\rangle \langle 2| + \text{h.c.}, \quad (4)$$

где $\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{e}_d \hat{d}$ — оператор вектора дипольного момента атомов, $\Omega_j = E_j d_{3j} / \hbar$ — частоты Раби падающих полей ($j = 1, 2$). Здесь предположено, что поляризации падающих волн сонаправлены с вектором дипольного момента атомов ($\mathbf{e}_d \cdot \mathbf{e}_{1,2} = 1$), а элементы матрицы дипольного момента $d_{12} = 0$ в силу того, что электродипольный переход $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ запрещен; $\tilde{\kappa} = d_{41} / d_{31}$, $\tilde{q} = d_{42} / d_{32}$ — отношения матричных элементов дипольного момента.

Будем рассматривать одномерную задачу, в которой мы полагаем, что фронт падающей волны является плоским и бесконечным (см. формулу (1)). Тогда матрица плотности будет зависеть только от проекции скорости атома на направление распространения излучения, т.е. от координаты z : $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \hat{\rho}(v, z, t)$, где $v = v_z$.

Выполним замену, выделяющую в недиагональных элементах матрицы плотности быстроосциллирующий множитель:

$$\tilde{\rho}_{ge} = \rho_{ge} \exp[-i(\omega_g t - k_g z)], \quad g = 1, 2, \quad e = 3, 4, \quad (5)$$

$$\tilde{\rho}_{12} = \rho_{12} \exp[-i(\omega_1 - \omega_2)t + i(k_1 - k_2)z], \quad (6)$$

где $\rho_{nm}(v, z) = \langle n | \hat{\rho}(v, z) | n \rangle$, после чего воспользуемся приближением вращающейся волны. Тогда, пренебрегая когерентностями ρ_{34} , получим систему уравнений для одноатомной матрицы плотности [29]:

$$\frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{11}}{\partial z} = -i\Omega_1 \tilde{\rho}_{13} + i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{31} - i\tilde{\kappa}\Omega_1 \tilde{\rho}_{14} + i\tilde{\kappa}^* \Omega_1^* \tilde{\rho}_{41} + \frac{\gamma}{2} (\rho_{33} + \tilde{\kappa}^2 \rho_{44}) + \Gamma_{\parallel} (\rho_{22} - \rho_{11}), \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{22}}{\partial z} = -i\Omega_2 \tilde{\rho}_{23} + i\Omega_2^* \tilde{\rho}_{32} - i\tilde{q}\Omega_2 \tilde{\rho}_{24} + i\tilde{q}^* \Omega_2^* \tilde{\rho}_{42} + \frac{\gamma}{2} (\rho_{33} + \tilde{q}^2 \rho_{44}) + \Gamma_{\parallel} (\rho_{11} - \rho_{22}), \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho_{33}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{33}}{\partial z} = i\Omega_1 \tilde{\rho}_{13} - i\Omega_1^* \tilde{\rho}_{31} + i\Omega_2 \tilde{\rho}_{23} - i\Omega_2^* \tilde{\rho}_{32} - \gamma \rho_{33}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho_{44}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{44}}{\partial z} = i\tilde{\kappa}\Omega_1\tilde{\rho}_{14} - i\tilde{\kappa}^*\Omega_1^*\tilde{\rho}_{41} + i\tilde{q}\Omega_2\tilde{\rho}_{24} - i\tilde{q}^*\Omega_2^*\tilde{\rho}_{42} - \frac{\gamma}{2}(\tilde{\kappa}^2 + \tilde{q}^2)\rho_{44}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{12}}{\partial z} = i\Omega_1^*\tilde{\rho}_{32} - i\Omega_2\tilde{\rho}_{13} + i\tilde{\kappa}^*\Omega_1^*\tilde{\rho}_{42} - i\tilde{q}\Omega_2\tilde{\rho}_{14} + [i(\Delta_2 - \Delta_1) + (k_1 - k_2)v - \Gamma_{12}]\tilde{\rho}_{12}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \rho_{13}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{13}}{\partial z} = -i\Omega_1^*\rho_{11} - i\Omega_2^*\tilde{\rho}_{12} + i\Omega_1^*\rho_{33} + [-i(\Delta_1 - k_1v) - \gamma']\tilde{\rho}_{13}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho_{14}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{14}}{\partial z} = -i\tilde{\kappa}^*\Omega_1^*\rho_{11} - i\tilde{q}^*\Omega_2^*\tilde{\rho}_{12} + i\tilde{\kappa}^*\Omega_1^*\rho_{44} + [-i(\Delta_1 - \omega_{34} - k_1v) - \gamma']\tilde{\rho}_{14}, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \rho_{23}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{23}}{\partial z} = -i\Omega_1^*\tilde{\rho}_{21} - i\Omega_2^*\rho_{22} + i\Omega_2^*\rho_{33} + [-i(\Delta_2 - k_2v) - \gamma']\tilde{\rho}_{23}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \rho_{24}}{\partial t} + v \frac{\partial \rho_{24}}{\partial z} = -i\tilde{\kappa}^*\Omega_1^*\tilde{\rho}_{21} - i\tilde{q}^*\Omega_2^*\rho_{22} + i\tilde{q}^*\Omega_2^*\rho_{44} + [-i(\Delta_2 - \omega_{34} - k_2v) - \gamma']\tilde{\rho}_{24}. \quad (15)$$

Здесь γ — скорость спонтанного распада возбужденного состояния, γ' — скорость распада оптических когерентностей, Γ_{\parallel} — продольная скорость релаксации основного состояния, Γ_{12} — поперечная скорость релаксации основного состояния ($\Gamma_{\parallel} \approx \Gamma_{12}/2$). Все эти скорости распада обусловлены взаимодействием атома с вакуумным термостатом.

Система уравнений (7)–(15) может быть решена только численно. Далее мы рассмотрим адиабатическое приближение, в котором будем полагать

$$\Omega_{12} \ll \gamma', \gamma, \quad \rho_{33}, \rho_{44} \ll \rho_{11}, \rho_{22}.$$

Мы также будем пренебрегать многократным рассеянием фотонов в среде [35, 36] и положим, что среда является оптически-тонкой. Кроме того, не будем рассматривать эффекты, связанные с конечной длиной ячейки, т. е. $\partial\rho/\partial z = 0$. Также сделаем следующие допущения:

$$\tilde{\kappa} = \tilde{q} = 1, \quad \Omega_1 = \Omega_2 = \Omega_R, \quad k_1 \approx k_2 = k_s,$$

$$\Delta_1 \approx \Delta_2 = \Delta_L.$$

Обозначим $k_1 - k_2 = \Delta k_s$, $\Delta_1 - \Delta_2 = \delta_R$ — двухфотонная отстройка, $\rho_{12} = R + iJ$. Проведем адиабатическое исключение переменных населенностей

ρ_{33} , ρ_{44} возбужденных состояний и оптических когерентностей ρ_{13} , ρ_{23} , ρ_{14} , ρ_{24} . Используя условие нормировки $\sum \rho_{ii}(v) = 1$, получим систему уравнений для населенностей ρ_{11} , ρ_{22} нижних уровней и когерентности ρ_{12} , которая может быть выражена через вещественную R и мнимую J части:

$$\frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} = -\frac{2\Omega_R^2}{\gamma'}(G + G_{34})(\rho_{11} - \rho_{22}) - \frac{4\Omega_R^2}{\gamma'}(F + F_{34})J + 2\Gamma_{\parallel}(\rho_{22} - \rho_{11}), \quad (16)$$

$$\frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} = -\frac{2\Omega_R^2}{\gamma'}(G + G_{34})(\rho_{11} - \rho_{22}) + \frac{4\Omega_R^2}{\gamma'}(F + F_{34})J + 2\Gamma_{\parallel}(\rho_{11} - \rho_{22}), \quad (17)$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = R\Gamma_{12} + J(\delta_R + \Delta k_s v) - \frac{2\Omega_R^2}{\gamma'}(G + G_{34})R - \frac{\Omega_R^2}{\gamma'}(G + G_{34})(\rho_{11} + \rho_{22}), \quad (18)$$

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -R(\delta_R + \Delta k_s v) - J\Gamma_{12} - \frac{2\Omega_R^2}{\gamma'}(G + G_{34})J + \frac{\Omega_R^2}{\gamma'}(F + F_{34})(\rho_{11} - \rho_{22}). \quad (19)$$

В системе уравнений (16)–(19) введены следующие обозначения:

$$G = \frac{\gamma'^2}{\gamma'^2 + (\Delta_L - k_s v)^2}, \quad (20)$$

$$G_{34} = \frac{\gamma'^2}{\gamma'^2 + (\Delta_L - k_s v - \omega_{34})^2},$$

$$F = \frac{(\Delta_L - k_s v)\gamma'}{\gamma'^2 + (\Delta_L - k_s v)^2}, \quad (21)$$

$$F_{34} = \frac{(\Delta_L - k_s v - \omega_{34})\gamma'}{\gamma'^2 + (\Delta_L - k_s v - \omega_{34})^2}.$$

Уравнения для населенностей ρ_{33} и ρ_{44} возбужденных состояний, а также суммарная населенность ρ_{exc} возбужденного состояния для конкретной скоростной группы могут быть выражены следующим образом:

$$\rho_{33}(v) = \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'}G(v)(1 + 2R(v)), \quad (22)$$

$$\rho_{44}(v) = \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'}G_{34}(v)(1 + 2R(v)),$$

$$\rho_{exc}(v) = \rho_{33}(v) + \rho_{44}(v). \quad (23)$$

Нетрудно видеть, что система уравнений (16)–(19) переходит при устремлении $\omega_{34} \rightarrow \infty$ в систему уравнений для Λ -схемы [9].

Рассмотрим стационарный режим, т. е. положим $\partial/\partial t = 0$ в системе уравнений (16)–(19). Используя условие нормировки $\rho_{11}(v) + \rho_{22}(v) = 1$ для матри-

цы плотности и исключая одно уравнение, например (17), найдем аналитические выражения для $\rho_{12}(v)$, $R(v)$, $J(v)$:

$$\rho_{12}(v) = -\frac{1}{2} \frac{2\tilde{F}'\gamma'(\delta_R + \Delta kv)\Omega_R^2 - \gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 - 4\Omega_R^4(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)}{\gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)}, \quad (24)$$

$$R(v) = \frac{2\Omega_R^2(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)}{\gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)}, \quad (25)$$

$$J(v) = \frac{\gamma'\Omega_R^2\tilde{G}(\delta_R + \Delta kv)}{\gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)}, \quad (26)$$

где Δk — однофотонная отстройка. Подставляя эти выражения в (22), (23), найдем суммарную населенность возбужденного уровня:

$$\rho_{exc}(v) = \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'} \times \tilde{G}(v) \left(1 + \frac{4\Omega_R^2(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)}{\gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2)} \right). \quad (27)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\tilde{G}(v) = G(v) + G_{34}(v), \quad (28)$$

$$\tilde{F}(v) = F(v) + F_{34}(v). \quad (29)$$

Перейдем к рассмотрению атомов, находящихся в двух скоростных группах, $+k_s v$ и $-k_s v$. Это отражает ситуацию, когда имеются две скоростные группы атомов — одни двигаются вдоль направления распространения лазерного излучения, другие — в обратном. Далее будем использовать индексы «+» и «-» в выражениях для $\tilde{G}(v)$, $\tilde{F}(v)$ и $\rho_{exc}(v)$, соответствующие двум скоростным группам, $+k_s v$ и $-k_s v$. Найдем суммарную населенность $\rho_{exc}^s(v)$, соответствующую двум скоростным группам:

$$\rho_{exc}^s(v) = \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'} (\tilde{G}_+(v) + \tilde{G}_-(v)) + \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'} \left(\frac{4\Omega_R^2(\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2)\tilde{G}_+(v)}{\gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2)} \right) + \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'} \left(\frac{4\Omega_R^2(\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2)\tilde{G}_-(v)}{\gamma'^2(\delta_R - \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2)} \right). \quad (30)$$

Для того чтобы найти сдвиг КПН-резонанса, нам необходимо взять производную от суммарной населенности по двухфотонной отстройке и приравнять ее к нулю ($\partial\rho_{exc}^s(v)/\partial t = 0$). Полагая, что лазерная

отстройка $\Delta_L = 0$, получим алгебраическое уравнение, которое определяет все основные экстремумы. Один из этих экстремумов соответствует световому сдвигу δ_{LS} КПН-резонанса для определенной скоростной группы:

$$\left(\frac{\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2}{\gamma'^2 + (k_s v)^2} + \frac{\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2}{\gamma'^2 + (k_s v + \omega_{34})^2} \right) \times \left(\frac{\delta_{LS} + \Delta kv}{\gamma'^2(\delta_{LS} + \Delta kv)^2 + 4\Omega_R^4(\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2)} \right) + \left(\frac{\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2}{\gamma'^2 + (k_s v)^2} + \frac{\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2}{\gamma'^2 + (k_s v - \omega_{34})^2} \right) \times \left(\frac{\delta_{LS} - \Delta kv}{\gamma'^2(\delta_{LS} - \Delta kv)^2 + 4\Omega_R^4(\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2)} \right). \quad (31)$$

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Экспериментальная реализация эффекта КПН в большинстве случаев предполагает, что регистрируемый сигнал сформирован атомами от всех скоростных групп. Такая ситуация наблюдается, когда атомы имеют тепловое распределение. С другой стороны, в эксперименте может быть реализована такая ситуация, когда имеет место селекция по скоростям атомов, которая типична для пучковых стандартов частоты [37]. Один из вариантов такого стандарта частоты может быть реализован на эффекте КПН [38,39]. Ниже мы исследуем обе ситуации: в разд. 3.1 рассматривается форма резонанса КПН для отдельных скоростных групп атомов; в разд. 3.2 — суммарный вклад от всех скоростных групп атомов в форму резонанса КПН. Отметим, что мы пренебрегаем влиянием стенок и рассматриваем модель так называемой бесконечной среды. Такой подход оправдан и имеет место на практике в случае, когда размеры ячейки значительно (в несколько раз) превосходят длину волны λ микроволнового перехода. Типичные значения $\lambda = 4.4$ см в атомарных парах ^{87}Rb , $\lambda = 3.3$ см в ^{133}Cs . В работе [40] проводились эксперименты, где длина ячейки с метаном составляла 8 м, а в [41] использовалась многопроходная поглощающая ячейка длиной 18 м, причем эффективная длина взаимодействия составила 108 м.

3.1. Форма резонанса КПН для отдельной скоростной группы атомов

Рассмотрим атомы, двигающиеся со скоростями $+v$ и $-v$. В этом случае суммарные населенности $\rho_{exc}^{s,+}(v)$ и $\rho_{exc}^{s,-}(v)$ возбужденного уровня для этих скоростных групп могут быть определены следующими выражениями:

$$\rho_{exc}^{s,+}(v) = \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'} \times \left[\tilde{G}_+(v) + \frac{4\Omega_R^2(\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2)\tilde{G}_+(v)}{\gamma'^2(\delta_R + \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}_+^2 + \tilde{G}_+^2)} \right], \quad (32)$$

$$\rho_{exc}^{s,-}(v) = \frac{2\Omega_R^2}{\gamma\gamma'} \times \left[\tilde{G}_-(v) + \frac{4\Omega_R^2(\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2)\tilde{G}_-(v)}{\gamma'^2(\delta_R - \Delta kv)^2 + \Omega_R^4(\tilde{F}_-^2 + \tilde{G}_-^2)} \right]. \quad (33)$$

На рис. 2 представлены зависимости $\rho_{exc}^{s,+}(v)$ и $\rho_{exc}^{s,-}(v)$ от двухфотонной отстройки для трех скоростных групп: $v = \pm v_T/100$, $v = \pm v_T/33$, $v = \pm v_T/10$ (v_T — наиболее вероятная скорость). В случае, когда скорость атомов равняется $v = \pm v_T/100$ (рис. 2а), провалы, соответствующие резонансу КПН, расположены достаточно близко. Их сдвиг определяется величиной $\delta_{LS} = \pm \Delta k_s v$. На вставке к рис. 2а можно наблюдать, что КПН-резонанс, соответствующий $\rho_{exc}^s(v) = [\rho_{exc}^{s,+}(v) + \rho_{exc}^{s,-}(v)]/2$, сдвинут в положительную область отстроек. Отличие от нуля светового сдвига связано с достаточно близким ($\omega_{34} = 20\gamma$) расположением уровня 4. Атомы, двигающиеся со скоростями $+v$ и $-v$, по-разному «воспринимают» этот уровень, поскольку расстояния до него равны соответственно $\omega_{34} - \Delta k_s v$ и $\omega_{34} + \Delta k_s v$.

С ростом скорости атомов расщепление между пиками КПН-резонанса, соответствующими $\rho_{exc}^{s,+}(v)$ и $\rho_{exc}^{s,-}(v)$, увеличивается. При скоростях $v = \pm v_T/33$ наблюдается дублет резонанса КПН (рис. 2б). Дальнейшее увеличение скорости приводит к тому, что расщепление между КПН-резонансами растет. При $v = \pm v_T/10$ суммарный сигнал КПН-резонанса представляет собой два отдельных провала (рис. 2в).

Величина сдвига КПН-резонанса, определяемого $\rho_{exc}^s(v)$, задается формулой (31). В случае, когда $\Omega_R \ll \gamma \ll \omega_{34}$, мы можем пренебречь скоростью релаксации низкочастотных когерентностей в вы-

ражении (31). Тогда можно получить следующую оценку для величины сдвига КПН-резонанса:

$$\delta_{LS}(|v|) = \frac{2k_s \Delta k v^2 (\Delta k^2 v^2 (\gamma^2 + k_s^2 v^2) - 4\Omega_R^4)}{(3\Delta k^2 v^2 (\gamma^2 + k_s^2 v^2) - 4\Omega_R^4)\omega_{34}}, \quad (34)$$

откуда видно, что зависимость δ_{LS} от ω_{34} носит гиперболический характер. По мере роста величины ω_{34} вклад от уровня $|4\rangle$ уменьшается. Это связано с тем, что чем больше ω_{34} , тем выше должна быть скорость атомов, которые могли бы взаимодействовать с уровнем $|4\rangle$. Однако доля таких атомов значительно меньше, и это приводит к уменьшению влияния уровня $|4\rangle$.

3.2. Форма резонанса КПН для суммарного вклада от всех скоростных групп

В этом разделе мы проанализируем суммарный сигнал КПН-резонанса от всех скоростных групп. Полагая, что атомы имеют равновесное распределение по скоростям, запишем выражение для суммарного сигнала КПН-резонанса:

$$\rho_{exc} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{exc}^s(v) M(v) dv, \quad (35)$$

$$M(v) = \frac{1}{\sqrt{\pi} v_T} \exp\left(-\frac{v^2}{v_T^2}\right).$$

Контрастом КПН-сигнала будем называть величину

$$C(\delta_R) = 1 - \frac{\rho_{exc}(\delta_R)}{\rho_{exc}^N}, \quad (36)$$

где ρ_{exc}^N — населенность возбужденного состояния в отсутствие двухфотонного резонанса.

На рис. 3 представлен контраст КПН-резонанса в зависимости от двухфотонной отстройки. Проанализируем вначале его зависимость для различных значений ω_{34} (рис. 3а). На этом рисунке можно видеть, что имеет место КПН-резонанс, который центрирован вблизи нулевой двухфотонной отстройки. Этот пик обусловлен уровнем, находящимся в условиях однофотонного резонанса (в нашем случае это уровень $|3\rangle$). Также можно наблюдать, что имеет место второй пик, положение которого зависит от величины ω_{34} , причем чем сильнее расщепление ω_{34} , тем больше величина сдвига этого пика относительно нулевого ($\delta_R = 0$) резонанса. Наличие этого пика обусловлено нерезонансным влиянием уровня $|4\rangle$. Стоит отметить, что при увеличении частоты Раби и при $\omega_{34} < 25\gamma$ для выбранных параметров расчета этот пик начинает сливаться с нулевым резонансом.

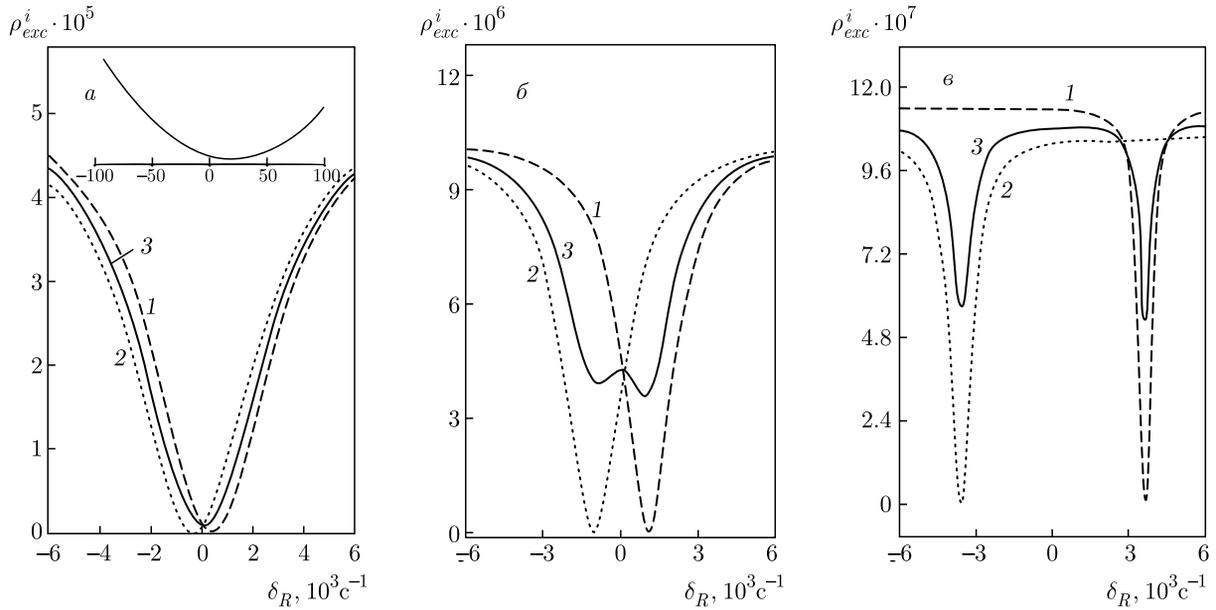


Рис. 2. Населенности ρ_{exc}^i , $i = s, +$ (кривые 1), $i = s, -$ (2), $i = s$ (3) возбужденного состояния в зависимости от двухфотонной отстройки для разных скоростных групп при $v = v_T/100$ (а), $v_T/33$ (б), $v_T/10$ (в). Параметры расчета следующие: $\Omega_R = 2 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, $\Gamma_L = 0.5\gamma$, $\omega_{34} = 20\gamma$, $T = 55^\circ\text{C}$. На вставке приведена кривая 3 в увеличенном масштабе

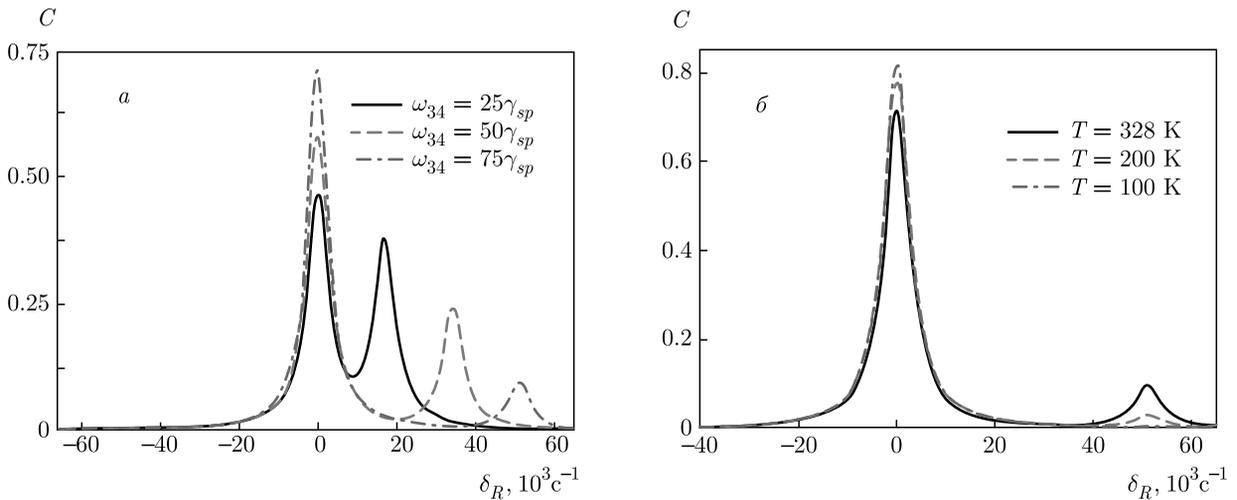


Рис. 3. (В цвете онлайн) Контраст КРН-резонанса в зависимости от двухфотонной отстройки для различных значений величины сверхтонкого расщепления возбужденного уровня при $T = 55^\circ\text{C}$ (а) и различных значений температуры при $\omega_{34} = 75\gamma$ (б). Параметры расчета следующие: $\Omega_R = 2 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, $\Gamma_L = 0.5\gamma$

Теперь обратимся к зависимости контраста КРН-резонанса для разных температур (рис. 3б). Видно, что амплитуда второго пика существенно зависит от температуры, а именно, при понижении температуры его амплитуда уменьшается. Одновременно с этим происходит увеличение амплитуды основного пика.

Подчеркнем, что ширина второго пика практически такая же, как и основного. Его положение может быть описано оценочной формулой

$$\delta_{p2} = \frac{\delta k}{k} \omega_{34}.$$

Эта формула имеет следующий физический смысл: ω_{34}/k — скорость атомов, доплеровский сдвиг кото-

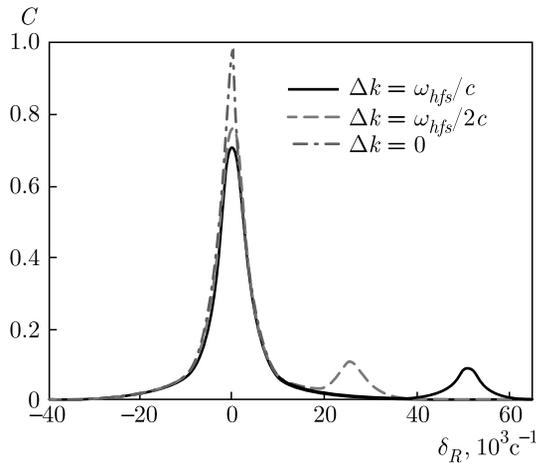


Рис. 4. (В цвете онлайн) Контраст КПН-резонанса в зависимости от двухфотонной отстройки для различных значений Δk . Параметры расчета следующие: $\Omega_R = 2 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, $\Gamma_L = 0.5\gamma$, $\omega_{34} = 75\gamma$, $T = 55^\circ\text{C}$

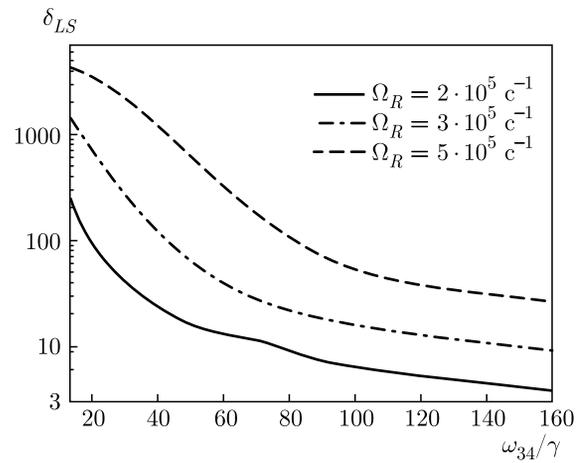


Рис. 5. Зависимости светового сдвига от величины сверхтонкого расщепления возбужденного уровня для различных частот Раби. Параметры расчета следующие: $\Gamma_L = 0.5\gamma$, $T = 55^\circ\text{C}$

рых равен ω_{34} . Для атомов,двигающихся с такой скоростью, внешние поля квазирезонансны переходам $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$ и $|2\rangle \rightarrow |4\rangle$. Эти атомы и формируют двухфотонный резонанс, отстроенный на δ_R . В то же время число таких атомов уменьшается с ростом как температуры, так и расщепления ω_{34} (уменьшается число атомов в хвосте максвелловского распределения). Поэтому на рисунках и наблюдается соответствующее уменьшение амплитуды второго пика. Отметим, что если в расчете ограничить диапазон скоростей так, чтобы исключить из него атомы со скоростью ω_{34}/k , то этот вторичный пик исчезнет.

Зависимость положения второго пика от двухфотонной отстройки для разных Δk представлена на рис. 4. Для вырожденного случая ($\Delta k = 0$) второй пик сливается с первым, и мы наблюдаем один нулевой резонанс. При этом амплитуда основного пика возрастает, и он становится более узким. Если состояние не вырождено (это имеет место при возбуждении КПН на сверхтонких переходах щелочных атомов), то контур более широкий. В этом случае можно наблюдать появление второго пика. В то же время наиболее существенное различие проявляется для относительно небольших частот Раби, поскольку в этом случае световое уширение мало и, следовательно, влияние доплеровских эффектов становится значительнее.

Рассмотрим зависимость сдвига δ_{LS} КПН-резонанса от величины сверхтонкого расщепления возбужденного уровня. Эти зависимости представлены на рис. 5 для различных значений частот Раби. В

области $\omega_{34} < 20\gamma$ сдвиг КПН-резонанса значительно увеличивается. Это связано с гиперболической зависимостью сдвига от ω_{34} . В пределе, если мы устремим $\omega_{34} \rightarrow 0$, то сдвиг пропадет. В этом случае отсутствует сверхтонкое расщепление, а уровень $|3\rangle$ будет действовать с удвоенной силой. С другой стороны, по мере роста ω_{34} величина сдвига будет уменьшаться, поскольку как уже было сказано выше, уровень $|4\rangle$ отдаляется и доля атомов, которые могут взаимодействовать с уровнем $|4\rangle$, уменьшается. Это приводит к тому, что сдвиг КПН-резонанса стремится к нулю. Таким образом, имеет место экстремум для данной зависимости, т. е. существует область, где этот сдвиг максимален. Для наших значений частот Раби этот экстремум лежит в диапазоне $3\gamma < \omega_{34} < 15\gamma$. С ростом частоты Раби величина сдвига растет, так как увеличивается скорость оптической накачки.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено совместное влияние движения атомов и сверхтонкого расщепления возбужденного состояния на формирование КПН-резонанса в разреженном газе. Получено алгебраическое уравнение, описывающее суммарный сдвиг КПН-резонанса для конкретной скоростной группы. Показано, что наличие сверхтонкого расщепления приводит к световому сдвигу КПН-резонанса как для отдельных скоростных групп, так

и для суммарного сигнала по всем скоростным группам атомов. Установлено, что в определенном диапазоне значений сверхтонкого расщепления возбужденного уровня возникает дополнительный пик, соответствующий КПН-резонансу на втором «нерезонансном» сверхтонком уровне. Проанализированы зависимости амплитуды и положения этого пика от величины сверхтонкого расщепления, температуры и от разности волновых векторов двух оптических переходов.

Благодарности. Авторы признательны И. М. Соколову за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках Государственного задания (базовая часть), проект № FSEG-2020-0024.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Alzetta, L. Moi, and G. Orriols, *Nuovo Cim. B* **36**, 5 (1976).
2. E. Arimondo and G. Orriols, *Lett. Nuovo Cim.* **17**, 333 (1976).
3. H. R. Gray, R. M. Whitley, and C. R. Stroud, *Opt. Lett.* **3**, 218 (1978).
4. Б. Д. Агапьев, М. Б. Горный, Б. Г. Матисов и др., *УФН* **163**, 1 (1993).
5. М. Б. Горный, Б. Г. Матисов, Ю. В. Рождественский, *ЖЭТФ* **68**, 728 (1989).
6. E. Arimondo, *Prog. Opt.* **35**, 257 (1996).
7. J. Vanier, *Appl. Phys. B* **81**, 421 (2005).
8. С. А. Зибров, В. Л. Величанский, А. С. Зибров и др., *Письма в ЖЭТФ* **82**, 534 (2005).
9. G. Kazakov, B. Matisov, A. Litvinov, and I. Mazets, *J. Phys. B* **40**, 3851 (2007).
10. S. A. Zibrov, I. Novikova, D. F. Phillips et al., *Phys. Rev. A* **81**, 013833 (2010).
11. D. Peter, D. Schwindt, S. Knappe et al., *Appl. Phys. Lett.* **85**, 6409 (2004).
12. V. V. Yashuk, J. Granwehr, D. F. Kimbal et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160801 (2004).
13. О. А. Кочаровская, Я. И. Ханин, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 581 (1988).
14. S. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1022 (1989).
15. A. Imamoglu and S. Harris, *Opt. Lett.* **14**, 1344 (1989).
16. M. Stahler, R. Wynands, S. Knappe et al., *Opt. Lett.* **27**, 1472 (2002).
17. A. Akulshin, A. Celikov, and V. Velichansky, *Opt. Comm.* **84**, 139 (1991).
18. M. D. Lukin, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 457 (2003).
19. M. Fleischhauer, A. Imamoglu, and J. P. Marangos, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 633 (2005).
20. R. Zhang and X.-B. Wang, *Phys. Rev. A* **94**, 063856 (2016).
21. V. M. Datsyuk, I. M. Sokolov, D. V. Kupriyanov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **77**, 033823 (2008).
22. А. В. Тайченачев, А. М. Тумайкин, В. И. Юдин, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 173 (2000).
23. C. Y. Ye and A. S. Zibrov, *Phys. Rev. A* **65**, 023806 (2002).
24. M. S. Feld and A. Javan, *Phys. Rev. A* **2**, 177 (1969).
25. H. Lee, Yu. Rostovtsev, C. J. Bednar, and A. Javan, *Appl. Phys. B* **76**, 33 (2003).
26. A. S. Sheremet, L. V. Gerasimov, I. M. Sokolov et al., *Phys. Rev. A* **82**, 033838 (2010).
27. K. A. Barantsev, S. V. Bozhokin, A. S. Kuraptsev et al., *JOSA B* **38**, 1613 (2021).
28. M. Bhattarai, V. Bharti, V. Natarajan et al., *Phys. Lett. A* **383**, 191 (2019).
29. G. V. Voloshin, K. A. Barantsev, and A. N. Litvinov, *Quant. Electr.* **50**, 1023 (2020).
30. Г. В. Волошин, К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, *ЖЭТФ* **156**, 5 (2019).
31. M. Stahler, R. Wynands, S. Knappe et al., *Opt. Lett.* **27**, 1472 (2002).
32. A. V. Taichenachev, V. I. Yudin, V. L. Velichansky et al., *Phys. Rev. A* **73**, 013812 (2006).
33. A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. A* **90**, 012511 (2014).

34. S. E. Skipetrov and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. B* **98**, 064207 (2018).
35. D. V. Kupriyanov, I. M. Sokolov, and M. D. Havey, *Opt. Comm.* **243**, 165 (2004).
36. A. S. Kuraptsev, I. M. Sokolov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. B* **96**, 023830 (2017).
37. Ф. Риле, *Стандарты частоты*, Физматлит, Москва (2009).
38. А. К. Вершовский, В. С. Жолнеров, Ю. В. Рождественский, О. П. Харчев, Патент RU 2490836 С1 от 20.08.2013.
39. И. М. Соколов, *КЭ* **45**, 10 (2015).
40. S. N. Bagayev, V. P. Chebotayev, A. K. Dmitriyev et al., *Appl. Phys. B* **52**, 163 (1991).
41. Ch. Chardonnet, F. Guernet, G. Charton, and Ch. J. Bord, *Appl. Phys. B* **59**, 333 (1994).

ЭФФЕКТ УДАРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО «ПЫЛЕНИЯ» И СПОСОБЫ ЕГО ПОДАВЛЕНИЯ

В. А. Огородников^{a,b}, *С. В. Ерунов*^{a,b}, *А. О. Бликов*^{a,b}, *Е. В. Кулаков*^{a*},
Е. А. Чудаков^{a,b}, *М. В. Антипов*^a, *К. Н. Панов*^a, *М. А. Сырунин*^a,
В. Н. Князев^a, *Н. Б. Давыдов*^a, *А. Б. Георгиевская*^{a,b}, *А. О. Яговкин*^a,
И. В. Юртов^a, *Д. Н. Замыслов*^{a,b}, *А. Е. Ковалев*^a,
А. В. Котин^a, *И. А. Блинов*^{a,b}, *М. Г. Новиков*^{a,b}

^a *Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

^b *Нижегородский государственный технический университет им. П. Е. Алексеева
603155, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 1 апреля 2021 г.,
после переработки 12 июля 2021 г.
Принята к публикации 14 июля 2021 г.

Приведены результаты исследований процесса выброса частиц со свободной поверхности металлических лайнеров при их ускорении до скоростей 4–5 км/с с помощью энергии взрывчатых веществ. Экспериментально показано, что подавление эффекта ударно-индуцированного «пыления» можно реализовать путем квазиизэнтропического или изэнтропического нагружения лайнеров в процессе их ускорения.

DOI: 10.31857/S004445102111002X

1. ВВЕДЕНИЕ

В физике ударных волн в последние десятилетия подробно исследовался и широко обсуждался эффект ударно-индуцированного «пыления», связанный с выбросом частиц материала со свободной поверхности (СП) лайнера при выходе на нее ударной волны (УВ) [1–20]. Главные источники выброса частиц связаны с микронеровностями на СП и дефектами структуры материала лайнера (поры, включения и т. п.). Обсуждаемый эффект может привести к экранировке СП «подушкой» из этих частиц, которая препятствует регистрации тонкой структуры динамики ее движения с использованием, например, доплеровских методов [21]. В ряде случаев наличие частиц перед СП вообще недопустимо, например, в устройствах для сжатия плазмы при исследовании термоядерного синтеза [22, 23].

В связи с этим возникает проблема подавления или даже полного исключения эффекта ударно-

индуцированного «пыления». Из природы самого эффекта следует наиболее простой способ его подавления, связанный с высокой чистотой обработки СП лайнера, изготовленного из бездефектного материала, или использования магнитного поля для безударно-волнового разгона лайнера [24–26]. Однако это не всегда реализуемо и эффективно.

Другой подход к решению данной проблемы связан с уменьшением интенсивности УВ, выходящей на СП, например, в задачах по высокоскоростному разгону лайнеров в виде пластин или оболочек с использованием энергии взрыва химических веществ. Так, в [27] этот подход реализован путем введения вакуумированного или воздушного зазора величиной 6 мм между взрывчатым веществом (ВВ, high explosive, HE) и лайнером из алюминия с крупномасштабными возмущениями на СП ($2a_0 = 0.5$ мм, $\lambda = 550$ мкм) при его скорости движения 1.5 км/с. На приведенных в [27] спектрограммах наблюдается ступенчатый характер ускорения лайнера как при вакуумированном, так и при воздушном зазорах, при этом утверждается, что «пылевые» потоки с СП

* E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

датчиками PDV не регистрируются. При увеличении зазора между ВВ и лайнером можно было бы добиться более плавного ускорения лайнера за счет реализации более изэнтропического нагружения.

Также уменьшение амплитуды УВ в лайнере реализовано в двухкаскадных устройствах для исследования квазиизэнтропической сжимаемости компонентов термоядерной смеси (дейтерий, гелий) в работах [28, 29]. Ускорение сжимающих исследуемый газ цилиндрической или сферической оболочек осуществлялось путем их нагружения оболочками первого каскада, разгоняемых продуктами взрыва мощного заряда ВВ, через зазор, заполненный газом под высоким давлением (250 атм). Такой способ приводит к тому, что разгон оболочек второго каскада происходит серией УВ небольшой интенсивности, циркулирующих между оболочками двух каскадов, квазиизэнтропически.

Чтобы продемонстрировать эффективность этих подходов для подавления эффекта ударно-индуцированного «пыления», в данной работе приведены экспериментальные результаты по сравнению эффектов «пыления» при ударно-волновом, квазиизэнтропическом и изэнтропическом способах нагружения лайнеров в виде пластин из меди марки М1. При этом опыты при ударно-волновом нагружении лайнера из меди проведены в аналогичной, по условиям нагружения, постановке опытов в [30], чтобы сопоставить полученные результаты. В отличие от [30], в данной работе использовалась более широкая диагностика, основанная на независимых физических принципах.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА И ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ МЕТОДИКИ ДИАГНОСТИКИ

Схемы проведения опытов с ударно-волновым, квазиизэнтропическим и изэнтропическим способами нагружения лайнеров при использовании зарядов ВВ на основе гексогена диаметром 120 мм и высотой 220, 70 и 120 мм приведены на рис. 1. Используемые габаритно-весовые характеристики зарядов ВВ были выбраны с целью обеспечения близких конечных скоростей ускоряемых лайнеров 5 км/с. С каждым способом нагружения лайнера проведено по два опыта.

При ударно-волновом способе нагружения (УВН) лайнеры из меди толщиной 3 мм имели чистоту обработки СП Ra 1.25 (опыт 1) и Rz 20 (опыт 2) на диаметре 60 мм. Их нагружали стальным ударником диаметром 60 мм и толщиной 2.2 мм со скоростью 5.1 км/с, что соответствовало

выходу на СП лайнера из меди УВ прямоугольного профиля с амплитудой 160 ГПа. Расстояние между ударником и лайнером составляло 68 мм. Это пространство было заполнено разреженным воздухом при давлении 0.2–0.3 мм рт. ст. (технический вакуум).

При квазиизэнтропическом способе нагружения (КИН) биметаллические лайнеры из алюминия толщиной 5.5 мм и меди толщиной 1.0 мм также имели чистоту обработки СП Ra 1.25 (опыт 3) и Rz 20 (опыт 4) на диаметре 60 мм. Их нагружали стальным ударником диаметром 60 мм и толщиной 3.5 мм через слой аргона толщиной 30 мм, находящийся под давлением 60 атм, что соответствовало выходу на СП лайнера серии УВ с амплитудой первой волны 10 ГПа.

При изэнтропическом способе нагружения (ИН) биметаллические лайнеры из алюминия толщиной 2.0 мм и меди толщиной 1.0 мм имели чистоту обработки СП Ra 1.25 на диаметре 120 мм. Их нагружали продуктами взрыва заряда ВВ через зазоры величиной $\Delta = 15$ мм (опыт 5) и $\Delta = 10$ мм (опыт 6), заполненные разреженным воздухом при давлении 6.7 (опыт 5) и 0.6 мм рт. ст. (опыт 6), что соответствовало плавному нагружению лайнера.

На рис. 2 приведены характерные профилограммы СП лайнеров, имеющих чистоту обработки Ra 1.25 и Rz 20, а в таблице приведены фактические характеристики рельефа СП в каждом опыте: $2a_0$ — расстояние между впадинами и горбами (амплитуда возмущений), λ — расстояние между горбами (длина волны возмущений), а также величина разрежения воздуха в вакуумируемых пространствах, P_0 , и величина давления в аргоне, P_G .

Во всех опытах на расстоянии 30 мм от СП лайнера устанавливали одинаковые приемники с датчиками для диагностики движения и определения параметров «пылевых» потоков и СП, расположенными на площади радиусом до 16 мм относительно геометрического центра лайнера. В пространстве между СП лайнеров из меди и датчиками в приемнике создавали разрежение P_0 (технический вакуум) (см. таблицу).

В зависимости от вида применяемых методик регистрации были использованы три группы датчиков PDV, два типа пьезодатчиков и два оптических волокна пирометра:

— открытые датчики PDV, предназначенные для измерения времени выхода УВ или волны сжатия на СП лайнера и непрерывной регистрации ее скорости до подлета к приемнику, а также дисперсии скорости частиц («пыли»), если они имеются;

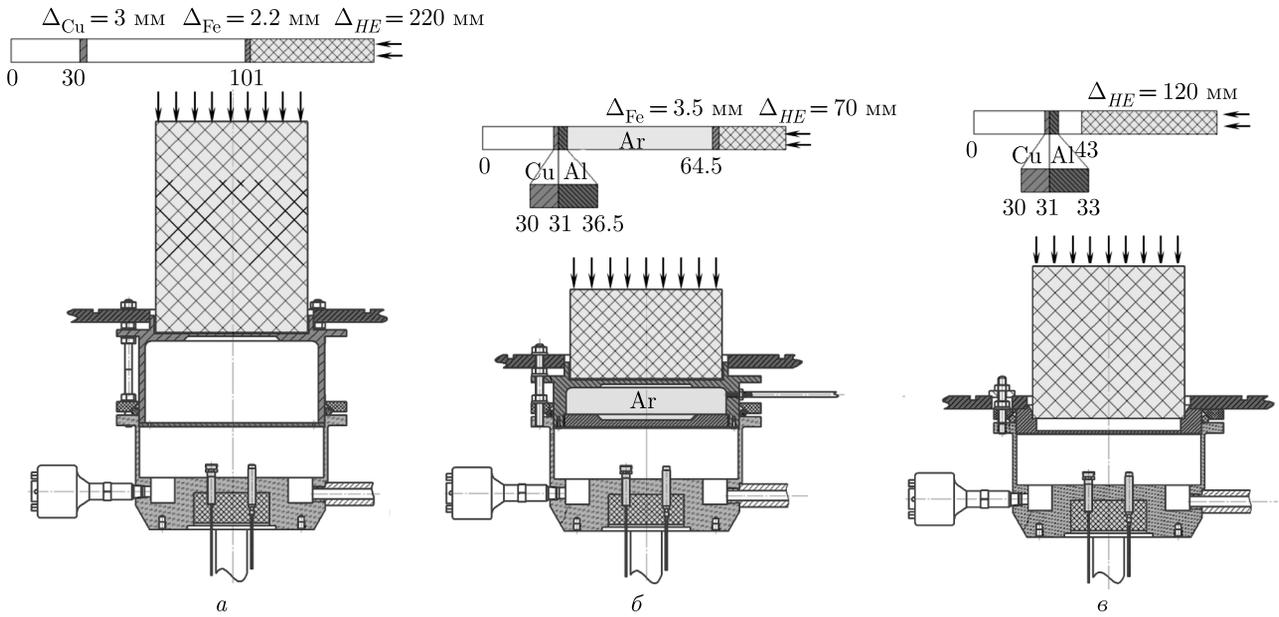


Рис. 1. Схемы нагружения лайнеров, а — УВН, б — КИН, в — ИН

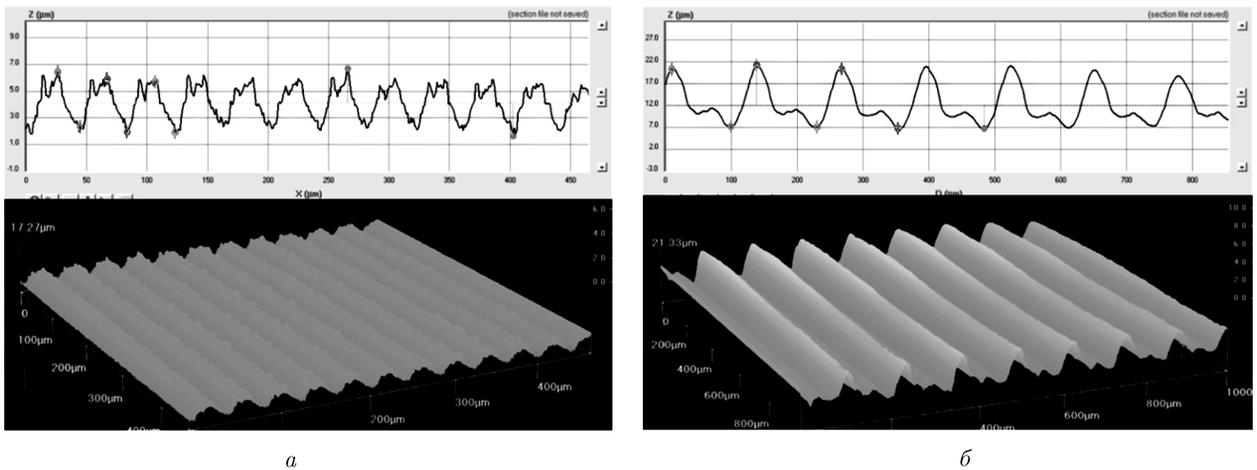


Рис. 2. Профилограммы СП лайнеров из меди, а — Ra 1.25, б — Rz 20

— датчики PDV, закрытые индикаторными экранами, предназначенные для измерения их скорости и оценки удельной на единицу поверхности массы «пыли». Использовали по два датчика, закрытых индикаторными экранами: из алюминия толщиной 200 и 30 мкм, из тантала толщиной 200 мкм и кварцевого стекла толщиной 200 мкм;

— открытые угловые датчики PDV, установленные под углом 30° к оси приемника устройства, предназначенные для зондирования скорости по диаметру СП лайнера;

— пьезодатчики, предназначенные для определения удельной на единицу поверхности массы «пы-

ли» и оценки средней скорости (СП) лайнера и среды, опережающей СП лайнера. Использовали по два датчика с чувствительными элементами из пьезокерамики (ЦТС-21) и кварца диаметром 4 мм и толщиной 0.5 мм;

— два оптических волокна пирометра, предназначенные для определения яркостной температуры. Измерения проводили двумя фотоэлектронными умножителями через интерференционные фильтры с максимумом пропускания на длинах волн 1500 и 1600 нм с полосой пропускания на полувысоте 12 нм. Перед опытами оптические линии с детекторами калибровали эталонным источником излу-

Таблица. Фактические характеристики рельефа СП и давления в полостях устройств

Способ нагружения	Ударно-волновой		Квазиизэнтропический		Изэнтропический	
	1	2	3	4	5	6
№ опыта						
Измен. величина	Ra 1.25	Rz 20	Ra 1.25	Rz 20	Ra 1.25	Ra 1.25
$2a_0$, мкм	5	17	7	16	4	8
λ , мкм	40	130	50	130	40	40
P_0 , Па (мм рт. ст.)	32 (0.24)	40 (0.30)	62 (0.47)	63 (0.48)	890 (6.7)	80 (0.6)
P_G , Па (атм)	–	–	$8.0 \cdot 10^2$ (60.9)	$7.9 \cdot 10^2$ (60.3)	–	–

ния абсолютно черного тела с температурой 1600 К.

Наряду с описанной выше диагностикой движения СП во всех опытах применяли рентгенографическую методику регистрации. В качестве источника рентгеновского излучения использовали установку 2 Эридан-3, граничная энергия излучения которой составляла 1 МэВ, а длительность импульса на полувысоте 100 нс. Коэффициент рентгенографического увеличения в опытах составлял 1.2. Регистрацию моментов рентгенографирования осуществляли с помощью цифрового осциллографа TDS3054 с погрешностью ± 0.1 мкс. Регистрацию рентгеновских изображений проводили с помощью пакета фотохромных экранов ADC-CR, расположенных друг за другом. Изображения, полученные на экранах, суммировали по специальному алгоритму [31]. Погрешность положения характерных границ на изображении составляла 0.2 мм. Из-за большого веса заряда ВВ (5 кг ТЭ) в опытах для сохранения рентгеновской установки и системы регистрации использовали достаточно толстые защитные экраны из алюминиевого сплава (на броне каземата 5 мм, на бронекассете 10 мм). Такая постановка опытов позволяет зарегистрировать поток частиц меди средней плотностью 0.02 г/см^3 (ступенька медного клина 100 мкм) и более.

Выбор физической схемы опытов проводили на основании одномерных и двумерных численных расчетов с использованием программного обеспечения и вычислительных комплексов РФЯЦ-ВНИИЭФ [32–34]. В одномерных расчетах определяли параметры нагружения импульсом давления $P(t)$ медных образцов, рассчитывали зависимости $X(t)$, $W(t)$, $T(t)$ СП меди. В двумерных расчетах определяли область нагружения СП медных образцов импульсом давления («плоский» участок СП), не

подверженную влиянию боковых разгрузок. Измерения скорости СП и параметров пыли методиками пьезоэлектрических и PDV-датчиков проводили в области «плоского» участка СП. Расчет детонации и условий нагружения лайнеров продуктами взрыва проводили с использованием уравнения состояния в форме Зубарева [35]. Для металлов Fe, Al, Cu использовали уравнения состояния в форме РОСА [36]. Для аргона использовали уравнение состояния в форме идеального газа с $\gamma = 5/3$. Для начального давления аргона 60 атм принимали плотность $\rho = 0.107 \text{ г/см}^3$. В расчетах устройств с изэнтропическим и квазиизэнтропическим нагружениями для лайнера из меди учитывали сдвиговую прочность по релаксационной модели сдвиговой прочности [37]. Геометрию этих схем нагружения выбирали с учетом предполагаемого отсутствия развития микрокумулятивных струй с микрорельефа СП. Начальная геометрия устройств, использованная в расчетах, приведена на рис. 1.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 приведены рентгенографические снимки профилей СП лайнеров из меди с шероховатостью СП Rz 20 (опыты 2, 4) и Ra 1.25 (опыт 6), полученные при различных способах их нагружения (УВН, КИН, ИН). Штриховыми линиями обозначено начальное положение СП лайнеров.

На снимках (рис. 3) приведены времена выхода УВ или возмущений на СП лайнера, t_0 , и рентгенографирования ее формы в процессе движения, t_γ , относительно времени подачи высоковольтного импульса на систему инициирования заряда ВВ. В

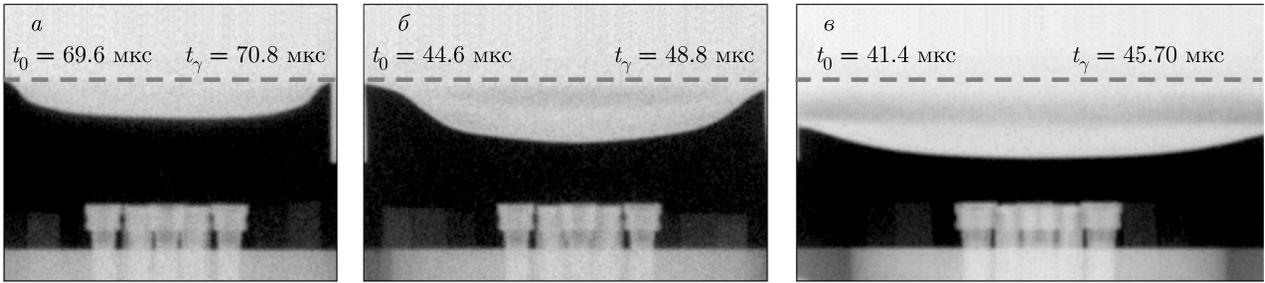


Рис. 3. Рентгенограммы опытов: а — УВН, Rz 20; б — КИН, Rz 20; в — ИН, Ra 1.25

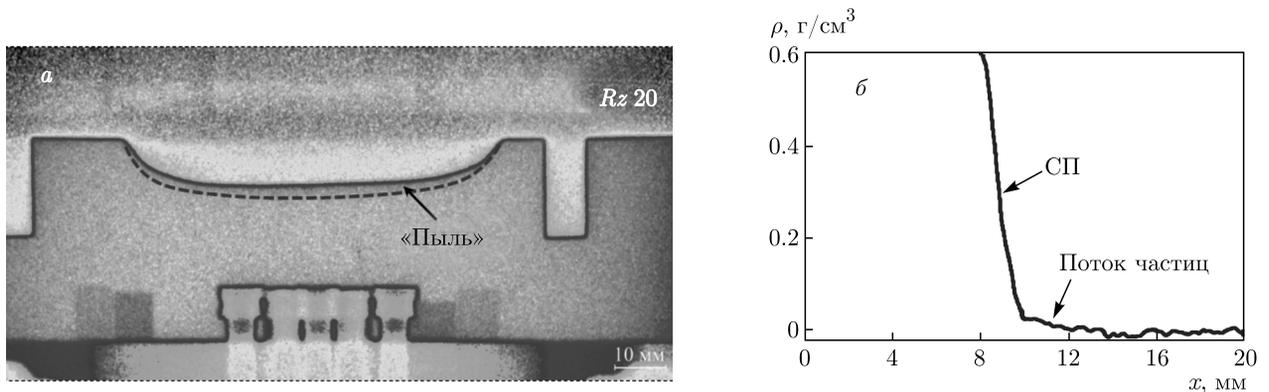


Рис. 4. а) Рентгеноснимок опыта №2 на момент времени $t_\gamma = 70.8$ мкс в псевдоцветах. б) Распределение плотности потока частиц перед СП

опытах 1, 3 получены аналогичные результаты при лучшей чистоте обработки СП (Ra 1.25), а в опыте 5 при большей величине зазора между зарядом ВВ и лайнером ($\Delta = 15$ мм). Результаты компьютерной обработки рентгеноснимков показывают, что во всех опытах, за исключением опыта 2 (УВН, Rz 20), на момент регистрации потока частиц перед СП лайнера не наблюдается. В опыте 2 удалось зарегистрировать малоплотный поток частиц перед СП лайнера, что видно в увеличенном масштабе и в псевдоцвете на рис. 4а. На рис. 4б для опыта 2 приведено распределение плотности потока частиц в направлении его движения, величина которой вблизи СП составила 20 мг/см^3 , что соответствует примерно порогу разрешения используемой рентгенографической методики. Участок $\rho(x)$, связанный с СП, на рис. 4б не выглядит «вертикальным» из-за размытия, связанного с высокой скоростью движения лайнера, и неидеальности обработки рентгеноснимка.

На рис. 5 приведены спектрограммы скоростей движения СП лайнеров из меди, зарегистрированные PDV-датчиками во всех шести опытах. Здесь же жирными сплошными линиями нанесены резуль-

таты численных расчетов динамики движения СП, которые свидетельствуют об их хорошем согласии с результатами экспериментов. На рис. 5а и 5г приведены данные, полученные одним датчиком PDV, по другим датчикам получены аналогичные результаты. Наблюдаемое «расщепление» на рис. 5а является приборным «артефактом», связанным с использованием частотного уплотнения сигналов на одном канале регистратора.

Анализ спектрограмм свидетельствует о наличии заметных потоков частиц перед СП лайнеров при их ударно-волновом нагружении в опытах 1 и 2, которые экранируют СП, поэтому PDV-датчики скорость ее движения не регистрируют (рис. 5а,г) за исключением начального участка длительностью (0.1–0.2) мкс.

При квазиизэнтропическом нагружении лайнеров в опытах 3, 4 диаграммы скорости движения СП имеют ступенчатый вид (рис. 5б,д). Величины первых ступенек скорости и скорости подлета СП к приемнику с датчиками диагностики составляют 0.63 ± 0.03 и 4.25 ± 0.05 км/с (опыт 3) и 0.62 ± 0.02

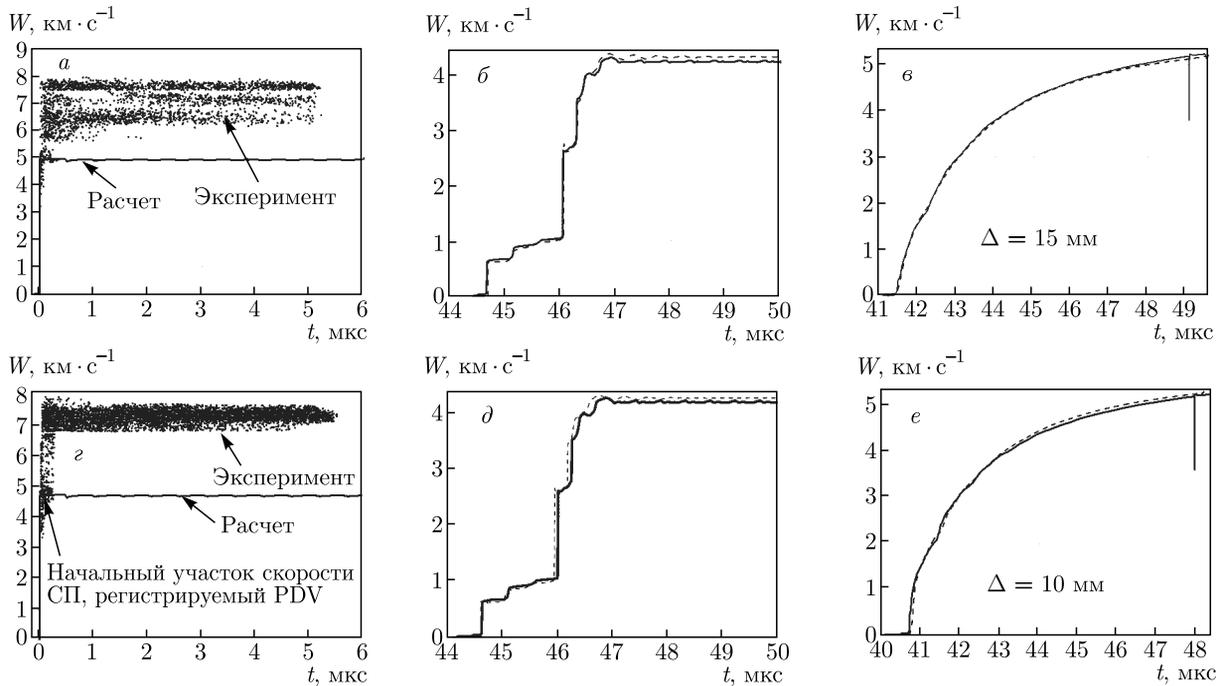


Рис. 5. Оцифрованные спектрограммы скорости движения СП. а, з — УВН, Ra 1.25, Rz 20; б, д — КИН, Ra 1.25, Rz 20; в, е — ИН, Ra 1.25. На рис. б, в, д, е штриховые линии — PDV (средняя по четырем датчикам), сплошные — расчет

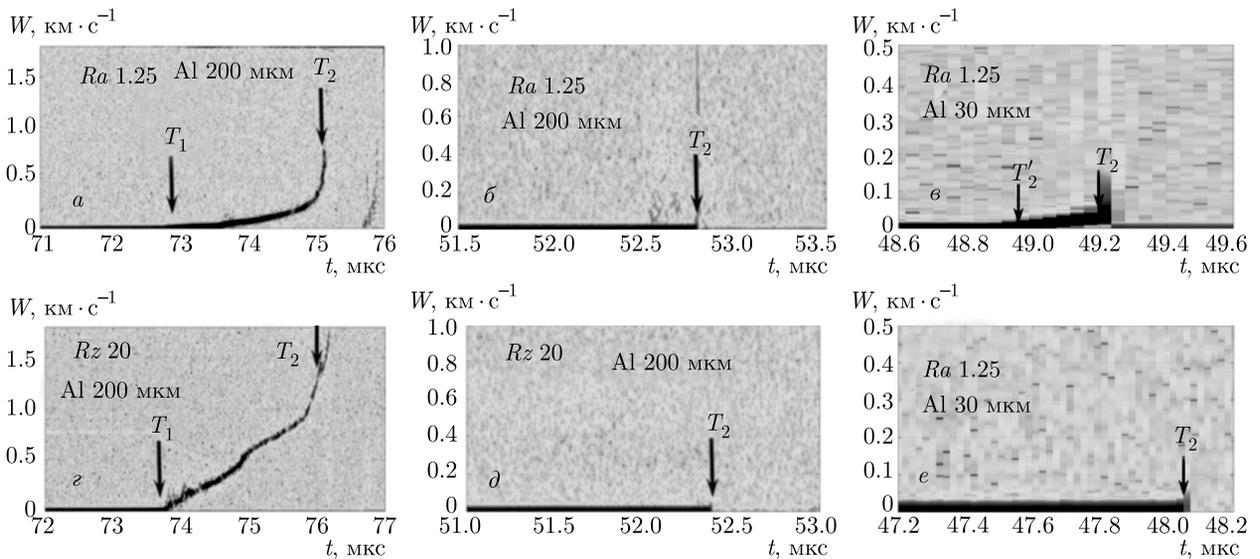


Рис. 6. Спектрограммы скоростей движения индикаторных экранов, а, з — УВН; б, д — КИН; в, е — ИН; T_1, T_2 — подлет к индикаторному экрану фронта потока частиц и СП соответственно, T_2' — время начала воздействия УВ в остаточном газе

и 4.28 ± 0.01 км/с (опыт 4). На ступеньках оцифрованных спектрограмм не наблюдается дисперсии скорости, связанной с выбросом частиц с СП.

При изэнтропическом нагружении лайнеров в опытах 5, 6 диаграммы скорости движения СП име-

ют плавно возрастающий характер до величины скорости 5.2 км/с (рис. 5в,е). Потока частиц перед СП не наблюдается.

Отмеченные закономерности относительно наличия потоков частиц перед СП подтверждают ре-

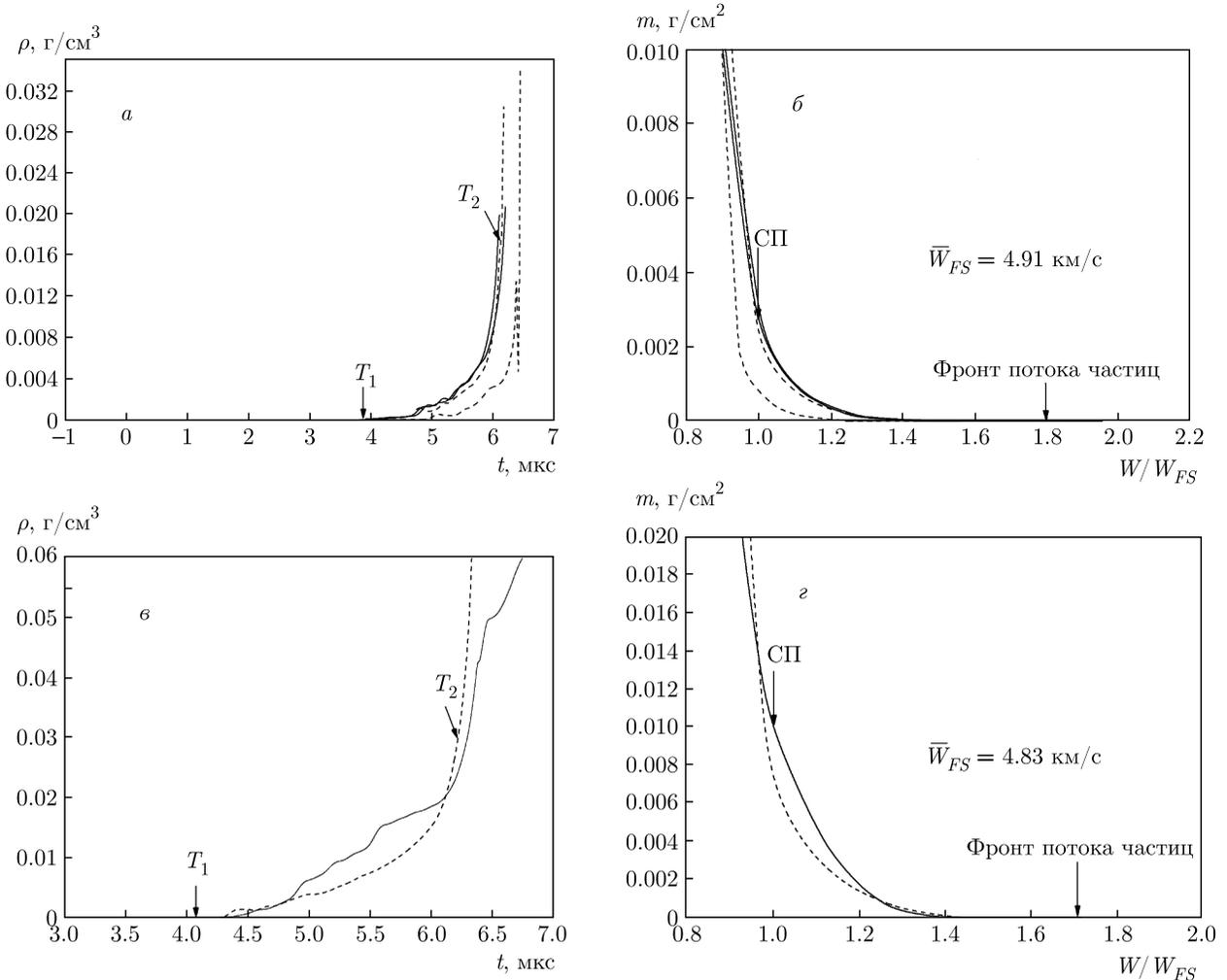


Рис. 7. Распределения плотности и массы в потоках частиц перед СП; *a, б* — опыт 1 (Ra 1.25), *в, г* — опыт 2 (Rz 20); \bar{W}_{FS} — скорость подлета СП к пьезодатчикам; T_1, T_2 — подлет к пьезодатчикам потока частиц и СП соответственно. Штриховые кривые — кварц, сплошные — пьезокерамика

зультаты измерений скоростей индикаторных экранов PDV-датчиками (рис. 6) и вычисленные, по результатам измерений давлений пьезоэлектрическими датчиками, распределения плотности и массы потоков частиц перед СП (рис. 7). На рис. 7а и 7б представлены зависимости, полученные двумя кварцевыми и двумя пьезокерамическими датчиками. На рис. 7в и 7г приведены зависимости, полученные одним кварцевым и одним пьезокерамическим датчиками, сигналы с других датчиков по техническим причинам получены не были.

Так, в опытах 1, 2 при ударно-волновом нагружении лайнеров PDV-датчики регистрируют скорости движения потоков частиц (рис. 5а,з) и индикаторных экранов (рис. 6а,з) под их действием. При-

чем удельная на единицу поверхности масса потока частиц, оцененная с использованием закона сохранения импульса, в опыте 2 ($m = 10 \pm 2$ мг/см²) больше, чем в опыте 1 ($m = 3 \pm 1$ мг/см²), что связано с худшей чистотой обработки СП лайнера (см. таблицу). В опытах 3, 4 (рис. 5б,д и 6б,д) и 5, 6 (рис. 5в,е и 6в,е) при квазиизэнтропическом и изэнтропическом нагружениях лайнеров поток частиц датчиками PDV не регистрируется ни перед СП, ни по движению индикаторных экранов. Наблюдаемое в момент времени T_2' небольшое увеличение скорости на индикаторном экране из алюминия толщиной 30 мкм (рис. 6в) связано с наличием остатков воздуха, что подтверждается расчетами с учетом начальных давлений воздуха в устройстве 6.7 мм рт. ст. (опыт 5) и 0.6 мм рт. ст. (опыт 6).

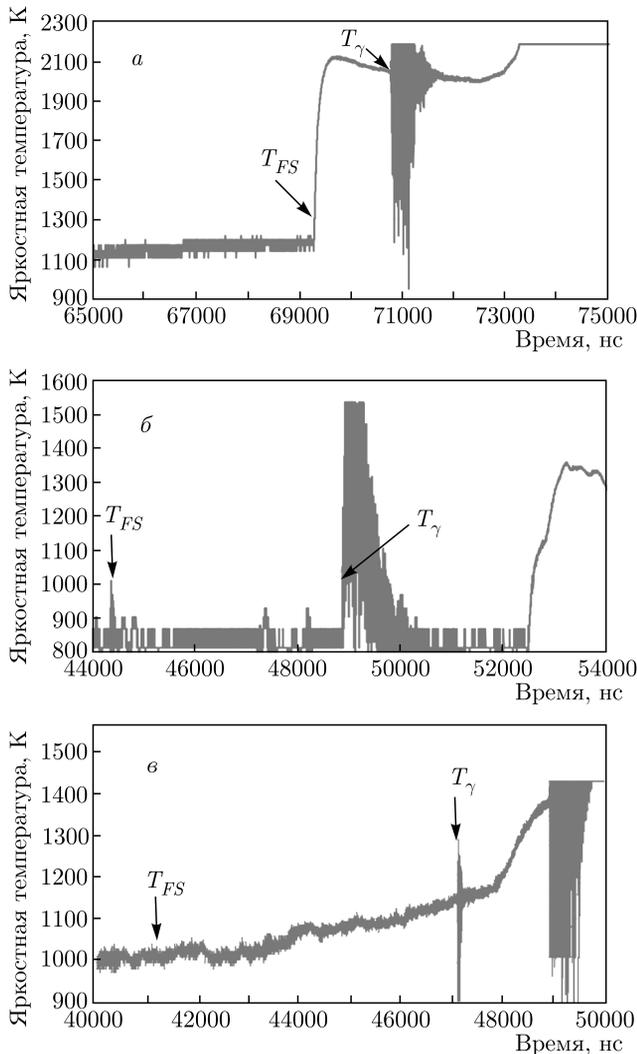


Рис. 8. Результаты измерений яркостной температуры на длине волны 1500 нм: T_{FS} , T_γ — времена выхода УВ или волны сжатия на СП и подачи рентгеновского импульса соответственно, *a* — УВН (опыт 1); *b* — КИН (опыт 3), *v* — ИН (опыт 5)

Аналогичные выводы следуют из результатов измерений давлений с использованием пьезоэлектрических датчиков. Так, в опытах 1, 2 при ударно-волновом нагружении лайнеров оцененные удельные на единицу поверхности массы потоков частиц перед СП составляют $m = 2.4 \pm 0.5$ мг/см² и $m = 9.5 \pm 1.5$ мг/см² соответственно. В опытах 3, 4, 5, 6 при квазиизэнтропическом и изэнтропическом нагружениях лайнеров пьезоэлектрические датчики потоков частиц перед СП лайнеров не регистрируют.

На рис. 8 приведены результаты пирометрических измерений яркостной температуры СП лай-

неров. «Ненулевые» значения температур в отсутствие полезного сигнала, например до выхода УВ на СП, обусловлены теньевым током ФЭУ и связаны с особенностями обработки калибровочного и экспериментального сигналов. Значение температуры «нулевой» линии не влияет на величину и интерпретацию экспериментального сигнала при времени $t \geq T_{FS}$.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что при УВН в момент выхода УВ на СП регистрируется температура $T \approx 2100$ К, близкая к температуре меди после изэнтропической разгрузки при данных условиях нагружения [38]. При КИН и ИН регистрируемые сигналы не превышают фоновых значений.

Аналогичные качественные закономерности следуют из газодинамических расчетов. Так, расчетные температуры СП лайнера составляют ≈ 1700 К, ≈ 900 К, ≈ 350 К соответственно при ударно-волновом, квазиизэнтропическом и изэнтропическом режимах нагружения.

Следует отметить, что в опытах 1 и 2 при УВН лайнеров как PDV-датчики, так и пьезодатчики регистрируют большой спектр скоростей частиц от 7 до 10 км/с, что не противоречит данным [30], полученным в аналогичных условиях нагружения лайнеров из меди. Однако зарегистрированная в [30], с использованием спектроскопического метода, температура плазмы меди 11000 К в данной работе, с использованием пирометрической методики, не подтверждена.

На рис. 9 приведены расчетные $x-t$ -диаграммы движения СП лайнеров из меди при различных способах их нагружения. Здесь же для сравнения нанесены результаты экспериментов с использованием рентгенографической, лазерно-оптической (гетеродин-интерферометра) и пьезоэлектрической методик, которые свидетельствуют о хорошем согласии всех представленных результатов, полученных с использованием методик, основанных на независимых физических принципах.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. При исследовании ударно-индуцированного «пыления», связанного с выбросом частиц со свободной поверхности лайнеров из меди (М1) при выходе на нее ударной волны с давлением 160 ГПа (УВН), определены параметры потоков частиц: удельные массы $m = 2.8 \pm 1.0$ мг/см² и $m = 9.8 \pm 2$ мг/см², соотношения скоростей потока частиц

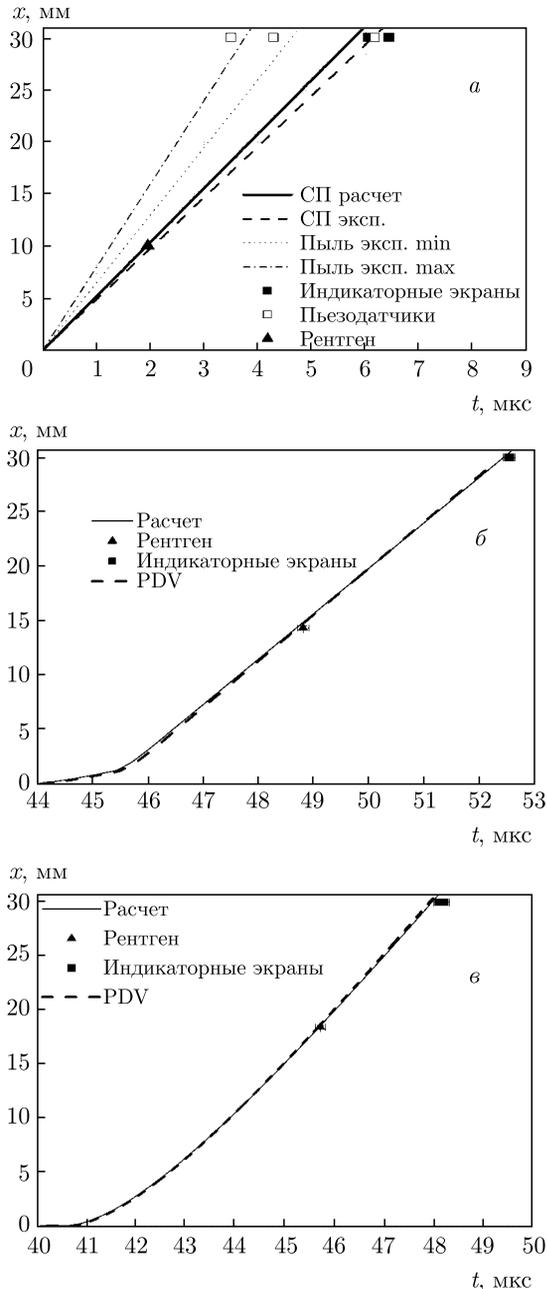


Рис. 9. x - t -диаграммы движения СП и пылевого потока, а — УВН (опыт 1), б — КИН (опыт 3), в — ИН (опыт 5)

и СП $W_P/W_{FS} = 1.8 \pm 0.2$ и 1.7 ± 0.3 для лайнеров с чистой поверхностью Ra 1.25 и Rz 20 соответственно.

2. Показано, что использование квазиизэнтропического режима нагружения (серией УВ в течение 2 мкс с амплитудой первой волны 10 ГПа) и изэнтропического нагружения (серией волн сжатия в течение 8 мкс с амплитудой первой волны 0.1 ГПа) приводит, в отличие от ударно-волнового

нагружения, к устранению потока частиц перед СП лайнеров из меди (М1) с чистотой обработки Ra 1.25 и Rz 20 при их ускорении до скоростей 4.3 и 5.2 км/с соответственно, по крайней мере в пределах разрешающей способности используемых методик (по массе ≥ 0.5 мкг/см², по плотности ≥ 1.0 мкг/см³).

Благодарности. Авторы выражают благодарность сотрудникам, принявшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных результатов: А. В. Романову, А. С. Пупкову, В. А. Баранову, Г. С. Яндубаеву, В. В. Ковалдову, Д. М. Моисееву, В. В. Ерастову, А. А. Утенкову, И. В. Юргову, А. В. Федосееву, Д. А. Рыбальченко, Д. С. Миронову, С. А. Янкову, И. В. Шмелеву, Д. А. Калашникову, А. П. Явтушенко, А. М. Тарасову, С. И. Киршанову, А. В. Гущину, В. В. Лосеву, А. Н. Черяеву, А. В. Зайцеву, Р. В. Тилькунову, М. А. Каганову, В. Н. Филияеву, М. О. Лебедевой, Д. Е. Зотову, В. А. Комракову, Р. А. Воронкову, Т. А. Адигамовой, А. С. Соколовой.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (в рамках соглашения с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 и программы по созданию молодежных лабораторий (научная тема «Газодинамика и физика взрыва»)).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. S. Vogan, W. W. Anderson, M. Grover et al., J. Appl. Phys. **98**, 113508 (2005).
2. Н. Д. Семкин, К. Е. Воронов, Л. С. Новиков и др., ПТЭ № 2, 123 (2005).
3. T. Resseguier, L. Signor, A. Dragon et al., J. Appl. Phys. **101**, 013506 (2007).
4. M. B. Zellner, M. Grover, J. E. Hammerberg et al., J. Appl. Phys. **102**, 013522 (2007).
5. T. C. Germann, J. E. Hammerberg, and G. Dimonte, 7th Biannual Int. Conf.: New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, Portugal (2008), pp. 18–23.
6. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, В. В. Бурцев и др., ЖЭТФ **136**, 615 (2009).
7. Н. В. Невмержицкий, А. Л. Михайлов, В. А. Раевский и др., ВАНТ, сер. Теоретическая и прикладная физика № 3, 3 (2010).

8. G. Dimonte, G. Terrones, F. Cherne et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 264502 (2011).
9. Yongtao Chen, Haibo Hu, Tiegang Tang et al., *J. Appl. Phys.* **111**, 053509 (2012).
10. D. M. Or'о, J. E. Hammerberg, W. T. Buttler et al., *AIP Conf. Proc.* **1426**, 1351 (2012).
11. D. S. Sorenson, R. M. Malone, G. A. Capelle et al., *Proc. NEDPC 2013*, Livermore, California, US, LA-UR-14-23036 (2013).
12. М. В. Антипов, А. Б. Георгиевская, В. В. Игонин и др., *Международная конференция XV Харитоновские научно-тематические чтения, Сб. докладов, Proc. Int. Conf. XV Khariton's Topical Scientific Readings*, Саров (2013), с. 666.
13. S. K. Monfared, D. M. Or'о, M. Grover et al., *J. Appl. Phys.* **116**, 063504 (2014).
14. А. Л. Михайлов, В. А. Огородников, В. С. Сасик и др., *ЖЭТФ* **145**, 892 (2014).
15. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, В. С. Сасик и др., *ЖЭТФ* **150**, 411 (2016).
16. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, С. В. Ерунов и др., *ЖЭТФ* **152**, 1156 (2017).
17. W. T. Buttler, S. K. Lamoreaux, R. K. Schubze et al., *J. Dynamic Behavior Mater.* **3**, 334 (2017).
18. Н. В. Невмержицкий, В. А. Раевский, Е. А. Сотсков и др., *ФГВ* **54**, 82 (2018).
19. М. В. Антипов, И. В. Юртов, А. А. Утенков и др., *ФГВ* **54**, 96 (2018).
20. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, С. В. Ерунов и др., *ЖЭТФ* **156**, 474 (2019).
21. J. R. Asay and L. M. Barker, *J. Appl. Phys.* **45**, 2540 (1974).
22. А. С. Козырев, *Газодинамический термоядерный синтез*, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (2005).
23. С. Ф. Гаранин, *Физические процессы в системах МАГО МТФ*, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (2012).
24. R. W. Lemke, H. D. Knudson, and J. P. Davis, *Int. J. Impact End.* **38**, 480 (2011).
25. R. W. Lemke, D. H. Dolan, D. G. Dalton et al., *J. Appl. Phys.* **119**, 015904 (2016).
26. W. T. Buttler, D. M. Or'о, D. L. Preston et al., *J. Fluid Mech.* **703**, 60 (2012).
27. W. Georges, J. Loiseau, A. Higgins et al., *AIP Conf. Proc.* **1793**, 060026 (2017).
28. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., *ЖЭТФ* **146**, 169 (2014).
29. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., *ЖЭТФ* **151**, 592 (2017).
30. М. И. Кулиш, В. Б. Минцев, С. В. Дудин и др., *Письма в ЖЭТФ* **94**, 105 (2011).
31. В. А. Аринин, Б. И. Ткаченко, Цифровая обработка сигналов **2**, 52 (2006) [V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, *Pattern Recognition and Image Analysis* **19**, 63 (2009)].
32. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, *ВАНТ, сер. Методики и программы численного решения задач математической физики*, вып. 3, 11 (1982).
33. С. М. Бахрах, С. Ф. Спиридонов, А. А. Шанин, *ДАН СССР* **276**, 829 (1984).
34. Ю. В. Янилкин, Т. А. Торопова, *ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов*, вып. 4, 58 (1994).
35. В. Н. Зубарев, А. А. Евстигнеев, *ФГВ* **20**, 114 (1984).
36. Б. Л. Глушак, Л. Ф. Гударенко, Ю. М. Стяжкин, *ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов*, вып. 2, 57 (1991).
37. Б. Л. Глушак, О. Н. Игнатова, С. С. Надежин, В. А. Раевский, *ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов*, вып. 2, 25 (2012).
38. Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович и др., *Физика взрыва*, Наука, Москва (1975).

УСТОЙЧИВАЯ ГЕНЕРАЦИЯ БОКОВОЙ ПОЛОСЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА В ОПТОМЕХАНИЧЕСКОЙ ФОТОН-МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ С НАКАЧКОЙ ФОНОНАМИ

Хуа-Цзюнь Чен^{}, Юн-Лэй Чен, Пэн-Цзие Чжун, Бао-Чэн Ху*

*School of Mechanics and Photoelectric Physics,
Anhui University of Science and Technology
Huainan Anhui 232001, China*

Поступила в редакцию 30 апреля 2021 г.,
после переработки 30 апреля 2021 г.
Принята к публикации 28 мая 2021 г.

(Перевод с английского)

ROBUST SECOND-ORDER SIDEBAND GENERATION IN A PHOTONIC-MOLECULE OPTOMECHANICS WITH PHONON PUMP

Hua-Jun Chen, Yong-Lei Chen, Peng-Jie Zhu, Bao-Cheng Hou

Теоретически изучена генерация боковой полосы второго порядка (ГБПВП) при помощи фоновой накачки оптомеханической фотон-молекулярной системы при резонансных условиях и вдали от резонанса. Обнаружено, что частотная зависимость эффективности генерации имеет четыре боковых пика в резонансе при изменении разных параметров, включая константу связи резонаторов J , отношение δ , характеризующее два резонатора, амплитуду f и фазу ϕ_m фоновой накачки. Эффективность ГБПВП может быть существенно увеличена при одновременном использовании связи резонаторов и накачки фононами. Более того, ГБПВП наблюдается и в состояниях вдали от резонанса, в которых происходит расщепление мод в зависимости от значения разных параметров. В нашей работе найден перспективный способ создания управляемой оптической нелинейности.

DOI: 10.31857/S0044451021110031

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение последних лет оптомеханические системы (ОМСИ), в которых происходит взаимодействие оптических и фоновых мод, стали активно исследоваться [1]. Были изучены различные оптомеханические явления, которые могут способствовать применению оптомеханических устройств, в том числе охлаждение к основному состоянию [2–4], оптомеханически-индуцированная прозрачность (ОМИП) [5–8], явления медленного и быстрого света [8–10], сжатого света [11–13] и

проведены измерения массы [14–17]. С другой стороны, ОМСИ дают возможность изучать нелинейные явления, связанные со взаимодействием света и вещества, в том числе оптическую бистабильность [18–22] и четырехволновое смешивание (ЧВС) [23–26]. Недавно в различных ОМСИ был обнаружен еще один нелинейный оптомеханический эффект — генерация боковой полосы высшего порядка [27–39]. При использовании в ОМСИ мощного лазера накачки (частоты ω_p) и маломощного лазера зондирования (частоты ω_s) ГБПВП появляется на частотах $\omega_p \pm 2\delta$ ($\delta = \omega_s - \omega_p$ — это отстройка частоты зондирования от частоты накачки), где знак «+» («–») соответствует верхней (нижней) частоте боковой полосы второго порядка. Изучение боковой полосы второго порядка важно для исследования

^{*} E-mail: chenphysics@126.com

нелинейных оптомеханических взаимодействий [40–43], а ее генерация позволит с большей точностью измерять электрический заряд [44, 45] и микромаcсы [46], управлять распространением света [30, 47], генерировать оптические частотные гребенки [35] и создавать преобразователи частоты [48].

Однако поскольку ГБВП в ОМСИ является достаточно слабой, важным становится вопрос о том, как получить и усилить ГБВП. Усилению ГБВП было уделено большое внимание, и этого удалось достичь в разных оптомеханических системах, например, в изготовленных из нелинейного материала Керра [36], в оптомеханических системах с механической накачкой [28], а также в гибридной оптомеханической связанной двухуровневой системе [37]. В настоящей работе для получения усиления ГБВП мы исследуем оптомеханическую фотон-молекулярную систему, которая содержит два резонатора с модами шепчущей галереи (МШГ), один из которых является оптомеханическим резонатором, а второй — обычным оптическим. Механические колебания в системе возбуждаются посредством слабой когерентной фононной накачки, а связь обоих резонаторов J контролируется изменением расстояния между ними, как это наблюдалось экспериментально [49]. Усиление ГБВП достигается путем управления амплитудой f и фазой ϕ_m механической накачки, отношением уровней затухания в резонаторах δ и силой их связи J соответственно в резонансном режиме и в режиме разбалансировки.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

На рис. 1 показано схематическое изображение оптомеханической фотон-молекулярной системы, которая состоит из двух МШГ-микрорезонаторов, имеющих непосредственную связь [5, 49, 50]. Первый МШГ-резонатор c является оптомеханическим резонатором, который характеризуется затуханием κ_c и частотой ω_c резонаторной моды, возбуждаемой сильным полем накачки в присутствии слабого зондирующего поля, проходящего по коническому оптоволокну. Вследствие действия силы светового давления поле световой волны, заведенное в оптомеханический резонатор c , индуцирует радиальную дыхательную моду (механическую моду b) с частотой ω_m и скоростью затухания γ_m . Кроме того, на механическую моду b оказывает влияние слабая когерентная накачка фононами. Чтобы учесть взаимодействие между оптической модой

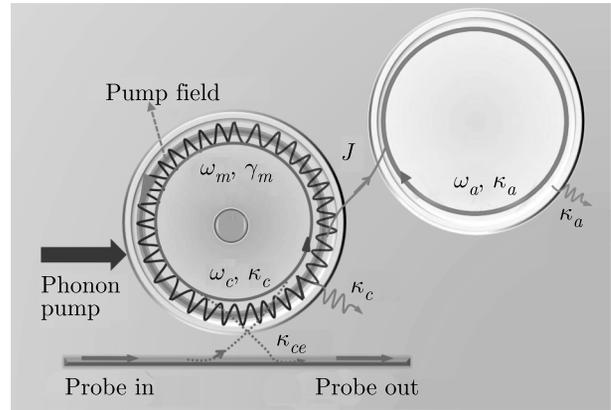


Рис. 1. Схематическое изображение оптомеханической фотон-молекулярной системы с фононной накачкой, которая состоит из оптомеханического резонатора c , возбуждаемого двухтоновым лазерным излучением, и вспомогательного резонатора a высокой добротности. Параметр J характеризует силу связи двух резонаторов посредством затухающего поля

c и механической модой b посредством давления излучения, введем силу оптомеханической связи $g = g_0 x_0$ ($g_0 = \omega_c/R$ и R — радиус резонатора c). Нулевые колебания положения механического осциллятора даются величиной $x_0 = \sqrt{\hbar/2M\omega_m}$ (M — эффективная масса МШГ-резонатора c) [5]. Второй МШГ-резонатор является вспомогательным, в нем возбуждается оптическая мода a , характеризуемая затуханием κ_a и частотой ω_a . Этот резонатор связан с оптомеханическим резонатором посредством затухающего поля. В системе отсчета, которая вращается с частотой накачки ω_p , полный гамильтониан оптомеханической фотон-молекулярной системы можно разбить на три части [1, 5, 43, 50]:

$$\begin{aligned} H_0 &= \hbar\Delta_c c^\dagger c + \hbar\Delta_a a^\dagger a + \hbar\omega_m b^\dagger b, \\ H_{int} &= \hbar J(a^\dagger c + ac^\dagger) - \hbar g c^\dagger c(b^\dagger + b), \\ H_{dri} &= i\hbar\sqrt{\kappa_{ce}}\varepsilon_p(c^\dagger - c) + i\hbar\sqrt{\kappa_{ae}}\varepsilon_s \times \\ &\times (c^\dagger e^{-i\delta t} - ce^{i\delta t}) + 2qF_m \cos(\omega_q t + \phi_m), \end{aligned} \quad (1)$$

где H_0 , H_{int} и H_{dri} — соответственно гамильтонианы свободной системы, взаимодействия и накачки, а $\Delta_c = \omega_c - \omega_p$ и $\Delta_a = \omega_a - \omega_p$ — соответствующее рассогласование частот резонатора и поля накачки, $c(a)$ и $c^\dagger(a^\dagger)$ — бозонные операторы уничтожения и рождения резонаторных мод c и a , $b^\dagger(b)$ — оператор рождения (уничтожения) механической моды.

В гамильтониане H_{int} первый член описывает взаимодействие между двумя модами оптического МШГ-резонатора, где J — величина связи двух ре-

зонаторов, которой можно управлять, меняя расстояние между резонаторами [49, 51]. Когда связь J между двумя резонаторами слабая, энергия не может легко передаваться от резонатора c резонатору a . В обратном случае с ростом величины связи J при уменьшении расстояния между резонаторами энергия может легко перетекать между ними [52]. Второй член соответствует оптомеханическому взаимодействию, характеризуемому связью g .

Гамильтониан накачки H_{dri} состоит из трех членов. Первые два из них содержат классические поля, распространяющиеся по волноводу при накачке оптомеханической фотон-молекулярной системы. Это поле накачки (частоты ω_p) и поле зондирования (частоты ω_s). Их амплитуды определяются выражениями соответственно $\varepsilon_p = \sqrt{P_c/\hbar\omega_p}$ и $\varepsilon_s = \sqrt{P_s/\hbar\omega_s}$; $\delta = \omega_s - \omega_p$ — рассогласование частот накачки и зондирования. Поле лазерного излучения из оптоволокна заводится в резонатор c и характеризуется скоростью ухода фотонов во внешнюю среду κ_{ce} , после чего мощность заведенного излучения определяется при помощи сбалансированной схемы гомодинного детектирования. В адиабатическом режиме происходит накачка только одной моды резонатора ω_c , а спектральный диапазон уединенного резонатора $c/2\pi R$ (c — скорость света в вакууме, а R — радиус МШГ-резонатора) значительно превышает частоту его колебаний. Следовательно, рассеянием фотонов в другие моды резонатора можно пренебречь. Затухание резонаторной моды $\kappa = \kappa_c = \kappa_a = \kappa_{ex} + \kappa_0$, где κ_0 — собственное затухание фотона, а κ_{ex} — затухание за счет того, что энергия покидает оптический резонатор, переходя в форму распространяющейся волны [5]. Для простоты мы используем условие $\kappa_{ex} = \kappa_0 = \kappa_{ae} = \kappa_{ce}$ и считаем, что $\omega_c = \omega_a$. Последний член определяет возбуждение механической моды b слабой когерентной фоновой накачкой, параметр F_m определяется как

$$F_m = \frac{f}{2\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_m}},$$

где f — амплитуда накачки, ϕ_m — фаза, а частота $\omega_q = \omega_s - \omega_p$.

Квантовые уравнения Ланжевена, которые описывают эволюцию системы, можно получить, добавляя к уравнению Гейзенберга члены, описывающие затухание и входной шум резонатора и механических мод [1, 5, 50]:

$$\begin{aligned} \partial_t c = & -(i\Delta_c + \kappa_c)c + igcq - iJa + \sqrt{\kappa_{ce}} \times \\ & \times (\varepsilon_p + \varepsilon_s e^{-i\delta t}) + \sqrt{2\kappa_c} c_{in}, \quad (2) \end{aligned}$$

$$\partial_t a = -(i\Delta_a + \kappa_a)a - iJc + \sqrt{2\kappa_a} a_{in}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \partial_t^2 q + \gamma_m \partial_t q + \omega_m^2 q = & 2g\omega_m c^\dagger c - \\ & - 2qF_m \cos(\omega_q t + \phi_m) + \xi, \quad (4) \end{aligned}$$

где вакуумные шумы на входе резонатора обозначены c_{in} и a_{in} с нулевым средним значением, а ξ — сила Ланжевена, которая возникает, благодаря взаимодействию между механическим резонатором и его окружением. Поскольку поле зондирования значительно слабее поля накачки, то, следуя обычным процедурам квантовой оптики, мы записали каждый из гейзенберговских операторов в виде суммы его среднего значения в стационарном состоянии и малых флуктуаций с нулевым средним значением:

$$O = O_s + \delta O \quad (O = c, a, q).$$

Стационарные значения определяются из следующих уравнений:

$$(i\Delta' + \kappa_c)c_s - iJa_s = \sqrt{\kappa_{ce}}\varepsilon_p, \quad (5)$$

$$(i\Delta_a + \kappa_a)a_s + iJc_s = 0, \quad (6)$$

$$q_s = \frac{2g|c_s|^2}{\omega_m}, \quad (7)$$

где $\Delta' = \Delta_c - gq_s$.

Следует заметить, что всем операторам можно поставить в соответствие их ожидаемые значения в приближении среднего поля $\langle Qc \rangle = \langle Q \rangle \langle c \rangle$ [6]. Для простоты мы пренебрегаем некоторыми незначительными квантовыми корреляциями без потери общности. После линеаризации путем пренебрежения нелинейными флуктуационными членами уравнения Ланжевена для ожидаемых значений записываются в виде нелинейных уравнений

$$\begin{aligned} \langle \partial_t \delta c \rangle = & -(i\Delta' + \kappa_c) \langle \delta c \rangle + igc_s \langle \delta q \rangle - iJ \langle \delta a \rangle + \\ & + \sqrt{\kappa_{ce}}\varepsilon_s e^{-i\delta t} + ig \langle \delta c \rangle \langle \delta q \rangle, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\langle \partial_t \delta a \rangle = -(i\Delta_a + \kappa_a) \langle \delta a \rangle - iJ \langle \delta c \rangle, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \langle \partial_t^2 \delta q \rangle + \gamma_m \langle \partial_t \delta q \rangle + \omega_m^2 \langle \delta q \rangle = & 2g\omega_m (c_s^* \langle \delta c \rangle + \\ & + c_s \langle \delta c^\dagger \rangle + \langle \delta c^\dagger \rangle \langle \delta c \rangle) - 2qF_m \cos(\omega_q t + \phi_m) \quad (10) \end{aligned}$$

и частотный отклик в стационарном состоянии содержит множество частотных компонент.

Учитывая ГБВП, но пренебрегая более высокими порядками, мы используем следующий анзац:

$$\begin{aligned} \langle \delta O \rangle = & O_{1+} e^{-i\delta t} + O_{1-} e^{i\delta t} + O_{2+} e^{-i2\delta t} + \\ & + O_{2-} e^{i2\delta t}, \quad (11) \end{aligned}$$

где O_{1+} (O_{1-}) и O_{2+} (O_{2-}) соответствуют верхним (нижним) боковым полосам первого и второго порядков. Подставляя уравнение (11) в уравнения (8)–(10) и пренебрегая членами порядка малости выше второго, мы получаем три группы уравнений следующего вида. Первая группа описывает эволюцию боковой полосы первого порядка

$$\begin{aligned} (i\Delta' + \kappa_c - i\delta)c_{1+} &= -igc_s q_{1+} - iJa_{1+} + \sqrt{\kappa_{ex}}\varepsilon_s, \\ (i\Delta_a + \kappa_a - i\delta)a_{1+} &= -iJc_{1+}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$q_{1+} = 2g\lambda_1(c_s^*c_{1+} + c_s c_{1-}^*) + F_m\lambda_1 e^{-i\phi_m}.$$

Решая эти уравнения, мы получаем

$$c_{1+} = \frac{igc_s\Lambda_2^*F_m\lambda_1 e^{-i\phi_m} + (\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2)\sqrt{\kappa_{ex}}\varepsilon_s}{\Lambda_1(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2) - 2ig^2\Lambda_2^*\lambda_1|c_s|^2}, \quad (13)$$

$$c_{1-}^* = \frac{igc_s^*\lambda_1(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2)(2gc_s^*\sqrt{\kappa_{ex}}\varepsilon_s - F_m\Lambda_1 e^{-i\phi_m})}{(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2)[\Lambda_1(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2) + 2ig^2\lambda_1\Lambda_2^*|c_s|^2]}, \quad (14)$$

$$q_{1+} = \frac{\lambda_1\Lambda_2^*(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2)(2gc_s^*\sqrt{\kappa_{ex}}\varepsilon_s - F_m\Lambda_1 e^{-i\phi_m})}{(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2)[\Lambda_1(\Lambda_2^* - 2ig^2\lambda_1|c_s|^2) + 2ig^2\lambda_1\Lambda_2^*|c_s|^2]}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= -i\Delta' + \kappa_c - i\delta + iJ\eta_1, & \Lambda_2 &= i\Delta' + \kappa_c + i\delta + iJ\eta_2, \\ \eta_1 &= -iJ/(i\Delta_a + \kappa_a - i\delta), & \eta_2 &= -iJ/(i\Delta_a + \kappa_a + i\delta), \\ \lambda_1 &= \omega_m/(\omega_m^2 - i\gamma_m\delta - \delta^2). \end{aligned}$$

Вторая группа уравнений описывает эволюцию ГБПВП

$$c_{2+} = \frac{igc_{1+}q_{1+}(\Lambda_4^* - 2ig^2\lambda_2|c_s|^2) - 2ig^2\lambda_2c_s\Lambda_4^*c_{1+}c_{1-}^* - 2g^3|c_s|^2\lambda_2c_{1-}^*q_{1+}}{\Lambda_3(\Lambda_4^* - 2ig^2\lambda_2|a_0|^2) + 2ig^2\Lambda_4^*\lambda_2|a_0|^2}, \quad (16)$$

Решая эти уравнения, мы получаем

$$c_{2+} = \frac{igc_{1+}q_{1+}(\Lambda_4^* - 2ig^2\lambda_2|c_s|^2) - 2ig^2\lambda_2c_s\Lambda_4^*c_{1+}c_{1-}^* - 2g^3|c_s|^2\lambda_2c_{1-}^*q_{1+}}{\Lambda_3(\Lambda_4^* - 2ig^2\lambda_2|a_0|^2) + 2ig^2\Lambda_4^*\lambda_2|a_0|^2}, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_3 &= -i\Delta' + \kappa_c - 2i\delta + iJ\eta_3, \\ \Lambda_5 &= -i\Delta' + \kappa_c + 2i\delta + iJ\eta_4, \\ \eta_3 &= -iJ/(i\Delta_a + \kappa_a - 2i\delta), \\ \eta_4 &= -iJ/(i\Delta_a + \kappa_a + 2i\delta), \\ \lambda_2 &= \omega_m/(\omega_m^2 - 2i\gamma_m\delta - 4\delta^2). \end{aligned}$$

В случае ГБПВП здесь нас интересует поведение верхней боковой полосы второго порядка. Для удобства мы определяем эффективность генерации боковой полосы второго порядка следующим образом:

$$\eta = \left| \frac{-\sqrt{\kappa_{ex}}c_{2+}}{\varepsilon_s} \right|. \quad (18)$$

Это безразмерный параметр, характеризующий эффективность ГБПВП.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Генерация боковой полосы второго порядка при $\Delta_c = 0$

Мы используем следующие значения параметров [5]: сила оптомеханической связи $g_0/2\pi = 12$ ГГц/нм, коэффициент механического затухания $\gamma_m/2\pi = 41$ кГц, частота механического резонатора $\omega_m/2\pi = 51.8$ МГц, коэффициенты затухания двух резонаторов $\kappa_c/2\pi = \kappa_a/2\pi = 15$ МГц, эффективная масса $M = 20$ нг, длина волны лазера $\lambda_0 = 750$ нм, добротность механической моды $Q = 1500$. Связь J между двумя резонаторными модами играет ключевую роль и может влиять на распространение зондирующего луча. Экспериментально установлено, что связь J зависит от расстояния между резонатором c и резонатором a [49] (с ростом расстояния между резонаторами сила связи уменьшается экспоненциально). В данном случае сила

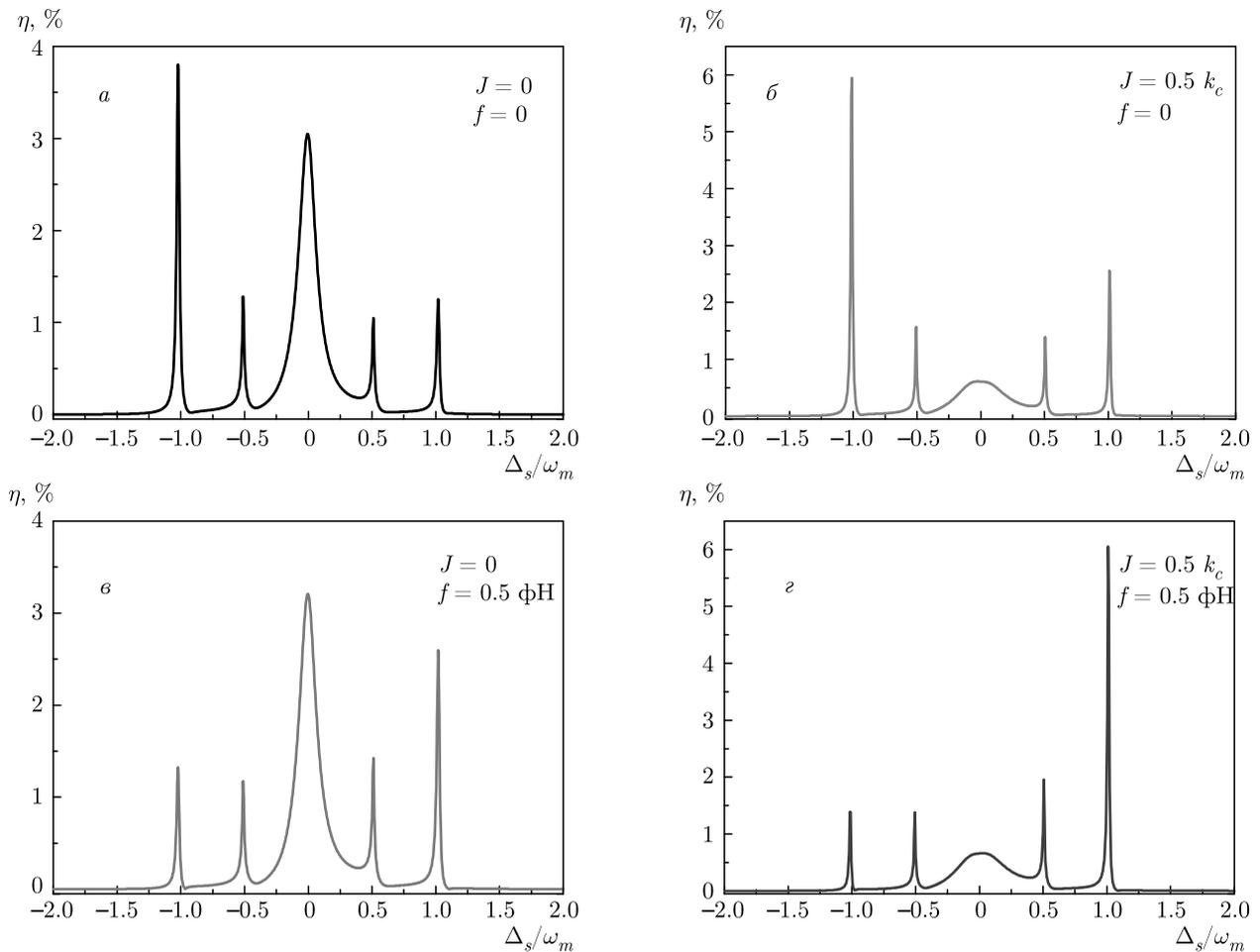


Рис. 2. Эффективность ГБПВП η при разных значениях параметров J , f и $\Delta_c = 0$

связи $J \sim \sqrt{\kappa_c \kappa_a}$. Эффективность ГБПВП можно определить при помощи уравнения (18). Вследствие оптомеханических взаимодействий могут излучаться поля с частотами $\omega_p \pm 2n\delta$, где n — целое число, характеризующее порядок боковых полос [27]. Излучаемое поле с частотой $\omega_p + 2\delta$ связано с верхней боковой полосой второго порядка, а поле с частотой $\omega_p - 2\delta$ связано с нижней боковой полосой второго порядка. В данной работе мы рассматриваем только верхнюю боковую полосу второго порядка и исследуем ГБПВП при разных рассогласованиях частот. На рис. 2 мы исследуем разные режимы с точки зрения двух ключевых параметров, влияющих на ГБПВП: силы связи резонаторов J и амплитуды накачки f . На рис. 2а эффективность ГБПВП показана как функция нормированного рассогласования частоты зондирования Δ_s/ω_m со значениями $J = 0$ и $f = 0$, т.е. в системе, куда входит лишь один оптомеханический резонатор c . На зависимо-

сти эффективности ГБПВП η можно видеть пять пиков. Из них один лоренцевский пик находится вблизи $\Delta_s = 0$, два боковых пика располагаются около $\Delta_s = \pm\omega_m$ и два других боковых пика располагаются около $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$. При учете второго вспомогательного оптического резонатора a фотоны будут перетекать из одного оптического резонатора в другой. Эффективность ГБПВП η изображена на рис. 2б как функция Δ_s/ω_m для $J = 0.5\kappa_c$ и $f = 0$. Видно, что четыре боковых пика, расположенных соответственно при $\Delta_s = \pm\omega_m$ и $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$ существенно увеличены, а высота лоренцевского пика при $\Delta_s = 0$ меньше, чем на рис. 2а. Это объясняется тем, что между двумя резонаторами происходит перенос энергии (который определяется числом фотонов в резонаторе). На рис. 2в изображен случай $J = 0$ и $f = 0.5$ фН (1 фН = 10^{-15} Н), т.е. рассмотрен только один оптомеханический резонатор c без вспомогательного резонатора a , а механическая мо-

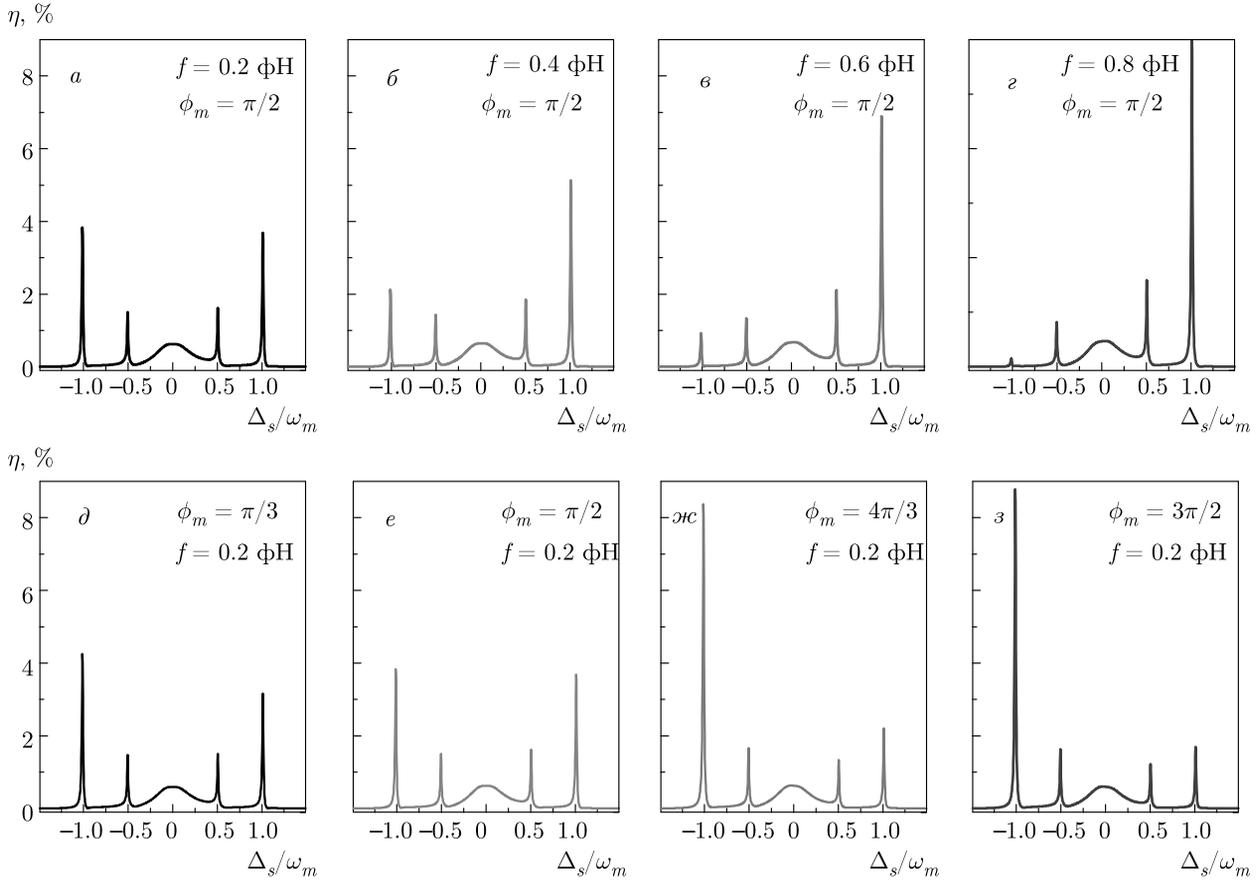


Рис. 3. Эффективность ГБПВП η как функция Δ_s/ω_m при разных значениях параметров

да b в оптомеханическом резонаторе возбуждается при помощи накачки фононами. Видно, что четыре боковых пика эффективности ГБПВП η в $\Delta_s = \pm\omega_m$ и $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$ инвертированы по сравнению со случаем, изображенным на рис. 2а. Если взять оба параметра, J и f , ненулевыми, то инвертированные, как и на рис. 2в, пики интенсивности ГБПВП становятся более выраженными, как показано на рис. 2г, если сравнивать их амплитуды с амплитудами пиков на рис. 2а.

Из данных на рис. 2 следует, что оба параметра J и f влияют на эффективность ГБПВП η . Ниже мы обсуждаем эти параметры подробнее. На рис. 3а–г показана эффективность ГБПВП η как функция величины Δ_s при увеличении амплитуды возбуждения f от значения $f = 0.2$ фН до значения $f = 0.8$ фН при постоянной мощности $P_c = 0.1$ мВт, а также постоянной силе связи $J = 0.5\kappa_c$ и фазе $\phi_m = \pi/2$. На этих рисунках хорошо видно, что величина бокового пика эффективности ГБПВП η , расположенного при $\Delta_s = -\omega_m$, уменьшается, а величина бокового пика, расположенного при

$\Delta_s = \omega_m$, заметно увеличивается с ростом амплитуды возбуждения f . При этом величины других боковых пиков, расположенных при $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$, меняются слабо. Кроме того, на рис. 3д–з изучено влияние фазы ϕ_m на ГБПВП при постоянной амплитуде возбуждения $f = 0.2$ фН. С ростом фазы ϕ_m от значения $\phi_m = \pi/3$ до значения $\phi_m = 3\pi/2$ величина бокового пика ГБПВП η при $\Delta_s = -\omega_m$ растет, а величина пика при $\Delta_s = \omega_m$ уменьшается, в то время как боковые пики при $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$ меняются слабо. Следовательно, амплитуда возбуждения f и фаза ϕ_m являются двумя параметрами, которые могут влиять на боковые пики эффективности ГБПВП η при $\Delta_s = \pm\omega_m$.

Чтобы исследовать влияние вспомогательного оптического резонатора, рассмотрим отношение $\delta = \kappa_a/\kappa_c$ ($\kappa_c = \omega_c/Q_c$ и $\kappa_a = \omega_a/Q_a$, где Q_c и Q_a — добротности двух оптических резонаторов). Наша цель состоит в том, чтобы изучить параметры, влияющие на ГБПВП. κ — время жизни моды в резонаторе, которое зависит от частоты и от добротности резонатора. Известно, что в случае моды в резонато-

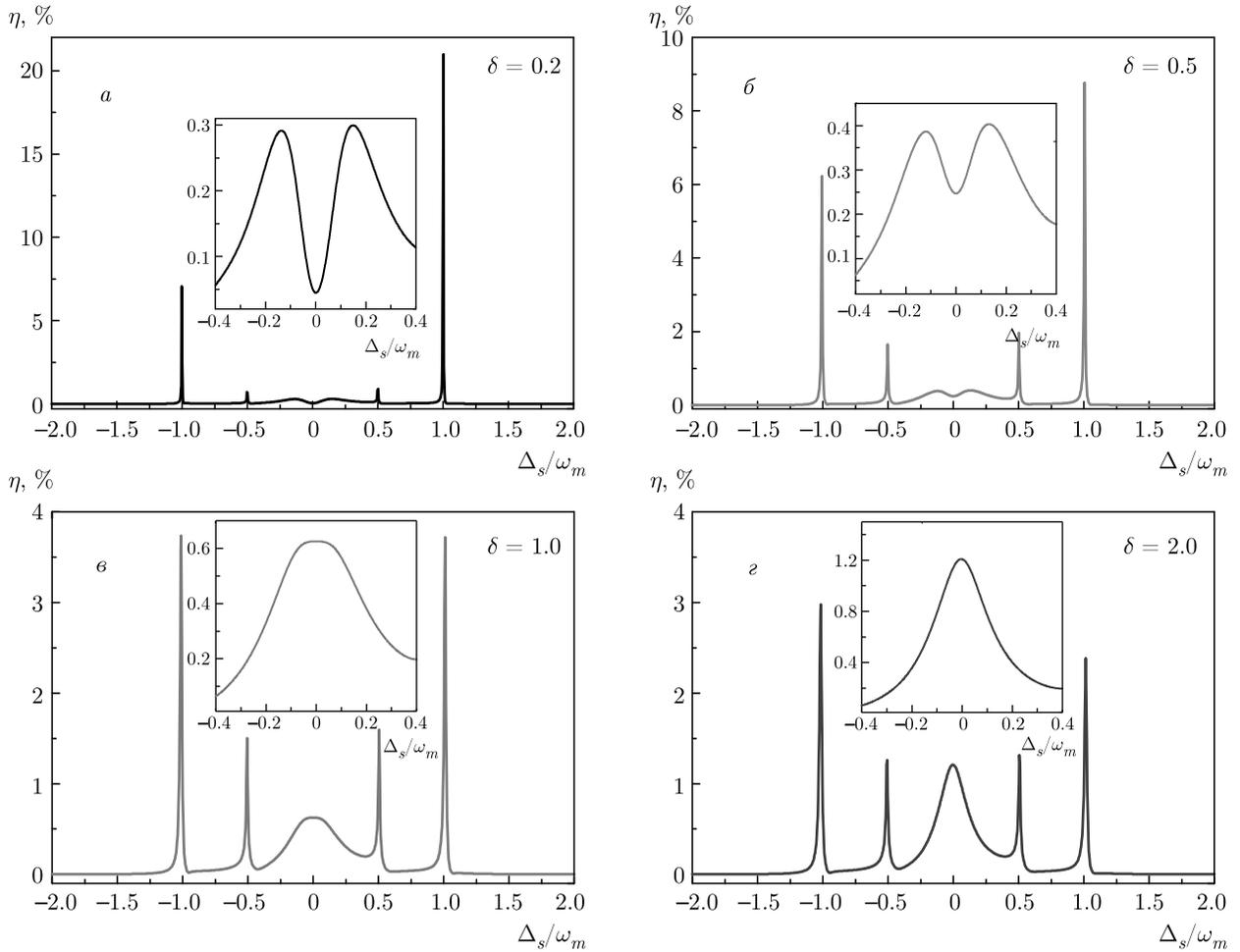


Рис. 4. Эффективность ГБПВП η как функция Δ_s при разных значениях параметра δ и $\Delta_c = 0$

ре трудно достичь одновременно больших значений Q и малых V вследствие дифракционного предела. Для оптического резонатора маленькие значения V достигаются за счет большого коэффициента радиационного затухания, что приводит к уменьшению Q . Несмотря на то, что различные типы резонаторов обладают собственными уникальными свойствами, приходится искать компромисс между большими значениями Q и малыми значениями V . Тем не менее, если связать исходный оптомеханический резонатор c с большим затуханием со вспомогательный модой резонатора a , имеющей большое значение Q , но и большое значение V , можно сильно повлиять на ГБПВП. На рис. 4 изображена эффективность ГБПВП η как функция Δ_s для нескольких различных значений отношения δ . Видно, что величины четырех боковых пиков эффективности ГБПВП η при $\Delta_s = \pm\omega_m$ и $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$ последовательно уменьшаются с ростом отношения δ от

значения $\delta = 0.2$ до значения $\delta = 2.0$. При этом проявляются две интересные особенности. Первая из них заключается в том, что величина бокового пика эффективности ГБПВП η при $\Delta_s = \omega_m$ больше, чем пика при $\Delta_s = -\omega_m$ в случае, когда $\delta < 1$. В случае $\delta > 1$, наоборот, величина бокового пика при $\Delta_s = \omega_m$ меньше, чем величина пика при $\Delta_s = -\omega_m$. Вторая особенность заключается в том, что при $\delta < 1$ на зависимости эффективности ГБПВП η наблюдается расщепление моды (окно прозрачности), в то время как для $\delta > 1$ расщепление пропадает и на зависимости эффективности ГБПВП η проявляется лоренцевский пик. Для примера в случае $\delta = 0.2$, соответствующем условию $\delta < 1$, $\kappa_a = 0.2\kappa_c$, т.е. $Q_a > Q_c$, а если $\delta = 2.0$, что соответствует случаю $\delta > 1$, $\kappa_a = 2.0\kappa_c$, т.е. $Q_a < Q_c$. Следовательно, при изучении генерации боковых полос высоких порядков в ОМСИ можно рассматривать оптомеханический резонатор с боль-

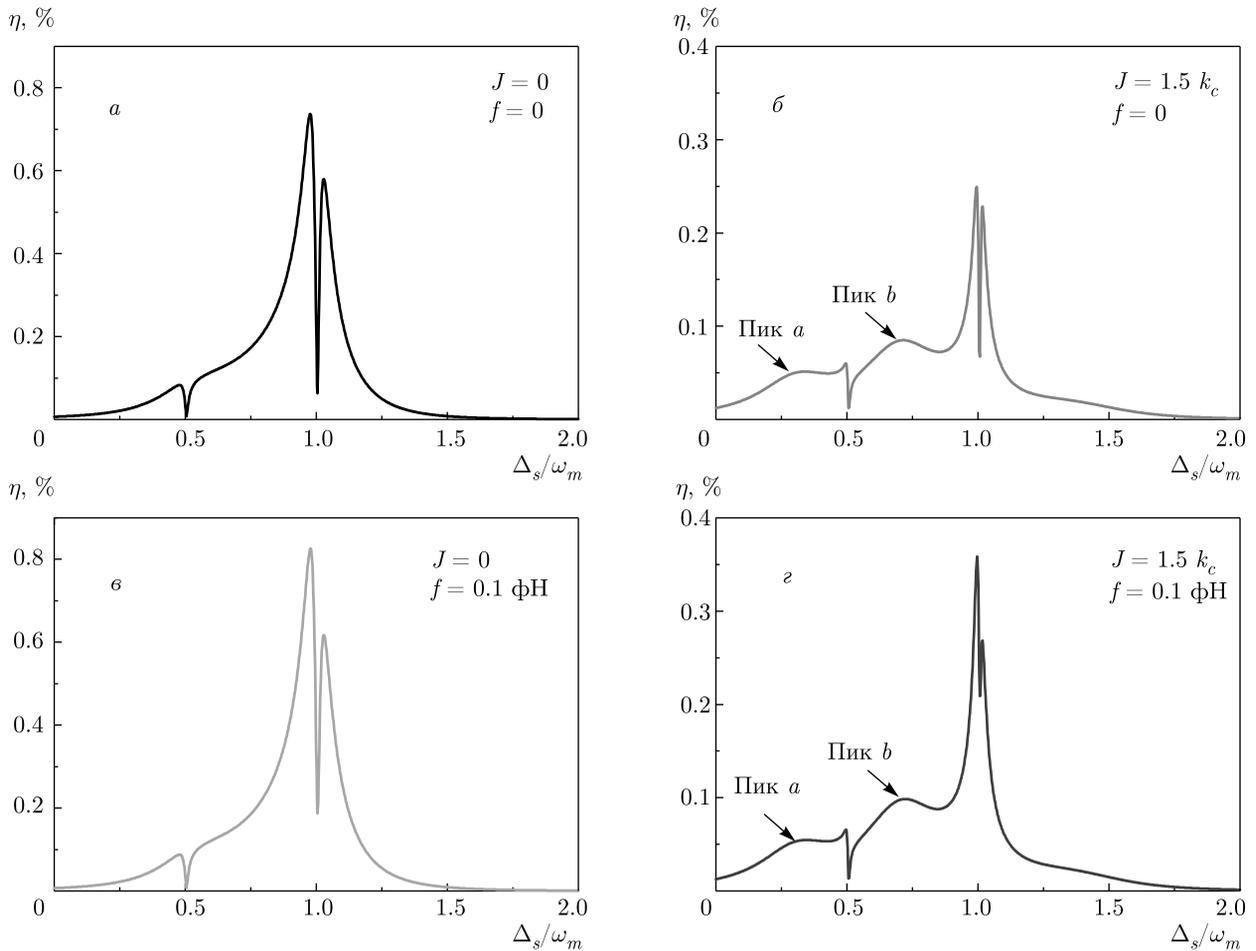


Рис. 5. Эффективность ГБПВП η при разных значениях параметров J , f и $\Delta_c = \omega_m$

шим затуханием κ , не принимая во внимание другие параметры, если этот резонатор соединен со вспомогательным оптическим резонатором с регулируемой добротностью Q . Это предложение можно использовать как основу для изучения нелинейных явлений в составных ОМСИ.

3.2. ГБПВП при $\Delta_c = \omega_m$

Сместим величину отстройки от резонанса ($\Delta_c = 0$) в сторону красной полосы ($\Delta_c = \omega_m$) и изучим ГБПВП в области различных параметров. На рис. 5 построена зависимость эффективности ГБПВП η от Δ_s при разных значениях двух параметров J и f в случае, когда выполнено условие $\Delta_c = \Delta_a = \omega_m$. Как показано на рис. 5а, для системы с одним оптомеханическим резонатором s на зависимости эффективности ГБПВП η имеется структура, состоящая из двух пиков с минимумом между ними, расположенным при $\Delta_s = \omega_m$, и еще

один минимум без пиков при $\Delta_s = 0.5\omega_m$. Мы рассчитали пик с меньшей частотой (левый пик, расположенный при $\Delta_s = 0.97\omega_m$, нормированная интенсивность которого примерно равна 0.74%), а также пик с большей частотой (правый пик, расположенный при $\Delta_s = 1.03\omega_m$, с нормированной интенсивностью, равной примерно 0.58%). Как показано на рис. 5б, в случае оптомеханической фотон-молекулярной системы с дополнительным резонатором a (при $J = 1.5\kappa_c$) амплитуда двойного пика эффективности ГБПВП η уменьшается и величины обоих пиков становятся примерно одинаковыми (величина левого пика порядка 0.25% и величина правого пика порядка 0.23%). Вдобавок, по сравнению с рис. 5а, на зависимости эффективности ГБПВП появляются еще два пика, а именно пик a , расположенный при $0.34\omega_m$, и имеющий интенсивность 0.05%, и пик b , расположенный при $0.71\omega_m$, и имеющий интенсивность 0.08%. Чтобы продемонстрировать влияние фоновой накачки, на рис. 5в

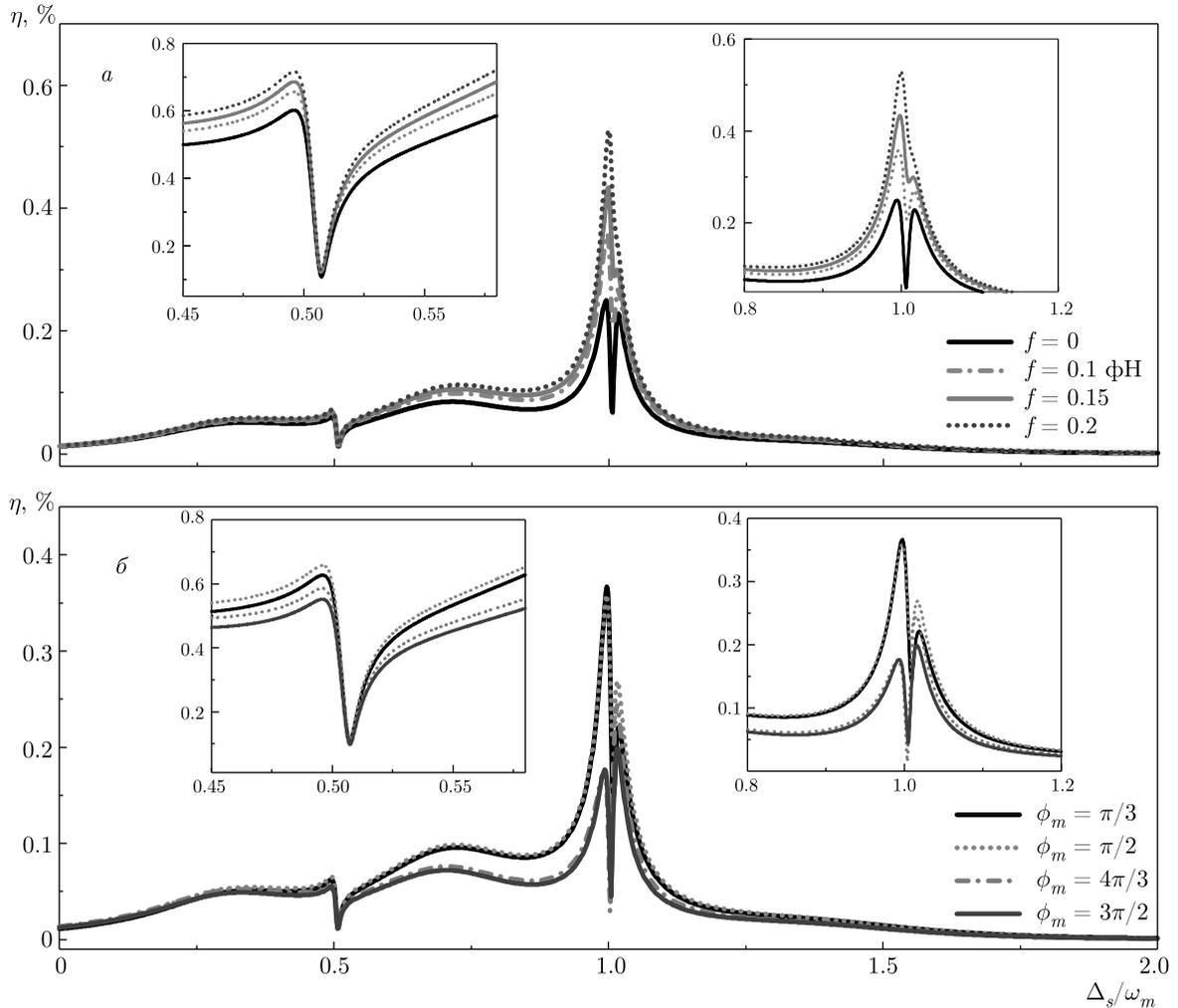


Рис. 6. Эффективность ГБПВП η как функция Δ_s/ω_m при фиксированном значении фазы $\phi_m = \pi/2$ и разных значениях амплитуды возбуждения f (а) и при фиксированном значении $f = 0.1$ фН и разных значениях фазы ϕ_m (б)

изображены результаты для системы с единственным оптомеханическим резонатором s , возбуждаемым фоновой накачкой с амплитудой $f = 0.1$ фН. Если сравнивать с рис. 5а, то амплитуда двойного пика на зависимости эффективности ГБПВП η увеличивается, при этом величина левого пика примерно равна 0.81%, а величина правого пика примерно равна 0.62%. Таким образом, можно утверждать, что эффективность ГБПВП η увеличивается при фоновой накачке. Наконец, если оба параметра J и f отличны от нуля, то на зависимости эффективности ГБПВП η увеличиваются амплитуды как двойного пика, так и пиков a и b , если проводить сравнение с рис. 5б, то при этом величина левого пика примерно равна 0.34%, величина правого пика — 0.27%, а величины пиков a и b составляют соответственно 0.055% и 0.1%.

Поскольку амплитуда возбуждения влияет на эффективность ГБПВП η , исследуем эту амплитуду f и связанный с ней параметр — фазу ϕ_m . На рис. 6а построена эффективность ГБПВП η для четырех разных значений амплитуды возбуждения f и для мощности накачки $P_c = 0.1$ мВт, силы связи $J = 1.5\kappa_c$ и фазы $\phi_m = \pi/2$. Без фоновой накачки (черная кривая на рис. 6а) ГБПВП характеризуется расщеплением мод, но с ростом f от значения $f = 0$ до значения $f = 0.2$ фН ГБПВП трансформируется, усиливаясь по величине при одновременном уменьшении расщепления при $\Delta_s = \omega_m$. На рис. 6б построена эффективность ГБПВП η для четырех различных значений фазы ϕ_m при фиксированной амплитуде возбуждения $f = 0.1$ фН. Для $\Delta_s = \omega_m$ в случае, когда $\phi_m < \pi$, например, когда $\phi_m = \pi/3$ или $\phi_m = \pi/2$, амплитуда левого пика на

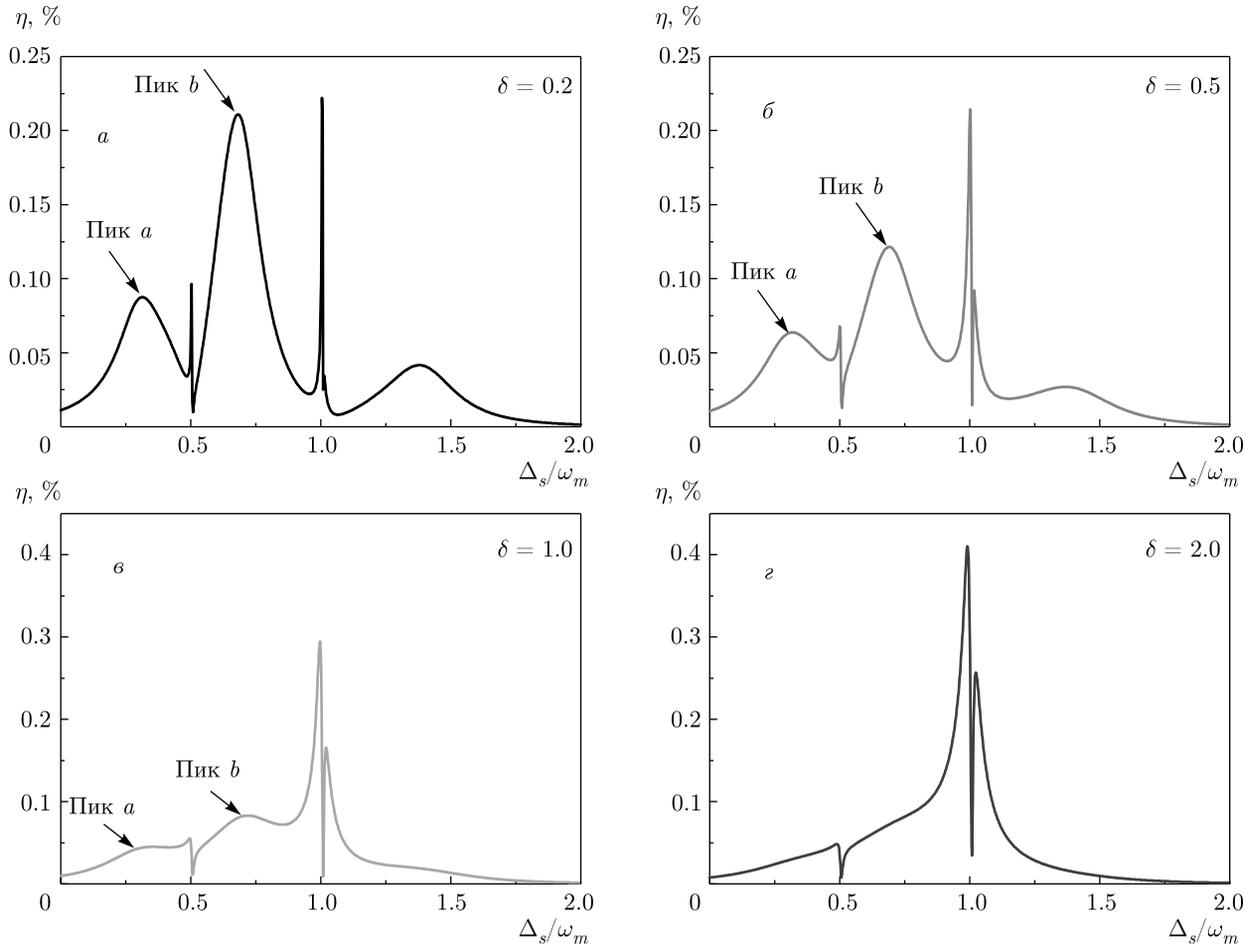


Рис. 7. Эффективность ГБПВП η как функция Δ_s при разных значениях параметра δ и $\Delta_c = \omega_m$

зависимости интенсивности ГБПВП η больше, чем правого. В случае, когда $\phi_m > \pi$, например, когда $\phi_m = 4\pi/3$ или $\phi_m = 3\pi/2$, наблюдается обратное соотношение, т. е. для $\Delta_s = \omega_m$ амплитуда левого пика на зависимости интенсивности ГБПВП η меньше, чем правого, при меньшей величине особенностей. На вставках более подробно показаны участки зависимости эффективности ГБПВП η при $\Delta_s = 0.5\omega_m$ и $\Delta_s = \omega_m$.

В случае отстройки в сторону красной полосы, т. е. при $\Delta_c = \omega_m$, мы приводим данные для разных значений отношения δ , которое является еще одним параметром, влияющим на эффективность ГБПВП η . С ростом этого отношения δ от значения $\delta = 0.2$ до значения $\delta = 2.0$ эффективность ГБПВП η заметно меняется. На рис. 7а, когда $\delta = 0.2$, помимо структур с двойными пиками и минимумами при $\Delta_s = 0.5\omega_m$ и $\Delta_s = \omega_m$ появляются два новых пика, лоренцевский пик a , расположенный при $0.32\omega_m$ с амплитудой 0.087% , и пик b , расположен-

ный при $0.68\omega_m$ с амплитудой 0.21% . Как показано на рис. 7б, с ростом отношения δ до значения $\delta = 0.5$ правый пик на зависимости эффективности ГБПВП η , являющийся частью двойного пика при $\Delta_s = \omega_m$, увеличивается, а расщепление моды при $\Delta_s = 0.5\omega_m$ пропадает. Кроме того, уменьшаются величины пиков a и b . Как видно на рис. 7в, при $\delta = 1$ величины пиков a и b уменьшаются еще больше, а эффективность ГБПВП η при $\Delta_s = 0.5\omega_m$ и при $\Delta_s = \omega_m$ увеличивается. В случае $\delta > 1$, как показано на рис. 7г, на зависимости эффективности ГБПВП η наблюдается только одна структура с двойным пиком и минимумом при $\Delta_s = \omega_m$, а также еще один минимум без окружающих его пиков при $\Delta_s = 0.5\omega_m$. При этом два лоренцевских пика a и b не наблюдаются.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы теоретически изучили ГБПВП в оптомеханической фотон-молекулярной системе, которая

возбуждается двухтоновым лазерным излучением и слабой когерентной фононной накачкой. В режиме резонанса ГБПВП существенно возрастает при изменении силы связи резонаторов J , отношения δ , характеризующего оба резонатора, а также амплитуды f и фазы ϕ_m фононной накачки. При этом появляются четыре боковых пика, расположенных соответственно при $\Delta_s = \pm\omega_m$ и $\Delta_s = \pm 0.5\omega_m$. Вдали от резонанса зависимость эффективности ГБПВП η демонстрирует переход от режима одного пика к режиму расщепления мод, что напоминает явление линейной оптомеханически-индуцированной прозрачности. В частности, при изменении двух параметров J и δ на зависимости ГБПВП появляются два дополнительных пика. В нашей работе указаны способы увеличивать ГБПВП, не требующие усиления сигналов, что позволит ослабить требования к эксперименту.

Финансирование. Работа Хуа-Цзюнь Чена выполнена при поддержке Государственного фонда естественных наук Китая (гранты №№ 11647001, 11804004), научного фонда китайской докторантуры (грант № 2020M681973) и фонда естественных наук провинции Аньхой (грант № 1708085QA11).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Aspelmeyer, T. J. Kippenberg, and F. Marquardt, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 1391 (2014).
2. A. D. O'Connell, M. Hofheinz, M. Ansmann et al., *Nature* **464**, 697 (2010).
3. J. Chan, T. P. M. Alegre, A. H. Safavi-Naeini et al., *Nature* **478**, 89 (2011).
4. J. D. Teufel, T. Donner, D. Li et al., *Nature* **475**, 359 (2011).
5. S. Weis, R. Rivière, S. Deléglise et al., *Science* **330**, 1520 (2010).
6. G. S. Agarwal and S. Huang, *Phys. Rev. A* **81**, 041803 (2010).
7. J. D. Teufel, D. Li, M. S. Allman et al., *Nature* **471**, 204 (2011).
8. A. H. Safavi-Naeini, T. P. M. Alegre, J. Chan et al., *Nature* **472**, 69 (2011).
9. M. J. Akram, M. M. Khan, and F. Saif, *Phys. Rev. A* **92**, 023846 (2015).
10. H. J. Chen, *J. Appl. Phys.* **124**, 153102 (2018).
11. D. W. C. Brooks, T. Botter, S. Schreppler et al., *Nature* **488**, 476 (2012).
12. A. H. Safavi-Naeini, S. Gröblacher, J. T. Hill et al., *Nature* **500**, 185 (2013).
13. T. P. Purdy, P. L. Yu, R. W. Peterson et al., *Phys. Rev. X* **3**, 031012 (2013).
14. J. Zhu, S. K. Ozdemir, Y.-F. Xiao et al., *Nat. Photon.* **4**, 46 (2010).
15. J. J. Li and K. D. Zhu, *Phys. Rep.* **525**, 223 (2013).
16. F. Liu and M. Hossein-Zadeh, *IEEE Sensors J.* **13**, 146 (2013).
17. F. Liu, S. Alaie, Z. C. Leseman, and M. Hossein-Zadeh, *Opt. Express* **21**, 19555 (2013).
18. E. A. Sete and H. Eleuch, *Phys. Rev. A* **85**, 043824 (2012).
19. R. Kanamoto and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 063601 (2010).
20. T. P. Purdy, D. W. C. Brooks, T. Botter et al., *Phys. Rev. Lett.* **105**, 133602 (2010).
21. D. Yan, Z. H. Wang, C. N. Ren et al., *Phys. Rev. A* **91**, 023813 (2015).
22. W. Xiong, D. Y. Jin, Y. Qiu et al., *Phys. Rev. A* **93**, 023844 (2016).
23. S. Huang and G. S. Agarwal, *Phys. Rev. A* **81**, 033830 (2010).
24. W. Z. Jia, L. F. Wei, Y. Li, and Y. X. Liu, *Phys. Rev. A* **91**, 043843 (2015).
25. X. W. Xu and Y. Li, *Phys. Rev. A* **92**, 023855 (2015).
26. H. J. Chen, H. W. Wu, J. Y. Yang et al., *Nanoscale Res. Lett.* **14**, 73 (2019).
27. H. Xiong, L.-G. Si, A.-S. Zheng et al., *Phys. Rev. A* **86**, 013815 (2012).
28. H. Suzuki, E. Brown, and R. Sterling, *Phys. Rev. A* **92**, 033823 (2015).
29. C. Cao, S.-C. Mi, Y.-P. Gao et al., *Sci. Rep.* **6**, 22920 (2016).
30. Y. Jiao, H. Lu, J. Qian et al., *New J. Phys.* **18**, 083034 (2016).
31. J. Li, Q. Xiao, and Y. Wu, *Phys. Rev. A* **93**, 063814 (2016).
32. H. Xiong, L.-G. Si, X.-Y. Lu, and Y. Wu, *Opt. Express* **24**, 5773 (2016).
33. H. Xiong, Y.-W. Fan, X. Yang, and Y. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 061108 (2016).

34. C. Kong, H. Xiong, and Y. Wu, *Phys. Rev. A* **95**, 033820 (2017).
35. L.-G. Si, L.-X. Guo, H. Xiong, and Y. Wu, *Phys. Rev. A* **97**, 023805 (2018).
36. Y.-F. Jiao, T.-X. Lu, and H. Jing, *Phys. Rev. A* **97**, 013843 (2018).
37. C. Kong, S. Li, C. You et al., *Sci. Rep.* **8**, 1060 (2018).
38. K. C. Yellapragada, N. Pramanik, S. Singh, and P. A. Lakshmi, *Phys. Rev. A* **98**, 053822 (2018).
39. B. Chen, L. Shang, X.-F. Wang et al., *Phys. Rev. A* **99**, 063810 (2019).
40. K. Børkje, A. Nunnenkamp, J. D. Teufel, and S. M. Girvin, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 053603 (2013).
41. A. Kronwald and F. Marquardt, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 133601 (2013).
42. M.-A. Lemonde, N. Didier, and A. A. Clerk, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 053602 (2013).
43. Y. C. Liu, Y. F. Xiao, Y. L. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 083601 (2013).
44. C. Kong, H. Xiong, and Y. Wu, *Phys. Rev. A* **95**, 033820 (2017).
45. H. Xiong, L.-G. Si, and Y. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 171102 (2017).
46. B. Wang, Z. X. Liu, H. Xiong, and Y. Wu, *IEEE Photon. J.* **10**, 6803908 (2018).
47. L. D. Wang, J. K. Yan, X. F. Zhu, and B. Chen, *Physica E* **89**, 134 (2017).
48. B. Chen, L. D. Wang, J. Zhang et al., *Phys. Lett. A* **380**, 798 (2016).
49. B. Peng, S. K. Ozdemir, F. Lei et al., *Nat. Phys.* **10**, 394 (2014).
50. H. Jing, S. K. Ozdemir, X. Y. Lü et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 053604 (2014).
51. H. J. Chen, C. Z. Chen, Y. Li et al., *Opt. Commun.* **382**, 73 (2017).
52. H. J. Chen, *J. Appl. Phys.* **124**, 153102 (2018).
53. D. B. Sohn, S. Kim, and G. Bahl, *Nat. Photon.* **12**, 91 (2018).

ИСПАРЕНИЕ ПЕРВИЧНЫХ ЧЕРНЫХ ДЫР, БАРИОННАЯ АСИММЕТРИЯ И ТЕМНАЯ МАТЕРИЯ

*А. Чаудхури**, *А. Долгов***

*Физико-астрономический факультет, Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 22 марта 2021 г.,
после переработки 2 июля 2021 г.
Принята к публикации 3 июля 2021 г.

Достаточно легкие первичные черные дыры (ПЧД) могли испариться в очень ранней Вселенной и уменьшить существовавшую ранее барионную асимметрию и/или замороженную плотность стабильных реликтовых частиц. Эффект особенно силен в случае распада ПЧД, когда и если они доминировали в космологической плотности энергии. Величина уменьшения сначала рассчитывается аналитически при упрощенном предположении о дельта-образном спектре масс ПЧД и в приближении мгновенного распада. В реалистичном случае экспоненциального распада и для широкого спектра масс ПЧД расчеты выполнены численно. Возникающее в результате уменьшение асимптотической плотности суперсимметричных реликтов открывает для них более широкое окно по массам, чтобы стать жизнеспособными кандидатами на роль носителей темной материи.

DOI: 10.31857/S0044451021110043

Масса внутри горизонта во Вселенной на стадии доминирования излучения (RD) составляет

1. ВВЕДЕНИЕ

$$M_{hor} = m_{Pl}^2 t, \quad (1)$$

Первичные черные дыры могут быть достаточно обильны в ранней Вселенной и даже какое-то время доминировать в космологической плотности энергии. В последнем случае они могут оказать существенное влияние на барионную асимметрию Вселенной, на долю частиц темной материи, а также привести к росту возмущений плотности на относительно небольших масштабах.

где масса Планка равна $m_{Pl} \approx 2.176 \cdot 10^{-5}$ г, а t — космологическое время (возраст Вселенной). Соответственно, согласно пионерским оценкам ЗН, начальный момент создания ПЧД с массой M можно принять равным

$$t_{in}(M) = \frac{M}{m_{Pl}^2}. \quad (2)$$

Обычно считается, что первичные черные дыры (ПЧД) создаются согласно механизму Зельдовича–Новикова (ЗН) [1] (см. также [2]). Согласно ЗН, ПЧД могли бы возникнуть, если возмущение плотности $\delta\rho/\rho$ на размере горизонта оказалось бы больше единицы. В таком случае эта область с более высокой плотностью окажется внутри своего собственного гравитационного радиуса и превратится в черную дыру. В предположении спектра Харрисона–Зельдовича [3, 4] первичных возмущений плотности подобный процесс создания ПЧД может привести к их значительной плотности.

Более точные расчеты с учетом уравнения состояния первичной плазмы приводят к несколько иному результату, но для наших приближенных оценок это не слишком существенно.

Как правило, предполагается, что спектр масс ПЧД, созданных механизмом ЗН, очень узок. Для него обычно принимается степенная форма или даже дельта-функция. Однако существует довольно много других сценариев образования ПЧД. Можно упомянуть, в частности, механизм, предложенный в работах [5, 6], который приводит к логнормальному распределению по массам и может, в принципе, создавать ПЧД с массами до тысяч и даже миллионов солнечных масс благодаря образованию

* E-mail: arnabchaudhuri.7@gmail.com

** E-mail: dolgov@fe.infn.it

зародышей ЧД во время космологической инфляции. Другие механизмы образования ПЧД, стимулированные инфляцией, рассмотрены, например, в статьях [7, 8]. Работы по образованию ПЧД с расширенным спектром масс включают, в частности, статьи [9–12]. Возникновение ПЧД вследствие фазового перехода в первичной плазме исследуется в работе [13]. Недавний обзор образования массивных ПЧД можно найти в [14].

Логнормальный спектр масс стал довольно популярным в течение последних нескольких лет, поскольку он хорошо описывает наблюдаемые массивные черные дыры в современной Вселенной. В частности, анализ распределения по «чирп»-массам событий, зарегистрированных LIGO, замечательно согласуется с логнормальным спектром [15]. Понимается, возможны другие спектры масс ПЧД, но задача изучения всех возможных спектров весьма сложна, поэтому мы ограничимся спектром в форме дельта-функции и приведем два примера расширенных спектров, а именно, плоский спектр и степенной спектр, близкий по форме к логнормальному. Для обоих типов расширенных спектров предполагается, что массы ПЧД ограничены некоторыми M_{min} и M_{max} . Все три типа спектров приводят к сравнимым результатам для коэффициентов подавления энтропии.

Мы будем рассматривать достаточно малые массы ПЧД, такие что черные дыры испарятся достаточно рано, ранее первичного нуклеосинтеза (BBN). Хотя такие короткоживущие ПЧД исчезли задолго до нашего времени, их влияние на современную Вселенную может быть хорошо заметно. С одной стороны, распады ПЧД могут привести к значительному выбросу количества энтропии в первичную плазму и уменьшить величину ранее созданной барионной асимметрии или уменьшить относительную (по отношению к фону реликтовых фотонов) плотность частиц темной материи [16, 17]. С другой стороны, барионная асимметрия могла возникнуть при испарении ПЧД [18, 19], да и темная материя также могла быть создана в таком процессе. Однако мы пренебрежем вторым видом процессов и будем рассматривать лишь разбавление барионов и частиц темной материи испарением ПЧД. Действительно, можно показать, что при выбранных значениях параметров стабильные суперсимметричные реликты, образующиеся в процессе испарения ПЧД, будут давать пренебрежимо малый вклад в плотность темной материи, см. Приложение А.

Интересный хорошо известный эффект, не затронутый в этой работе, — это рост возмущений плотно-

сти на ранней стадии доминирования вещества. Если бы существовала эпоха доминирования ранних ПЧД, возрастающие возмущения плотности могли бы создать небольшие скопления материи в современной Вселенной, такие как шаровые скопления или даже карликовые галактики.

В рассмотренном ниже сценарии предполагается, что Вселенная изначально находилась в состоянии доминирования излучения, на так называемой RD-стадии, когда космологическая материя в основном состояла из релятивистских частиц. Космологическая плотность энергии в эту эпоху была равна

$$\rho_{rel}^{(1)} = \frac{3m_{Pl}^2}{32\pi t^2}, \quad (3)$$

а масштабный фактор эволюционировал как

$$a_{rel}(t) = a^{(in)} \left(\frac{t}{t_{in}} \right)^{1/2}. \quad (4)$$

Если бы в этот период была создана достаточно большая плотность ПЧД и если бы ПЧД были достаточно массивными, чтобы дожить до того момента, когда они начали доминировать во Вселенной, то закон космологического расширения превратился бы в нерелятивистский, а плотность энергии стала бы асимптотически стремиться к

$$\rho_{nr} = \frac{m_{Pl}^2}{6\pi(t+t_1)^2}, \quad (5)$$

где t_1 определяется из условия равенства плотностей энергии ρ_{nr} (5) и $\rho_{rel}^{(1)}$ (3), что произошло бы в момент равновесия, который мы обозначим как t_{eq} . Сравнивая эти два выражения, находим, что $t_1 = t_{eq}/3$, а t_{eq} можно найти из уравнений

$$\frac{a_{in}}{a_{eq}} = \left(\frac{t_{in}}{t_{eq}} \right)^{1/2} = \frac{\rho_{BH}^{(in)}}{\rho_{rel}^{(in)}},$$

см. ниже.

В конечном итоге все или значительная часть ПЧД испарилась, образовав релятивистскую материю, и при $t = t_2$ режим расширения вернулся к релятивистскому:

$$\rho_{rel}^{(2)} = \frac{3m_{Pl}^2}{32\pi(t+t_2)^2}, \quad (6)$$

где t_2 определяется условием равенства ρ_{nr} (5) и $\rho_{rel}^{(2)}$ (6) в момент распада ПЧД, т. е. при $t = \tau_{BH}$.

Конечно, приведенные выше оценки являются приближительными и представлены здесь, чтобы понять суть эффекта. Тем не менее они применяются

ниже для расчетов в приближении мгновенного распада для мгновенного изменения режима расширения. Сравнение с точными расчетами продемонстрировало, что эти «мгновенные» результаты оказались довольно точными.

В тепловом равновесии плотность энергии релятивистских частиц равна

$$\rho_{rel} = \frac{\pi^2 g_*(T) T^4}{30}, \quad (7)$$

где T — температура плазмы, $g_*(T)$ — количество типов релятивистских частиц в плазме при температуре T .

Как известно, см., например, [20, 21], энтропия равновесной космологической плазмы с нулевым химическим потенциалом сохраняется в сопутствующем объеме:

$$s = \frac{\rho + \mathcal{P}}{T} a^3 = \text{const}, \quad (8)$$

где ρ — плотность энергии плазмы, \mathcal{P} — ее давление.

В обычных сценариях бариогенезиса несохранение барионного числа происходило при очень высоких температурах, а при низких температурах барионы эффективно сохранялись. Соответственно, в поздние космологические эпохи плотность барионного числа N_B также сохранялась в сопутствующем объеме. Поэтому барионная асимметрия оставалась постоянной в ходе расширения Вселенной, если не было притока энтропии в плазму, т. е. имело место соотношение

$$\beta = N_B/s = \text{const}. \quad (9)$$

Есть несколько реалистичных механизмов производства энтропии в ранней Вселенной. Например, энтропия вырастала в процессе электрослабого фазового перехода, даже если это был переход второго рода (или мягкий кроссовер). Рост энтропии мог быть на уровне порядка 10% [17]. Если в ходе космологической эволюции произошел фазовый переход первого рода, например в фазовом переходе КХД, рост энтропии может быть гигантским. Некоторый рост энтропии может быть также вызван остаточной аннигиляцией неравновесных нерелятивистских частиц темной материи после того, как они практически отключились от плазмы (заморозились).

В этой работе мы рассматриваем гипотетический случай Вселенной, в которой на каком-то этапе доминировали ПЧД, и вычисляем уменьшение предшествующей барионной асимметрии, а также относительное уменьшение плотности частиц темной материи (далее называемых X -частицами). Мы покажем, что при разумном количестве ПЧД подав-

ление плотности слабо взаимодействующих массивных частиц (WIMP), может быть достаточно сильным, чтобы позволить им быть реалистичными кандидатами на роль носителей темной материи, несмотря на то, что сила их взаимодействия типична для суперсимметрии, в частности, при сечении аннигиляции, равно $\sigma_{ann} v \approx \alpha^2/m_X^2$ при $\alpha \sim 10^{-2}$. Здесь m_X — масса X -частицы.

Пространство параметров суперсимметрии, как известно, существенно ограничено данными Большого адронного коллайдера (БАК) [22], но некоторые типы легчайших суперсимметричных частиц все еще остаются жизнеспособными кандидатами на роль частиц темной материи [23, 24]. Дополнительное выделение энтропии, обсуждаемое в этой статье, может привести к более широкому классу возможных легчайших суперсимметричных частиц носителей темной материи.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 мы приводим простую оценку величины выделения энтропии для случая ПЧД, имеющих фиксированную массу (дельта-функция), приближения мгновенного распада ПЧД и мгновенного перехода от начальной RD-стадии к стадии доминантности нерелятивистской материи, или MD-стадии, и обратно. В разд. 3 численно получены решения для закона космологической эволюции и выделения энтропии в случае смеси релятивистской материи и распадающихся ПЧД с дельта-функциональным спектром масс. Раздел 4 посвящен изучению эволюции для двух примеров широкого распределения ПЧД по массам. В разд. 5 мы анализируем результаты и формулируем выводы. Приложение А посвящено расчетам плотности числа X -частиц, возникающих при испарении ПЧД, тема, которая несколько удалена от основной линии статьи. Мы показываем там, что плотность частиц темной материи, образующихся при испарении ПЧД, недостаточно велика, чтобы компенсировать подавление энтропии. В Приложении В представлены выражения для аналитически вычисленных интегралов, входящих в уравнения эволюции.

2. МГНОВЕННАЯ СМЕНА РЕЖИМОВ РАСШИРЕНИЯ И МГНОВЕННОЕ ИСПАРЕНИЕ

Рассмотрим простейшую модель ПЧД с фиксированной массой M_0 и плотностью, на момент возникновения равной

$$\frac{dN_{BH}}{dM} = \mu_1^3 \delta(M - M_0), \quad (10)$$

где μ_1 — постоянный параметр размерности массы.

Все эти ПЧД были созданы одновременно в момент времени $t_{in}(M_0) = M_0/m_{Pl}^2$, см. уравнение (2). Предположим, что доля плотности энергии (массы) ПЧД при рождении составляла

$$\frac{\rho_{BH}^{(in)}}{\rho_{rel}^{(in)}} = \epsilon \ll 1. \quad (11)$$

Если пренебречь испарением ПЧД и если взаимодействием ПЧД с релятивистской материей можно пренебречь, то оба ингредиента космической плазмы эволюционируют независимо согласно законам

$$\begin{aligned} \rho_{rel}(t) &= \left(\frac{a^{(in)}}{a(t)}\right)^4 \rho_{rel}^{(in)}, \\ \rho_{BH}(t) &= \left(\frac{a^{(in)}}{a(t)}\right)^3 \rho_{BH}^{(in)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Рассмотрим случай, когда плотности релятивистской и нерелятивистской (ПЧД) материи стали равны при $t = t_{eq}$ до распада ПЧД. Согласно уравнениям (11) и (12) это происходит, когда

$$\frac{\rho_{BH}(t_{eq})}{\rho_{rel}(t_{eq})} = \epsilon \frac{a(t_{eq})}{a_{in}} = 1. \quad (13)$$

В этом разделе мы предполагаем, что при $t < t_{eq}$ расширение Вселенной описывается чисто релятивистским законом, когда масштабный фактор изменяется в соответствии с уравнением (4). Соответственно находим

$$t_{eq} = t_{in}/\epsilon^2. \quad (14)$$

ПЧД выжили бы в первичной плазме до момента равенства плотностей релятивистской и нерелятивистской материи, если бы выполнялось условие $t_{eq} - t_{in} < \tau_{BH}$, где время жизни ПЧД по отношению к испарению дается выражением [25]

$$\tau_{BH} \approx 3 \cdot 10^3 N_{eff}^{-1} M_{BH}^3 m_{Pl}^{-4} \equiv C \frac{M_{BH}^3}{m_{Pl}^4}, \quad (15)$$

где $C \approx 30$ и N_{eff} — эффективное количество разновидностей частиц с массами, меньшими температуры черной дыры. Для выбранных значений масс ПЧД $N_{eff} \approx 100$. (На самом деле g_* ближе к 200, но эта разница не имеет большого значения.) Температура черной дыры равна

$$T_{BH} = \frac{m_{Pl}^2}{8\pi M_{BH}}. \quad (16)$$

Таким образом, условие достижения равенства плотностей энергий релятивистской и нерелятивистской компонент первичной плазмы до распада ЧД выглядит следующим образом:

$$M_{BH} > \left[\frac{m_{Pl}^2}{C} \left(\frac{1}{\epsilon^2} - 1 \right) \right]^{1/2} \approx \frac{m_{Pl}}{\sqrt{C}\epsilon}. \quad (17)$$

Согласно предположению о мгновенной смене режима расширения масштабный фактор после того, как достигается момент равенства плотностей энергий релятивистской и нерелятивистской компонент, т. е. при $t > t_{eq}$, начинает эволюционировать согласно закону

$$a_{nr}(t) = a_{rel}(t_{eq}) \left(\frac{t + t_{eq}/3}{4t_{eq}/3} \right)^{2/3}, \quad (18)$$

а космологическая плотность энергии убывает по нерелятивистскому закону расширения:

$$\rho_{BH} = \frac{m_{Pl}^2}{6\pi (t + t_{eq}/3)^2}. \quad (19)$$

Такие формы уравнений (18) и (19) продиктованы непрерывностью параметра Хаббла и плотности энергии (т. е. равенством ρ_{rel} и ρ_{BH}) при $t = t_{eq}$. MD-режим (19) длился до $t = \tau_{BH}$, когда мгновенный взрыв ПЧД создал новую релятивистскую плазму с температурой

$$T_{heat}^4 = \frac{5m_{Pl}^2}{\pi^3 g_*(T_{heat})(\tau_{BH} + t_{eq}/3)^2}. \quad (20)$$

Здесь предполагается мгновенная термализация.

Температура релятивистской плазмы, сосуществующей с доминирующими ПЧД, уменьшалась как масштабный фактор:

$$T_{rel} = T_{eq} \frac{a_{eq}}{a_{nr}(\tau_{BH})} = T_{eq} \left(\frac{4t_{eq}}{3\tau_{BH} + t_{eq}} \right)^{2/3}. \quad (21)$$

Соответственно, температура вновь созданной релятивистской плазмы, возникающей в результате распада ПЧД, могла быть намного выше, чем T_{rel} , даваемая уравнением (21). Коэффициент подавления энтропии, равный кубу отношения температуры новой релятивистской плазмы, создаваемой мгновенным испарением ПЧД, и температуры «старой» релятивистской плазмы плюс единица, записывается как

$$\begin{aligned} S &= 1 + \left(\frac{T_{heat}}{T_{rel}} \right)^3 = 1 + \left(\frac{a(\tau_{BH})}{a_{eq}} \right)^{3/4} = \\ &= 1 + \sqrt{\frac{3\tau_{BH}}{4t_{eq}}} \left(1 + \frac{t_{eq}}{3\tau_{BH}} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (22)$$

Наш подход действителен для $\tau_{BH} \geq t_{eq}$, а в предельном случае $\tau_{BH} = t_{eq}$ коэффициент подавления энтропии составляет $S = 2$, происходящий из релятивистской материи и от ПЧД в равных долях. Поскольку минимальное значение отношения

$$\frac{\tau_{BH}}{t_{eq}} = \frac{CM_{BH}^2 \epsilon^2}{m_{Pl}^2} \quad (23)$$

равно единице, минимальная масса ПЧД, для которой можно доверять приближенным расчетам, приведенным выше, равна

$$M_{BH} > M_1^{min} \equiv \frac{m_{Pl}}{\epsilon \sqrt{C}} \approx 4 \cdot 10^6 \text{ г} \cdot \frac{10^{-12}}{\epsilon}, \quad (24)$$

где $C = 30$ согласно формуле (15).

Для больших $\tau \gg t_{eq}$, когда S велико, это подавление примерно равно

$$S \approx \sqrt{\frac{3\tau_{BH}}{4t_{eq}}} = \frac{\sqrt{3C} \epsilon M}{2m_{Pl}} = 2.14 \cdot 10^{-7} \frac{\epsilon}{10^{-12}} \frac{M}{\text{г}}. \quad (25)$$

Масса ПЧД ограничена сверху условием, что температура нагрева после испарения должна быть выше температуры ВВН, составляющей примерно 1 МэВ. Из уравнения (20) следует, что

$$T_{heat} \approx 0.06 m_{Pl} \left(\frac{m_{Pl}}{M_{BH}} \right)^{3/2}. \quad (26)$$

Следовательно, массы ПЧД должны быть меньше 10^9 г.

Коэффициенты подавления энтропии для $\epsilon = 10^{-12}$ в зависимости от M_{BH} представлены на рис. 1 для малых и больших масс.

3. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ДЕЛЬТА-ФУНКЦИОННОГО СПЕКТРА МАСС ПЕРВИЧНЫХ ЧЕРНЫХ ДЫР

Здесь мы откажемся от приближения мгновенного распада и мгновенного изменения режимов космологического расширения и численно решим уравнения, описывающие эволюцию космологических плотностей энергии нерелятивистских ПЧД и релятивистской материи. Удобно работать с безразмерной переменной времени $\eta = t/\tau_{BH}$, когда уравнения можно записать как

$$\frac{d\rho_{BH}}{d\eta} = -(3H\tau_{BH} + 1)\rho_{BH}, \quad (27)$$

$$\frac{d\rho_{rel}}{d\eta} = -4H\tau_{BH}\rho_{rel} + \rho_{BH}. \quad (28)$$

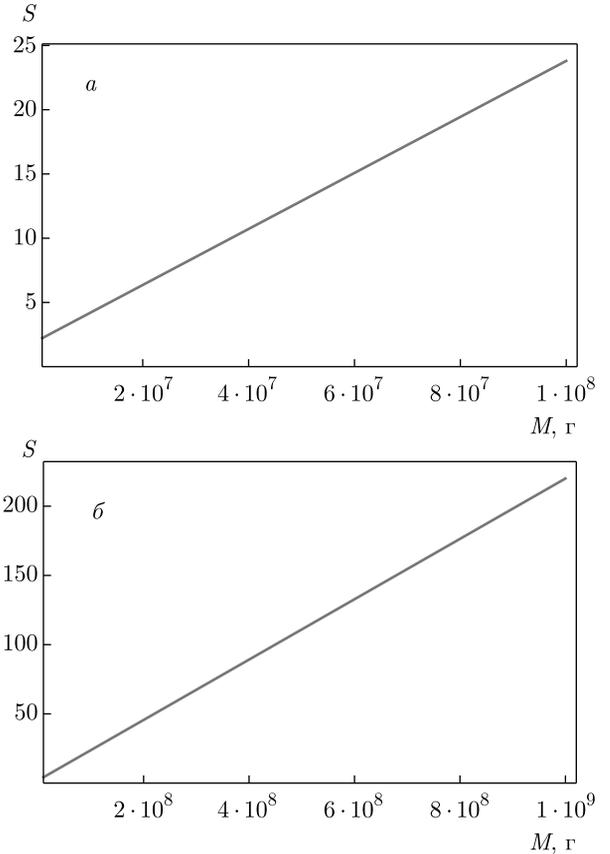


Рис. 1. Коэффициент подавления энтропии из-за распада ПЧД в приближении мгновенного распада как функция массы ЧД, начиная с M_1^{min} до $M = 10^8$ г (а), 10^9 г (б) для $\epsilon = 10^{-12}$

Представим плотности энергии ПЧД и релятивистской материи соответственно в следующем виде:

$$\rho_{BH} = \rho_{BH}^{(in)} \exp(-\eta + \eta_{in}) \frac{y_{BH}(\eta)}{z^3(\eta)}, \quad (29)$$

$$\rho_{rel} = \rho_{rel}^{(in)} \frac{y_{rel}(\eta)}{z^4(\eta)}, \quad (30)$$

где $y_{rel}^{(in)} = y_{BH}^{(in)} = 1$ и

$$\eta_{in} = \frac{m_{Pl}^2}{CM_{BH}^2} \ll 1. \quad (31)$$

Постоянная C определяется в уравнении (15).

Красное смещение $z(\eta) = a(\eta)/a_{in}$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{dz}{d\eta} = H\tau_{BH} z, \quad (32)$$

где параметр Хаббла H определяется обычным выражением для пространственно-плоской Вселенной:

$$\frac{3H^2 m_{Pl}^2}{8\pi} = \rho_{rel} + \rho_{BH}. \quad (33)$$

Используя уравнения (30) и (29) с $\rho_{rel}^{(in)}$, определенной формулой (3) при $t = t_{in}$, и учитывая, что $\rho_{BH}^{(in)} = \epsilon \rho_{rel}^{(in)}$, находим

$$H\tau_{BH} = \frac{C}{2} \frac{M_{BH}^2}{m_{Pl}^2} \left(\frac{y_{rel}}{z^4} + \frac{\epsilon}{z^3 e^{\eta - \eta_{in}}} \right)^{1/2}. \quad (34)$$

Очевидно, уравнение (27) с ρ_{BH} , данным уравнением (29), имеет решение

$$y_{BH}(\eta) = y_{BH}^{(in)} = 1, \quad (35)$$

а $\rho_{rel}(\eta)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{dy_{rel}}{d\eta} = \epsilon z(\eta) e^{-\eta + \eta_{in}}. \quad (36)$$

Уравнения (32) и (36) можно решить численно с начальными условиями при $\eta = \eta_{in}$

$$y_{bh} = y_{rel} = z = 1. \quad (37)$$

Однако большое значение коэффициента $H\tau$ делает численную процедуру весьма медленной. Чтобы этого избежать, введем новую функцию W согласно соотношению

$$z = \sqrt{W}/\epsilon \quad (38)$$

и приходим к уравнениям

$$\frac{dW}{d\eta} = C\epsilon^2 \left(\frac{M}{m_{Pl}} \right)^2 \left(y_{rel} + \sqrt{W} e^{-\eta + \eta_{in}} \right)^{1/2}, \quad (39)$$

$$\frac{dy_{rel}}{d\eta} = \sqrt{W} e^{-\eta + \eta_{in}}, \quad (40)$$

где $W(\eta_{in}) = \epsilon^2$. Выделение энтропии от испарения ПЧД можно рассчитать следующим образом. В отсутствие ПЧД величины, сохраняющиеся в сопутствующем объеме, эволюционировали бы как $1/z^3$. С учетом дополнительного излучения, исходящего от испарения ПЧД, энтропия изменяется как $y_{rel}^{3/4}/z^3$, см. уравнение (30). Отсюда коэффициент подавления относительной численности замороженных частиц темной материи или ранее сгенерированной барионной асимметрии стремится к

$$S = [y_{rel}(\eta)]^{3/4} \quad (41)$$

при времени, стремящемся к бесконечности. Эволюция S показана на рис. 2 для значений $M_{BH} = 10^7, 10^8, 10^9$ г и $\epsilon = 10^{-12}$.

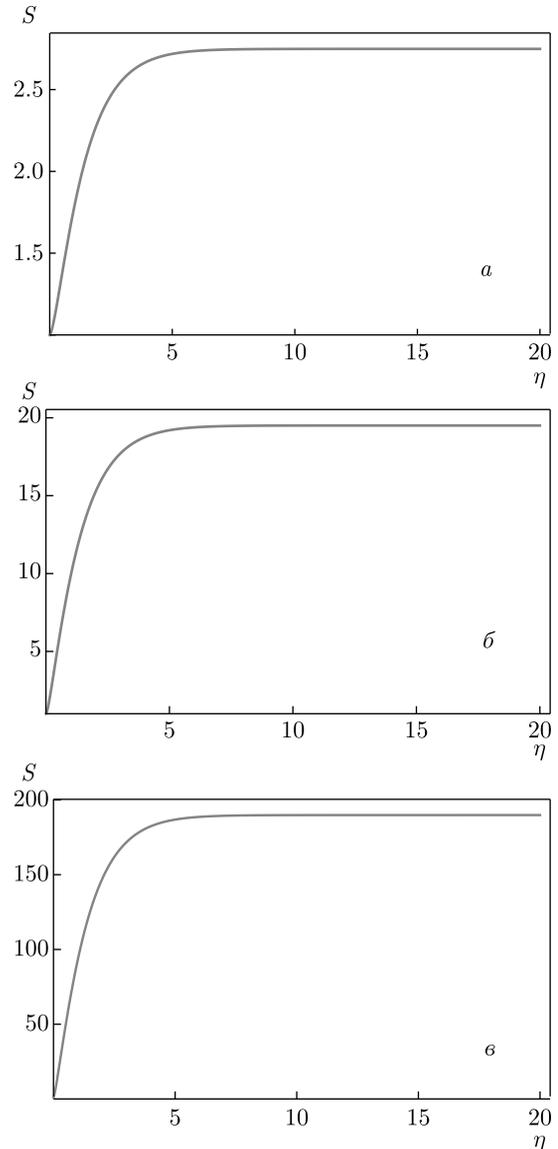


Рис. 2. Временная эволюция S для $M_{BH} = 10^7$ г (а), 10^8 г (б), 10^9 г (в) и $\epsilon = 10^{-12}$

При больших η (фактически при $\eta > 15$) коэффициент подавления S , как и ожидалось, стремится к постоянному значению. Результаты, представленные на рис. 2, очень хорошо согласуются с приближительными значениями, показанными на рис. 1.

На рис. 3 представлены асимптотические значения коэффициента подавления энтропии для разных масс ПЧД и $\epsilon = 10^{-12}$. Они также очень близки к предельным значениям, которые можно извлечь из рис. 1.

Отношение коэффициента подавления энтропии для точных расчетов при фиксированной массе ПЧД к коэффициенту, полученному в приближе-

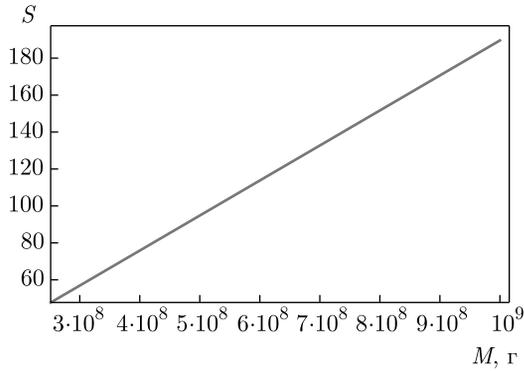


Рис. 3. Коэффициент подавления энтропии как функция массы для $\epsilon = 10^{-12}$

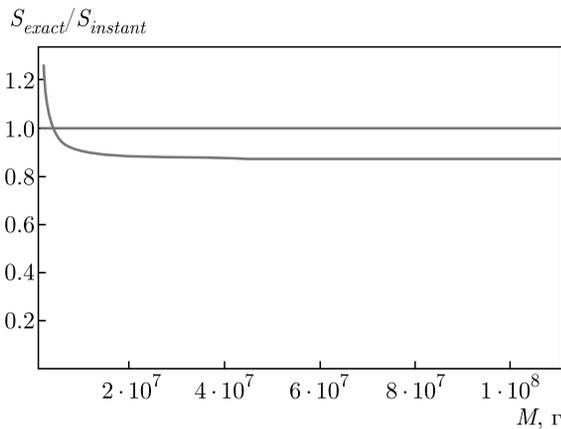


Рис. 4. (В цвете онлайн) Отношение коэффициента подавления энтропии для точных вычислений при фиксированной массе (красная кривая) и того же коэффициента, вычисленного в приближении мгновенного распада и мгновенного изменения режима расширения. Синяя линия описывает гипотетическое отношение, равное единице

нии мгновенного распада и мгновенного изменения режима расширения, как функция массы для $\epsilon = 10^{-12}$, представлено на рис. 4. Рост этого отношения при малых M можно объяснить недооценкой выделения энтропии в мгновенном приближении. Действительно, для M , меньших граничного значения, заданного формулой (24), высвобождение энтропии будет равно нулю, в то время как точные вычисления приводят к ненулевому результату, поэтому их отношение стремится к бесконечности.

4. РАСШИРЕННЫЙ СПЕКТР МАСС

Рассмотрим теперь вместо дельта-функции более широкое распределение по массам:

$$\frac{dN_{BH}}{dM} = f(M, t), \tag{42}$$

где N — плотность числа ПЧД. Поскольку ПЧД нерелятивистские, их дифференциальная плотность энергии равна

$$\frac{d\rho_{BH}}{dM} \equiv \sigma(M, t) = Mf(M, t). \tag{43}$$

Первичные черные дыры, созданные старым традиционным механизмом [1,2], должны иметь острый спектр масс, близкий к дельта-функции. Однако в нескольких более поздних работах были исследованы механизмы, приводящие к расширенному спектру масс, см., например, ранние статьи [5–8].

В последующем рассмотрении мы предполагаем, что плотности числа и энергии ПЧД в единице объема заключены в пределах между M_{min} и M_{max} . Значение M_{max} должно быть ниже верхнего предела $M = 10^9$ г, который налагается условием, что испарение ПЧД не исказило бы успешных результатов теории первичного нуклеосинтеза. Однако небольшая часть ПЧД может иметь массы больше 10^9 г, и их влияние на BBN может быть интересным, хотя еще не исследовано в полной мере.

Минимальное значение массы ПЧД, M_{min} , должно быть больше, чем M_1^{min} , заданное формулой (24), чтобы реализовалось предположение $\tau_{BH} \geq t_{eq}$, необходимое для того, чтобы доля подавления энтропии была больше единицы, иначе влияние масс, меньших M_{min} , было бы несущественным.

Параметризуем значение массы ПЧД безразмерным параметром x , таким что $M_{BH} = xM_0$, где M_0 — среднее значение распределения плотности массы, или значение, при котором $\sigma(M, t)$ достигает максимума. Очевидно, что x имеет ненулевое значение в следующих пределах:

$$x_{min} \equiv \frac{M_{min}}{M_0} \leq x \leq x_{max} \equiv \frac{M_{max}}{M_0}. \tag{44}$$

Определим теперь безразмерное «время» η как $\eta = t/\tau(M_0)$, где $\tau(M_0) \equiv \tau_0$ — время жизни ПЧД с массой M_0 . Все ПЧД имеют разную массу и, следовательно, время их жизни (15) и моменты возникновения (2) разные.

Временная эволюция дифференциальной плотности энергии ПЧД определяется уравнением

$$\dot{\sigma}(M, t) = -[3H + \Gamma(M)] \sigma(M, t), \tag{45}$$

где

$$\Gamma(M) = \frac{1}{\tau(M)} = \frac{m_{Pl}^4}{CM^3},$$

см. уравнение (15).

В терминах безразмерного времени η это уравнение принимает вид

$$\frac{d\sigma}{d\eta} \equiv \sigma' = - \left[3H\tau_0 + \left(\frac{M_0}{M} \right)^3 \right] \sigma. \quad (46)$$

Начальное значение η — момент образования ЧД. Оно зависит от M и, согласно уравнению (31), равно

$$\eta_{form}(M) = \frac{m_{Pl}^2 M}{CM_0^3}. \quad (47)$$

Очевидно, что $\sigma(M) = 0$, когда $\eta(M) < \eta_{form}$.

Уравнение, описывающее эволюцию плотности энергии релятивистской материи, теперь принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{rel}}{d\eta} \equiv \rho'_{rel} = \\ = -4H\tau_0\rho_{rel} + \int dM \left(\frac{M_0}{M} \right)^3 \sigma(M). \end{aligned} \quad (48)$$

По аналогии с предыдущим разделом мы вводим красное смещение, нормированное на значение масштабного фактора, когда образовалась наименее массивная ПЧД:

$$z(\eta) = a(\eta)/a[\eta_{form}(M_{min})]. \quad (49)$$

Эволюция $z(\eta)$ определяется уравнением, аналогичным уравнению (32):

$$\frac{dz}{d\eta} = H\tau_0 z, \quad (50)$$

с параметром Хаббла, который теперь определяется выражением

$$\frac{3H^2 m_{Pl}^2}{8\pi} = \rho_{rel} + \rho_{BH} = \rho_{rel} + \int dM \sigma(M). \quad (51)$$

Уравнение (46) имеет следующее решение:

$$\begin{aligned} \sigma(M, \eta) = \theta(\eta - \eta_f) \sigma(M, \eta_f) \times \\ \times \exp \left[(\eta_f - \eta) \left(\frac{M_0}{M} \right)^3 \right] \left(\frac{z(\eta_f)}{z(\eta)} \right)^3, \end{aligned} \quad (52)$$

где для краткости введено новое обозначение $\eta_f \equiv \eta_{form}(M)$, а тета-функция обеспечивает обращение в нуль решения для $\eta < \eta_f$. Начальное значение плотности ПЧД в момент образования $\sigma(\eta_f(M))$ (47) определяется долей $\epsilon(M)$ плотности энергии ПЧД с массой M по отношению к плотности энергии релятивистской материи в момент образования ПЧД:

$$\sigma(M, \eta_f(M)) = \epsilon(M) \rho_{rel}(\eta_f(M))/M, \quad (53)$$

где $\epsilon(M)$ зависит от сценария образования ПЧД и будет взята ниже в соответствии с некоторыми разумными предположениями. В любом случае мы предполагаем, что $\epsilon(M)$ обращается в нуль, если $M < M_{min}$ и $M > M_{max}$.

Предположим, что на временном интервале $\eta_f(M_{min}) < \eta < \eta_f(M_{max})$ общая доля массовой плотности ПБД пренебрежимо мала по сравнению с плотностью энергии релятивистской материи, поэтому режим расширения является невозмущенным релятивистским, см. формулы (3), (4). Соответственно с помощью уравнения (2) находим, что плотность энергии релятивистской материи на момент создания «первых» легчайших черных дыр равна

$$\rho_{rel}(t_{in}) = \frac{3}{32\pi} \frac{m_{Pl}^6}{M_{min}^2}. \quad (54)$$

Если плотность энергии ПЧД остается небольшой по сравнению с плотностью релятивистской материи до образования наиболее тяжелых ПЧД, то последним членом в правой части уравнения (48) можно пренебречь, и поэтому во временном интервале $\eta(M_{min}) < \eta < \eta(M_{max})$ плотность энергии ρ_{rel} равна

$$\rho_{rel} = \frac{3}{32\pi} \frac{m_{Pl}^6}{M_{min}^2} \frac{1}{z(\eta)^4}. \quad (55)$$

Следовательно, дифференциальная плотность энергии ПЧД эволюционирует как

$$\begin{aligned} \sigma(M, \eta) = \frac{3m_{Pl}^6}{32\pi M M_{min}^2} \frac{\epsilon(M)}{z(\eta_f(M))} \times \\ \times \frac{\theta(\eta - \eta_f(M))}{z^3(\eta) \exp[(M_0/M)^3(\eta - \eta_f(M))]}. \end{aligned} \quad (56)$$

В этом уравнении η заключено в пределах $\eta(M_{min}) < \eta < \eta(M_{max})$ или $\eta_f(M) < \eta < \eta(M_{max})$ в зависимости от того, какой нижний предел больше.

Поскольку

$$\left(\frac{M_0}{M} \right)^3 \eta_f(M) = \frac{m_{Pl}^2}{CM^2} \ll 1$$

для любого η , экспоненту можно разложить как

$$\begin{aligned} \exp \left[- \left(\frac{M_0}{M} \right)^3 (\eta - \eta_f(M)) \right] = \\ = \exp \left[- \left(\frac{M_0}{M} \right)^3 \eta \right] \left(1 + \frac{m_{Pl}^2}{CM^2} \right). \end{aligned} \quad (57)$$

В связи с необходимостью интегрирования по M соответствующие эволюционные уравнения оказываются интегродифференциальными и численные расчеты обычно становятся довольно громоздкими. Однако мы рассмотрим некоторые упрощенные формы начальных распределений ПЧД по массам, для которых интегралы по M можно взять аналитически, а затем дифференциальные уравнения можно быстро и просто решить численно. Используя такие игрушечные модели, мы можем понять суть особенности производства энтропии ПЧД с расширенным спектром масс ПЧД. К сожалению, мы не смогли найти работоспособную игрушечную модель для реалистичного логнормального спектра масс, см. [12]. Тем не менее спектры, которые допускают аналитическое интегрирование, могут быть численно довольно близкими к логнормальному.

Далее рассмотрим пару иллюстративных примеров, предполагая, что функция

$$F(x) = \epsilon(M)/z(\eta_f(M)) \quad (58)$$

заключена между $x_{min} = M_{min}/M_0$ и $x_{max} = M_{max}/M_0$. Здесь согласно формуле (53) $\epsilon(M)$ — доля плотности энергии ПЧД с массой M на момент создания ПЧД. Для простоты мы предполагаем, что $F(x)$ — полиномиальная функция по целым степеням x , хотя в последнем нет необходимости.

Возьмем два примера для F :

$$F_1(x) = \frac{\epsilon_0}{x_{max} - x_{min}} \quad (59)$$

для $x_{min} < x < x_{max}$ и $F_1 = 0$ для x вне этого интервала. Очевидно, что точка $x = 1$ должна находиться внутри этого интервала.

Еще одна интересная форма F :

$$F_2(x) = \frac{\epsilon_0}{N} a^2 b^2 \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{x}\right)^2 \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{b}\right)^2. \quad (60)$$

Здесь N — нормировочный коэффициент, выбранный таким образом, чтобы максимальное значение $F_2/\epsilon = 1$. Эта функция обращается в нуль при $x = x_{min} \equiv a$ и $x = x_{max} \equiv b$, с исчезающими производными в этих точках, и F_2 тождественно равна нулю вне этого интервала. Функция F_2 достигает максимума при $x_0 = 2ab/(a + b)$:

$$F_2^{(max)} = \frac{\epsilon_0}{16} N a^2 b^2 \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{b}\right)^4 = 1. \quad (61)$$

F_2 может быть численно довольно близка к логнормальному распределению при правильном выборе параметров. В качестве рабочего примера при $a = 1$,

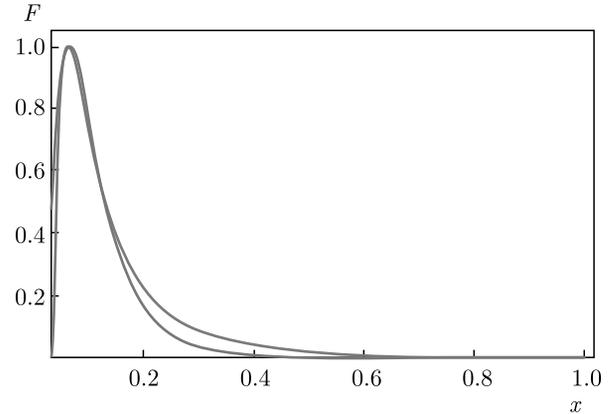


Рис. 5. (В цвете онлайн) Модельная функция спектра масс F_2 (красная кривая) и логнормальный спектр (синяя кривая) от $x = M/M_0$

$b = 30$ проведем сравнение F_2 с логнормальной функцией:

$$F_{LN} = \epsilon \exp[-1.5 (\ln^2(15x))]. \quad (62)$$

При выбранных значениях параметров функции $F_2(x)$ и $F_{LN}(x)$ представлены на рис. 5.

В уравнение эволюции входят два следующих интеграла (51) и (48):

$$I_0 = \int dM \sigma(M, \eta) \quad (63)$$

и

$$I_3 = \int dM \left(\frac{M_0}{M}\right)^3 \sigma(M, \eta). \quad (64)$$

Мы можем вычислить их явно, сделав некоторые упрощающие предположения о форме F (58), которые обсуждаются в разд. 4.1, 4.2.

4.1. Расчеты для плоского спектра

Здесь мы найдем коэффициент подавления энтропии для «плоского» спектра $F_1(x)$:

$$F_1(x) = \frac{\epsilon(M)}{z(\eta_f(M))} = \frac{\epsilon_0}{b - a} = \text{const}, \quad (65)$$

если x находится в пределах $a \equiv x_{min} < x < b \equiv x_{max}$ и $F_1(x) = 0$ за пределами этого отрезка. Параметры a и b здесь и ниже, см. формулу (75), определяют ширину спектра масс. Величина S довольно слабо зависит от них. Поскольку нет значительной разницы между величинами подавления энтропии для расширенного и дельта-образного спектров масс, вариация a и b не имеет существенного значения.

Используя уравнение (56), находим

$$\begin{aligned}
 I_0^{(1)} &= \int_{M_{min}}^{M_{max}} dM \sigma(M, \eta) = \frac{3m_{Pl}^6 \epsilon_0}{32\pi z^3(\eta) M_{min}^2 (b-a)} \times \\
 &\times \int \frac{dM}{M} \frac{\theta[\eta - \eta_f(M)]}{\exp[(M_0/M)^3(\eta - \eta_f(M))]} = \\
 &= \frac{K(\eta)}{b-a} \int_a^b \frac{dx}{x} \frac{\theta[\eta - \eta_f(M)]}{\exp[x^3(\eta - \eta_f(M))]} \equiv \\
 &\equiv \frac{K(\eta)}{b-a} j_{(10)}(a, b, \eta, \eta_f), \quad (66)
 \end{aligned}$$

где $x = M_0/M$ и

$$K(\eta) = \frac{3m_{Pl}^6 \epsilon_0}{32\pi z^3(\eta) M_{min}^2}, \quad (67)$$

$$\begin{aligned}
 I_3^{(1)} &= \int_{M_{min}}^{M_{max}} dM \left(\frac{M_0}{M}\right)^3 \sigma(M, \eta) = \\
 &\frac{K(\eta)}{b-a} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{dx}{x^4} \frac{\theta[\eta - \eta_f(M)]}{\exp[x^3(\eta - \eta_f(M))]} \equiv \\
 &\equiv \frac{K(\eta)}{b-a} j_{13}(x_{min}, x_{max}, \eta, \eta_f). \quad (68)
 \end{aligned}$$

Вычислим интегралы $j_{(10)}$ и $j_{(13)}$ аналитически, используя Mathematica, и подставим их в уравнения (47)–(49), которые решим численно. Поскольку $\eta_f(M) \ll \eta$ почти на всем интервале интегрирования, мы пренебрегаем η_f , см. также уравнение (57). Результаты представлены в Приложении В.

Будем искать решение, как это делается в разд. 4, принимая, что ρ_{rel} имеет вид

$$\rho_{rel} = y_{rel} \rho_{rel}^{(in)} / z^4, \quad (69)$$

где

$$\rho_{rel}^{(in)} = \frac{3m_{Pl}^6}{32\pi M_{min}^2},$$

и поэтому y_{rel} и z удовлетворяют уравнениям

$$y'_{rel} = \epsilon_0 z(\eta) j_{(13)}, \quad (70)$$

$$z'(\eta) = \frac{CM_0^3}{2m_{Pl}^2 M_{min}} \left(\frac{y_{rel}}{z^4} + \frac{\epsilon_0}{z^3} j_{(10)} \right)^{1/2}. \quad (71)$$

По аналогии с уравнением (38) вводим новую функцию W_e согласно

$$z = \sqrt{W_e} / \epsilon_0, \quad (72)$$

для которой получим

$$\begin{aligned}
 \frac{dW_e}{d\eta} &= \frac{C\epsilon_0^2 M_0^3}{m_{Pl}^2 M_{min}} \left(y_{rel} + \sqrt{W_e} j_{(10)} \right)^{1/2} \equiv \\
 &\equiv \frac{C\epsilon_0^2 M_0^2}{m_{Pl}^2 a} \left(y_{rel} + \sqrt{W_e} j_{(10)} \right)^{1/2}, \quad (73)
 \end{aligned}$$

$$\frac{dy_{rel}}{d\eta} = \sqrt{W_e} j_{(13)} \quad (74)$$

с начальными условиями $W_e^{(in)} = \epsilon^2$ и $y_{rel}^{(in)} = 1$.

Эти уравнения можно проинтегрировать численно. Асимптотическое значение $y_{rel}^{3/4}$ при больших η , которое, согласно уравнению (41), представляет собой коэффициент подавления энтропии, изображено на рис. 6, 7 для разных значений $\epsilon = 10^{-12}$, $x_{min} = 1/3$ и $x_{max} = 5/3$. Результат пропорционален M_{BH} и достаточно хорошо согласуется с приближительными результатами, рассчитанными в приближении мгновенного распада и мгновенной смены режима (25).

4.2. Расчеты с непрерывным почти логнормальным спектром масс

Здесь мы предполагаем, что спектр масс имеет вид

$$\begin{aligned}
 F_2(x) &= \frac{\epsilon(M)}{z(\eta_f(M))} = \\
 &= \frac{\epsilon_0 a^2 b^2 (1/a - 1/x)^2 (1/x - 1/b)^2}{16a^2 b^2 (1/a - 1/b)^4}. \quad (75)
 \end{aligned}$$

Соответственно уравнения (66) и (68) модифицируются добавлением множителя $F_2(x)$ в подынтегральные выражения. Выражения для $j_{(20)}$ и $j_{(23)}$ представлены в Приложении В.

Уравнения эволюции совпадают с уравнениями разд. 4.1 после замены $j_{(10)} \rightarrow j_{(20)}$ и $j_{(13)} \rightarrow j_{(23)}$. Коэффициенты подавления энтропии для непрерывного спектра масс и различных значений параметров представлены на рис. 8, 9.

Мы видим, что коэффициенты подавления энтропии для обеих форм расширенных спектров масс, прямоугольной и более реалистичной логнормальной, ведут себя как функция центрального значения массы ПЧД и ϵ по существу аналогично вычисленному для дельта-функционального спектра масс, рассмотренного в разд. 2 и 3, и изменяются от величины 2–3 для $M = 10^7$ г до 100–300 для $M = 10^9$ г.

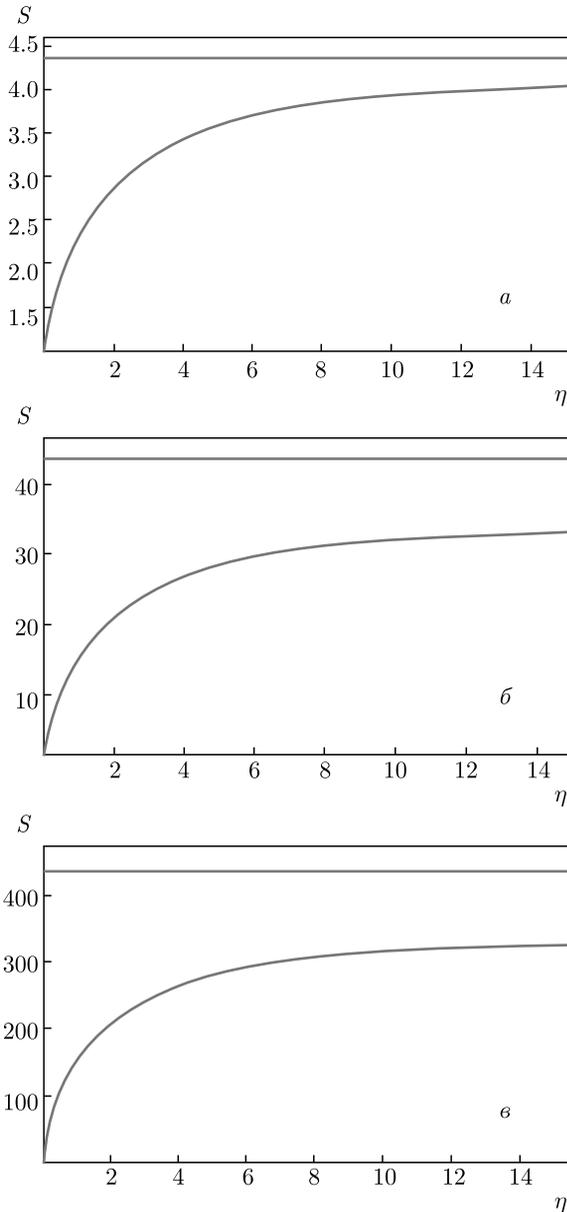


Рис. 6. (В цвете онлайн) Эволюция подавления энтропии $y_{rel}^{3/4}$ для плоского спектра масс (65) при $M_{BH} = 10^7$ г и $\epsilon = 10^{-12}$ как функция безразмерного времени η для $a = 1/3, b = 4/3$ (синие кривые). $M_0 = 10^7$ г (а), 10^8 г (б), 10^9 г (в). Красные линии — коэффициент подавления энтропии, приближенно рассчитанный в мгновенном приближении (25)

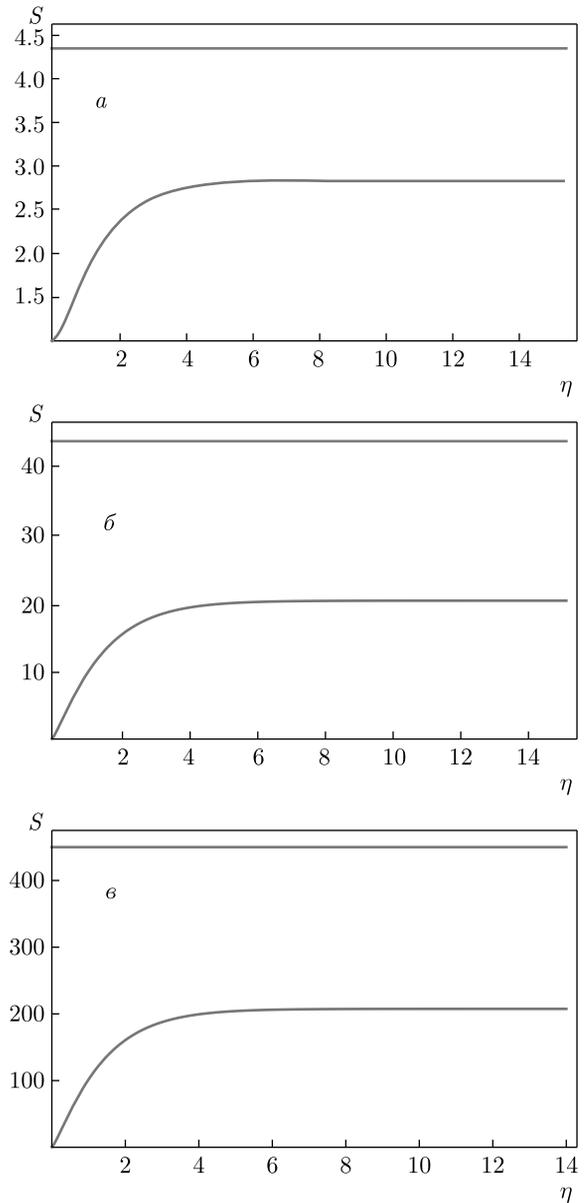


Рис. 7. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 6, но с $a = 0.95$ и $b = 1.05$ (синие кривые). $M_0 = 10^7$ г (а), 10^8 г (б), 10^9 г (в). Красные линии — коэффициент подавления энтропии, приближенно рассчитанный в мгновенном приближении (25)

Все же нужно заметить, что сравнение неоднозначно, так как оно зависит от нормировки спектров, например, мы можем сравнивать их при равных плотностях масс ПЧД или при их равных числах в единице объема. Результаты сравнения также зависят от ширины расширенных спектров. В любом случае результаты совпадают по порядку величины. Зави-

симость от ϵ в точности такая же, как это было обнаружено в аналитических расчетах в разд. 2.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как показано в данной работе, подавление замороженной плотности реликтовых частиц или космологической барионной асимметрии может быть

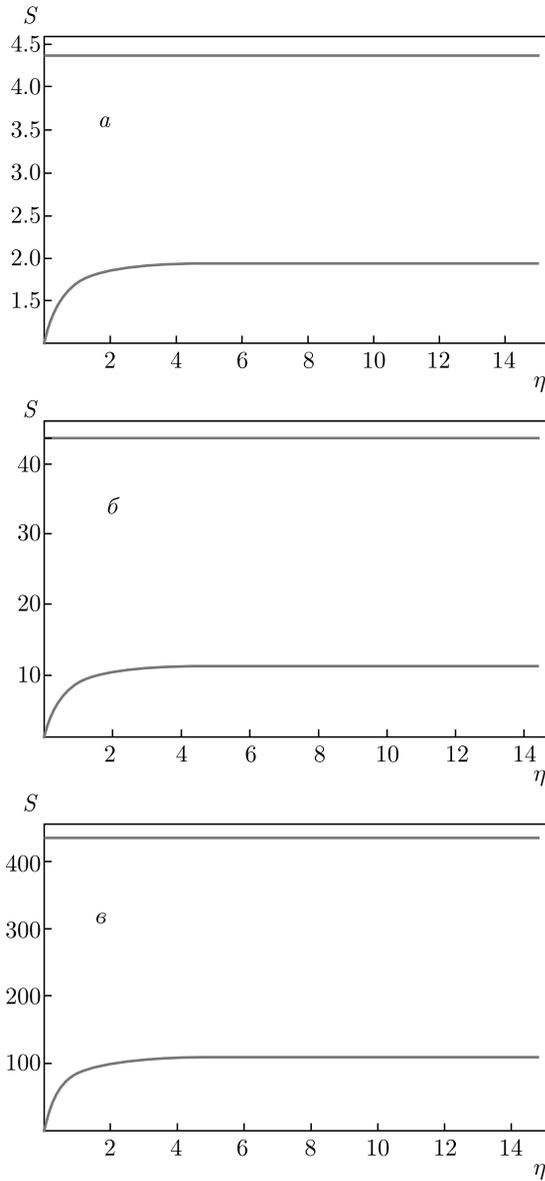


Рис. 8. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 6, но с непрерывным спектром масс и с $a = 1/3$, $b = 4/3$ (синие кривые). $M_0 = 10^7$ г (а), 10^8 г (б), 10^9 г (в). Красные линии — коэффициент подавления энтропии, приблизительно рассчитанный в мгновенном приближении (25)

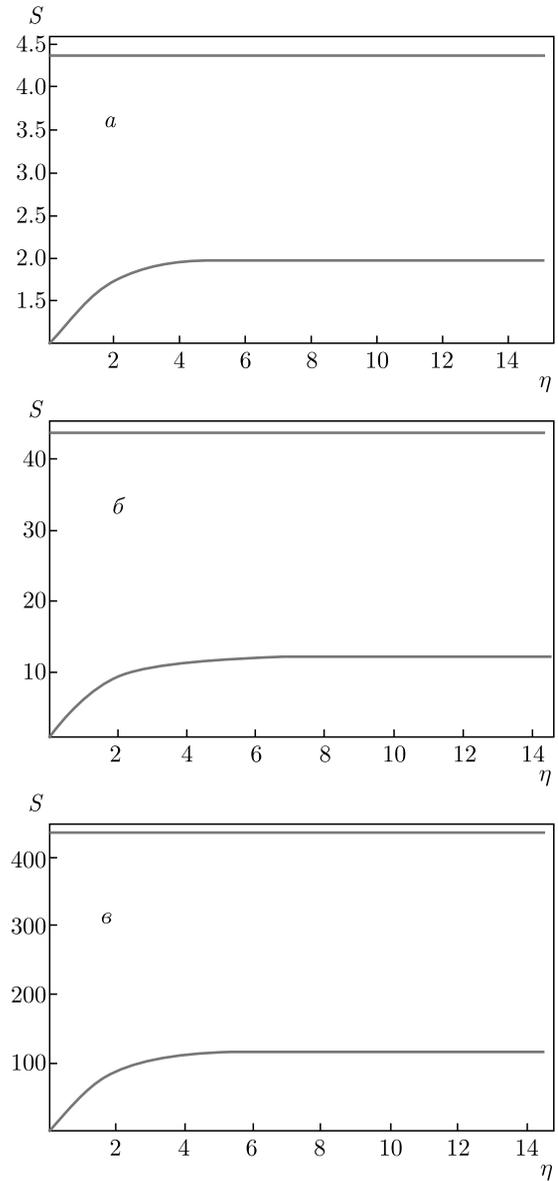


Рис. 9. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 6, но с непрерывным спектром масс и с $a = 0.95$ и $b = 1.05$ (синие кривые). $M_0 = 10^7$ г (а), 10^8 г (б), 10^9 г (в). Красные линии — коэффициент подавления энтропии, приблизительно рассчитанный в мгновенном приближении (25)

весьма значительным, если они были образованы до испарения ПЧД. При упрощенных приближениях о дельта-функциональном спектре масс ПЧД, мгновенном распаде ПЧД и мгновенном изменении режимов расширения от начального доминирования релятивистской материи до нерелятивистского доминирования ЧД и обратно коэффициент подавления энтропии, S , может быть вычислен аналитически, см. уравнение (25). Точные расчеты, но все еще

с дельта-функциональным спектром масс, находятся в очень хорошем совпадении с приближительными.

Величина подавления пропорциональна произведению ϵM_{BH} и, например, для $M_{BH} = 10^9$ г и $\epsilon = 10^{-12}$ коэффициент подавления составляет $S \approx 400$. Масса черной дыры 10^9 г составляет максимальное значение, разрешенное первичным нуклеосинтезом, см. вывод после уравнения (26). Это ограничение справедливо, если ПЧД доминировали

в ранней Вселенной до эпохи BBN, что могло произойти, если минимальная масса ПЧД определялась уравнением (24).

Расчеты с более реалистичными расширенными спектрами масс ПЧД показывают аналогичные черты коэффициента подавления S , который также пропорционален ϵ и центральному значению массы в массовом распределении. Имеется некоторая зависимость от формы спектра и от значений M_{max} и M_{min} , но они существенно не меняют наших результатов.

Существенное ограничение пространства параметров минимальной суперсимметричной модели, полученное на БАК, привело к сомнениям относительно гипотезы, что носители темной материи состоят из легчайших суперсимметричных частиц. Более того, обычные слабо взаимодействующие массивные частицы (WIMP) с массой ниже тераэлектронвольт также кажутся исключенными. Рассмотренный здесь механизм позволяет спасти относительно легкие WIMP и расширить пространство параметров для суперсимметричной темной материи. Поскольку, согласно известному результату, отношение космологической плотности энергии массивных реликтов к плотности энтропии пропорционально квадрату массы этих частиц, возможное повышение плотности энтропии в 100 раз позволяет увеличить допустимую массу частиц в 10 раз, что открывает возможность для суперсимметричной (SUSY) темной материи с массой, превышающей ограничения, установленные БАК.

Уменьшение космологической барионной асимметрии за счет указанного здесь механизма дополнительного высвобождения энтропии может показаться не столь существенным, потому что теоретические оценки асимметрии довольно неопределенны в силу того, что они сильно зависят от неизвестных параметров теории при высоких энергиях. Однако есть несколько исключений, для которых энтропийное разбавление может представлять интерес. Во-первых, это механизм Аффлекса–Дайна [26], который естественно приводит к величине барионной асимметрии, существенно превышающей наблюдаемую. Подавление на 1–2 порядка может быть полезно, но не всегда достаточно. Во-вторых, это сценарий бариогенезиса посредством лептогенеза [27], описание которого можно найти, например, в обзорах [28]. Согласно этой модели космологическая барионная асимметрия возникла из первоначально созданной лептонной асимметрии, которая возникла в результате распадов тяжелых майорановских нейтрино.

В некоторых моделях параметры CP-нарушающих распадов этого тяжелого нейтрино можно выразить через CP-нечетные фазы осцилляций легких нейтрино, что позволяет предсказать величину и знак лептонной асимметрии. Однако, если в прошлом существовало энтропийное разбавление асимметрии с величиной, зависящей от модели, ее величина не может быть предсказана, но знак, вероятно, может.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 19-42-02004).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Здесь мы оценим плотность стабильных суперсимметричных реликтов, образующихся при испарении ПЧД, и покажем, что их вклад в космологическую темную материю незначителен из-за очень низкой плотности ПЧД и из-за их быстрого охлаждения фоновыми релятивистскими частицами. С этой целью представим здесь несколько простых оценок и численных значений.

Момент образования ПЧД с массой M равен (2)

$$t_{in} = \frac{M}{m_{Pl}^2} = 2.5 \cdot 10^{-31} M_8 \text{ с}, \quad (76)$$

где $M_8 = M/(10^8 \text{ г})$.

По предположению, в момент образования черные дыры составляют небольшую долю $\epsilon \ll 1$ плотности энергии релятивистской материи.

Таким образом, плотности энергии и числа ПЧД при $t = t_{in}$ соответственно равны

$$\rho_{BH}^{(in)} = \frac{3\epsilon}{32\pi} \frac{m_{Pl}^6}{M^2}, \quad n_{BH}^{(in)} = \frac{3\epsilon}{32\pi} \frac{m_{Pl}^6}{M^3}. \quad (77)$$

Плотность энергии релятивистской материи при $t = t_{in}$ равна

$$\rho_{rel}^{(in)} = \frac{3}{32\pi} \frac{m_{Pl}^6}{M^2} = \frac{\pi^2 g_*^{(in)}}{30} T_{in}^4, \quad (78)$$

где $g_*^{(in)} \approx 100$ — количество типов релятивистских частиц при $T = T_{in}$. Соответственно температура релятивистской космологической плазмы на момент рождения ПЧД равна

$$T_{in} \approx 1.72 \cdot 10^{12} \text{ ГэВ}/\sqrt{M_8}. \quad (79)$$

Отношение плотности ПЧД к плотности релятивистских частиц в момент рождения можно оценить как

$$r_{in} = \frac{n_{BH}^{(in)}}{n_{rel}^{(in)}} = \frac{\rho_{BH}^{(in)}}{\rho_{rel}^{(in)}} \frac{T_{in}}{0.3M} = 0.9 \cdot 10^{-31} \epsilon_{12} M_8^{-3/2}, \quad (80)$$

где $\epsilon_{12} = 10^{12} \epsilon$ и $n_{rel} \approx 0.3 \rho_{rel}/T$.

Это отношение остается примерно постоянным до распада ПЧД, поскольку обе плотности практически сохраняются в сопутствующем объеме с точностью до возможного вброса энтропии, созданного аннигиляцией массивных частиц. Как мы увидим ниже, температура релятивистской материи в момент распада ПЧД составляет около 20–30 МэВ и поэтому в этот момент $g_* \sim 10$.

Следовательно, отношение r уменьшается в 10 раз.

Среднее расстояние между ПЧД на момент их создания составляет

$$d_{in}^{(BH)} = \left(n_{BH}^{(in)} \right)^{-1/3} = 2.4 \cdot 10^{-16} M_8 \epsilon_{12}^{-1/3} \text{ см.} \quad (81)$$

В момент равновесия, когда плотности ЧД и релятивистской материи сравнялись, среднее расстояние между ЧД было

$$d_{eq}^{(BH)} = \frac{d_{in}^{(BH)}}{\epsilon} = 2.4 \cdot 10^{-4} M_8 \epsilon^{-4/3} \text{ см.} \quad (82)$$

Температура релятивистской материи в момент равновесия составляла

$$T_{eq} = \epsilon T_{in} S_{eq}^{1/3} = 3.7 \epsilon_{12} M_8^{-1/2} \text{ ГэВ}, \quad (83)$$

где S_{eq} — отношение количества типов частиц при $T = T_{in}$ к количеству типов частиц при $T = T_{eq}$:

$$S_{eq} = \frac{g_*(10^5 \text{ ГэВ})}{g_*(3 \text{ ГэВ})} \approx 10. \quad (84)$$

Поскольку до достижения равновесия Вселенная расширялась в релятивистском режиме, когда масштабный фактор увеличивался как $a(t) \sim t^{1/2}$, равновесие достигалось в момент времени

$$t_{eq} = \frac{t_{in}}{\epsilon^2} = 2.5 \cdot 10^{-7} M_8 \epsilon_{12}^{-2} \text{ с.} \quad (85)$$

После этого и до момента распада ЧД при

$$t = \tau = \frac{30 M_{BH}^3}{m_{Pl}^4} = 1.6 \cdot 10^{-4} M_8^3 \text{ с} \quad (86)$$

Вселенная расширялась в режиме доминантности нерелятивистской материи по закону $a(t) \sim t^{2/3}$. Таким образом, на этом MD-этапе масштабный фактор увеличивался как

$$z(\tau) \equiv \left(\frac{\tau}{t_{eq}} \right)^{2/3} = 74 (\epsilon_{12} M_8)^{4/3}. \quad (87)$$

Соответственно, плотность энергии ПЧД непосредственно перед моментом их распада будет больше, чем плотность энергии релятивистского фона, на этот фактор красного смещения, $z(\tau)$:

$$\frac{\rho_{BH}(\tau)}{\rho_{rel}(\tau)} = 74 (\epsilon_{12} M_8)^{4/3}. \quad (88)$$

Температура релятивистского фона непосредственно перед распадом черной дыры была равна

$$T_{cool} \equiv T_{rel}(\tau) = \frac{T_{eq}}{z(\tau)} = 50 \epsilon_{12}^{-1/3} M_8^{-11/6} \text{ МэВ.} \quad (89)$$

Температура частиц, образующихся при распаде ЧД, равна

$$T_{BH} = \frac{m_{Pl}^2}{8\pi M} = 10^5 M_8^{-1} \text{ ГэВ.} \quad (90)$$

Итак, легчайшие суперсимметричные частицы минимальной SUSY-модели с массой $m_\chi \sim 10^3$ ГэВ должны обильно образовываться в процессе испарения ПЧД с $T_{BH} \gg m_\chi$, что составляет около 0.01–0.1 от общего количества образовавшихся частиц.

Поскольку ПЧД образовывались при температурах, намного превышающих температуру окружающей релятивистской плазмы, первоначально они не теряли массу из-за испарения, а вместо этого приобретали ее за счет аккреции окружающего вещества. Однако этот эффект оказывается незначительным. Действительно, площадь поверхности ПЧД равна $4\pi r_g^2$ и поток внешнего излучения будет порядка T^4 . Таким образом, скорость увеличения массы будет равна

$$\dot{M} = 4\pi r_g^2 T^4. \quad (91)$$

Согласно уравнению (3) $T^2 t \approx m_{Pl}/30$, и поэтому

$$dt = -\frac{m_{Pl} dT}{15T^3}.$$

Следовательно, увеличение массы составит

$$\Delta M = \frac{4\pi}{30} m_{Pl} r_g^2 T_{in}^2, \quad (92)$$

где T_{in} задается формулой (79). Итак, окончательно получаем

$$\frac{\Delta M}{M} \approx 0.1. \quad (93)$$

Интересно, что относительное увеличение массы не зависит от значения массы ПЧД.

Этот результат противоречит работе [2], как указал нам рецензент. Действительно, основанные на оценке скорости аккреции, полученной в работе [1], расчеты [2] привели к огромному увеличению массы ПЧД до миллиардов масс Солнца или даже намного больше. Это определенно весьма завышенная оценка. Аргументы работ [1, 2] основаны на применении механизма аккреции Бонди к ранней Вселенной. Однако физические ситуации в современной Вселенной в эпоху доминантности материи и в ранней Вселенной в эпоху доминантности излучения были совершенно различны. Предполагается, что в ранней Вселенной ПЧД покоились в сопутствующей системе отсчета, а поток релятивистских частиц на них индуцировался лишь процессом гравитационного притяжения окружающих релятивистских частиц, который имеет исключительно низкую эффективность, в частности, из-за хаббловского расширения. В работе [29] рассмотрен и выполнен расчет эффективности аккреции в разные эпохи космологической эволюции. Приведем цитату из этой работы: «Для ПЧД, размер которых намного меньше M_{cr} , аккреция совершенно не важна», где M_{cr} составляет примерно $5 \cdot 10^{14}$ г. ПЧД с массой больше M_{cr} может дожить до настоящего времени, в то время как более легкие ПЧД испарятся прежде, чем достигнут времени, благоприятного для аккреции. Поскольку мы имеем дело с ПЧД с массами не больше 10^9 г, можем пренебречь возможным увеличением их массы после образования.

Среднее расстояние между ПЧД непосредственно перед их распадом составляло

$$d^{BH}(\tau) = d_{eq}^{(BH)} z(\tau) \approx 1.75 \cdot 10^{-2} M_8^{7/3}. \quad (94)$$

Общее количество энергичных частиц, образовавшихся при распаде одной ЧД, равно

$$N_{hot} \approx \frac{M_{BH}}{3T_{BH}} = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{M}{m_{Pl}} \right)^2 = 1.8 \cdot 10^{26} M_8^2. \quad (95)$$

Мы предполагаем следующую модель: в результате мгновенного испарения ЧД каждая черная дыра превращается в облако энергичных частиц с температурой $T_{BH} = 10^5 M_8^{-1}$ ГэВ и радиусом τ_{BH} , см., например, формулу (86):

$$\tau_{BH} = 4.8 \cdot 10^6 M_8^3 \text{ см}. \quad (96)$$

Этот радиус намного больше среднего расстояния между ЧД (94) и число ПЧД в этом общем облаке составляет

$$N_{cloud} = \left(\frac{\tau_{BH}}{d_{BH}(\tau)} \right)^3 = 2 \cdot 10^{25} M_8^7, \quad (97)$$

поэтому плотность их числа непосредственно перед распадом была

$$n_{BH}(\tau) = d^{-3}(\tau) = 1.9 \cdot 10^5 M_8^{-7} \text{ см}^{-3}. \quad (98)$$

Плотность горячих частиц с температурой T_{BH} , созданных испарением этого набора черных дыр, равна

$$n_{hot} = n_{BH}(\tau) N_{hot} = 3.4 \cdot 10^{31} M_8^{-5} \text{ см}^{-3}. \quad (99)$$

Плотность холодных фоновых частиц с температурой T_{cool} (89) равна

$$n_{cool} = 0.1 g_* T_{cool}^3 = 1.6 \cdot 10^{37} \epsilon_{12}^{-1} M_8^{-11/2} \text{ см}^{-3}, \quad (100)$$

где мы взяли $g_* = 10$ при $T < 100$ МэВ. Отметим, что $n_{cool} \gg n_{hot}$.

Частицы, образующиеся при испарении ПЧД, состоят преимущественно из разновидностей легких или быстро распадающихся частиц и небольшого количества стабильных легчайших суперсимметричных частиц (или любых других стабильных частиц, предполагаемых частиц темной материи), обозначим их как X . Поскольку по предположению T_{BH} выше, чем масштаб масс SUSY, общее количество всех суперсимметричных партнеров, созданных за счет испарения, должно быть равно количеству всех других частиц. Каждый SUSY-партнер создает одну легчайшую суперсимметричную частицу (X -частицу) в процессе своего распада и несколько других видов частиц. Таким образом, количество X -частиц будет около одного процента от числа других частиц. Более точное значение здесь не так важно. Это соотношение должно еще больше уменьшиться в процессе термализации, см. ниже.

Выброшенные черными дырами энергичные частицы распространяются на фоне гораздо более холодной плазмы и остывают, одновременно нагревая фон. Охлаждение происходит, в частности, за счет кулоновского рассеяния, поэтому импульс горячих частиц уменьшается согласно уравнению (слабое, связанное с расширением Вселенной, в этом уравнении не учитывается, поскольку характерный временной масштаб остывания намного меньше, чем время Хаббла при $T \sim 100$ МэВ):

$$\dot{E}_{hot} = -\sigma v n_{cool} \delta E, \quad (101)$$

где δE — передача импульса от горячих частиц к холодным. Сечение рассеяния можно аппроксимировать как $\sigma = \alpha^2 g_* / |p_1 - p_2|^2$. Для безмассовых частиц

$$q^2 \equiv (p_1 - p_2)^2 = -2(E_1 E_2 - \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2). \quad (102)$$

Здесь E_1 и E_2 — начальная и конечная энергии холодных частиц,

$$E_1 \sim T_{cool}, \quad \delta E \equiv (E_2 - E_1) \sim E_2.$$

Для заметной передачи энергии необходимо рассеяние на большие углы, так что $q^2 \sim E_1 E_2$. Окончательно получим

$$\dot{E} = \frac{0.1 g_* T_{cool}^3 \alpha^2}{E_1} \approx 10^{-4} T_{cool}^2 = 6 \cdot 10^{18} \text{ МэВ/с.} \quad (103)$$

Соответственно величина потерь энергии горячих частиц, по порядку величины равная их температуре (90), будет достигнута в течение очень короткого времени:

$$t_{cool} \approx 10^{-10} \text{ с.} \quad (104)$$

Такое быстрое охлаждение обеспечивается за счет огромной плотности холодных частиц: их около миллиона на каждую горячую частицу, см. уравнения (99), (100).

В результате смешения и термализации двух компонентов, горячего и холодного, температура образующейся плазмы станет

$$T_{fin} = T_{cool} \left(\frac{\rho_{hot}}{\rho_{cool}} \right)^{1/4} \approx 147 M_8^{-3/2} \text{ МэВ.} \quad (105)$$

Соответственно, полная плотность релятивистских частиц будет равна

$$n_{rel} = 0.1 g_* T_{fin}^3 = 4 \cdot 10^{38} M_8^{-9/2} / \text{см}^3. \quad (106)$$

Согласно формуле (99) плотность числа X -частиц сразу после испарения должна быть около $10^{30} M_8^{-5} \text{ см}^{-3}$. После быстрой термализации отношение плотности X -частиц к плотности всех релятивистских частиц становится равным

$$n_X / n_{rel} = 3 \cdot 10^{-9}. \quad (107)$$

Эволюция плотности X -частиц определяется уравнением

$$\dot{n}_X + 3H n_X = -\sigma_X^{(ann)} v n_X^2, \quad (108)$$

где слагаемое, отвечающее обратной аннигиляции, не учитывается, поскольку горячие частицы от испаряющихся ПЧД очень быстро остывают с характерным временем (104) и, следовательно, температура плазмы станет намного меньше M_X . Очевидно, поскольку $m_X \gg T_{fin}$ (105), распределение X -частиц будет сильно отличаться от равновесного распределения Бозе–Эйнштейна или Ферми–Дирака,

но кинетическое равновесие устанавливается очень быстро, что приведет к распределению по энергии, близкому к равновесному с ненулевыми и равными химическими потенциалами частиц X и анти- X , в предположении нулевой X/\bar{X} -асимметрии. Если бы установилось полное кинетическое и химическое равновесие, то плотности X (и \bar{X}) были бы чрезвычайно малы и проблема избытка таких частиц не возникла бы. Ключевым моментом здесь является быстрое охлаждение плазмы образовавшихся горячих частиц, намного более быстрое, чем космологическое расширение, см. уравнение (104).

Параметр Хаббла H , входящий в уравнение (108), определяется выражением

$$H = \left(\frac{8\pi^3 g_*}{90} \right)^{1/2} \frac{T^2}{m_{Pl}} \approx \frac{0.4 T_{in}^2}{z^2 m_{Pl}}, \quad (109)$$

где $z = a_{in}/a$ — отношение начального масштабного коэффициента к текущему, а для начального значения температуры T_{in} мы возьмем T_{fin} , заданное уравнением (105). Надеемся, это не приведет к путанице.

Вводя $r = n_X z^3$ и меняя временную переменную на z , мы приходим к уравнению

$$\frac{dr}{dz} = -\sigma_{ann} v \frac{r^2}{H z^4} = -\frac{\sigma_{ann} v m_{Pl}}{0.4 T_{in}^2} \frac{r^2}{z^2}, \quad (110)$$

которое легко интегрируется, приводя к следующему результату:

$$n_X = \frac{n_{in}}{z^3 (1 - 1/z)} \rightarrow \frac{1}{Q z^3}, \quad (111)$$

где $Q = \sigma v m_{Pl} / (0.4 T_{in}^2)$.

Полное сечение аннигиляции может быть зафиксировано условием, что X -частицы являются доминирующими носителями космологической темной материи. Согласно многочисленным наблюдательным данным,

$$\Omega_{DM} = 0.26, \quad \Omega_{CMB} = 5.5 \cdot 10^{-5}, \quad (112)$$

или $(\rho_X / \rho_\gamma)_{obs} \approx 5 \cdot 10^3$.

По расчетам, приведенным, например, в книге [30], замороженная космологическая плотность массы X -частиц определяется уравнением

$$\Omega_X h^2 \approx \frac{10^9 x_f}{m_{Pl} \text{ ГэВ} (\sigma_{ann} v)} \approx 0.12, \quad (113)$$

где $h \approx 0.67$ — безразмерный параметр Хаббла, а $x_f = T_f / m_X = 20\text{--}30$ — отношение температуры заморозки к массе X . Последний член в приведенном выше соотношении является наблюдаемым значением. Следовательно,

$$\sigma_{ann} v m_{Pl} \approx 3 \cdot 10^{11} \text{ ГэВ}^{-1} \quad (114)$$

и

$$n_X \approx 10^{-12} z^{-3} T_{in}^2 \text{ ГэВ}. \quad (115)$$

Итак, для отношения плотности X к плотности релятивистских частиц находим

$$\frac{n_X}{n_{rel}} \rightarrow \frac{10^{-12} \text{ ГэВ}}{T_{in}} \approx 7 \cdot 10^{-12}, \quad (116)$$

так что отношение соответствующих плотностей энергии в настоящее время равно

$$\frac{\rho_X}{\rho_{CMB}} = \frac{m_X}{3T_{CMB}} \frac{n_X}{n_{rel}} \frac{g_*(0.1 \text{ МэВ})}{g_*(150 \text{ МэВ})} < 10^3 \frac{m_X}{\text{ТэВ}}, \quad (117)$$

что безопасно ниже наблюдательного значения $\rho_X/\rho_{CMB} = 5 \cdot 10^3$, особенно если $m_X < 1$ ТэВ. Здесь мы взяли $g_* = 50$ при $T = 150$ МэВ и $g_* < 10$ при $T = 0.1$ МэВ.

Результаты, представленные в этом приложении, не согласуются с опубликованными в работах [31, 32] о рождении возможных частиц темной материи испарением ПЧД. Но это разногласие естественно, поскольку в этих работах не учитывается ряд существенных физических эффектов. Во-первых, в этих работах предполагается, что испарение идет в пустое пространство, а в нашем случае Вселенная бы-

ла заполнена более холодной релятивистской плазмой. Во-вторых, не учитывается остаточная аннигиляция созданных частиц темной материи, в то время как выше было показано, что это очень важно. С другой стороны, охлаждение частиц темной материи идет настолько быстро, что их обратной аннигиляции не происходит, поэтому они не создаются в этом процессе.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Здесь мы приведем аналитические выражения для интегралов I_0 (63) и I_3 (64) для двух форм спектра масс ПЧД: плоского (первый индекс j равен 1) и непрерывного гладкого спектра, который численно близок к логнормальному (первый индекс j равен 2), см. уравнение (60) и выше. Вторые индексы 1 или 3 соответствуют I_0 и I_3 соответственно. Для краткости мы используем обозначения t вместо η .

$$j_{10}(t, a, b) = \frac{1}{3} \left[-\Gamma \left[0, \frac{t}{a^3} \right] + \Gamma \left[0, \frac{t}{b^3} \right] \right] \quad (118)$$

— аналитический результат для интеграла j_{10} , определенного в уравнении (66).

$$j_{13}(t, a, b) = \frac{-\exp[-t/a^3] + \exp[-t/b^3]}{3t} \quad (119)$$

— аналитический результат для интеграла j_{13} , определенного в уравнении (68).

$$\begin{aligned} j_{20}(t, a, b) = & -\frac{1}{9(a-b)^4} 8a^2b^2 \left(27 \exp \left[-\frac{t}{a^3} \right] - \frac{8a\Gamma[-2/3]}{t^{1/3}} + \frac{24\sqrt{3}a\pi}{t^{1/3}\Gamma[-1/3]} + \frac{8b\Gamma[-2/3, t/a^3]}{t^{1/3}} - \right. \\ & - \frac{2b(4a+b)\Gamma[-1/3, t/a^3]}{t^{2/3}} + 6\Gamma[0, t/a^3] + \frac{2a^2b^2\Gamma[1/3, t/a^3]}{t^{4/3}} - \frac{36a\Gamma[4/3, t/a^3]}{t^{1/3}} + \frac{9a^2\Gamma[5/3, t/a^3]}{t^{2/3}} \left. \right) + \frac{1}{9(a-b)^4} \times \\ & \times 8a^2b^2 \left(27 \exp \left[-\frac{t}{b^3} \right] - \frac{8b\Gamma[-2/3]}{t^{1/3}} + \frac{24\sqrt{3}b\pi}{t^{1/3}\Gamma[-1/3]} + \frac{8a\Gamma[-2/3, t/b^3]}{t^{1/3}} - \frac{2a(4b+a)\Gamma[-1/3, t/b^3]}{t^{2/3}} + \right. \\ & \left. + 6\Gamma[0, t/b^3] + \frac{2a^2b^2\Gamma[1/3, t/b^3]}{t^{4/3}} - \frac{36b\Gamma[4/3, t/b^3]}{t^{1/3}} + \frac{9b^2\Gamma[5/3, t/b^3]}{t^{2/3}} \right) \end{aligned} \quad (120)$$

— аналитический результат для интеграла j_{20} , как объяснено в разд. 4.2.

$$\begin{aligned} j_{23}(t, a, b) = & -\frac{1}{27(a-b)^4 t^{7/3}} 16a^2b^2 (-6at\Gamma[1/3, t/a^3] + 6a^2t^{2/3}\Gamma[2/3, t/a^3] + b[-18a^2 \exp[-t/a^3]t^{1/3} - \\ & - 18ab \exp[-t/a^3]t^{1/3} - \frac{18 \exp[-t/a^3]t^{4/3}}{a} - \frac{18b \exp[-t/a^3]t^{4/3}}{a^2} - \frac{8\sqrt{3}a^2b\pi}{\Gamma[-1/3]} - 9a^2b\Gamma[7/3] - 18t\Gamma[4/3, t/a^3] + \\ & + 9(4a+b)t^{2/3}\Gamma[5/3, t/a^3] + 9a^2b\Gamma[7/3, t/a^3]) + \frac{1}{27(a-b)^4 t^{7/3}} 16a^2b^2 (-6bt\Gamma[1/3, t/b^3] + 6b^2t^{2/3}\Gamma[2/3, t/b^3] + \\ & + a[-18b^2 \exp[-t/b^3]t^{1/3} - 18ab \exp[-t/b^3]t^{1/3} - \frac{18 \exp[-t/b^3]t^{4/3}}{b} - \frac{18a \exp[-t/b^3]t^{4/3}}{b^2} - \frac{8\sqrt{3}b^2a\pi}{\Gamma[-1/3]} - \\ & - 9b^2a\Gamma[7/3] - 18t\Gamma[4/3, t/b^3] + 9(a+4b)t^{2/3}\Gamma[5/3, t/b^3] + 9b^2a\Gamma[7/3, t/b^3]) \end{aligned} \quad (121)$$

— аналитический результат для интеграла j_{23} , как объяснено в разд. 4.2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Zel'dovich and I. Novikov, *Sov. Astron.* **10**, 602 (1967).
2. B. J. Carr and S. W. Hawking, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **168**, 399 (1974).
3. E. R. Harrison, *Phys. Rev. D* **1**, 2726 (1970).
4. Y. Zel'dovich, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **160**, 1P (1972).
5. A. Dolgov and J. Silk, *Phys. Rev. D* **47**, 4244 (1993).
6. A. Dolgov, M. Kawasaki, and N. Kevlishvili, arXiv:0806.2986.
7. P. Ivanov, P. Naselsky, and I. Novikov, *Phys. Rev. D* **50**, 7173 (1994).
8. J. Garcia-Bellido, A. D. Linde, and D. Wands, *Phys. Rev. D* **54**, 60406058 (1996); arXiv:astro-ph/9605094.
9. E. Kotok and P. Naselsky, *Phys. Rev. D* **58**, 103517 (1998); arXiv:astro-ph/9806139v1.
10. B. Basset and S. Tsujikawa, *Phys. Rev. D* **63**, 123503 (2001); arXiv:hep-ph/0008328.
11. A. Green and K. Malik, *Phys. Rev. D* **64**, 021301 (2001); arXiv:hep-ph/0008113.
12. M. Kawasaki and K. Murai, *JCAP* **2019**(01), 27 (2019); arXiv:1907.02273.
13. S. G. Rubin, M. Yu. Khlopov, and A. S. Sakharov, *Grav. Cosmol.* **6**, 51 (2000); arXiv:hep-ph/0005271.
14. V. I. Dokuchaev, Yu. N. Eroshenko, and S. G. Rubin, arXiv:0709.0070.
15. A. D. Dolgov, A. G. Kuranov, N. A. Mitichkin et al., arXiv:2005.00892.
16. A. D. Dolgov, P. D. Naselsky, and I. D. Novikov, arXiv:astro-ph/0009407.
17. A. Chaudhuri and A. Dolgov, *JCAP* **2018**(01), 32 (2018); arXiv:1711.01801v1.
18. Ya. B. Zel'dovich, *Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **24**, 29 (1976) [*JETP Lett.* **24**, 25 (1976)].
19. A. D. Dolgov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **79**, 337 (1980) [*JETP Lett.* **52**, 169 (1980)].
20. D. S. Gorbunov and V. A. Rubakov, *Introduction to the Theory of Early Universe — Hot Big Bang Theory*, World Sci. (2011).
21. C. Bambi and A. Dolgov, *Introduction to Particle Cosmology. The Standard Model of Cosmology and its Open Problems*, Springer (2015).
22. S. Chatrchyan et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 221804 (2011).
23. M. Cirelli, F. Sala, and M. Taoso, *JHEP* **2015**(01), 41 (2015); arXiv:1407.7058.
24. N. Nagata and S. Shirai, *JHEP* **2015**(01), 29 (2015); arXiv:1410.4549v2.
25. D. N. Page, *Phys. Rev. D* **13**, 198 (1976).
26. I. Affleck and M. Dine, *Nucl. Phys. B* **249**, 361 (1985); M. Dine, L. Randall, and S. Thomas, *Nucl. Phys. B* **458**, 291 (1996).
27. M. Fukugita and T. Yanagita, *Phys. Lett. B* **174**, 45 (1986).
28. W. Buchmuller, R. D. Peccei, and T. Yanagida, 10.1146/annurev.nucl.55.090704.151558,hep-ph/0502169.
29. J. R. Rice and B. Zhang, *J. High Energy Astrophys.* **13**, 22 (2017).
30. E. W. Kolb and M. S. Turner, *The Early Universe*, Addison-Wesley, Redwood City, CA (1980).
31. T. Fujita, M. Kawasaki, K. Harigaya, and R. Matsuda, *Phys. Rev. D* **89**, 103501 (2014); arXiv:1401.1909v2.
32. O. Lennon, J. March-Russell, R. Petrossian-Byrne, and H. Tillim, *JCAP* **2018**(04), 009 (2018); arXiv:1712.07664v2 (2018).

НИЗКОЧАСТОТНАЯ ДИНАМИКА НОСИТЕЛЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ CuAlO_2 ПО ДАННЫМ ЯМР

В. В. Оглобличев^{a}, А. Г. Смольников^a, А. Л. Бузлуков^a, Ю. В. Пискунов^a,
И. Ю. Арапова^a, А. Ф. Садыков^a, В. Л. Матухин^b*

^a *Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

^b *Казанский государственный энергетический университет
420066, Казань, Россия*

Поступила в редакцию 2 июня 2021 г.,
после переработки 24 июня 2021 г.
Принята к публикации 28 июня 2021 г.

В поликристаллическом образце CuAlO_2 получены спектры ЯМР на ядрах ^{63}Cu и ^{27}Al во внешнем магнитном поле $H_0 = 92.8$ кЭ в диапазоне температур 30–400 К. Анализ спектров ЯМР ^{27}Al показал, что при понижении температуры сдвиг ^{27}K линии ЯМР ядер ^{27}Al увеличивается по абсолютной величине и может быть описан законом Кюри–Вейсса. Такое поведение ^{27}K можно связать с возникновением эффективного магнитного момента на ионах меди вследствие движения дырок в подрешетке меди. В низкотемпературной области наблюдается максимум скорости спин-решеточной релаксации, T_1^{-1} , ядер ^{27}Al , обусловленный, наиболее вероятно, термоактивированной диффузией дырок. Анализ экспериментальных данных по T_1^{-1} дает оценку энергии активации $E_a \approx 0.1\text{--}0.2$ эВ. Температурное поведение параметров квадрупольного взаимодействия свидетельствует о сжатии кристаллической решетки вдоль осей a и c .

DOI: 10.31857/S0044451021110055

ных ионов в решетке. Наиболее подходящим кандидатом является дельтафосфит CuAlO_2 .

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время интенсивно изучаются квазидвумерные фрустрированные дельтафосфиты CuMeO_2 ($\text{Me} = \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Mn}$) как модельные системы со сложным магнитным порядком [1–3]. В этих соединениях конкуренция сравнимых по величине обменных взаимодействий магнитных ионов и кристаллографической магнитной анизотропии приводит к появлению богатых низкотемпературных фазовых диаграмм с различными типами магнитного порядка. Тем не менее многие особенности электронного строения и детали дефектной структуры соединений CuMeO_2 остаются невыясненными. Для исследования таких сложных магнитных структур и выявления различных вкладов в магнитную восприимчивость необходимо иметь эталонное соединение с близкой кристаллической структурой, но не содержащее магнит-

Дополнительный интерес к данному соединению вызван тем, что CuAlO_2 входит в группу прозрачных проводящих оксидов с электрической проводимостью p -типа, обладающих уникальной комбинацией оптических и электрофизических свойств. Механизмы электропроводности CuAlO_2 до сих пор остаются широко обсуждаемыми в литературе: прыжки с переменной длиной (variable-range hopping) [4], зона проводимости (conduction band) [5, 6], поляроны малого радиуса (small polaron transport) [7]. Кроме того, происхождение носителей в номинально нелегированном CuAlO_2 остается также невыясненным. Проводимость в номинально нелегированном CuAlO_2 неизменно p -типа, мала и резко возрастает с повышением температуры. Очевидно, что этот материал склонен к спонтанному образованию акцепторных дефектов. Авторы работ [8–11] рассчитали энергию образования дефектов в CuAlO_2 и в родственных ему материалах и пришли к выводу, что вакансии Cu являются наиболее

* E-mail: ogloblichev@imp.uran.ru

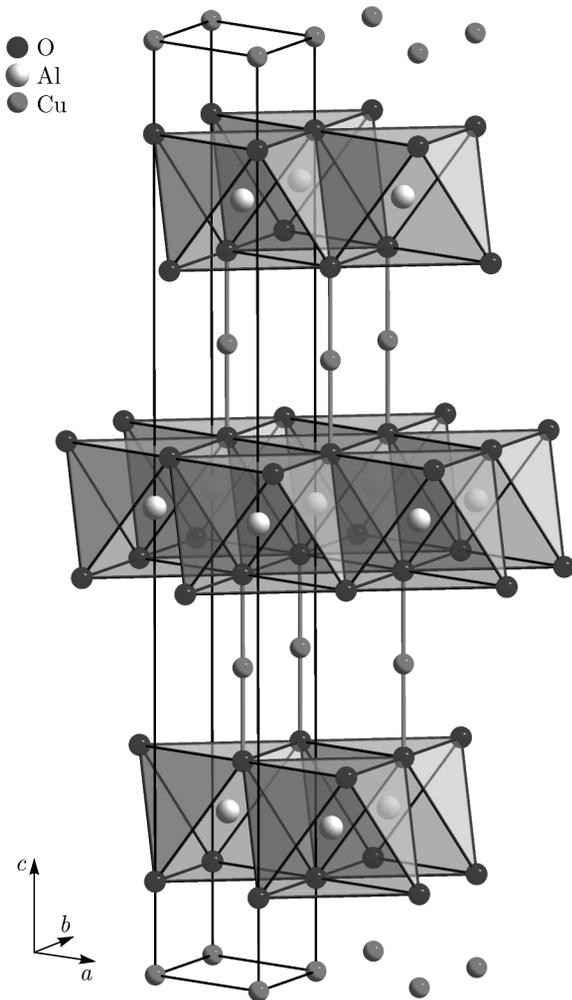


Рис. 1. (В цвете онлайн) Фрагмент кристаллической структуры CuAlO_2

вероятным дефектом. С появлением данного дефекта авторы связывают также возникновение парамагнитного момента при низких температурах в результате образования на ионах меди эффективного магнитного момента, но и этот вопрос остается пока открытым.

Соединение CuAlO_2 имеет ромбоэдрическую кристаллическую структуру с пространственной группой $R\bar{3}m$. Структура может быть представлена как последовательное чередование вдоль оси c слоев Al-O-Cu-O-Al (рис. 1). Трехвалентные ионы Al^{3+} находятся в центре кислородных октаэдров AlO_6 и формируют треугольную решетку в кристаллографической плоскости ab . Слои AlO_6 разделены между собой ионами одновалентной меди Cu^{1+} , в ближайшее окружение которых входят два иона кислорода O^{2-} . Каждый тип

ионов, входящих в состав CuAlO_2 , расположен в структурно-эквивалентных позициях.

Результаты предварительного исследования методом ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) ^{63}Cu приведены ранее в нашей работе [12]. В этой работе получено значение константы ядерного квадрупольного взаимодействия. В низкотемпературной области (ниже 276 К) на температурной зависимости скорости спин-решеточной релаксации, T_1^{-1} , обнаружен широкий максимум. Предполагая термоактивационный характер подвижности дырок, являющихся основными зарядовыми носителями в CuAlO_2 , мы получили оценку энергии активации. В настоящей работе проведено изучение в температурном диапазоне $T = 30\text{--}400$ К спектров ЯМР на ядрах ^{63}Cu , ^{27}Al и скорости спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al в полупроводниковом соединении CuAlO_2 в магнитном поле $H_0 = 92.8$ кЭ. Целью работы являлось исследование особенностей кристаллической структуры и низкочастотной динамики носителей (дырок).

2. ОБРАЗЦЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Поликристаллический образец CuAlO_2 приготовлен стандартным методом твердофазного синтеза и имеет ромбоэдрическую модификацию (пространственная группа $R\bar{3}m$). Детали синтеза, химические и структурные параметры соединения аналогичны приведенным в работах [13, 14].

Измерения ЯМР на ядрах ^{63}Cu и ^{27}Al проводились на самодельном импульсном спектрометре во внешнем магнитном поле $H_0 = 92.8$ кЭ в диапазоне температур от 30 до 400 К. Для исключения ЯМР-сигналов от металлической меди использовалась резонансная катушка из серебра.

ЯМР-спектры ^{63}Cu и ^{27}Al получены с использованием стандартной методики спинового эха $p\text{-}t_{del}\text{-}2p\text{-}t_{del}\text{-}echo$. Длительность первого импульса выбиралась равной $p = 1.7$ мкс, мощность радиочастотного усилителя — $N = 400$ Вт. Задержка между импульсами $t_{del} = 200$ мкс. Спектры ЯМР ^{63}Cu и ^{27}Al , представленные в работе, являются суммой фурье-преобразований полученных эхо-сигналов, накопленных в требуемом частотном диапазоне с шагом $\Delta\nu = 100$ кГц. Для описания спектров ЯМР использовали оригинальную программу моделирования спектров “Simul”, позволяющую численно рассчитывать форму линии на основе полного гамильтониана ядерной системы с учетом зеемановского

и квадрупольного вкладов [15–17]. Сдвиги линий ЯМР на ядре ^{27}Al , $K = (\nu - \nu_0) \cdot 10^6/\nu_0$, определялись относительно $\nu_0 = 102.95798$ МГц в оксиде алюминия Al_2O_3 , который имеет при комнатной температуре сдвиг +14 ppm [18, 19].

Время спин-спиновой релаксации измеряли на центральном переходе $m_I = -1/2 \leftrightarrow +1/2$ ядер алюминия ^{27}Al на частоте $\nu = 102.955$ МГц при изменении времени задержки между импульсами t_{del} в интервале 0.05–1.5 мс в импульсной последовательности спинового эха. Зависимости эхо-сигналов от t_{del} хорошо экстраполировались выражением для ядерной намагниченности

$$M(2t_{del}) = M_0 \exp(-2t_{del}/T_2). \quad (1)$$

Время спин-спиновой релаксации при $T = 295$ К составило $T_2 \approx 280(20)$ мкс и в пределах погрешности не зависело от температуры.

Времена спин-решеточной релаксации T_1 на ядрах ^{27}Al измеряли также на центральном переходе на частоте $\nu = 102.955$ МГц методом инвертирования и последующего восстановления ядерной намагниченности. При измерении T_1 использована импульсная последовательность $2p-t_{inv}-p-t_{del}-2p-t_{del}-echo$ при постоянной задержке $t_{del} = 200$ мкс и при изменении времени задержки t_{inv} между инвертирующим импульсом $2p$ и последовательностью спинового эха в интервале $t_{inv} = 0.05-5000$ мс. Количество точек измерения t_{inv} составляло не менее 35. Во всем исследованном интервале температур восстановление ядерной намагниченности отклонялось от описания экспоненциальной функцией. Следует отметить, что в случае ^{27}Al со спином $I = 5/2$ точный анализ кривой восстановления ядерной намагниченности $M(t)$ возможен только для некоторых частных случаев (см., например, работы [20, 21]). Причем даже в этих простейших случаях требуется наличие как минимум трех релаксационных компонент с различными весами. В наших ЯМР-экспериментах с неселективным возбуждением спектра точная аппроксимация зависимости $M(t)$ является крайне сложной. В этой связи мы ограничились грубыми оценками времен $T_{1,eff}$, полученными из предположения, что

$$M(t = T_{1,eff}) = M_0(1 - 1/e) \approx 0.63M_0, \quad (2)$$

где M_0 — равновесное значение намагниченности системы ядерных спинов, $T_{1,eff}$ — эффективное время спин-решеточной релаксации.

Измерения магнитной восприимчивости $\chi = M/H$ выполнялись на поликристаллическом об-

разце CuAlO_2 массой $m = 479$ мг с использованием СКВИД-магнетометра MPMS-XL7 (Quantum Design Inc., США) в магнитном поле $H = 5$ кЭ в интервале температур $T = 5-300$ К.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 представлен спектр ЯМР, полученный при комнатной температуре в поликристаллическом образце полупроводникового соединения CuAlO_2 во внешнем магнитном поле $H_0 = 92.8$ кЭ. Записанный спектр представляет собой суперпозицию ЯМР-сигналов от ядер алюминия ^{27}Al и меди ^{63}Cu .

3.1. Спектр ЯМР на ядре алюминия ^{27}Al

Спектр ЯМР от ядер ^{27}Al представляет собой узкую симметричную линию, расположенную на широком пьедестале сателлитных линий. Такая характерная структура обусловлена взаимодействием квадрупольного момента ядра ^{27}Q с градиентом электрического поля (ГЭП), создаваемым в месте расположения ядер их зарядовым окружением [22–24]. При наличии такого взаимодействия для ядер со спином $I = 5/2$ должно наблюдаться пять линий: центральная, соответствующая переходу $m_I = -1/2 \leftrightarrow +1/2$, и две пары сателлитных линий, соответствующих переходам $m_I = \pm 3/2 \leftrightarrow \pm 1/2$ и $m_I = \pm 5/2 \leftrightarrow \pm 3/2$. Положения резонансных частот центральной линии и са-

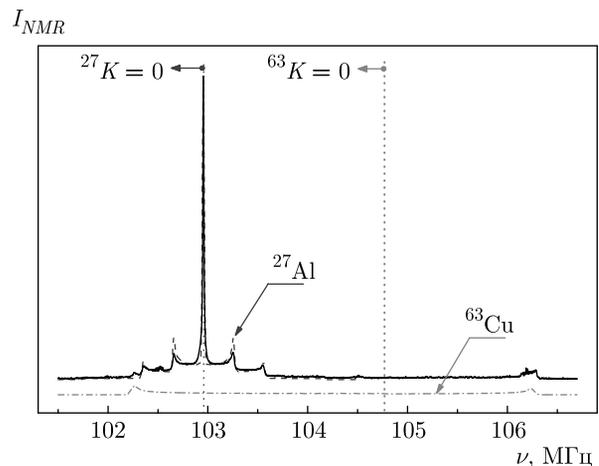


Рис. 2. (В цвете онлайн) Спектр ЯМР (сплошная кривая) в CuAlO_2 во внешнем магнитном поле 92.8 кЭ при температуре $T = 295$ К. Штриховая (синяя) и штрихпунктирная (красная) линии — моделирование экспериментального спектра ЯМР линиями от ядер ^{27}Al и ^{63}Cu

теллитов определяется компонентами тензора ГЭП V_{ij} ($i, j = x, y, z$):

$$\nu_Q = \frac{3eV_{zz}Q}{2I(2I-1)h} = \frac{3Q_{CC}}{2I(2I-1)}, \quad \eta = \frac{V_{yy}-V_{xx}}{V_{zz}}, \quad (3)$$

где ν_Q — квадрупольная частота, Q_{CC} — константа ядерного квадрупольного взаимодействия, h — постоянная Планка, η — параметр асимметрии тензора ГЭП.

Как показано на рис. 2, спектр ЯМР ядер ^{27}Al при $T = 295$ К удовлетворительно моделируется в предположении эквивалентности всех позиций ионов алюминия. В результате моделирования определены параметры ГЭП: значения квадрупольной частоты $^{27}\nu_Q = 608(5)$ кГц и параметра асимметрии $^{27}\eta = 0$. Полученные параметры хорошо согласуются со значениями, представленными в работе [25]. Температурная зависимость квадрупольной частоты $^{27}\nu_Q$ представлена ниже на рис. 6 (обсуждается там же совместно с данными, полученными на ядрах ^{63}Cu).

Сдвиг ^{27}K линий ЯМР ядер ^{27}Al при комнатной температуре равен -4 ppm и хорошо согласуется со сдвигами, наблюдаемыми для Al^{3+} в октаэдрическом окружении из атомов кислорода [26]. Температурная зависимость сдвига ^{27}K с учетом квадрупольной поправки второго порядка представлена на рис. 3а. Поведение кривой $^{27}K(T)$ удовлетворительно описывается зависимостью в форме закона Кюри – Вейсса

$$K(T) = K_0 + \frac{C}{T - \Theta_{nmr}}. \quad (4)$$

Как показано на рис. 3б, изменение с температурой величины $(^{27}K_0 - ^{27}K)^{-1}$, обратной сдвигу, хорошо аппроксимируется линейной функцией с характерной температурой Вейсса $\Theta_{nmr} = 0$ К, константой $C = -461$ ppm·К и температурно-независимым членом $K_0 = -2$ ppm. Не зависящий от температуры сдвиг $^{27}K_0$ обусловлен орбитальным и диамагнитным вкладами электронных оболочек. Наиболее интересен вклад в $K(T)$, зависящий от температуры, который обычно обусловлен дипольным вкладом и/или переносом спиновой поляризации от ближайших магнитных соседей. Данный вклад в $K(T)$ пропорционален магнитной восприимчивости $\chi(T)$ [23, 24].

На рис. 4 представлена зависимость магнитной восприимчивости $\chi = M/H$ от температуры во внешнем магнитном поле $H = 5$ кЭ, измеренной на том же поликристаллическом образце CuAlO_2 , на котором проводились эксперименты по ЯМР. Пове-

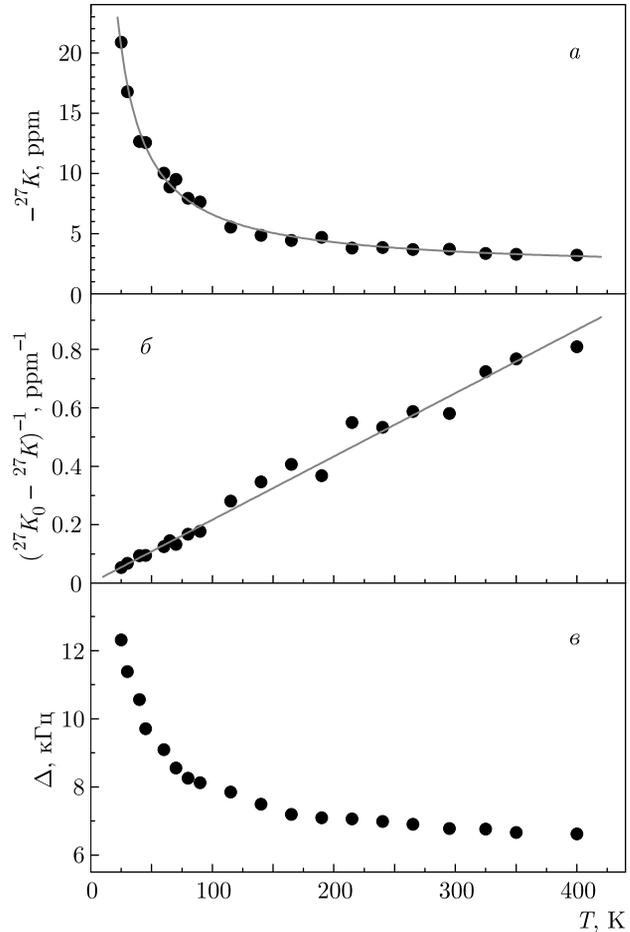


Рис. 3. Температурные зависимости сдвига ^{27}K линии ЯМР ядер ^{27}Al (а), обратной величины сдвига $(^{27}K_0 - ^{27}K)^{-1}$ (б), полуширины линии ЯМР ^{27}Al на половине высоты, Δ (в) в CuAlO_2 . Прямые линии — результат аппроксимации данных законом Кюри – Вейсса

дение $\chi(T)$ удовлетворительно описывается законом Кюри – Вейсса

$$\chi(T) = \chi_0 + \frac{C}{T - \Theta} \quad (5)$$

с константой $C = 0.017(2)$ см³·К/моль, $\Theta = -2(1)$ К, $\chi_0 = 4.9 \cdot 10^{-4}$ см³/моль. Соответствующий эффективный магнитный момент

$$\mu_{eff} = \sqrt{\frac{3Ck_B}{\mu_B^2 N_A}}, \quad (6)$$

где k_B — константа Больцмана, N_A — число Авогадро, составил $0.369\mu_B$. Полученные значения удовлетворительно согласуются с данными, полученными в работах [11, 27, 28].

При понижении температуры величина Δ — полуширина на половине высоты линии центрального перехода спектра ЯМР ^{27}Al , также растет (рис. 3в).

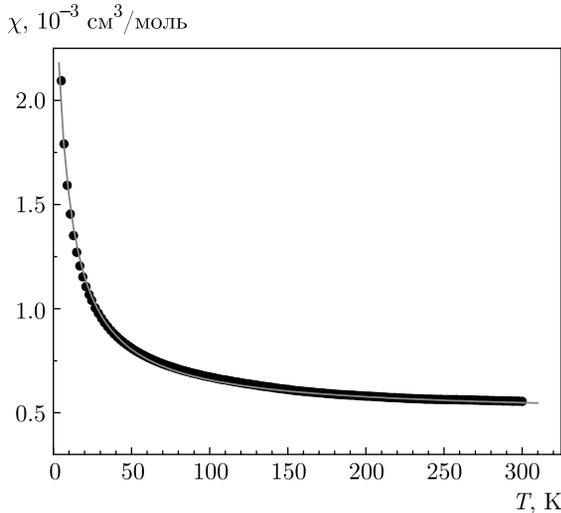


Рис. 4. (В цвете онлайн) Магнитная восприимчивость $\chi = M/H$ поликристаллического образца CuAlO_2 в зависимости от температуры, измеренная в магнитном поле $H = 5$ кЭ. Сплошная линия — результат аппроксимации данных законом Кюри–Вейсса

Увеличение ширины линии ЯМР обусловлено, наиболее вероятно, возникновением сверхтонких полей на ядрах алюминия, наводимых магнитными соседями. В полностью стехиометрическом соединении CuAlO_2 , свободном от магнитных примесей, существуют только ионы Cu^{1+} , Al^{3+} и O^{2-} , ни один из которых не имеет неспаренных электронов, и, следовательно, не должно существовать парамагнетизма. Однако в ряде работ [7–9] авторы рассчитали энергии образования дефектов в CuAlO_2 и родственных материалах и пришли к выводу, что вакансии в подрешетке Cu^{1+} являются наиболее вероятным дефектом. При возникновении данного дефекта для сохранения электронейтральности вещества в CuAlO_2 (при условии стехиометрии по кислороду) должны возникать ионы Cu^{2+} , которые можно рассматривать как ионы Cu^{1+} с одной дыркой в заполненной $3d$ -орбитали меди. Поскольку эти дырки подвижны, их наличие приводит к возникновению эффективного момента на каждой позиции ионов меди, которые, посредством наводимых сверхтонких полей [16, 29, 30], являются причиной сдвига и уширения линии ЯМР на ядрах ^{27}Al . Наблюдаемые различия в свойствах CuAlO_2 будут зависеть от концентрации вакансий в подрешетке ионов меди и, как следствие, носителей (дырок) в конкретном образце [28].

3.2. Температурная зависимость скорости спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al

Температурная зависимость скорости спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al в соединении

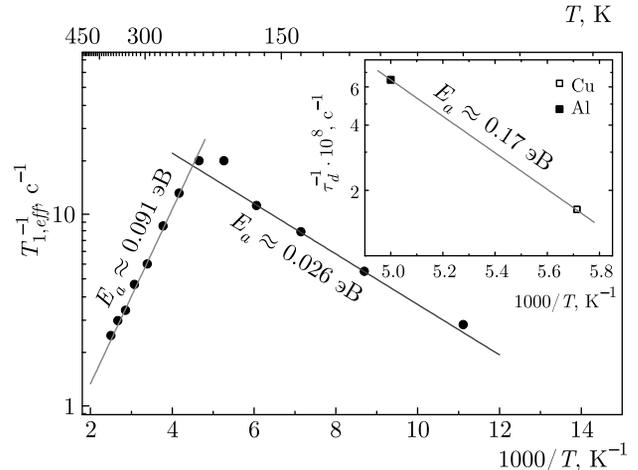


Рис. 5. Температурные зависимости скорости T_1^{-1} спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al в соединении CuAlO_2 . Прямые линии — результат аппроксимации данных в модели БПП. На вставке — частоты τ_d^{-1} дырочных перескоков, полученные по данным для T_1^{-1} для ядер ^{27}Al и ^{63}Cu [12]; прямая линия — аппроксимация данных выражением (8)

CuAlO_2 представлена на рис. 5. На зависимости $T_1^{-1}(T)$ обнаруживается ярко выраженный максимум при $T \approx 200$ К. Аномальный рост скорости ядерной спин-решеточной релаксации обычно наблюдается в районе существования структурных фазовых переходов. Однако какие-либо структурные превращения в CuAlO_2 в исследованном температурном диапазоне, по-видимому, отсутствуют, поскольку на температурных зависимостях сдвигов ЯМР ^{27}Al (см. рис. 3) и линии ЯКР ^{63}Cu [12] не наблюдаются заметные особенности и они носят монотонный характер.

Качественно аналогичные зависимости $T_1^{-1}(T)$ наблюдались ранее для ядер меди ^{63}Cu в целом ряде магнитных полупроводниковых соединений [31, 32] и рассматривались как доказательства замораживания движения дырок в медно-кислородных плоскостях. Можно предположить, что значительный вклад в скорость релаксации ядер ^{27}Al в исследуемом CuAlO_2 также определяется термоактивированными дырочными перескоками.

Простейший феноменологический подход для описания вклада в скорость спин-решеточной релаксации, обусловленного термоактивированной диффузией, был в свое время предложен Бломбергеном, Парселлом и Паундом (БПП) [33]. В рамках модели БПП предполагается, что корреляционная функция затухает как $\exp(-t/\tau_c)$. В простейшем случае одинаковых ядер и флуктуирующего диполь-дипольного межъядерного взаимодействия

зависимость скорости спин-решеточной релаксации определяется выражением вида

$$T_1^{-1} = \frac{2\gamma^2}{3\omega_L} M_2 \left[\frac{y}{1+y^2} + \frac{4y}{1+4y^2} \right], \quad y = \omega_L \tau_c, \quad (7)$$

где γ — гиромагнитное отношение ядра-зонда, M_2 — второй момент линии «жесткой решетки», ω_L — ларморовская частота, τ_c — так называемое время корреляции, определяющее длительность корреляции между двумя конфигурациями ядерного окружения в два разных момента времени. В случае термоактивированных перескоков время корреляции можно, как правило, приравнять к времени жизни атома в определенном состоянии: т. е. $\tau_c^{-1} = \tau_d^{-1}$, где частота атомных перескоков подчиняется закону Аррениуса

$$\tau_d^{-1} = \tau_{d0}^{-1} \exp(-E_a/k_B T). \quad (8)$$

Здесь E_a — энергия активации термоактивированной диффузии, а величина τ_{d0}^{-1} определяет частоту атомных перескоков при максимальной температуре.

В модели БПП зависимость $\ln T_1^{-1}$ от T^{-1} представляет собой симметричный пик. Максимум T_1^{-1} наблюдается при температуре, при которой частота атомных перескоков становится сравнимой с ларморовской частотой, $\tau_d^{-1} \approx \omega_L = 2\pi\nu_L$. При этом углы наклона прямых, соответствующих зависимостям $\ln T_1^{-1}$ от T^{-1} , в областях высоких и низких температур равны соответственно E_a/k_B и $-E_a/k_B$.

Необходимо отметить, что в нашем случае записать в явном виде выражение для $T_1^{-1}(T)$, аналогичное (7), представляется крайне затруднительным. Термоактивированные перескоки в электронной подсистеме CuAlO_2 вызывают флуктуации целого ряда взаимодействий на ядрах ^{27}Al : межъядерного диполь-дипольного взаимодействия ^{27}Al – ^{27}Al и ^{27}Al – $^{63,65}\text{Cu}$, диполь-дипольного электрон-ядерного взаимодействия, флуктуации ГЭП (что, естественно, приводит к возникновению квадрупольных механизмов спин-решеточной релаксации). Однако для всех этих случаев асимптотика поведения зависимости $\ln T_1^{-1}$ от T^{-1} должна сохраняться [22, 23]. Из этого следует, что полученные экспериментальные данные по скорости спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al позволяют нам оценить величину энергии активации для дырочных перескоков в CuAlO_2 . Результаты этой оценки показаны на рис. 5, где приведен «аррениусовский» (полулогарифмический) график T_1^{-1} от T^{-1} .

Как видно на рис. 5, значения E_a , полученные на низко- и высокотемпературном склонах зависи-

мости T_1^{-1} от T^{-1} различаются более чем в три раза. Подобные «асимметричные» зависимости неоднократно наблюдались для атомного движения. Для их описания был разработан ряд моделей, использующих более сложный вид корреляционных функций или распределение по E_a (как правило гауссовой формы) [34–39]. Следует отметить, что оценки энергии активации в рамках таких усовершенствованных моделей дают значения E_a , близкие к тем, что получаются при «линейной» аппроксимации на высокотемпературном склоне зависимости $\ln T_1^{-1}$ от T^{-1} . Учитывая сказанное выше и анализируя данные по скорости спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al , получаем оценку $E_a \approx 0.1$ эВ.

Параметры подвижности носителей (дырок) в CuAlO_2 можно оценить также из анализа данных по T_1^{-1} для ядер ^{27}Al и ^{63}Cu [12]. Зависимость $^{63}\text{T}_1^{-1}(T)$ для ядра меди также имеет максимум при $T \approx 175$ К на резонансной частоте 28 МГц. Предполагая, что условие $\tau_d \omega_L \approx 1$ для максимума скорости релаксации выполняется в обоих случаях, мы можем оценить величины $\tau_d^{-1} \approx 1.6 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ и $\tau_d^{-1} \approx 6.5 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ соответственно при 175 К и 200 К (вставка на рис. 5). Аппроксимация данных для τ_d^{-1} выражением (8) дает значения $E_a \approx 0.17$ эВ при $\tau_{d0}^{-1} \approx 1 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$.

Таким образом, температурное поведение скорости релаксации ядер ^{27}Al обусловлено, наиболее вероятно, диффузией дырок, являющихся основными зарядовыми носителями в образцах CuAlO_2 . Следует отметить, что ранее такой вывод был получен при анализе спин-решеточной релаксации в родственном соединении $\text{CuYO}_2 : \text{Ca}$, также имеющем кристаллическую структуру дельтафосфита [40].

Величина энергии активации для данного вида диффузионного движения составляет по нашим данным около 0.1–0.2 эВ, что значительно меньше не только ширины запрещенной зоны ($E_\Delta = 3\text{--}3.5$ эВ), но и энергии акцепторного уровня ($E_a = 750$ мэВ) в соединении CuAlO_2 [11]. Это свидетельствует о том, что активация дырок в низкотемпературном диапазоне происходит с дефектных уровней. Следует отметить, что в том же температурном диапазоне, где наблюдается максимум скорости релаксации, происходит заметное изменение характера поведения температурной зависимости коэффициента Зеебека [11].

3.3. Спектр ЯМР на ядре меди ^{63}Cu

Спектр ЯМР на изотопе меди ^{63}Cu , обладающем спином $I = 3/2$ (см. рис. 2), представляет

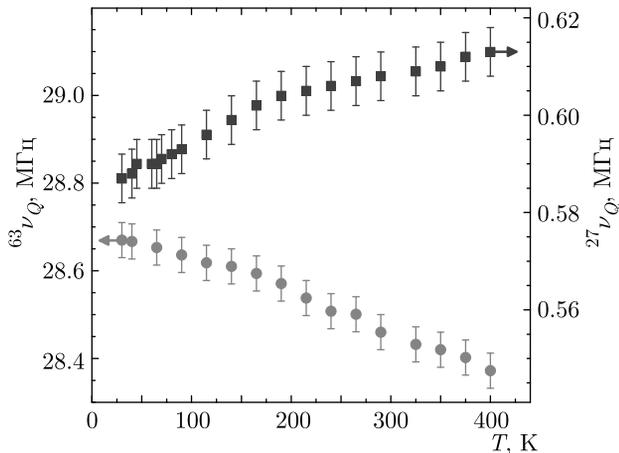


Рис. 6. Температурные зависимости квадрупольных частот $^{63}\nu_Q$ меди и $^{27}\nu_Q$ алюминия в CuAlO_2

собой центральный переход $m_I = -1/2 \leftrightarrow +1/2$. Сателлитные линии не записывались из-за широкого (более 50 МГц) спектра ЯМР ядер ^{63}Cu . Такой вид центрального перехода меди, расщепленного на два пика, возникает из-за вклада в полный сдвиг линии во втором порядке теории возмущений в результате взаимодействия большого квадрупольного момента ^{63}Q ядер меди с градиентом электрического поля [22–24]. Спектр можно описать квадрупольно-расщепленной линией с параметрами $^{63}\nu_Q = 28.46(4)$ МГц и $^{63}\eta = 0$. Эти величины хорошо согласуются с параметрами, полученными из анализа спектров ЯМР на ^{63}Cu в нашей работе на этом же образце [12]. Сдвиг ^{63}K линий ЯМР на ядре меди при комнатной температуре равен 1100 ppm. Выделить температурную зависимость сдвига ^{63}K проблематично из-за большой ширины спектра и, как следствие, большой погрешности определения сдвига линии.

Зависимости квадрупольной частоты от температуры для ^{63}Cu , $^{63}\nu_Q$, и алюминия ^{27}Al , $^{27}\nu_Q$, представлены на рис. 6. С понижением температуры происходит увеличение параметра $^{63}\nu_Q$ и уменьшение параметра $^{27}\nu_Q$. Моделирование такого поведения квадрупольных параметров было сделано в модели точечных зарядов. В этой модели каждый атом представлен материальной точкой с определенным зарядом: ион Al имеет заряд $+3e$; ион Cu — заряд $+1e$; ион O — заряд $-2e$. Модель точечных зарядов подразумевает вычисление вторых производных потенциала $V = e/r$, создаваемого атомами с зарядом e на расстоянии r от точки, где вычисляется ГЭП. Для построения кристаллической решетки исполь-

зовались координаты атомов в элементарной ячейке и элементарные трансляции. При искусственном увеличении или уменьшении параметра решетки c наблюдалось уменьшение или увеличение обоих параметров, $^{63}\nu_Q$ и $^{27}\nu_Q$. При искусственном уменьшении параметра решетки a наблюдалось уменьшение параметра $^{27}\nu_Q$, а параметр $^{63}\nu_Q$ не изменялся. При увеличении a наблюдался рост параметра $^{27}\nu_Q$, а параметр $^{63}\nu_Q$ также не изменялся. Из анализа такого поведения квадрупольных параметров можно сделать вывод, что наши экспериментальные данные свидетельствуют о сжатии кристаллической решетки вдоль осей a и c . Это вывод согласуется с данными по дифракции рентгеновский лучей на этом соединении [41].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В поликристаллическом образце CuAlO_2 зарегистрированы спектры ЯМР на ядрах ^{63}Cu и ^{27}Al во внешнем магнитном поле $H_0 = 92.8$ кЭ в диапазоне температур 30–400 К. Анализ ЯМР-спектров показал, что сдвиги линий ЯМР алюминия (^{27}K) и меди (^{63}K) при температуре $T = 295$ К равны соответственно -4 ppm и 1100 ppm. При понижении температуры сдвиг линии ЯМР ^{27}K увеличивается по абсолютной величине и может быть описан законом Кюри–Вейсса. Значение квадрупольной частоты для ионов алюминия $^{27}\nu_Q = 612(5)$ кГц при $T = 400$ К и при понижении температуры уменьшается на 3.1%. В то же время значение квадрупольной частоты для ионов меди, $^{63}\nu_Q = 28.372$ МГц (при $T = 400$ К), увеличивается на 1%. Такое поведение квадрупольных параметров свидетельствует о сжатии кристаллической решетки вдоль осей a и c . В области $T = 200$ К на температурной зависимости скорости T_1^{-1} спин-решеточной релаксации ядер ^{27}Al обнаруживается широкий максимум. Его появление обусловлено термоактивированной диффузией дырок (с энергией активации $E_a \approx 0.1$ – 0.2 эВ), являющихся основными зарядовыми носителями в соединении CuAlO_2 . Мы интерпретируем полученные экспериментальные ЯМР-данные: максимум на температурной зависимости T_1^{-1} при $T \approx 200$ К, а также поведение сдвига и ширины линии ЯМР на ядрах ^{27}Al , как свидетельство движения дырок, приводящего к возникновению эффективного магнитного момента в подрешетке меди и парамагнетизму при низких температурах. Появление же дырок связано с появлением вакансий на позициях меди в CuAlO_2 .

Возникновение на ионах меди эффективного магнитного момента в соединениях со структурой делофосфита CuMeO_2 ($\text{Me} = \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Mn}$) может играть важную роль в формировании ближнего или дальнего магнитного порядка в подрешетке магнитных ионов.

Благодарности. Авторы благодарны А. С. Волегову за обсуждение полученных результатов по магнитной восприимчивости.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для поддержки молодых ученых (МК-6094.2021.1.2) и в рамках государственного задания Министерства высшего образования и науки Российской Федерации (шифр «Функция» Г.р. АААА-А19-119012990095-0).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Seki, Y. Onose, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 067204 (2008).
2. Yu. A. Sakhratov, L. E. Svistov, P. L. Kuhns, H. D. Zhou, and A. P. Reyes, *Phys. Rev. B* **94**, 094410 (2016).
3. T. T. A. Lummen, C. Strohm, H. Rakoto, and P. H. M. van Loosdrecht, *Phys. Rev. B* **81**, 224420 (2010).
4. M. S. Lee, T. Y. Kim, and D. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 2028 (2001).
5. H. Kawazoe, M. Yasukawa, H. Hyodo, M. Kurita, H. Yanagi, and H. Hosono, *Nature (London)* **389**, 939 (1997).
6. H. Yanagi, S. Inoue, K. Ueda, H. Kawazoe, H. Hosono, and N. Hamada, *J. Appl. Phys.* **88**, 4159 (2000).
7. B. J. Ingram, T. O. Mason, R. Asahi, K. T. Park, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **64**, 155114 (2001).
8. H. Raebiger, S. Lany, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **76**, 045209 (2007).
9. M. Nolan, *Thin Sol. Films* **516**, 8130 (2008).
10. B. Ingram, G. Gonzalez, and T. Mason, *Chem. Mater.* **16**, 5616 (2004).
11. J. Tate, H. L. Ju, J. C. Moon, A. Zakutayev, A. P. Richard, J. Russell, and D. H. McIntyre, *Phys. Rev. B* **80**, 165206 (2009).
12. V. V. Ogloblichev, V. L. Matukhin, I. Yu. Arapova, C. V. Schmidt, and R. R. Khusnutdinov, *Appl. Magn. Res.* **50**, 619 (2019).
13. А. Г. Запазинский, В. Ф. Балакирев, Н. М. Чеботарев, Г. И. Чуфаров, *Ж. неорг. химии* **14**, 624 (1969).
14. V. L. Matukhin, I. N. Khabibullin, D. A. Shulgin, S. V. Schmidt, and E. I. Terukov, *Semicond.* **46**, 1102 (2012).
15. А. Г. Смольников, В. В. Оглобличев, С. В. Верховский, К. Н. Михалев, А. Ю. Якубовский, К. Кумагаи, Ю. Фурукава, А. Ф. Садыков, Ю. В. Пискунов, А. П. Геращенко, С. Н. Барило, С. В. Ширяев, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 766 (2015).
16. А. Г. Смольников, В. В. Оглобличев, С. В. Верховский, К. Н. Михалев, А. Ю. Якубовский, Y. Furukawa, Ю. В. Пискунов, А. Ф. Садыков, С. Н. Барило, С. В. Ширяев, *Физика металлов и металловедение* **118**, 142 (2017).
17. А. Ф. Садыков, А. П. Геращенко, Ю. В. Пискунов, В. В. Оглобличев, А. Г. Смольников, С. В. Верховский, А. Ю. Якубовский, Э. А. Тищенко, А. А. Буш, *ЖЭТФ* **142**, 753 (2012).
18. J. J. Fitzgerald, S. D. Kohl, G. Piedra, S. F. Dec, and G. E. Maciel, *Chem. Mater.* **6**, 1915 (1994).
19. К. Н. Михалев, А. Ю. Гермов, А. Е. Ермаков, М. А. Уймин, А. Л. Бузлуков, О. М. Саматов, *ФТТ* **59**, 500 (2017).
20. A. Narath, in *Hyperfine Interactions*, ed. by A. J. Freeman and R. B. Frankel, Acad. Press, New York (1967), p. 287.
21. E. R. Andrew and D. P. Tunstall, *Proc. Phys. Soc.* **78**, 1 (1961).
22. A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon Press, Oxford (1961).
23. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, Harper Row, New York (1963).
24. V. I. Chizhik, Y. S. Chernyshev, A. V. Donets, V. Frolov, A. Komolkin, and M. G. Shelyapina, *Magnetic Resonance and its Applications*, Springer, Berlin (2014).
25. *Magnetic Resonance*, ed. by C. K. Coogan, N. S. Ham, S. N. Stuart, J. R. Pilbrow, and G. V. H. Wilson, Plenum Press, New York (1970).
26. M. Haouas, F. Taulelle, and C. Martineau, *Progr. Nucl. Magn. Res. Spectr.* **94–95**, 11 (2016).
27. M. Aziziha, S. A. Byard, R. Beesely, J. P. Lewis, M. S. Seehra, and M. B. Johnson, *AIP Adv.* **9**, 035030 (2019).
28. M. Aziziha, R. Beesley, J. R. Magers, N. Mottaghi, M. B. Holcomb, J. P. Lewis, M. S. Seehra, and M. B. Johnson, *J. Magn. Magn. Mater.* **471**, 495 (2019).

29. A. Freeman and R. Frankel, *Hyperfine Interactions*, Acad. Press, New York–London (1967).
30. А. Г. Смольников, В. В. Оглобличев, А. Ю. Гермо́в, К. Н. Михале́в, А. Ф. Сады́ков, Ю. В. Пискунов, А. П. Геращенко, А. Ю. Якубовский, М. А. Муфлихонова, С. Н. Барило, С. В. Ширяев, Письма в ЖЭТФ **107**, 134 (2018).
31. P. Carretta, M. Corti, and A. Rigamonti, *Phys. Rev. B* **48**(5), 3433 (1993).
32. F. Raffa, M. Mali, J. Roos, D. Brinkmann, M. Matsumura, and K. Conder, *Phys. Rev. B* **58**(5), 2724 (1998).
33. N. Bloembergen, E. M. Purcell, and R. V. Pound, *Phys. Rev.* **73**, 679 (1948).
34. O. Kanert, J. Steinert, H. Jain, K. L. Ngai, *J. Non-Cryst. Sol.* **131–133**, 1001 (1991).
35. K. L. Ngai and A. K. Rizo, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1296 (1996).
36. D. Brinkmann, M. Mali, J. Roos, R. Messer, and H. Birli, *Phys. Rev. B* **26**, 4810 (1982).
37. S. Sen and J. F. Stebbins, *Phys. Rev.* **55**, 3512 (1997).
38. I. Svare, F. Borsa, D. R. Torgeson, and S. W. Martin, *Phys. Rev. B* **48**, 9336 (1993).
39. P. A. Beckmann, *Phys. Rep.* **171**(3), 85 (1988).
40. W. W. Warren Jr., A. Rajabzadeh, T. Olheiser, J. Liu, J. Tate, M. K. Jayaraj, and K. A. Vanaja, *Sol. St. Nucl. Magn. Res.* **26**, 209 (2004).
41. T. Ishiguro, N. Ishizawa, N. Mizutani, and M. Kato, *J. Sol. St. Chem.* **41**, 132 (1982).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОИОННОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ИОНА Fe^{3+} МЕТОДОМ ЭПР В ДИАМАГНИТНОМ КРИСТАЛЛЕ PbGaVO_4

А. М. Воротынов ^{a*}, А. И. Панкрац ^{a,b**}, М. И. Колков ^a

^a Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

^b Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 29 июня 2021 г.,
после переработки 12 июля 2021 г.
Принята к публикации 12 июля 2021 г.

Выращены кристаллы диамагнитного аналога PbGaVO_4 , содержащие малое количество (около 0.5 ат. %) ионов Fe^{3+} . С учетом кристаллической структуры проанализированы одноионные ЭПР-спектры Fe^{3+} в монокристаллах $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$. Подтверждено существование четырех неэквивалентных в магнитном отношении позиций ионов Fe^{3+} с различными направлениями локальных осей анизотропии. Определены параметры спинового гамильтониана, записанного в приближении локальной орторомбической симметрии парамагнитного центра. Показано, что необычно большое для S -ионов значение констант одноионной анизотропии обусловлено сильным искажением лигандного окружения ионов Fe^{3+} . Проведена оценка одноионного вклада в энергию суммарной магнитной анизотропии магнитоцентрированного кристалла PbGaVO_4 . Сделано предположение, что при формировании магнитной анизотропии магнитоцентрированного кристалла доминирующую роль играют двухионные механизмы анизотропии Fe–Fe-взаимодействий.

DOI: 10.31857/S0044451021110067

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди Pb-содержащих кристаллов большой интерес в последнее время вызывает семейство ортоборатов с общей формулой PbAVO_4 . Их кристаллическая структура для $A = \text{Ga}, \text{Al}$ впервые была исследована в работах [1, 2], где была установлена орторомбическая структура с пространственной группой $Pnma$, основным структурным элементом кристаллов этого семейства являются цепочки из соединенных ребрами кислородных октаэдров, в центрах которых расположены ионы A^{3+} . Магнитные свойства кристаллов этого семейства с $A = \text{Fe}, \text{Cr}$ и Mn были изучены в поликристаллическом состоянии той же группой авторов в работе [3] и была обнаружена интересная особенность этого семейства, заключающаяся в том, что тип магнитного

порядка зависит от парамагнитного иона A . Было установлено, что кристаллы с $A = \text{Fe}, \text{Cr}$ являются антиферромагнетиками с температурами Нееля соответственно 125 и 8.3 К. Соединение с $A = \text{Mn}$ было единственным в этом ряду, обладающим ферромагнитным порядком, что само по себе уникально, так как ферромагнитный порядок чрезвычайно редко встречается в оксидных соединениях. Исследования на монокристаллах дают гораздо более достоверную информацию, поскольку поликристаллические объекты могут содержать посторонние кристаллические фазы. Мы вырастили монокристаллы PbFeVO_4 с использованием спонтанной кристаллизации в раствор-расплаве, наши исследования показали [4], что магнитные свойства монокристаллов сильно отличаются от свойств поликристаллов. Температура Нееля по уточненным данным оказалась равной 114 К, а температурная зависимость магнитной восприимчивости соответствует, скорее, трехмерной модели магнитной структуры, нежели квазидномерной модели, следующей из поликристал-

* E-mail: sasa@iph.krasn.ru

** E-mail: pank@iph.krasn.ru

лических данных [3]. Были также обнаружены магнитодieleктрические аномалии в области установления магнитного порядка в кристалле PbFeVO_4 , свидетельствующие о взаимосвязи магнитной и dieлектрической подсистем кристалла. Исследования на монокристаллах обладают еще одним преимуществом, позволяя исследовать анизотропные свойства соединений. Исследования магнитных и резонансных свойств монокристаллов PbMnVO_4 , выращенных нами [5], показали, что это соединение ниже температуры Кюри $T_C = 30.3$ К является сильно-анизотропным ферромагнетиком. Было показано [5], что статический эффект Яна – Теллера является причиной формирования как ферромагнитной обменной связи в цепочках из октаэдров MnO_6 , так и сильной магнитной анизотропии кристалла. Значительные эффективные поля анизотропии PbMnVO_4 определяют экстремально большую для ферромагнетиков величину энергетической щели в спектре ФМР, достигающей 112 ГГц при $T = 4.2$ К. Было также обнаружено [6], что при нагревании кристалла в отсутствие внешнего магнитного поля заметный магнитный вклад в теплоемкость сохраняется вплоть до температур, вдвое превышающих T_C , а в сильных полях этот интервал становится еще шире. Этот факт, а также различие T_C и парамагнитной температуры Кюри $\Theta = 49$ К объяснены влиянием цепочечного характера магнитной структуры кристалла PbMnVO_4 . Важной структурной особенностью этого семейства кристаллов является искаженный кислородный октаэдр, окружающий ион A^{3+} . Эти искажения особенно велики в случае, когда в центре октаэдра находится ян-теллеровский ион Mn^{3+} , обуславливая сильную магнитную анизотропию кристалла PbMnVO_4 . Еще одна важная структурная особенность кристаллов PbAVO_4 заключается в неколлинеарности локальных осей искажения октаэдров, которая приводит к неколлинеарным осям одноионной магнитной анизотропии кристалла. Именно эта неколлинеарность приводит к новому эффекту — обнаруженному в кристалле PbMnVO_4 ориентационному переходу при намагничивании вдоль одной из ромбических осей [7–9]. Наличие искажений кислородного окружения парамагнитных ионов и неколлинеарности локальных осей искажений обуславливают важную роль одноионной магнитной анизотропии в кристаллах семейства PbAVO_4 . Учитывая тот факт, что кислородное окружение иона железа в PbFeVO_4 также испытывает заметные искажения, можно ожидать, что одноионная анизотропия и в этом кристалле может оказаться значительной. В частности, в ра-

боте [7] были изучены магнитоанизотропные свойства кристалла PbMnVO_4 при частичном замещении ионов Mn^{3+} ионами Fe^{3+} . Мы ожидали, что магнитная анизотропия уменьшится при таком замещении, что было бы вполне логично для S -иона, каковым является Fe^{3+} . Однако такое замещение не только не привело к уменьшению магнитной анизотропии, но даже вызвало некоторое ее усиление и соответствующее увеличение щели в спектре ФМР. Таким образом, исследование одноионной магнитной анизотропии для ряда парамагнитных ионов в семействе PbAVO_4 является важной и интересной задачей. Одним из наиболее эффективных экспериментальных методов решения такой задачи является исследование монокристаллов диамагнитных аналогов этого семейства, содержащих малые добавки парамагнитных ионов в октаэдрических позициях кристалла. Изучение одноионных спектров ЭПР таких ионов и анализ этих данных в рамках спинового гамильтониана позволяют экспериментально измерить константы одноионной анизотропии для соответствующих парамагнитных ионов. Настоящая работа посвящена исследованию одноионного спектра ЭПР иона Fe^{3+} в диамагнитном кристалле PbGaVO_4 . Были выращены монокристаллы ортобората $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$, содержащие малую добавку ионов Fe^{3+} . Исследование одноионного спектра ЭПР позволило определить параметры спинового гамильтониана иона Fe^{3+} в монокристалле PbGaVO_4 . Обнаружено необычно большое для S -иона значение констант одноионной магнитной анизотропии для иона Fe^{3+} .

2. ОБРАЗЦЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ТЕХНИКА

Монокристаллы PbGaVO_4 , содержащие малые (менее 1 ат.%) добавки ионов Fe^{3+} , были выращены с помощью модифицированного метода псевдораствор-расплавной спонтанной кристаллизации. Для предотвращения возможности загрязнения кристалла посторонними примесями синтез монокристаллов проводился с использованием в качестве растворителей оксидов $\text{PbO}-\text{V}_2\text{O}_5$, входящих в химическую формулу синтезируемого соединения. Состав шихты для выращивания монокристаллов приведен в табл. 1.

Синтез монокристаллов проводился в соответствии со следующим технологическим режимом: плавный подъем за 5 ч до температуры 970°C , последующей выдержкой в течение 4 ч и последую-

Таблица 1. Состав шихты для выращивания монокристалла $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$

	$\text{PbO}, \text{г}$	$\text{B}_2\text{O}_3, \text{г}$	$\text{Fe}_2\text{O}_3, \text{г}$	$\text{Ga}_2\text{O}_3, \text{г}$
$\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$ ($x = 0.005$)	79.4	17.2	0.007	14.0493

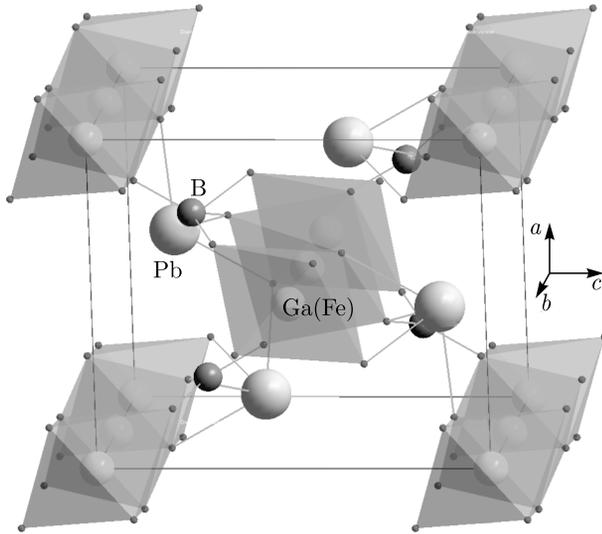


Рис. 1. Общий вид кристаллической структуры $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$

щим медленным снижением температуры до 750°C со скоростью $3.20^\circ\text{C}/\text{ч}$. После выключения печи платиновый тигель оставался в печи до полного ее остывания. Монокристаллы извлекались из тигля механическим способом. Прозрачные кристаллы с оранжевой окраской представляют собой вытянутые иголки призматического вида с поперечным сечением в форме сплюснутого параллелограмма и размерами порядка $2 \times 0.2 \times 0.2 \text{ мм}^3$. Рентгеновские исследования подтвердили орторомбическую пространственную группу $Pnma$, параметры решетки совпадают с данными [1]: $a = 6.9944(10) \text{ \AA}$, $b = 5.8925(8) \text{ \AA}$, $c = 8.2495(11) \text{ \AA}$, $V = 340.00(8) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$. На рис. 1 показан общий вид кристаллической структуры $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$. Основным элементом структуры являются цепочки из связанных ребрами кислородных октаэдров, в центре которых находится ион Ga^{3+} или Fe^{3+} . Цепочки вытянуты вдоль ромбической оси b и связаны между собой через группы VO_3 и PbO_4 . По-видимому, обменное взаимодействие через группу PbO_4 является принципиально важным. Так, в работе [10] показано, что замена Pb на Sr приводит к тому, что ферромаг-

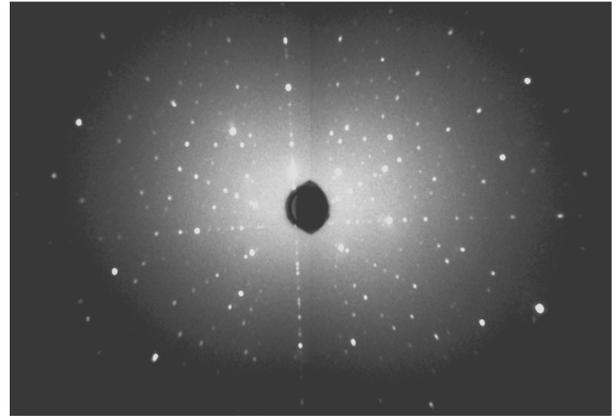


Рис. 2. Лауэграмма монокристалла $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$ при отражении от плоскости (101)

нитное взаимодействие между цепочками становится антиферромагнитным.

Ориентация монокристаллов и их качество определялись с помощью Photonic Science Laue crystal orientation system. На рис. 2 представлена лауэграмма монокристалла $\text{PbGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{VO}_4$, полученная при отражении первичного пучка от одной из боковых граней кристалла, представляющей собой диагональную плоскость типа (101). Отсутствие двойных и кольцевых рефлексов подтверждают высокое качество монокристалла. Таким образом, по данным рентгенографических исследований ромбическая ось b совпадает с длинным направлением иголки, естественные боковые грани кристалла представляют собой диагональные плоскости типа (101). Ориентация кристалла в эксперименте осуществлялась по естественной огранке кристалла. Измерения электронного парамагнитного резонанса проводились на спектрометре Bruker Elexsys E-580 X-диапазона при комнатной температуре. Регистрировалась первая производная сигнала поглощения.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 3 показаны фрагменты спектров ЭПР для трех ориентаций магнитного поля относительно кристаллических осей. Экспериментальный спектр 1 (тонкая линия черного цвета) записан в магнитном поле, параллельном ромбической оси b . Он содержит две узкие линии разной интенсивности. Спектр 2 получен при ориентации магнитного поля, перпендикулярной оси b в некотором направлении в плоскости ac , при такой ориентации поля наблюдаются две группы по две узкие линии также разной интенсивности. Кроме того, для этой ориентации в об-

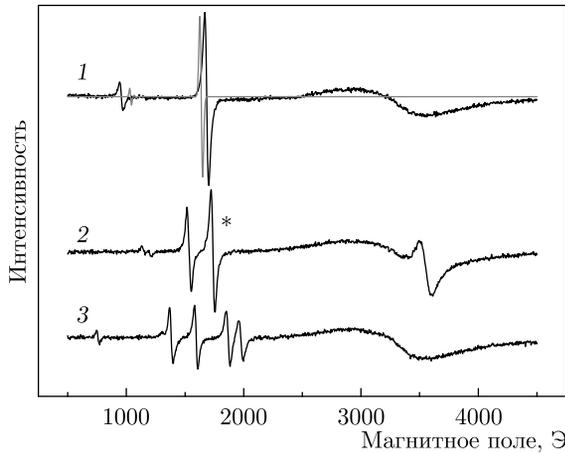


Рис. 3. Спектры ЭПР иона Fe^{3+} , записанные для трех различных ориентаций магнитного поля: 1 — $H \parallel b$, 2 — $H \perp b$, 3 — произвольная ориентация

ласти $H = 3500$ Э показана узкая линия, которую не удалось идентифицировать. Эта линия обладает сильной угловой зависимостью резонансного поля и может быть обусловлена неконтролируемой примесью другого парамагнитного иона или иона железа с другой валентностью. Спектр 3 записан при произвольной ориентации магнитного поля, в этом случае группа с максимальной интенсивностью сигнала содержит четыре линии. Кроме того, все три спектра 1–3 содержат широкую линию около $H = 3500$ Э, которая принадлежит держателю образца.

Угловые зависимости резонансных полей отдельных линий спектра ЭПР получены для двух различных плоскостей вращения магнитного поля относительно кристаллографических осей. На рис. 4 показаны угловые зависимости, измеренные при вращении магнитного поля от ромбической оси b к произвольному направлению в плоскости ac . Угловые зависимости при вращении магнитного поля в плоскости ac приведены на рис. 4б. На последнем рисунке светлыми и темными кружками показаны угловые зависимости для обеих линий большой интенсивности (см. спектр 2 на рис. 3), а синими треугольниками — для одной из линий малой интенсивности. На рис. 4а приведена угловая зависимость только для одной из линий большой интенсивности спектра 2 на рис. 3, помеченной звездочкой. Светлые и темные треугольники синего цвета на этом рисунке соответствуют линиям малой интенсивности.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Обратимся к обсуждению кристаллической структуры PbGaVO_4 . Степень искажения кисло-

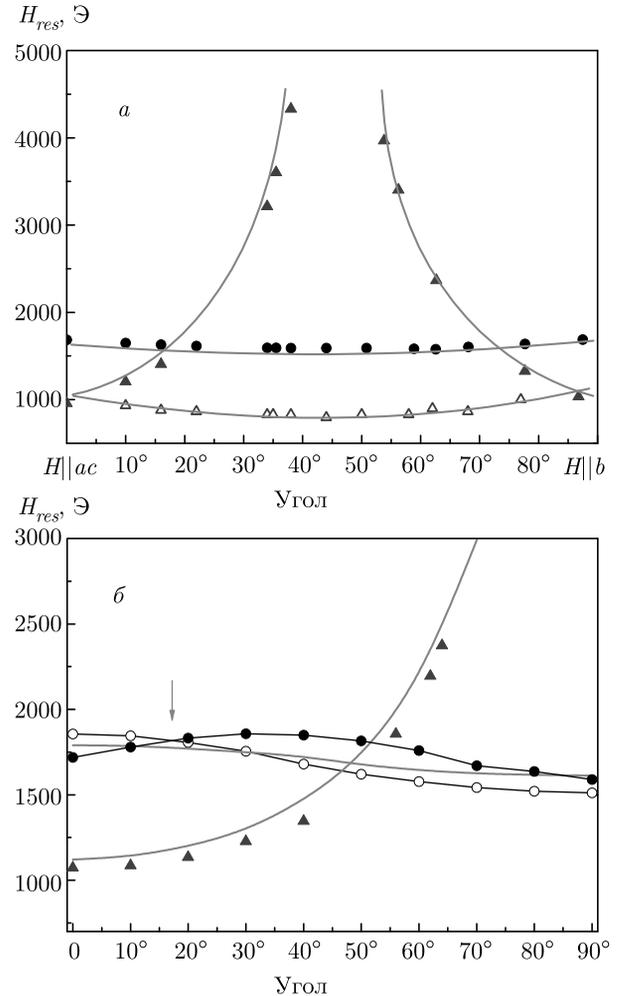


Рис. 4. Угловые зависимости резонансных полей, измеренные при вращении магнитного поля: а — от оси b к произвольному направлению в плоскости ac , б — в плоскости ac . Точки — эксперимент, сплошные линии — подгонка с параметрами гамильтониана

родных октаэдров в кристаллах семейства PbAVO_4 зависит от иона A^{3+} , некоторые параметры октаэдров приведены в табл. 2. Видно, что наиболее сильные искажения кислородного окружения наблюдаются в кристалле PbMnVO_4 , это обусловлено ян-теллеровским характером иона Mn^{3+} [3, 5]. Однако и в остальных кристаллах семейства PbAVO_4 кислородные октаэдры испытывают заметные искажения, обусловленные влиянием связывающих групп VO_3 и PbO_4 , причем в кристаллах PbFeVO_4 и PbGaVO_4 искажения октаэдров близки по величине. Во всех соединениях PbAVO_4 характер искажений таков, что наиболее вытянутой в октаэдрах является диагональ O3-A-O3 , которую можно рассматривать как локальную ось анизотропии для

Таблица 2. Кристаллические параметры кислородных октаэдров в PbABO_4

Расстояния и углы	PbFeBO_4	PbGaBO_4	PbMnBO_4
A-O1, Å	1.923(3)	1.888(2)	1.885(3)
A-O2, Å	2.035(4)	2.008(2)	1.990(3)
A-O3, Å	2.095(4)	2.074(2)	2.225(4)
A-O1-A	101.2(2)°	102.55(16)°	104.0(2)°
A-O3-A	90.2(2)°	90.51(14)°	83.8(2)°

парамагнитных ионов [5, 7, 8]. На рис.5 приведены фрагменты кристаллической структуры PbGaBO_4 , на которых показаны две соседние цепочки октаэдров, наиболее длинные диагонали октаэдров выделены толстыми линиями.

В каждой цепочке кристалла PbGaBO_4 локальные оси соседних октаэдров образуют между собой угол 90.51° . Следовательно, каждая локальная ось образует угол 44.7° с ромбической осью b (см. рис. 5а). Кроме того, локальные оси каждой цепочки образуют плоскость, при этом плоскости локальных осей соседних цепочек симметрично развернуты вокруг оси b на угол $\pm 31.3^\circ$ относительно оси a (рис. 5б).

Перечисленные особенности структуры позволяют объяснить вид экспериментальных спектров ЭПР при различных ориентациях магнитного поля. Если исходить из того, что для ионов Fe^{3+} , замещающих ионы Ga^{3+} в кислородных октаэдрах, локальными осями анизотропии являются наиболее длинные диагонали октаэдров, связывающие вершины с ионами O3, то вид спектра ЭПР зависит от ориентации магнитного поля относительно этой оси. Поэтому при произвольной ориентации поля в спектре ЭПР наблюдаются четыре наиболее интенсивные линии, соответствующие четырем неэквивалентным (по отношению к ориентации внешнего магнитного поля) позициям иона Fe^{3+} в кристалле (спектр 3 на рис. 3). Когда магнитное поле направлено вдоль ромбической оси b , локальные оси всех четырех неэквивалентных позиций иона Fe^{3+} ориентированы одинаково по отношению к полю (рис. 5а). В этом случае все четыре позиции вырождены и спектр ЭПР содержит единственную линию большой интенсивности (спектр 1 на рис. 3). При ориентации магнитного поля в ac -плоскости вырожденными оказывается каждая пара соседних октаэдров

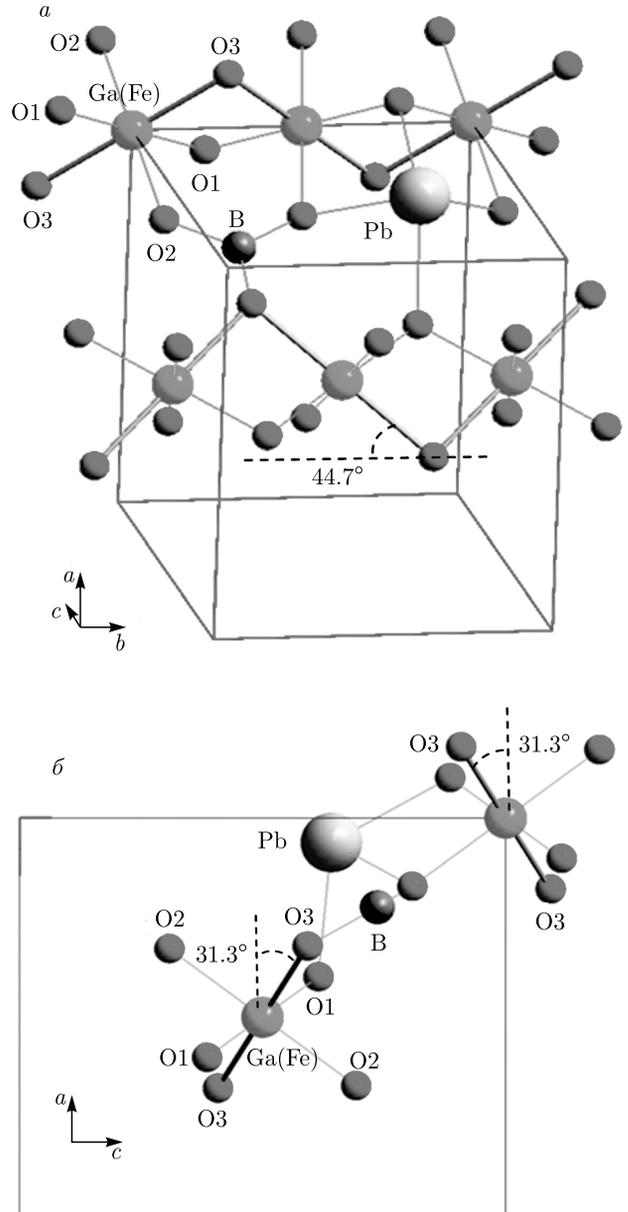


Рис. 5. Фрагмент кристаллической структуры PbGaBO_4 , содержащий две соседние цепочки октаэдров, а — общий вид, б — вид вдоль ромбической оси b

в цепочке. В то же время плоскости локальных осей соседних цепочек развернуты между собой на угол 62.6° , поэтому при произвольной ориентации поля в ac -плоскости в спектре присутствуют две линии большой интенсивности, каждая из которых отвечает ионам Fe^{3+} одной из цепочек (спектр 3 на рис. 3). При ориентации поля вдоль ромбических осей a или c такой спектр вырождается в одиночную линию, одна из таких ориентаций отмечена красной стрелкой на рис. 4б. Такое объяснение подтверждается

Таблица 3. Значения подгоночных параметров спинового гамильтониана (1)

g_x	g_y	g_z	$D, \text{см}^{-1}$	$E, \text{см}^{-1}$	$B_4^0, \text{см}^{-1}$	$B_4^2, \text{см}^{-1}$	$B_4^4, \text{см}^{-1}$
1.8(1)	2.0(1)	1.9(1)	-2.57(5)	0.95(5)	0.41(4)	1.30(8)	0.94(3)

сравнением интенсивностей линий ЭПР для разных ориентаций магнитного поля: максимальная интенсивность одиночной линии ЭПР наблюдается при $H \parallel b$, когда все четыре позиции иона Fe^{3+} вырождены (спектр 1 на рис. 3), а минимальные интенсивности линий соответствуют произвольной ориентации магнитного поля (спектр 3 на рис. 3). Анализ спектров ЭПР проводился с помощью программы XSophe [11] и спинового гамильтониана, записанного в приближении локальной орторомбической симметрии парамагнитного центра:

$$\hat{H} = -\hat{g}\beta SH + DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) + [B_4^0 O_4^0 + B_4^2 O_4^2 + B_4^4 O_4^4] / 60, \quad (1)$$

где \hat{g} — тензор g -фактора, β — магнетон Бора. Вид спиновых операторов O_4^0 , O_4^2 и O_4^4 приведен в работе [12]. Второй, третий и четвертый члены в (1) описывают одноионную магнитную анизотропию ромбической симметрии и обуславливают «тонкую» структуру спектра ЭПР для спина S . Анализ показывает, что наиболее интенсивные линии в спектре ЭПР вызваны переходами между уровнями энергии с $m = \pm 3/2$. Использованное здесь обозначение m вместо S отражает тот факт, что в результате действия орторомбической одноионной анизотропии к исходным «чистым» волновым функциям двукратно вырожденного уровня с $S = \pm 3/2$ с разными весовыми коэффициентами примешиваются волновые функции остальных уровней с $S = \pm 1/2$ и $S = \pm 5/2$. В результате переходы между уровнями $m = \pm 3/2$ и $m = \pm 5/2$ становятся разрешенными. Линии малой интенсивности принадлежат переходам с $m = \pm 1/2$ и $m = \pm 5/2$. Наилучшая подгонка экспериментальных спектров ЭПР и их угловых зависимостей с помощью программы XSophe дает значения параметров, приведенных в табл. 3.

Красной линией на рис. 3 для спектра 1 показан теоретический одноионный спектр ЭПР, построенный с учетом найденных параметров спинового гамильтониана (1). Сплошными линиями красного цвета на рис. 4 показаны теоретические угловые зависимости резонансных полей одноионного спектра ЭПР, вычисленные с учетом параметров табл. 3. Во всех случаях наблюдается хорошее совпадение с экс-

периментальными результатами. На рис. 4б теоретические угловые зависимости (линии красного цвета) показаны только для одной из цепочек. Из анализа кристаллической структуры (рис. 5б) следует, что аналогичные угловые зависимости для другой цепочки должны быть сдвинуты на угол 62.6° относительно первой цепочки. В эксперименте этот угол оказался равным примерно 40° . Сравнение с экспериментальной угловой зависимостью для одной из линий большой интенсивности (светлые кружки) также показывает, что зависимости качественно совпадают, но амплитуда экспериментальной зависимости приблизительно в полтора раза превышает амплитуду теоретической зависимости. Возможно, эти расхождения объясняются неточностью ориентации образца. Полученные значения констант одноионной анизотропии нетипично высоки для иона Fe^{3+} , который в свободном состоянии является S -ионом. В подавляющем большинстве кристаллов величина константы D для этого иона не превышает $0.1\text{--}0.2 \text{ см}^{-1}$. Например, для Fe^{3+} в диамагнитном кристалле CaCO_3 , ближайшее окружение которого составляет кислородный октаэдр со слабыми тригональными искажениями, константа одноионной анизотропии равна $D = (0.0922 \pm 0.0003) \text{ см}^{-1}$ [13, 14]. В то же время сильные искажения кислородного окружения, включая кислородные вакансии, приводят к значительным величинам констант одноионной анизотропии D для этого иона, которые для ряда диамагнитных кристаллов варьируются в пределах $0.67\text{--}4.38 \text{ см}^{-1}$ [15–18]. Таким образом, сильная одноионная магнитная анизотропия иона Fe^{3+} в кристалле PbGaVO_4 также является следствием сильных искажений кислородного окружения иона в этом кристалле. Оценка одноионного вклада в энергию суммарной магнитной анизотропии магнитоконцентрированного кристалла может быть проведена в приближении классического коллинеарного магнетика с моментами, ориентированными вдоль орторомбических осей решетки PbFeVO_4 . При использовании значений параметров одноионной анизотропии, найденных из спектров ЭПР (табл. 3), получаем энергию на спин с точностью до аддитивной константы $E_a \approx -1.44 \cdot S^2 \text{ см}^{-1}$, $E_b \approx -1.19 \cdot S^2 \text{ см}^{-1}$, $E_c \approx -0.86 \cdot S^2 \text{ см}^{-1}$.

Таким образом, значения полученных параметров одноионной анизотропии определяют орторомбическую ось a как общую легкую ось, а ось c является наиболее трудной. Именно такие направления легкой и наиболее трудной осей формируются в ферромагнетике PbMnVO_4 [5]. В антиферромагнетике PbCrVO_4 ось a также является осью легкого намагничивания [3]. В то же время данные нейтронных и магнитных измерений [3, 4] показывают, что легкой осью анизотропии магнитоконцентрированного PbFeVO_4 является орторомбическая ось c . В работе [19] при описании спин-волнового спектра PbFeVO_4 учитывается магнитная анизотропия кристалла с макроскопической легкой осью анизотропии, также совпадающей с орторомбической осью c . Причиной такого несовпадения экспериментально установленной ориентации легкой оси анизотропии в PbFeVO_4 с направлением легкой оси для одноионного механизма может быть конкуренция с доминирующими двухионными механизмами анизотропии Fe–Fe-взаимодействий, которые определяют ось c как эффективную легкую ось в кристалле. Вполне вероятно, что в качестве такого двухионного доминирующего механизма может выступать анизотропное обменное взаимодействие, на такую возможность указывает анизотропия парамагнитной температуры Кюри в PbFeVO_4 [4].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выращены кристаллы диамагнитного аналога PbGaVO_4 , содержащие малое количество (около 0.5 ат.%) ионов Fe^{3+} , оптимальное для регистрации одноионного спектра ЭПР. Спектры ЭПР проанализированы с учетом кристаллической структуры, подтверждено существование четырех неэквивалентных по отношению к ориентации внешнего магнитного поля позиций ионов Fe^{3+} с различными направлениями локальных осей анизотропии. Вид спектров ЭПР и угловые зависимости резонансных полей определяются направлениями магнитного поля относительно локальных осей анизотропии, совпадающих с наиболее длинными диагоналями октаэдров из ионов кислорода, окружающих ионы Fe^{3+} . Показано, что наиболее интенсивные линии спектра ЭПР обусловлены переходами между уровнями с $m = \pm 3/2$, а линии малой интенсивности принадлежат переходам с $m = \pm 1/2$ и $m = \pm 5/2$. Экспериментальные данные проанализированы в рамках спинового гамильтониана, записанного в приближении локальной орторомбической симмет-

рии парамагнитного центра. Из подгонки экспериментальных спектров ЭПР и их угловых зависимостей определены параметры спинового гамильтониана. Величины найденных параметров одноионной анизотропии нетипично велики для иона Fe^{3+} и обусловлены сильными искажениями кислородного окружения ионов в решетке PbGaVO_4 . Оценка одноионного вклада в энергию суммарной магнитной анизотропии для магнитоконцентрированного антиферромагнетика PbFeVO_4 определяет орторомбическую ось a как общую легкую ось, а ось c является наиболее трудной. В то же время по экспериментальным данным установлено, что магнитная анизотропия этого кристалла характеризуется легкой осью, совпадающей с орторомбической осью c . Причиной такого несовпадения легких осей может быть конкуренция с доминирующими двухионными механизмами анизотропии Fe–Fe-взаимодействий, которые определяют ось c как эффективную легкую ось в кристалле.

Благодарности. Авторы благодарны М. С. Павловскому за измерение лауэграмм кристалла PbGaVO_4 .

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Красноярского края, Красноярского Краевого фонда науки (грант № 20-42-240006 «Синтез и исследование Pb^{2+} и Bi^{3+} , содержащих оксидных монокристаллов с частичным замещением по одной из подсистем: магнитные структуры и магнитодиэлектрический эффект»).

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Park and J. Barbier, *Acta Crystallogr. E* **57**, i82 (2001).
2. H. Park, J. Barbier, and R. P. Hammond, *Sol. State Sci.* **5**, 565 (2003).
3. H. Park, R. Lam, J. E. Greedan, and J. Barbier, *Chem. Mater.* **15**, 1703 (2003).
4. A. Pankrats, K. Sablina, D. Velikanov et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **353**, 23 (2014).
5. A. Pankrats, K. Sablina, M. Eremin et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **414**, 82 (2016).
6. A. Pankrats, M. Kolkov, S. Martynov et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **471**, 416 (2019).
7. A. Pankrats, M. Kolkov, A. Balaev et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **497**, 165997 (2020).

8. С. Н. Мартынов, ФТТ **62**, 1036 (2020).
9. С. Н. Мартынов, ФТТ **63**, 1090 (2021).
10. J. Head, P. Manuel, F. Orlandi et al., Chem. Mater. **32**, 10184 (2020).
11. M. Griffin, A. Muys, C. Noble et al., Mol. Phys. Rep. **26**, 60 (1999).
12. А. Абрагам, В. Блини, *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, Т. 2, Мир, Москва (1973).
13. J. Wakabayashi, J. Chem. Phys. **130**, 144 (1963).
14. В. А. Ацаркин, В. Г. Лушников, Л. П. Сорокина, ФТТ **7**, 2367 (1965).
15. D. L. Carter and A. Okaya, Phys. Rev. **118**, 1485 (1960).
16. H. Unoki and T. Sakudo, J. Phys. Soc. Jpn. **23**, 546 (1967).
17. E. S. Kirkpatrick, K. A. Muller, and R. S. Rubins, Phys. Rev. **135**, A86 (1964).
18. P. Eisenberger and P. S. Pershan, J. Chem. Phys. **45**, 2832 (1966).
19. M. A. Prosnikov, Phys. Rev. B **103**, 094443 (2021).

МАГНИТООПТИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР Q ДЛЯ СТРУКТУР С ОДНООСНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

О. А. Максимова ^{a,b*}, С. А. Лященко ^a, С. Н. Варнаков ^a, С. Г. Овчинников ^{a,b}

^a Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН»
660036, Красноярск, Россия

^b Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 29 июня 2021 г.,
после переработки 29 июня 2021 г.
Принята к публикации 1 июля 2021 г.

Работа посвящена развитию метода магнитооптической эллипсометрии на отражение. Решена обратная задача для структур с оптической одноосной анизотропией: найдены коэффициенты отражения для границы раздела внешняя среда–образец, получено аналитическое выражение для магнитооптического параметра, пропорционального намагниченности, позволяющее определить его исключительно по экспериментальным данным, измеряемым с помощью магнитооптической эллипсометрии. Представлен подробный алгоритм для проведения эксперимента по нахождению тензора диэлектрической проницаемости при экваториальной геометрии.

DOI: 10.31857/S0044451021110079

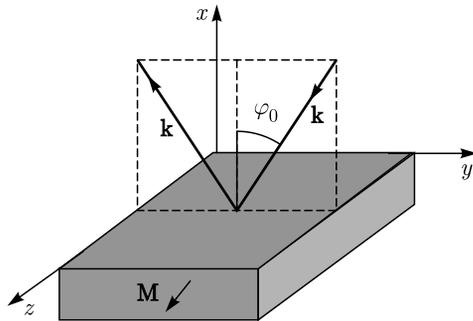
1. ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Магнитооптическая эллипсометрия (МЭ) одновременно обладает высокой чувствительностью к магнитному состоянию и оптическим свойствам отражающей поверхности. Этот метод широко используется и является очень удобным для контроля оптических, структурных, магнитных, магнитооптических (МО) свойств наноструктурированных материалов. По причине громоздкости математического аппарата МЭ, большинство измерений проводятся с целью простого анализа магнитных характеристик по полевым зависимостям эллипсометрических углов, либо рассмотрением простых изотропных и однородных сред. Однако многие материалы, особенно в пленочном и диспергированном состояниях, обладают зависимостью структуры от направления и, как следствие, имеют одноосную оптическую анизотропию. У таких материалов отличаются оптические свойства в плоскости пленки и перпендикулярно к ней [1, 2]. Примерами этих структур являются

фотонные кристаллы [3], полимерные пленки [4], ориентированные массивы углеродных нанотрубок [5, 6]. В последние годы также активно исследуются оптические свойства анизотропных двумерных систем MXenes [7, 8] и MAX-фаз [9–11] (*ab initio*-расчеты). Если рассматривать магнитооптические свойства такой структуры, то кроме уже имеющейся оптической анизотропии необходимо учитывать и вынужденную анизотропию [12], обусловленную приложением внешнего магнитного поля, что неизбежно усложняет расчет и анализ полного тензора диэлектрической проницаемости. Поэтому в литературе такому подходу пока уделяется мало внимания. Преимущественно это работы [13–15], основанные на формализме матриц 4×4 [16], который хорошо проработан для МЭ, но не всегда применим, так как для определения всех матричных элементов необходимо проводить измерения в разных геометриях, следовательно, вращать образец.

Мы разработали оригинальный метод определения всех компонент тензора диэлектрической проницаемости тонких магнитных слоев по данным МЭ-характеристики оптически изотропных объемных сред и многослойных структур [17–21], который заключается в сочетании классических эллипсомет-

* E-mail: maximo.a@mail.ru



Геометрия экваториального магнитооптического эффекта Керра

рических измерений эллипсометрических углов ψ_0 , Δ_0 без приложения внешнего магнитного поля и проведении эллипсометрических измерений при перемагничивании образца во внешнем магнитном поле (измерение $\delta\psi$, $\delta\Delta$) в экваториальной конфигурации. Эти измерения можно проводить при различных углах падения света и при разных длинах волн падающего излучения. Решение обратной задачи заключается в нахождении физических величин, таких как компоненты тензора диэлектрической проницаемости, по набору данных ψ_0 , Δ_0 , $\delta\psi$, $\delta\Delta$ посредством рассмотрения системы основных уравнений эллипсометрии:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(\psi_0) \exp(i\Delta_0) &= \frac{R_{p0}}{R_{s0}}, \\ \operatorname{tg}(\psi_0 + \delta\psi) \exp(i(\Delta_0 + \delta\Delta)) &= \frac{R_{p0} + R_{p1}}{R_{s0} + R_{s1}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где нижний индекс «0» — это индекс для измерений, проводимых без приложения внешнего магнитного поля, «1» — для измерений при приложении внешнего магнитного поля. Здесь индексы «s», «p» соответствуют s- и p-поляризации света.

В настоящей работе мы предлагаем расширить этот подход на магнитные оптически анизотропные материалы, а именно, для начала решить обратную задачу МЭ для полубесконечных структур с оптической одноосной анизотропией. Примерами подобных материалов являются толстые атомно-слоистые МАХ-пленки [22], столбчатые ферромагнитные пленки [23–25] и различные низкосимметричные магнитооптически-активные объемные кристаллы [26–28]. Новый подход позволяет получать информацию о МО-свойствах образца из МЭ-измерений без вращения образца и электромагнита, создающего внешнее магнитное поле.

Рассмотрим геометрию МЭ-измерений на отражение, соответствующую экваториальному магни-

тооптическому эффекту Керра (рисунок). При экваториальной конфигурации МО-эффекта Керра намагниченность лежит в плоскости образца. Выберем направление оси z традиционно [12, 17–22, 29, 30] параллельно направлению намагниченности. Таким образом, плоскость yz — граничная плоскость поверхности отражения, xy — плоскость падения света на образец.

В общем случае оптически анизотропных сред тензор диэлектрической проницаемости представляют [13, 14] следующим образом:

$$\varepsilon^{MO} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & -iQ_z M_z & -iQ_y M_y \\ iQ_z M_z & \varepsilon_y & -iQ_x M_x \\ iQ_y M_y & iQ_x M_x & \varepsilon_z \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где $Q = (Q_x, Q_y, Q_z)$ — магнитооптический параметр, не зависящий от намагниченности, а $M = (M_x, M_y, M_z)$ — намагниченность.

С другой стороны, есть традиция не выделять в компонентах тензора диэлектрической проницаемости отдельно намагниченность, а вместо этого считать Q пропорциональным намагниченности магнитооптическим параметром, именуемым также вектором Фохта [12, 29–34]. В этом случае для изотропных сред, когда все диагональные компоненты тензора равны и имеют некое значение ε_0 , недиагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости представляют собой произведение диагональной компоненты на компоненту вектора Фохта:

$$\varepsilon_{ij} = -i\varepsilon_0 Q_k, \quad (3)$$

где i, j, k принимают значение x, y, z . Из геометрии решаемой нами МЭ-задачи следует, что для оптической одноосной анизотропной полубесконечной ферромагнитной структуры коэффициенты преломления в плоскости yz одинаковы:

$$N_x \neq N_y = N_z, \quad (4)$$

что означает, что диагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости в плоскости образца также одинаковы:

$$\varepsilon_{xx} \neq \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz}. \quad (5)$$

Таким образом, принимая во внимание работы [12, 14], для случая одноосной анизотропии тензор диэлектрической проницаемости можно представить в виде

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & -i\varepsilon_{zz}Q & 0 \\ i\varepsilon_{zz}Q & \varepsilon_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

где $Q=Q_1-iQ_2$ — комплексный магнитооптический параметр, пропорциональный намагниченности, лежащей в плоскости пленки, $\varepsilon_{xx} = \varepsilon'_{xx} - i\varepsilon''_{xx}$, $\varepsilon_{zz} = \varepsilon'_{zz} - i\varepsilon''_{zz}$ (вещественные части обозначены одним штрихом, мнимые части — двумя). Квадратичные по намагниченности эффекты в данном случае не учитываются.

Для изотропных структур коэффициенты отражения, учитывающие магнитооптический отклик, хорошо известны [12, 29]:

$$R_s = \frac{N_0 \cos(\varphi_0) - N_1 \cos(\varphi_1)}{N_0 \cos(\varphi_0) + N_1 \cos(\varphi_1)}, \quad (7)$$

$$R_p = \frac{N_1 \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_1)}{N_1 \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_1)} - iQ \frac{N_0^2 \sin(2\varphi_0)}{(N_1 \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_1))^2}, \quad (8)$$

где N_0 — комплексный показатель преломления внешней среды, N_1 — комплексный показатель преломления ферромагнитного материала, φ_0 — угол падения света на образец. Эти выражения используются в основанном на матрицах Джонса методе определения компонент тензора диэлектрической проницаемости изотропных образцов, разработанном в работах [17–20].

Работать с анизотропными средами, продолжая использовать матрицы Джонса и коэффициенты Френеля, можно, когда выполняется условие равенства нулю недиагональных элементов матрицы Джонса коэффициентов отражения [35, 36]

$$r_{ps} = r_{sp} = 0. \quad (9)$$

В нашей геометрии выражение (9) справедливо, поскольку в случае одноосной оптической анизотропии объемного образца для его выполнения достаточно того, что оптическая ось параллельна или перпендикулярна плоскости падения света [35, 36].

Для анизотропных систем с выбранной нами геометрией (рисунок) получение коэффициентов отражения описано в работе [36]. Их можно представить в виде

$$r_{ss} = \frac{N_0 \cos(\varphi_0) - N_z \cos(\varphi_{ts})}{N_0 \cos(\varphi_0) + N_z \cos(\varphi_{ts})}, \quad (10)$$

$$r_{pp} = \frac{N_y \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_y \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})}, \quad (11)$$

где углы φ_{ts} и φ_{tp} — углы преломления, определяющиеся выражениями

$$\cos(\varphi_{ts}) = \frac{\sqrt{N_z^2 - N_0^2 \sin^2(\varphi_0)}}{N_z}, \quad (12)$$

$$\cos(\varphi_{tp}) = \frac{\sqrt{N_x^2 - N_0^2 \sin^2(\varphi_0)}}{N_x}. \quad (13)$$

В работе [36] сразу учтен знак минус в соотношении $N = n - ik$, что традиционно для представления коэффициента преломления в эллипсометрии и МЭ. В изотропном пределе $N_x = N_y = N_1$ из уравнений (10), (11) следуют стандартные коэффициенты Френеля [35].

Однако коэффициенты отражения (10), (11) в [36] не учитывают влияния внешнего магнитного поля, и их недостаточно для анализа магнитооптических свойств образца. Выражения, учитывающие магнитооптический отклик, нам и необходимо добавить к уже известным в литературе формулам для коэффициентов отражения анизотропных сред, связать с измеряемыми методом магнитооптической эллипсометрии параметрами и определить выражения для получения информации о магнитооптическом параметре $Q = Q_1 - iQ_2$ и о полном тензоре диэлектрической проницаемости (6).

2. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ОТРАЖЕНИЯ ДЛЯ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ВНЕШНЯЯ СРЕДА — ОПТИЧЕСКИ АНИЗОТРОПНЫЙ ОДНООСНЫЙ ОБЪЕМНЫЙ ОБРАЗЕЦ С УЧЕТОМ МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА

Для того чтобы учесть магнитооптический отклик в выражениях (10), (11), обратимся к тому, как он учитывался в работах Соколова и Кринчика [12, 29], где рассматривался случай границы раздела двух изотропных сред. Для учета экваториального МО-эффекта Керра (ТМОКЕ) при рассмотрении отражения на границе внешней среды с оптически анизотропным объемным образцом необходимо пройти те же шаги, что и при его учете на границе с изотропным образцом. Все выкладки ниже справедливы для видимого спектрального диапазона и проведены в предположении, что $\mu \approx \mu_0 \approx 1$, а магнитооптический параметр $Q \ll 1$ [12, 30, 32, 37].

Используем тензор (6) и решаем уравнения Максвелла со следующей связью между напряженностью и индукцией:

$$\begin{aligned} D_x &= \varepsilon_{xx} E_x - i\varepsilon_{zz} Q E_y, \\ D_y &= i\varepsilon_{zz} Q E_x + \varepsilon_{zz} E_y, \\ D_z &= \varepsilon_{zz} E_z. \end{aligned} \quad (14)$$

Решение ищем в виде плоской неоднородной волны, распространяющейся в магнитной среде:

$$E = E_0 \exp \left(i\omega \left(t - \frac{\alpha^* x + \beta^* y + \gamma^* z}{v^*} \right) \right), \quad (15)$$

где α^* , β^* , γ^* — направляющие косинусы, v^* — скорость распространения волны в среде. Тогда получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} E_x - i\varepsilon_{zz} Q E_y &= \\ &= N_x^2 [E_x - \alpha^* (\alpha^* E_x + \beta^* E_y + \gamma^* E_z)], \\ i\varepsilon_{zz} Q E_x + \varepsilon_{zz} E_y &= \\ &= N_y^2 [E_y - \beta^* (\alpha^* E_x + \beta^* E_y + \gamma^* E_z)], \\ \varepsilon_{zz} E_z &= \\ &= N_z^2 [E_z - \gamma^* (\alpha^* E_x + \beta^* E_y + \gamma^* E_z)]. \end{aligned} \quad (16)$$

В результате ряда преобразований (см. Приложение А) с учетом (4), (5) получим

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} Q \sin(\varphi_{tp})) E_x + \\ + (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} \sin(\varphi_{tp}) - i\varepsilon_{zz}^2 Q \cos(\varphi_{tp})) E_y = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

С учетом введенной нами системы координат граничные условия для s -поляризации:

$$E_{0is} + E_{0rs} = E_{d3} = E_{ts}, \quad (18)$$

$$N_0 \cos(\varphi_0) (E_{0is} - E_{0rs}) = N_z \cos(\varphi_{ts}) E_{ts}, \quad (19)$$

для p -поляризации:

$$\cos(\varphi_0) (E_{0ip} - E_{0rp}) = E_{d2}, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} N_0 (E_{0ip} + E_{0rp}) &= \\ &= N_y (\cos(\varphi_{tp}) E_{d2} - \sin(\varphi_{tp}) E_{d1}), \end{aligned} \quad (21)$$

где нижний индекс i при E соответствует падающей волне, r — отраженной, d — прошедшей в среду, E_{d1} , E_{d2} , E_{d3} — это соответственно x -, y -, z -компоненты амплитуды напряженности электрического поля прошедшей волны [12, 29].

Полученный коэффициент отражения $r_{ss \text{ ТМОКЕ}}$ полностью совпадает с коэффициентом

отражения для анизотропных сред в отсутствие внешнего магнитного поля (10):

$$r_{s \text{ ТМОКЕ}} = \frac{N_0 \cos(\varphi_0) - N_z \cos(\varphi_{ts})}{N_0 \cos(\varphi_0) + N_z \cos(\varphi_{ts})}, \quad (22)$$

соответственно, для s -поляризации влияние магнитного поля на коэффициент отражения при реализации экваториальной конфигурации МО-эффекта Керра отсутствует не только для изотропных систем, но и анизотропных тоже:

$$R_{s1} = 0. \quad (23)$$

Коэффициент отражения для p -поляризации при ТМОКЕ получаем из (20), (21), к которым добавлено выражение для условия связи между E_{d1} и E_{d2} (см. Приложение А):

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \frac{E_{0rp}}{E_{0ip}} = \frac{\cos(\varphi_0) - FN_0}{\cos(\varphi_0) + FN_0}, \quad (24)$$

где

$$F = \frac{\cos(\varphi_{tp}) + iQ \sin(\varphi_{tp})}{N_z (1 + i(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx})Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}))}. \quad (25)$$

Поскольку во время эксперимента для учета МО-вклада измеряются изменения эллипсометрических параметров, т. е. наблюдается изменение коэффициента отражения по сравнению с выражением (11), характеризующим поведение света в ситуации без приложения внешнего магнитного поля, то хотелось бы увидеть в явном виде изменение коэффициента отражения R_{p1} . Поэтому представим выражение (24) для $r_{pp \text{ ТМОКЕ}}$ в виде суммы r_{pp} без учета внешнего магнитного поля, т. е. выражения (11), и слагаемого, отвечающего за вклад экваториального МО-эффекта Керра (см. Приложение А). Таким образом, получаем коэффициент отражения для p -поляризации с учетом МО-отклика в геометрии экваториального МО-эффекта Керра:

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - iQ \frac{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))}{(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2}. \quad (26)$$

Из (26) можно получить выражение для коэффициента отражения для границы раздела с изотропным кристаллом при учете того, что $N_x = N_z = N_1$ и $\varphi_{tp} = \varphi_1$:

$$\begin{aligned} r_p &= \frac{N_1 \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_1)}{N_1 \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_1)} - \\ &- iQ \frac{2N_0 N_1 \sin(\varphi_1) \cos(\varphi_0)}{(N_1 \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_1))^2}. \end{aligned} \quad (27)$$

Воспользуемся законом Снелла

$$N_1 \sin(\varphi_1) = N_0 \sin(\varphi_0) \quad (28)$$

и тогда получаем известное выражение (8) для коэффициента отражения для p -поляризации на границе раздела двух изотропных сред [12, 38].

3. АНАЛИТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ПАРАМЕТРА Q

Как было показано нами в предыдущих работах по изучению МО-свойств изотропных структур [20, 39], в случае, когда вклад от магнитного поля в коэффициенты отражения мал, можно использовать в расчетах малые параметры как отношения магнитной к немагнитной частей коэффициента отражения для p -поляризации:

$$\alpha = R'_{p1}/R'_{p0}, \quad (29)$$

$$\beta = R''_{p1}/R''_{p0}, \quad (30)$$

где индекс «0» соответствует измерениям, проводимым в отсутствие внешнего магнитного поля, «1» —

при наличии внешнего магнитного поля (ТМОКЕ). Эти малые параметры связаны с измеряемыми эллипсометрическими (ψ_0, Δ_0) и магнитоэллипсометрическими ($\delta\psi, \delta\Delta$) параметрами следующим образом [20]:

$$\alpha \approx \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} + \frac{R''_{p0}}{R'_{p0}}\delta\Delta, \quad (31)$$

$$\beta \approx \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} - \frac{R'_{p0}}{R''_{p0}}\delta\Delta, \quad (32)$$

т.е. коэффициент отражения для p -поляризации можно записать следующим образом:

$$R_p = R_{p0} + R_{p1} = R'_{p0} - iR''_{p0} + R'_{p1} - iR''_{p1}, \quad (33)$$

$$R_{p0} = R'_{p0} - iR''_{p0}, \quad (34)$$

$$R_{p1} = R'_{p1} - iR''_{p1} = \alpha R'_{p0} - i\beta R''_{p0}. \quad (35)$$

Сопоставим выражения (34), (35) с полученным выше выражением (26)

$$R'_{p0} - iR''_{p0} = \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})}, \quad (36)$$

$$\alpha R'_{p0} - i\beta R''_{p0} = -iQ \frac{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))}{(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2}. \quad (37)$$

Учтем (31), (32) и выразим отсюда Q (см. Приложение В):

$$Q = \frac{N_0^2 \cos^2(\varphi_{tp}) - N_z^2 \cos^2(\varphi_0)}{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))} \left(\delta\Delta - i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} \right). \quad (38)$$

Таким образом, для одноосного анизотропного объемного кристалла можно аналитически рассчитать магнитооптический параметр по результатам МЭ-измерений, проведенных в экваториальной конфигурации МО-эффекта Керра.

Если в (37) положить, что $N_x = N_z = N_1$ и $\varphi_{tp} = \varphi_1$, полученное выражение (37) переходит в выражение

$$Q = \frac{N_0^2 \cos^2(\varphi_1) - N_1^2 \cos^2(\varphi_0)}{2N_0 N_1 \sin(\varphi_1) \cos(\varphi_0)} \times \left(\delta\Delta - i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} \right). \quad (39)$$

Воспользуемся законом Снелла (28) и получим выражение, полностью совпадающее со значением МО-параметра для изотропного кристалла [20]:

$$Q = \frac{N_0^2 \cos^2(\varphi_1) - N_1^2 \cos^2(\varphi_0)}{N_0^2 \sin(2\varphi_0)} \times \left(\delta\Delta - i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} \right). \quad (40)$$

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как следует из полученного выражения (37), для расчета всех компонент тензора диэлектрической проницаемости (6) достаточно иметь информацию об

- угле падения света φ_0 ,
- коэффициенте преломления внешней среды N_0 ,
- коэффициентах преломления анизотропной структуры в плоскости образца $N_y = N_z$ и перпендикулярно ей N_x ,

- эллипсометрическом параметре ψ_0 , измеряемом без приложения магнитного поля,
- магнитоэллипсометрических параметрах

$$\delta\psi = \psi(+H) - \psi(-H), \quad \delta\Delta = \Delta(+H) - \Delta(-H),$$

измеряемых в экваториальной конфигурации магнитооптического эффекта Керра, где $\pm H$ — внешнее магнитное поле на образце.

Экспериментальные подходы и математические инструменты для измерения коэффициентов преломления анизотропной пленки произвольной толщины (в том числе непрозрачной) методом эллипсометрии уже давно разработаны и не требуют дополнительных пояснений [40–42]. Реализация конкретного подхода может зависеть от условий эксперимента и имеющейся приборной базы экспериментатора.

Следует учитывать, что предлагаемый нами метод расчета Q ограничен не только особенностями модели однородной полубесконечной среды и геометрией экваториального МО-эффекта Керра, но также и условием малости МО-вклада в коэффициент отражения R_p для условия малости параметров α, β [20]. Последнее условие может быть нарушено при близости к углу Брюстера, особенно для слабопоглощающих образцов. Поэтому, на наш взгляд, наиболее надежен подход, представляющий многоугловые эллипсометрические измерения, из-за простоты оптической схемы и возможности избежать угол Брюстера. Образец обязан иметь гладкую отражающую поверхность, непрозрачную в используемом спектральном диапазоне, и насколько возможно тонкий неферромагнитный оксидный слой на поверхности. В этом случае можно представить алгоритм проведения магнитоэллипсометрического эксперимента в следующем виде.

1) Измеряем спектральные зависимости ψ_0, Δ_0 без магнитного поля для произвольного угла φ_0 . Вычисляем спектральную зависимость вещественной компоненты угла Брюстера для образца в приближении изотропной полубесконечной среды. Выбираем не менее двух углов падения φ_0 , которые доступны для установки на магнитоэллипсометре и не попадают на значения угла Брюстера в нужном спектральном диапазоне.

2) На одном из выбранных углов φ_0 измеряем полевые зависимости ψ_0, Δ_0 при фиксированной длине волны, соответствующей максимальной величине сигнал/шум магнитоэллипсометра.

3) По полевой зависимости ψ_0, Δ_0 выбираем оптимальные значения магнитного поля $\pm H$ для дальнейших спектральных магнитоэллипсометрических

измерений, т. е. если образец ферромагнитен, то величину H целесообразно выбрать из условия ферромагнитного насыщения образца.

4) Для заданного угла φ_0 измеряем спектральные зависимости ψ_0, Δ_0 размагниченного образца и изменения $\delta\psi, \delta\Delta$ при перемагничивании образца в полях $\pm H$;

5) Задаем второй выбранный угол падения φ_0 и измеряем спектральные зависимости ψ_0, Δ_0 размагниченного образца;

6) Для размагниченного состояния образца численными методами получаем комплексные величины N_x и $N_z = N_y$, из которых по (37) вычисляется Q .

Получив значения магнитооптического параметра Q и коэффициентов преломления N_x, N_y, N_z , можно рассчитать все компоненты тензора диэлектрической проницаемости (6).

5. ВЫВОДЫ

Таким образом, получены выражения для коэффициентов отражения для p - и s -поляризации для границы раздела внешней среды и образца с оптической одноосной анизотропией, учитывающие магнитооптический отклик при геометрии экваториального магнитооптического эффекта Керра. Аналитически рассчитан магнитооптический параметр Q для выбранной геометрии эксперимента. Показана схема проведения магнитоэллипсометрических измерений для получения всех компонент тензора диэлектрической проницаемости одноосного анизотропного материала, например, МАХ-фаз.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-12-00226, <http://rscf.ru/project/21-12-00226/>).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Ниже представлен вывод коэффициентов отражения на границе раздела внешней среды и объемной среды с одноосной оптической анизотропией и тензором диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & -i\varepsilon_{zz}Q & 0 \\ i\varepsilon_{zz}Q & \varepsilon_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Все выкладки ниже справедливы для видимого спектрального диапазона и проведены в предполо-

жении, что $\mu \approx \mu_0 \approx 1$, а магнитооптический параметр $Q \ll 1$ [12].

Ищем решение уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} D_x &= \varepsilon_{xx} E_x - i\varepsilon_{zz} Q E_y, \\ D_y &= i\varepsilon_{zz} Q E_x + \varepsilon_{zz} E_y, \\ D_z &= \varepsilon_{zz} E_z. \end{aligned} \quad (A.2)$$

в виде плоской неоднородной волны, распространяющейся в магнитной среде:

$$E = E_0 \exp\left(i\omega\left(t - \frac{\alpha^* x + \beta^* y + \gamma^* z}{v^*}\right)\right), \quad (A.3)$$

где α^* , β^* , γ^* — направляющие косинусы, v^* — скорость распространения волны в среде. Тогда получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} E_x - i\varepsilon_{zz} Q E_y &= \\ = N_x^2 [E_x - \alpha^* (\alpha^* E_x + \beta^* E_y + \gamma^* E_z)], \\ i\varepsilon_{zz} Q E_x + \varepsilon_{zz} E_y &= \\ = N_y^2 [E_y - \beta^* (\alpha^* E_x + \beta^* E_y + \gamma^* E_z)], \\ \varepsilon_{zz} E_z &= N_z^2 [E_z - \gamma^* (\alpha^* E_x + \beta^* E_y + \gamma^* E_z)]. \end{aligned} \quad (A.4)$$

Домножим строки системы (A.4) соответственно на $N_y^2 N_z^2 \alpha^*$, $N_z^2 N_x^2 \beta^*$, $N_x^2 N_y^2 \gamma^*$, просуммируем их и учтем, что $N_y = N_z$, $\varepsilon = N^2$, а направляющие косинусы $\alpha^* = \cos \varphi_{tp}$, $\beta^* = \sin \varphi_{tp}$, $\gamma^* = 0$. Тогда получим

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{xx} E_x - i\varepsilon_{zz} Q E_y) \cos(\varphi_{tp}) \varepsilon_{zz} + \\ + (i\varepsilon_{zz} Q E_x + \varepsilon_{zz} E_y) \sin(\varphi_{tp}) \varepsilon_{xx} = 0, \end{aligned} \quad (A.5)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} Q \sin(\varphi_{tp})) E_x + \\ + (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} \sin(\varphi_{tp}) - i\varepsilon_{zz}^2 Q \cos(\varphi_{tp})) E_y = 0. \end{aligned} \quad (A.6)$$

С учетом выбранной системы координат (см. рисунок) получаем граничные условия для s -поляризации:

$$E_{0is} + E_{0rs} = E_{d3} = E_{ts}, \quad (A.7)$$

$$N_0 \cos(\varphi_0) (E_{0is} - E_{0rs}) = N_z \cos(\varphi_{ts}) E_{ts}, \quad (A.8)$$

для p -поляризации:

$$\cos(\varphi_0) (E_{0ip} - E_{0rp}) = E_{d2}, \quad (A.9)$$

$$\begin{aligned} N_0 (E_{0ip} + E_{0rp}) = \\ = N_y (\cos(\varphi_{tp}) E_{d2} - \sin(\varphi_{tp}) E_{d1}), \end{aligned} \quad (A.10)$$

где нижний индекс i при E соответствует падающей волне, r — отраженной, d — прошедшей в среду, E_{d1} , E_{d2} , E_{d3} — это соответственно x -, y - и z -компоненты амплитуды напряженности электрического поля прошедшей волны [12, 29].

Для s -поляризации коэффициент отражения при реализации экваториальной конфигурации МО-эффекта Керра (ТМОКЕ) имеет вид

$$r_{ss \text{ ТМОКЕ}} = \frac{N_0 \cos(\varphi_0) - N_z \cos(\varphi_{ts})}{N_0 \cos(\varphi_0) + N_z \cos(\varphi_{ts})}, \quad (A.11)$$

Коэффициент отражения для p -поляризации при ТМОКЕ получаем из (A.9), (A.10), к которым необходимо добавить еще условие связи между E_{d1} и E_{d2} . Искомое соотношение можно получить из (A.6):

$$E_{d2} = \frac{(\varepsilon_{xx} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} Q \sin(\varphi_{tp})) E_{d1}}{i\varepsilon_{zz} Q \cos(\varphi_{tp}) - \varepsilon_{xx} \sin(\varphi_{tp})}, \quad (A.12)$$

Соответственно, решаем систему трех уравнений:

$$\begin{aligned} E_{d2} &= \frac{(\varepsilon_{xx} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} Q \sin(\varphi_{tp})) E_{d1}}{i\varepsilon_{zz} Q \cos(\varphi_{tp}) - \varepsilon_{xx} \sin(\varphi_{tp})}, \\ \cos(\varphi_0) (E_{0ip} - E_{0rp}) &= E_{d2}, \\ N_0 (E_{0ip} + E_{0rp}) &= N_y (\cos(\varphi_{tp}) E_{d2} - \\ &\quad - \sin(\varphi_{tp}) E_{d1}). \end{aligned} \quad (A.13)$$

Выразим E_{d1} из первого уравнения системы (A.13) и подставим в третье:

$$N_0 E_{0ip} + N_0 E_{0rp} = N_y E_{d2} \left(\cos(\varphi_{tp}) - \sin(\varphi_{tp}) \frac{i\varepsilon_{zz} Q \cos(\varphi_{tp}) - \varepsilon_{xx} \sin(\varphi_{tp})}{\varepsilon_{xx} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} Q \sin(\varphi_{tp})} \right). \quad (A.14)$$

Отсюда получаем выражение для E_{d2} :

$$E_{d2} = \frac{(N_0 E_{0ip} + N_0 E_{0rp}) (\varepsilon_{xx} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} Q \sin(\varphi_{tp}))}{N_y \varepsilon_{xx} + i N_y Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}) (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})}. \quad (A.15)$$

Теперь приравняем полученное выражение (A.15) к левой части второго уравнения в системе (A.13):

$$\cos(\varphi_0)(E_{0ip} - E_{0rp}) = \frac{(N_0 E_{0ip} + N_0 E_{0rp})(\varepsilon_{xx} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} Q \sin(\varphi_{tp}))}{N_y \varepsilon_{xx} + iN_y Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp})(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})}. \quad (A.16)$$

Поскольку нам необходимо получить выражение для коэффициента отражения $r_p = E_{0rp}/E_{0ip}$, удобно ввести обозначение

$$F = \frac{\varepsilon_{xx} \cos(\varphi_{tp}) + i\varepsilon_{xx} Q \sin(\varphi_{tp})}{N_y \varepsilon_{xx} + iN_y Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp})(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})}. \quad (A.17)$$

Учтем, что $N_y = N_z$, поделим числитель и знаменатель F на ε_{xx} :

$$F = \frac{\cos(\varphi_{tp}) + iQ \sin(\varphi_{tp})}{N_z(1 + i(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx})Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}))}. \quad (A.18)$$

Выражение (A.16) примет вид

$$E_{0ip} \cos(\varphi_0) - E_{0rp} \cos(\varphi_0) = FN_0 E_{0ip} + FN_0 E_{0rp}, \quad (A.19)$$

$$E_{0ip}(\cos(\varphi_0) - FN_0) = E_{0rp}(\cos(\varphi_0) + FN_0). \quad (A.20)$$

Таким образом, коэффициент отражения для p -поляризации равен

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \frac{E_{0rp}}{E_{0ip}} = \frac{\cos(\varphi_0) - FN_0}{\cos(\varphi_0) + FN_0}. \quad (A.21)$$

Выделим в (A.21) два слагаемых, R_{p0} и R_{p1} , где немагнитное слагаемое R_{p0} определяется выражением (11), а R_{p1} отвечает за вклад ТМОКЕ:

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \left(\cos(\varphi_0) - \frac{N_0}{N_z} \frac{\cos(\varphi_{tp}) + iQ \sin(\varphi_{tp})}{1 + i(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx})Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp})} \right) / \left(\cos(\varphi_0) + \frac{N_0}{N_z} \frac{\cos(\varphi_{tp}) + iQ \sin(\varphi_{tp})}{1 + i(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx})Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp})} \right). \quad (A.22)$$

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \left[N_z \cos(\varphi_0) \left(1 + i \left(1 - \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} \right) Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}) \right) - N_0 \cos(\varphi_{tp}) - iN_0 Q \sin(\varphi_{tp}) \right] / \left[N_z \cos(\varphi_0) \left(1 + i \left(1 - \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} \right) Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}) \right) + N_0 \cos(\varphi_{tp}) + iN_0 Q \sin(\varphi_{tp}) \right], \quad (A.23)$$

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \left[N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp}) + i \left(1 - \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} \right) Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) - iN_0 Q \sin(\varphi_{tp}) \right] / \left[N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}) + i(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) Q \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) + iN_0 Q \sin(\varphi_{tp}) \right], \quad (A.24)$$

$$r_{pp \text{ ТМОКЕ}} = \left[(N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})) - iQ \sin(\varphi_{tp})(N_0 - \left(1 - \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} \right) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0)) \right] / \left[(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})) \left(1 + iQ \sin(\varphi_{tp}) \frac{(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) + N_0}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} \right) \right]. \quad (A.25)$$

Домножим числитель и знаменатель выражения (A.25) на комплексно-сопряженное второму множителю знаменателя, а именно на

$$\left(1 - iQ \sin(\varphi_{tp}) \frac{(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) + N_0}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} \right),$$

после чего, поскольку магнитооптический параметр $Q \ll 1$, пренебрежем слагаемыми, пропорциональными Q^2 и более высоким степеням Q в виду малости:

$$r_{pp\ TMOKE} = \left[\frac{(N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp}))}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - \frac{iQ \sin(\varphi_{tp}) (N_0 - (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0))}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} \right] \times \\ \times \left(1 - iQ \sin(\varphi_{tp}) \frac{(1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) + N_0}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} \right), \quad (A.26)$$

$$r_{pp\ TMOKE} = \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - \frac{iQ \sin(\varphi_{tp}) (N_0 - (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0))}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - \\ - \frac{iQ \sin(\varphi_{tp}) (N_0 + (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0))}{(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2} (N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})), \quad (A.27)$$

Таким образом, мы выделили уже первое слагаемое, которое, как и ожидалось, равно выражению (11). Преобразуем вид второго и третьего слагаемых:

$$r_{p\ TMOKE} = \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - \frac{iQ \sin(\varphi_{tp})}{(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2} \times \\ \times \left(\left(N_0 - \left(1 - \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} \right) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) \right) (N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})) + (N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})) \times \right. \\ \left. \times \left(N_0 + \left(1 - \frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} \right) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0) \right) \right). \quad (A.28)$$

Рассмотрим отдельно выражение в скобке второго слагаемого, обозначим его буквой A

$$A = (N_0 - (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0)) (N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})) + (N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})) \times \\ \times (N_0 + (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) N_z \cos(\varphi_0)). \quad (A.29)$$

Раскроем скобки:

$$A = N_0 N_z \cos(\varphi_0) - N_z^2 (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) \cos^2(\varphi_0) + N_0^2 \cos(\varphi_{tp}) - N_0 N_z (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_0) \cos^2(\varphi_{tp}) + \\ + N_0 N_z \cos(\varphi_0) + N_z^2 (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_{tp}) \cos^2(\varphi_0) - \\ - N_0^2 \cos(\varphi_{tp}) - N_0 N_z (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos(\varphi_0) \cos^2(\varphi_{tp}), \quad (A.30)$$

$$A = 2N_0 N_z \cos(\varphi_0) (1 - (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos^2(\varphi_{tp})). \quad (A.31)$$

В итоге выражение (A.28) принимает форму

$$r_{pp\ TMOKE} = \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - iQ \frac{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - \varepsilon_{zz}/\varepsilon_{xx}) \cos^2(\varphi_{tp}))}{(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2}, \quad (A.32)$$

где первое слагаемое это R_{p0} , а второе — R_{p1} .

Таким образом, получаем коэффициент отражения для p -поляризации с учетом МО-отклика при геометрии ТМОКЕ:

$$r_{pp\ TMOKE} = \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} - iQ \frac{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))}{(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2}. \quad (A.33)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Ниже представлен вывод выражения для МО-параметра Q из системы уравнений (36). Из второго уравнения мы получаем

$$Q = \frac{(i\alpha R'_{p0} + \beta R''_{p0})(N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2}{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))}. \quad (\text{B.1})$$

Распишем первый множитель в числителе (B.1) с учетом выражений для малых параметров α и β (31), (32):

$$\beta R''_{p0} + i\alpha R'_{p0} = \left(\frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} - \frac{R'_{p0}}{R''_{p0}} \delta\Delta \right) R''_{p0} + i \left(\frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} + \frac{R''_{p0}}{R'_{p0}} \delta\Delta \right) R'_{p0}. \quad (\text{B.2})$$

Раскроем скобки и приведем подобные:

$$\begin{aligned} \beta R''_{p0} + i\alpha R'_{p0} &= \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} R''_{p0} - R'_{p0} \delta\Delta + i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} R'_{p0} + i R''_{p0} \delta\Delta = \\ &= \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} (R''_{p0} + i R'_{p0}) - \delta\Delta (R'_{p0} + i R''_{p0}) = R_{p0} \left(i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} - \delta\Delta \right). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Тогда магнитооптический параметр приобретает вид

$$Q = R_{p0} \left(i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} - \delta\Delta \right) (N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2 / \left(2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) \left(1 - \left(1 - \frac{N_z^2}{N_x^2} \right) \cos^2(\varphi_{tp}) \right) \right). \quad (\text{B.4})$$

Подставляем значение R_{p0} из (36)

$$\begin{aligned} Q &= \frac{N_z \cos(\varphi_0) - N_0 \cos(\varphi_{tp})}{N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp})} \left(i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} - \delta\Delta \right) (N_z \cos(\varphi_0) + N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2 / \\ &\quad / \left(2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) \left(1 - \left(1 - \frac{N_z^2}{N_x^2} \right) \cos^2(\varphi_{tp}) \right) \right) = \\ &= \frac{(N_z \cos(\varphi_0))^2 - (N_0 \cos(\varphi_{tp}))^2}{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))} \left(i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} - \delta\Delta \right). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Отсюда получаем выражение для расчета магнитооптического параметра для одноосного анизотропного объемного кристалла:

$$Q = \frac{N_0^2 \cos^2(\varphi_{tp}) - N_z^2 \cos^2(\varphi_0)}{2N_0 N_z \sin(\varphi_{tp}) \cos(\varphi_0) (1 - (1 - N_z^2/N_x^2) \cos^2(\varphi_{tp}))} \left(\delta\Delta - i \frac{\delta\psi(1 + \text{tg}^2(\psi_0))}{\text{tg}(\psi_0)} \right). \quad (\text{B.6})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Schopper, *Z. Physik* **132**, 146 (1952).
2. T. Yamaguchi, S. Yoshida, and A. Kinbara, *J. Opt. Soc. Amer.* **62**, 634 (1972).
3. J. Gomis-Bresco, D. Artigas, and L. Torner, *Nat. Photon.* **11**, 232 (2017).
4. M. Losurdo, G. Bruno, and E. A. Irene, *J. Appl. Phys.* **94**, 4923 (2003).
5. K. Bubke, H. Gnewuch, M. Hempstead et al., *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1906 (1997).
6. Y. Murakami, Sh. Chiashi, Y. Miyauchi et al., *Chem. Phys. Lett.* **385**, 298 (2004).

7. K. Chaudhuri, Z. Wang, M. Alhabeab et al., *2D Metal Carbides and Nitrides (MXenes)*, ed. by B. Anasori and Y. Gogotsi, Springer, Cham. (2019), p. 327.
8. K. Hantanasirisakul and Y. Gogotsi, *Adv. Mater.* **30**, 1804779 (2018).
9. Y. Mo, P. Rulis, and W. Y. Ching, *Phys. Rev. B* **86**, 165122 (2012).
10. X.H. Li, H.L. Cui, and R.Z. Zhang, *Front. Phys.* **13**, 136501 (2018).
11. A. Chowdhury, M. A. Ali, M. M. Hossain, M. M. Uddin, S. H. Naqib, and A. K. M. A. Islam, *Phys. Stat. Sol. B* **255**, 1700235 (2018).
12. А. В. Соколов, *Оптические свойства металлов*, ГИФМЛ, Москва (1961).
13. K. Mok, G. J. Kovács, J. McCord et al., *Phys. Rev. B* **84**, 094413 (2011).
14. K. Mok, C. Scarlat, G. J. Kovács et al., *J. Appl. Phys.* **110**, 123110 (2011).
15. D. Schmidt, C. Briley, E. Schubert et al., *Appl. Phys. Lett.* **102**, 123109 (2013).
16. P. Yeh, *Surface Science* **96**, 41 (1980).
17. O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, S. N. Varnakov et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **440**, 196 (2017).
18. O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, S. N. Varnakov et al., *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **155**, 012030 (2017).
19. O. A. Maximova, S. A. Lyaschenko, S. N. Varnakov et al., *Defect and Diffusion Forum* **386**, 131 (2018).
20. O. Maximova, S. Ovchinnikov, and S. Lyaschenko, *J. Phys. A: Math. Theor.* **54**, 295201 (2021).
21. О. А. Максимова, С. А. Лященко, М. А. Высотин и др., *Письма в ЖЭТФ* **110**, 155 (2019).
22. S. Lyaschenko, O. Maximova, D. Shevtsov et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **528**, 167803 (2021).
23. Sh. Zhu, X. Tang, R. Wei et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **484**, 95 (2019).
24. S. Y. Wu, H. X. Liu, Lin Gu et al., *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3047 (2003).
25. T. C. Chuang, C. F. Pai, and S. Y. Huang, *Phys. Rev. Appl.* **11**, 061005 (2019).
26. Н. Б. Иванова, Н. В. Казак, Ю. В. Князев и др., *ЖЭТФ* **140**, 1160 (2011).
27. J. Bartolomé, A. Arauzo, N. V. Kazak et al., *Phys. Rev. B* **83**, 144426 (2011).
28. И. И. Назаренко, *Структура, магнитные свойства оксидов переходных металлов со структурой котоита и людвига*, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск (2019).
29. Г. С. Кринчик, *Физика магнитных явлений*, Изд-во МГУ, Москва (1976).
30. А. Н. Калиш, *Магнитооптические эффекты в периодических наноструктурированных средах*, Дисс. канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (2013).
31. T. Haider, *Int. J. Electromagn. Appl.* **7**, 17 (2017).
32. V. I. Belotelov and A. K. Zvezdin, *J. Opt. Soc. Amer. B* **22**, 286 (2005).
33. K. W. Wierman, J. N. Hilfiker, R. F. Sabiryanov et al., *Phys. Rev. B* **55**, 3093 (1997).
34. R. Rauer, G. Neuber, J. Kunze et al., *Rev. Sci. Instr.* **76**, 023910 (2005).
35. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light*, North-Holland Pub. Co., Amsterdam (1977).
36. H. Fujiwara, *Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications*, John Wiley & Sons Ltd., Chichester (2007).
37. В. И. Белотелов, *Плазмонные гетероструктуры и фотонные кристаллы с перестраиваемыми оптическими свойствами*, Дисс. ... докт. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (2012).
38. А. В. Малаховский, *Избранные вопросы оптики и магнитооптики соединений переходных элементов*, Наука, Сибирское отделение, Новосибирск (1992).
39. О. А. Максимова, *Оптические и магнитооптические свойства магнитных наноструктур по данным in situ спектральной магнитооптической эллипсометрии*, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск (2020).
40. D. den Engelsen, *J. Opt. Soc. Amer.* **61**, 1460 (1971).
41. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *J. Opt. Soc. Amer.* **64**, 128 (1974).
42. T. Wagner, J. N. Hilfiker, T. E. Tiwald et al., *Phys. Stat. Sol. A* **188**, 1553 (2001).

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ФРУСТРИРОВАННЫХ КОБАЛЬТИТАХ $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ ($x = 0-0.06$) ПРИ НЕБОЛЬШОМ ОТКЛОНЕНИИ ОТ СТЕХИОМЕТРИИ

З. А. Казей*, В. В. Снегирев, М. С. Столяренко

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119992, Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2021 г.,
после переработки 19 июля 2021 г.
Принята к публикации 20 июля 2021 г.

Проведены экспериментальные исследования структурных (метрики решетки) и упругих характеристик в области структурного и магнитного фазовых переходов в кобальтитах $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ с различной термообработкой, отличающихся небольшим избытком кислорода x . Обнаружено, что для отожженного в вакууме стехиометрического образца $\text{ErBaCo}_4\text{O}_7$ при структурном переходе параметр $\Delta a/a$ особенности не обнаруживает, параметры b и c испытывают скачки разного знака и разной величины $\Delta b/b \approx 4 \cdot 10^{-3}$ и $\Delta c/c \approx -5 \cdot 10^{-3}$. Это приводит к скачку анизотропной (ромбической) $\varepsilon_o \approx -4 \cdot 10^{-3}$ и изотропной (объемной) $\Delta V/V \approx -1 \cdot 10^{-3}$ деформаций. При незначительном отклонении от стехиометрии по кислороду меняются характер искажения структуры, а именно величина анизотропной и знак изотропной деформации. Искажение структуры в стехиометрическом образце сопровождается резким скачком модуля Юнга, порядка $8 \cdot 10^{-2}$, а в слабостехиометрических образцах с $x \approx 0.03$ упругие аномалии в области T_S на порядок уменьшаются. Сравнение упругих аномалий в области температуры магнитного фазового перехода T_N для искаженных образцов с разным отклонением от стехиометрии свидетельствует, что на установление дальнего магнитного порядка в кобальтовой подсистеме влияет, по-видимому, не только искажение структуры, но и наличие беспорядка, вносимого нестехиометрическим кислородом.

DOI: 10.31857/S0044451021110080

1. ВВЕДЕНИЕ

Соединения сложного состава, имеющие несколько взаимосвязанных подсистем при наличии беспорядка различного типа, являются в настоящее время наиболее активно исследуемыми объектами в физике твердого тела. Подобные соединения позволяют изучать фундаментальные проблемы физики твердого тела и магнетизма, такие как нетривиальные основные состояния, эффекты ближнего порядка, а также сложные магнитные структуры, спонтанные и индуцированные фазовые переходы различной природы. К таким магнетикам сложного состава относятся редкоземельные (РЗ) кобальтиты $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ (R — редкоземельный ион, Ca , Y), которые демонстрируют необычное магнитное поведение, обусловленное фрустрацией обменных

взаимодействий и переменной валентностью в кобальтовой подсистеме [1–6].

Слоистые кобальтиты $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$, образующиеся кроме ионов Y и Ca также тяжелыми РЗ-ионами, начиная с Tb , имеют взаимодействующие $3d$ -кобальтовую и $4f$ -редкоземельную магнитные подсистемы. Стехиометрические соединения с трехвалентным ионом R^{3+} содержат ионы кобальта смешанной валентности Co^{2+} и Co^{3+} в соотношении 3:1, которые распределены в структуре неупорядоченно по двум типам тетраэдрических позиций. Соотношение разновалентных ионов $\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$ в кобальтовой подсистеме можно варьировать с помощью неизовалентного замещения $\text{R}^{3+} \rightarrow \text{Ca}^{2+}$ или $\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+} \rightarrow \text{Zn}^{2+}/\text{Al}^{3+}$, а также изменением содержания кислорода ($7+x$). Это дает возможность изучать влияние средней валентности в Co -подсистеме на фазовые переходы и физические свойства этих фрустрированных соединений.

Кристаллическая структура РЗ-кобальтитов при высоких температурах описывается гексагональной

* E-mail: kazei@plms.phys.msu.ru

$R\bar{6}3mc$ (или тригональной $P\bar{3}1c$) пространственной группой [7–11]. В каркасной кристаллической структуре тетраэдры CoO_4 , объединенные общими углами, образуют упакованные поочередно вдоль оси c треугольные слои и слои Кагоме. Более крупные октаэдрические и кубооктаэдрические позиции в трехмерной тетраэдрической сетке занимают катионы соответственно R^{3+} и Ba^{2+} . Двумерная решетка Кагоме, состоящая из соединенных углами треугольников, хорошо известна как мотив структуры, приводящей к геометрической фрустрации.

Для изолированного треугольника из трех спинов с одинаковыми по модулю отрицательными константами взаимодействия J_{ij} для ближайших соседей фрустрации приводили бы к неколлинеарной 120-градусной конфигурации спинов. В бесконечной плоской сетке из связанных треугольников фрустрации в магнитной системе приводят к вырожденному основному состоянию и отсутствию дальнего магнитного порядка даже при значительных константах обменного взаимодействия [12]. Искажение кристаллической структуры, так же как различные слабые взаимодействия, способны частично или полностью снять фрустрации и привести к появлению дальнего магнитного порядка [13].

Y-кобальтит, содержащий один тип магнитных ионов, позволяет изучать поведение фрустрированной Co-подсистемы. При $T_S = 313$ К он испытывает структурный переход, приводящий к понижению симметрии от гексагональной до орторомбической (пространственная группа $Pbn2_1$; $a_o \approx a_h$, $b_o \approx \sqrt{3}a_h$). Этот переход первого рода сопровождается аномалиями упругих, магнитных и транспортных свойств. Поскольку за счет структурного перехода геометрические фрустрации снимаются, в YBaCo_4O_7 наблюдается сначала появление ближнего магнитного порядка в Co-подсистеме, а затем ниже $T_N \approx 110$ К — трехмерного антиферромагнитного упорядочения [1] с понижением симметрии до моноклинной $P112_1$ [12, 14]. При дальнейшем понижении температуры наблюдается еще один магнитный фазовый переход при $T_{N2} \sim 70$ К [15], который обусловлен спиновой переориентацией в Co-подсистеме [12].

О величине обменного взаимодействия в кобальтовой подсистеме этого семейства можно судить по значению парамагнитной температуры $\theta_{CW} = -508$ К в законе Кюри–Вейсса для магнитной восприимчивости YBaCo_4O_7 [1]. Из-за фрустрированности обменных взаимодействий дальний магнитный порядок, однако, устанавливается при существенно более низкой температуре

$T_N \sim 110$ К и характеризуется сложной неколлинеарной магнитной структурой [1, 12]. В магнитной структуре ромбического Y-кобальтита можно выделить цепочки, упорядоченные антиферромагнитно вдоль ромбических осей a и b так, что результирующий момент в ячейке скомпенсирован. Волновой вектор магнитной структуры $\mathbf{k} = 0$, магнитная ячейка совпадает с кристаллографической.

Для других кобальтитов с магнитными R3-ионами кристаллическая структура при высоких температурах также описывается гексагональной пространственной группой $R\bar{6}3mc$ и обнаруживает небольшое искажение, происходящее в виде фазового перехода, приводящего к аномалиям физических свойств [16–19]. При уменьшении радиуса R3-иона устойчивость структуры увеличивается, а критическая температура структурного перехода T_S монотонно понижается. Это искажение структуры при фазовом переходе в R3-кобальтитах снимает фрустрацию обменных взаимодействий, что сказывается на магнитных фазовых переходах в Co-подсистеме при $T_N < T_S$ [13, 20]. Надежные данные о магнитной структуре кобальтитов с магнитными R3-ионами в литературе отсутствуют.

В фрустрированных и низкоразмерных системах на установление дальнего магнитного порядка существенно влияют различные слабые взаимодействия и возмущения, такие как небольшое искажение структуры, магнитная анизотропия, беспорядок различной природы и др. Небольшое искажение структуры в стехиометрических R3-кобальтитах снимает фрустрацию обменных взаимодействий, что благоприятствует развитию дальнего магнитного порядка в Co-подсистеме ниже T_S [13, 20]. Структуры нестехиометрических соединений остаются неискаженными, и фрустрации в системе сохраняются. Как следствие, при понижении температуры постепенно развивается ближний магнитный порядок, для которого длина корреляции не достигает размеров кристаллитов. Таким образом, характер фазовых переходов и различные физические свойства в слоистых кобальтитах $\text{R}\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$ в очень сильной степени зависят как от искажения структуры, определяемого избытком кислорода, так, по-видимому, и от магнитной анизотропии R3-подсистемы. Использование в экспериментах образцов с различным содержанием кислорода объясняет, на наш взгляд, противоречивые данные о магнитной конфигурации, основном состоянии, температурах и особенностях структурных и магнитных фазовых переходов в литературе [1].

Структура слоистого кобальтита изучена достаточно подробно в гексагональной фазе и значительно меньше в искаженной орторомбической фазе. При этом характер изменения параметров решетки (метрика решетки) при структурном переходе, а также его изменение при отклонении от стехиометрии практически не исследованы. Влияние искажения структуры на поведение фрустрированной Со-подсистемы исследовалось для серии Y-кобальтитов с небольшим отклонением от стехиометрии [21]. В частности, было обнаружено, что упругие свойства слоистых кобальтитов $\text{YBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ в очень сильной степени зависят от избытка кислорода. Представляет интерес, на наш взгляд, исследование слоистых кобальтитов с магнитными РЗ-ионами, дающими большой вклад в магнитную анизотропию. В настоящей работе исследуется влияние небольшого контролируемого отклонения от стехиометрии по кислороду на структурные и магнитные фазовые переходы, а также на структурные и упругие характеристики в слоистых кобальтитах $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ с различной термообработкой.

2. ОБРАЗЦЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ТЕХНИКА

Исследования структурных и упругих характеристик проводились на поликристаллических образцах $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ ($x = 0-0.06$), синтезированных по керамической технологии. Для твердофазного синтеза на воздухе использовались оксиды Er_2O_3 (ИтО-МГр.), Co_3O_4 (99.7%, Alfa-Aesar) и карбонат BaCO_3 (ос. ч.), предварительно отожженные при температурах соответственно 800 °С, 700 °С и 400 °С. Синтез проводился в три стадии при температурах 900, 1000 и 1100 °С (время отжига при каждой температуре 20 ч) с закалкой в конце отжига и промежуточным перетиранием. Перед последним отжигом при $T = 1100$ °С порошок прессовался в таблетки диаметром 15 мм и толщиной 3 мм (см. детали в работе [22]). Для получения требуемого содержания кислорода и его однородного распределения по объему образцы керамики подвергались дополнительной термообработке, которая имеет свою специфику для слоистых кобальтитов [23].

Известно, что в образцах кобальтитов с различными РЗ-ионами содержание кислорода зависит от особенностей термообработки и, вообще говоря, от

типа РЗ-иона. После синтеза и закалки от температуры 900–950 °С керамики $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ с ионами от Dy до Er имеют, как правило, избыток кислорода $x \sim 0.05-0.10$ в зависимости от морфологии керамики и параметров термообработки. Для получения образцов с заданным отклонением от стехиометрии, в том числе с $x = 0$, требуется дополнительная термообработка.

Ступенчатая зависимость равновесного содержания кислорода $x_{eq}(T)$ от температуры для семейства $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ [23] не позволяет получать требуемые значения x отжигом при заданных значениях температуры и парциального давления кислорода. Промежуточные составы $\text{RBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ с различным избытком кислорода x и однородным его распределением по объему удается получить, используя зависимость x от времени отжига в течение нескольких суток на воздухе при $T = 210$ °С, при которой вхождение кислорода лимитируется поверхностным обменом. В случае $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ закаленный образец Q имел небольшой избыток кислорода $x \approx 0.06$, а для получения кислорода $x = 0$ образец A отжигался в вакууме при $T = 500$ °С [22]. Исследовался также образец T с $x \approx 0.03$, который был получен при небольшой дополнительной термообработке образца A — отжигу на воздухе при $t_{tr} \sim 150$ °С в течение 12 ч.

Содержание кислорода в образцах определялось йодометрическим титрованием на оригинальной автоматизированной установке, управляемой компьютерной программой. Йодометрическое титрование основано на растворении образца в растворе кислоты и последующем восстановлении высоковалентного кобальта Co^{3+} соответствующим восстановителем [24]. Для каждого образца было проведено два-три последовательных эксперимента, при которых примерно 30 мг исследуемого образца растворялись в 1.5 М растворе HCl , содержащем избыток KI . Восстановление высоковалентных ионов Co^{3+} образца до ионов Co^{2+} приводило к образованию в растворе стехиометрического количества йода, который титровался 0.02 М раствором $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$, дозируемым электронной поршневой бюреткой. Конечная точка титрования (точка эквивалентности) определялась по скачку потенциала в процессе химической реакции при измерении ЭДС обратимого гальванического элемента. ЭДС элемента, состоящего из индикаторного электрода (платиновый электрод) и электрода сравнения (каломельный электрод с двойным солевым мостиком), погруженных в исследуемый

раствор, измерялась электрометрическим вольтметром с высоким входным сопротивлением. Автоматизированная установка позволяла надежно регистрировать точку эквивалентности и, соответственно, обеспечивала относительную точность определения избытка кислорода $\Delta x = 0.003$.

Рентгенографические исследования при комнатной температуре проводились на дифрактометре Stoe с монохроматором на первичном пучке ($K_{\alpha 1}$ -излучение Co). Температурные рентгеновские измерения проводились на дифрактометре «Гейгерфлекс» (Япония) на $K_{\alpha 1, \alpha 2}$ -излучении Co без монохроматора с низкотемпературной камерой “Oxford_Instruments” (Англия), позволяющей получать и поддерживать температуру с точностью 0.5 К в интервале (77–300) К. Все линии на рентгенограммах исследуемых образцов $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ (A, Q, T) при комнатной температуре индиферировались в рамках гексагональной структуры (образцы содержали небольшое количество, порядка 1–3% оксида эрбия). Полнопрофильный анализ рентгенограммы в интервале углов (18–120)° при температурах 300 К и 80 К с использованием программы Full_Prof позволил определить значения параметров a , b и c гексагональной и слабо искаженной гексагональной (орторомбической) элементарной ячейки (далее используются обозначения a , b , c для параметров орторомбической ячейки) и их изменение с температурой. Для температурных измерений трех параметров решетки ромбической структуры использовались два близко расположенных (расщепленных) рефлекса $\{(400)+(620)\}$ и рефлекс (004) с углами соответственно $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ и $2\theta_3 \approx 41^\circ$.

Модуль Юнга E и коэффициент внутреннего трения q^{-1} измерялись методом составного резонатора на частоте около 100 кГц в интервале температур (80–300) К на оригинальной автоматизированной установке (более подробное описание см. в работе [19]). Температурные измерения (точность измерения ± 0.03 К) проводились в режиме стационарного состояния, а температурный шаг и выдержка в области фазового перехода варьировались в широких пределах. Из сглаженной экспериментальной амплитудно-частотной характеристики $A_{sm}(f)$ в области резонанса определялись амплитуды и частоты резонанса и антирезонанса. Температурные зависимости амплитуд и частот резонанса и антирезонанса позволяли определять изменение модуля Юнга $E(T)$ и поглощения (коэффициента внутреннего трения) $q^{-1}(T)$ в широком диапазоне температур.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Рентгеноструктурный анализ

Структурные исследования образцов $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$, выполненные в нашей работе, представляют интерес как с точки зрения обнаружения искажения структуры, снимающего фрустрации, так и для выяснения природы структурного перехода в семействе R3-кобальтитов. Для стехиометрического образца $\text{ErBaCo}_4\text{O}_7$ все линии на рентгенограмме при комнатной температуре индиферированы в рамках гексагональной структуры. На рентгенограмме при $T = 80$ К наблюдается заметное отличие для ряда рефлексов (наиболее сильное для рефлексов с углами $2\theta \approx 63^\circ$ и 69°), чувствительных к ромбическому искажению. Структура образца при $T = 80$ К описывается с учетом небольшого ромбического искажения. Расщепление рефлекса $\{(400) + (260)\}$, наиболее чувствительного к ромбическому искажению, напрямую дает величину искажения

$$\varepsilon_o = (a - b/\sqrt{3})/a = 2(d_1^2 - d_2^2)/(4d_1^2 - d_2^2)$$

$d_{1,2}^{-1} = 2 \sin(\theta_{1,2})/\lambda$, где $\theta_1 = \theta_{400}$, $\theta_2 = \theta_{260}$ — брэгговские углы соответствующих рефлексов.

Для отожженного стехиометрического образца при $T = 300$ К на $K_{\alpha 1, \alpha 2}$ -излучении Co наблюдается нерасщепленный дублетный рефлекс для $d_1 = d_2$ при $b = a\sqrt{3}$, тогда как при $T = 260$ К этот рефлекс обнаруживает расщепление на две линии (рис. 1б). При этом высокоугловая компонента расщепленного рефлекса с $2\theta_2$ остается на месте, а возникает дополнительная линия, смещенная на $\Delta(2\theta_2) \approx 0.25^\circ$. Расщепление рефлекса с углом $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ возникает скачком при температуре фазового перехода $T_S \approx 280$ К и уменьшается при понижении температуры до 80 К. Сложный профиль расщепленной линии описывается двумя дублетами с соотношением интенсивностей расщепленных компонент 2:1, соответствующей статистической величине для этого типа искажения (штриховые линии на рис. 1б). Для второго исследуемого рефлекса (004) угол $2\theta_3 \approx 41^\circ$ скачком возрастает на $\Delta(2\theta_3) \approx 0.2^\circ$ при T_S и продолжает увеличиваться при понижении температуры до 80 К (рис. 1а). Этот рефлекс при ромбическом искажении решетки остается нерасщепленным, и его двойная структура при $T = 280$ К отражает двухфазное состояние образца, когда в диапазоне примерно 10 К сосуществуют две фазы. Наличие двухфазного состояния вблизи T_S на рефлексе с углом $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ проявляется как увеличение

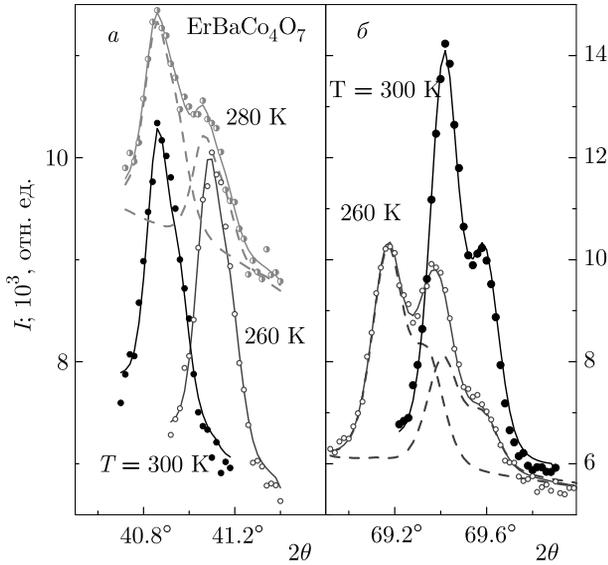


Рис. 1. Экспериментальные (точки) и рассчитанные (линии) дифракционные пики (004) (а) и $\{(400) + (260)\}$ (б) на $K_{\alpha 1, \alpha 2}$ -излучении Co стехиометрического А образца $\text{ErBaCo}_4\text{O}_7$ в гексагональной ($T = 300 \text{ K}$), орторомбической ($T = 260 \text{ K}$; штриховые кривые — компоненты расщепленного при искажении пика) фазах и двухфазном состоянии ($T = 280 \text{ K}$; штриховые кривые — вклады от двух фаз)

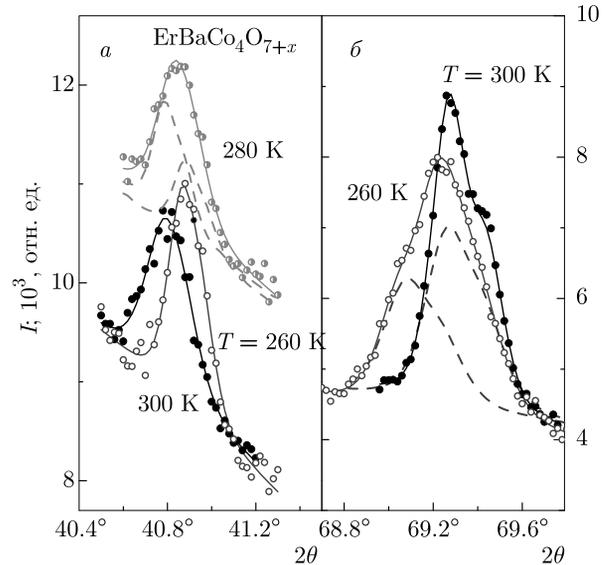


Рис. 2. Экспериментальные (точки) и рассчитанные (линии) дифракционные пики (004) (а) и $\{(400) + (260)\}$ (б) на $K_{\alpha 1, \alpha 2}$ -излучении Co закаленного Q образца $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ в гексагональной ($T = 300 \text{ K}$), орторомбической ($T = 260 \text{ K}$; штриховые кривые — компоненты расщепленного при искажении пика) фазах и двухфазном состоянии ($T = 280 \text{ K}$; штриховые кривые — вклады от двух фаз)

интенсивности высокоугловой компоненты, на которую накладывается рефлекс гексагональной фазы с тем же брэгговским углом. В области двухфазного состояния интенсивность малоугловой компоненты рефлекса уменьшается, а высокоугловой растет, так что соотношение интенсивностей не соответствует статистическому 2 : 1.

Для образца Q с небольшим отклонением от стехиометрии полуширина всех рефлексов, в том числе и исследуемых, на рентгенограмме в неискаженной фазе заметно увеличивается, что затрудняет количественные измерения (рис. 2). Такое поведение типично для замещенных и разбавленных систем и отражает неоднородность параметров структуры по объему образца. Из сравнения исследуемых рефлексов для двух образцов А и Q видно, что для слабостехиометричного Er-кобальтита их ширина увеличивается в 1.5 раза при сравнимой интегральной интенсивности. При увеличении кислородного индекса x параметр a для образца Q практически не меняется, а параметр c уменьшается, что отличается от зависимостей $a(x)$ и $c(x)$, наблюдаемых в Y- и Dy-сериях [25]. Характер расщепления и изменения рефлексов при структурном переходе в слабостехиометрическом образце Q в целом оста-

ся таким же, меняются только величины искажения решетки и скачков параметров. Отметим, что отношение интенсивностей расщепленного рефлекса с $2\theta_{1,2} \approx 69^\circ$ при ромбическом искажении структуры не соответствует статистическому 2 : 1, наблюдаемому для стехиометрического образца. Ширина рефлекса с $2\theta_3 \approx 41^\circ$ вблизи фазового перехода дополнительно возрастает, при этом четкого разделения на две линии, как для стехиометрического образца А, не наблюдается (см. рефлексы при температурах 260 и 280 K на рис. 2а и обсуждение далее). Это уширение рефлекса (004), сохраняющееся вплоть до примерно 310 K, может свидетельствовать о наличии двухфазного состояния, существующего в широкой области температур.

Относительные изменения $\Delta a/a$, $\Delta b/b$, $\Delta c/c$ (кривые 1, 2, 3) параметров решетки с температурой для образцов А и Q приведены на рис. 3. Для удобства сравнения для всех параметров приведены относительные изменения, например,

$$\Delta a/a = \Delta a(T)/a_0; \quad \Delta a(T) = a(T) - a_0,$$

$$a_0 = a(T = 300 \text{ K}),$$

нормированные на их значение при $T = 300 \text{ K}$. Связь между параметрами ромбической и гексаго-

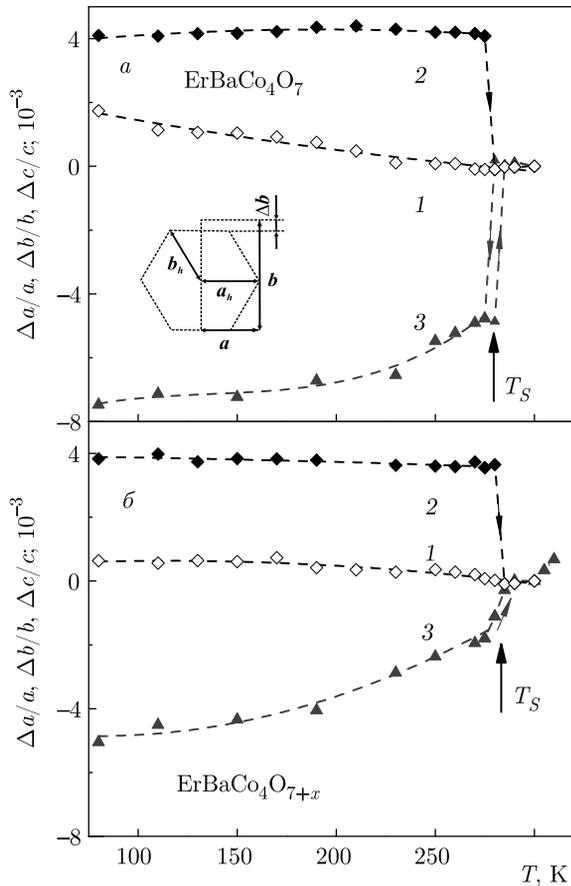


Рис. 3. Относительные изменения параметров решетки (кривые 1 — $\Delta a/a$, 2 — $\Delta b/b$, 3 — $\Delta c/c$) с температурой стехиометрического *A* (*a*, *x* = 0) и закаленного *Q* (*b*, *x* = 0.06) образцов $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$. Все зависимости нормированы на значение параметров при $T = 300$ К: $\Delta a_i/a_i = (a_i(T) - a_{i0})/a_{i0}$, $a_{i0} = a_i(T = 300 \text{ К})$; $a_i = a, b, c$. На вставке показана проекция элементарной ячейки в гексагональной и слабоискаженной фазах

нальной ячеек показана на вставке рис. 3а; выше T_S (в гексагональной фазе) параметры *a* и $b' = b/\sqrt{3}$ совпадают. Рассмотрим сначала характер изменения метрики решетки при фазовом переходе для стехиометрического образца *A* (рис. 3а). Интересно и необычно, что при температуре T_S параметр *a* аномалии не обнаруживает, тогда как параметры *b* и *c* испытывают скачки разного знака и разной величины $\Delta b/b \approx 4 \cdot 10^{-3}$ и $\Delta c/c \approx -5 \cdot 10^{-3}$ (двухфазное состояние для параметра *b* на рис. 3а не показано). Для закаленного образца *Q* с небольшим отклонением от стехиометрии температура T_S заметно не меняется, а максимальное изменение параметров $\Delta a/a$, $\Delta b/b$ в диапазоне (80–300) К и, соответственно, скачок при T_S немного уменьшаются (рис. 3б; для удобства сравнения масштабы на рис. а

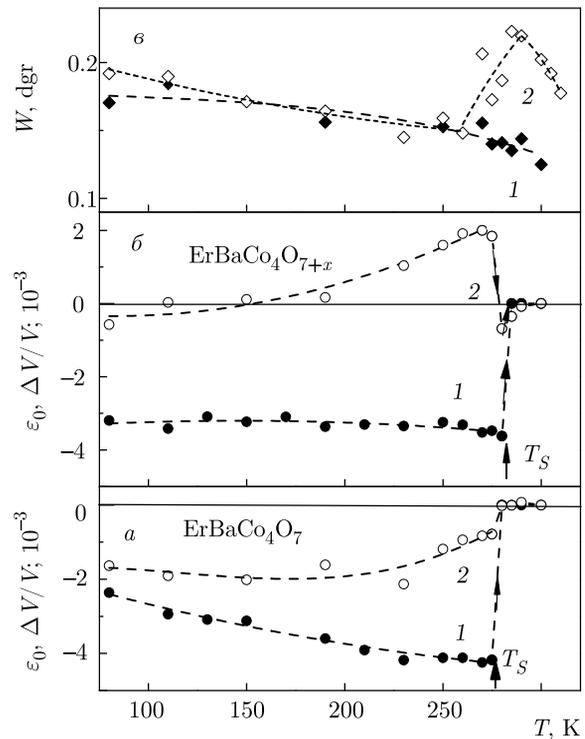


Рис. 4. Относительные изменения степени ромбического искажения $\varepsilon_o = (\Delta a/a - \Delta b/b)$ (кривые 1) и объема $\Delta V/V = (\Delta a/a + \Delta b/b + \Delta c/c)$ (кривые 2) с температурой стехиометрического *A* (*a*, *x* = 0) и закаленного *Q* (*b*, *x* = 0.06) образцов $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$. Температурная зависимость полуширины *W* дифракционного пика (004) для стехиометрического *A* (кривая 1) и закаленного *Q* (кривая 2) образцов

и *b* по оси ординат выбраны одинаковыми). Наоборот, для параметра *c* максимальное изменение и скачок уменьшаются в два раза.

Небольшую деформацию решетки при структурном переходе принято описывать в терминах анизотропной (изменение степени ромбического искажения)

$$\varepsilon_o = \Delta a/a - \Delta b/b$$

(рис. 4, кривые 1) и изотропной (изменение объема)

$$\Delta V/V = \Delta a/a + \Delta b/b + \Delta c/c$$

(кривые 2) деформаций. Для отожженного образца *A* разные по знаку и величине скачки параметров *b* и *c* приводят к скачкам степени ромбического искажения $\varepsilon_o \approx -4 \cdot 10^{-3}$ и объема $\Delta V/V \approx -1 \cdot 10^{-3}$. С понижением температуры от $T \leq T_S$ параметр *c* уменьшается, параметр *b* практически не меняется, а параметр *a*, наоборот, растет (отрицательное тепловое расширение), что приводит к уменьшению

степени ромбического искажения $\varepsilon_o(T)$ в два раза при $T = 80$ К.

Для закаленного образца Q с небольшим отклонением от стехиометрии изменение объема при T_S меняет знак, так как скачок параметра $\Delta c/c$ уменьшается почти в три раза при почти неизменных значениях $\Delta a/a$ и $\Delta b/b$. При этом степень ромбического искажения $\varepsilon_o(T) \approx -3.2 \cdot 10^{-3}$ практически не меняется с температурой и равна среднему значению для отожженного образца в диапазоне (80–280) К. Проверка на других рефлексах $\{(060) + (330)\}$ с $2\theta \approx 64^\circ$ и $\{(062) + (332)\}$ с $2\theta \approx 68^\circ$, также чувствительных к ромбическому искажению, дает значение ε_o при $T \leq T_S$, совпадающее с указанным в пределах $\pm 20\%$. Для образца Q рефлекс с углом $2\theta_3 \approx 41^\circ$ обнаруживает заметное и резкое уширение вблизи $T \leq T_S$ (рис. 4в), которое сохраняется в широком диапазоне температур выше T_S . Это может свидетельствовать о сохранении низкотемпературной фазы в метастабильном состоянии выше T_S , однако из-за отсутствия четкого расщепления пика (004) разделение на вклады от двух фаз затруднительно. Таким образом, искажение структуры в образце Q также происходит путем фазового перехода первого рода, хотя границы двухфазного состояния нами не определялись и на рис. 4 не показаны.

3.2. Модуль Юнга и внутреннее трение

Модули упругости очень чувствительны к фазовым переходам различной природы, и их температурные зависимости позволяют регистрировать как температуру перехода, так и влияние на переход различных факторов [19]. В работе исследовались температурные зависимости модуля Юнга $E(T)$ и внутреннего трения $q^{-1}(T)$ закаленного Q , отожженного A и подвергнутого дополнительной термообработке T образцов $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$, близких к стехиометрическим. Для образцов с различной термообработкой, которые различаются величиной и характером искажения структуры, температурные зависимости $\Delta E(T)/E_0$ обнаруживают существенно разное поведение. Для удобства сравнения на рисунках приведены относительные изменения модуля $\Delta E(T)/E_0$:

$$\Delta E(T) = E(T) - E_0, \quad E_0 = E(T = 300 \text{ К}),$$

нормированные на значение E_0 при $T = 300$ К.

Для отожженного стехиометрического образца A на зависимости $\Delta E(T)/E_0$ наблюдается резкий скачок, порядка $8 \cdot 10^{-2}$, при температуре T_S структурного фазового перехода (рис. 5). Переход проис-

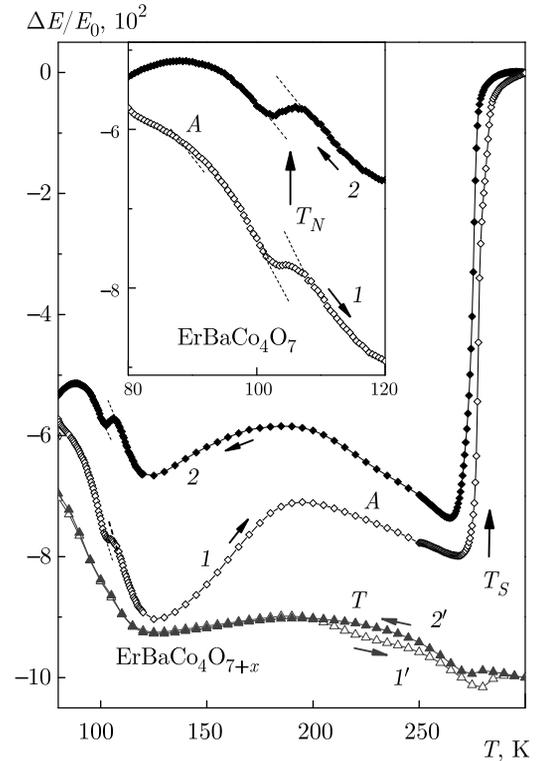


Рис. 5. Зависимость относительной величины модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0$ от температуры для стехиометрического A (кривые 1, 2; штриховыми линиями показана экстраполяция температурного хода вне аномалии) и термообработанного T (кривые 1', 2') образцов $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$ при нагреве (светлые точки) и охлаждении (темные точки). На вставке показана зависимость от температуры модуля Юнга в области магнитного перехода для стехиометрического образца A в большем масштабе (кривые для различных образцов смещены по вертикальной оси на произвольную величину)

ходит с гистерезисом около 3 К, температура перехода, определенная по максимуму $(1/E_0)dE/dT$ производной модуля, составляет $T_{Su} = 278$ К при нагреве и $T_{Sd} = 275$ К при охлаждении (рис. 6). На закаленном образце Q аномалии на кривых $\Delta E(T)/E_0$ и $q^{-1}(T)$ при T_S выражены очень слабо и наблюдаются только на производной модуля Юнга $(1/E_0)dE/dT$. Более того, небольшая дополнительная термообработка отожженного образца (отжиг при $t_{tr} \sim 150$ °С в течение 12 ч) значительно «съедает» аномалии на кривых $\Delta E(T)/E_0$ при T_S (образец T , кривые 1', 2' на рис. 5), тогда как сама температура T_S меняется незначительно.

Структурный переход в образце A сопровождается двойным максимумом на зависимости внутреннего трения $q^{-1}(T)$ при T_S и $T_d = 220$ К (рис. 7).

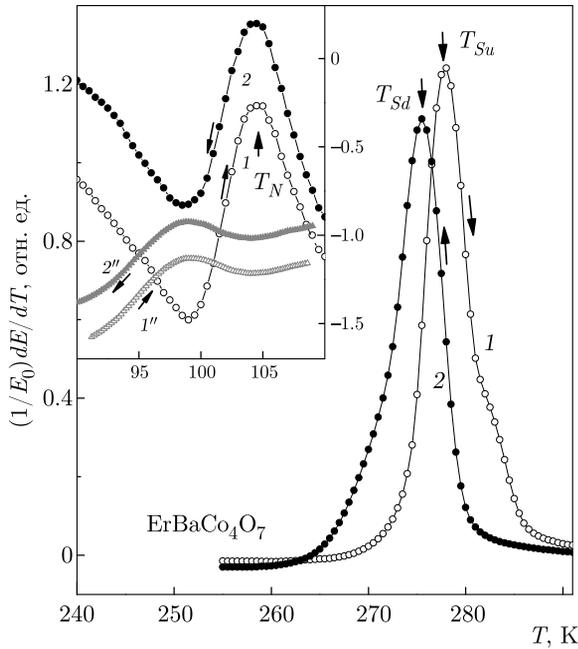


Рис. 6. Зависимость производной модуля Юнга $(1/E_0)dE/dT$ от температуры для стехиометрического *A* образца $ErBaCo_4O_7$ при нагреве (светлые точки) и охлаждении (темные точки). На вставке показана зависимость от температуры производной модуля Юнга $(1/E_0)dE/dT$ в области магнитного перехода для стехиометрического *A* (кривые 1, 2) и закаленного *Q* (кривые 1'', 2'') образцов

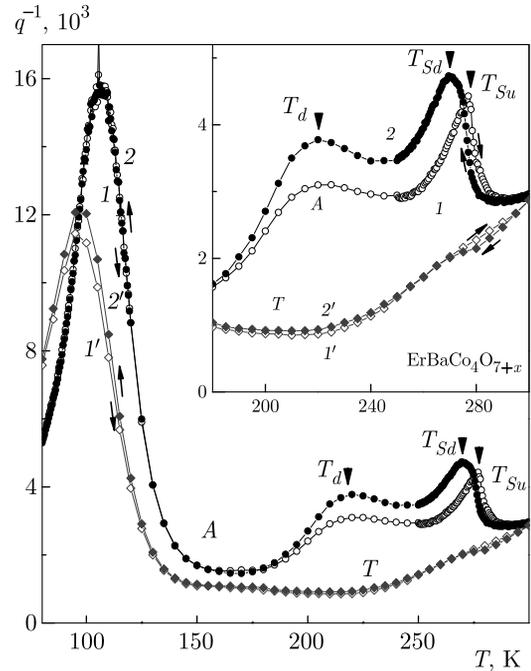


Рис. 7. Температурная зависимость внутреннего трения $q^{-1}(T)$ для стехиометрического *A* (кривые 1, 2) и термообработанного *T* (кривые 1', 2') образцов $ErBaCo_4O_{7+x}$ с небольшим отклонением от стехиометрии при нагреве (светлые точки) и охлаждении (темные точки). На вставке показана зависимость от температуры внутреннего трения $q^{-1}(T)$ для *A*- и *T*-образцов $ErBaCo_4O_{7+x}$ в области структурного перехода в большем масштабе

Максимум при нагреве при $T_{Su} = 278$ К имеет вид λ -аномалии, тогда как при охлаждении максимум при T_{Sd} более широкий и смещен вниз по температуре. Второй максимум при T_d обычно наблюдается при структурных фазовых переходах и связан с релаксацией структурных доменов под действием упругих напряжений звуковой волны. Небольшая дополнительная термообработка отожженного образца также значительно «съедает» аномалии на кривых $q^{-1}(T)$ при T_S (образец *T*, кривые 1', 2' на рис. 7).

Согласно нашим рентгеновским данным, при отклонении от стехиометрии величина ромбического искажения меняется незначительно, а наибольшее изменение испытывает объемная аномалия, которая меняет знак. Известно, что вклады изотропной и анизотропной спонтанных деформаций при фазовом переходе в модуль Юнга, так же как и в модуль сдвига, различаются [26, 27]. Это позволяет объяснить такое резкое изменение величины скачка на кривой $\Delta E(T)/E_0$ при небольшом отклонении от стехиометрии.

Искажение кристаллической структуры в стехиометрическом образце $ErBaCo_4O_7$ приводит к снятию фрустраций и, как уже говорилось, последующему установлению дальнего магнитного порядка в кобальтовой подсистеме. В этом случае можно ожидать появление явно выраженного магнитного фазового перехода и аномалий упругих свойств системы при T_N . Действительно, для отожженного стехиометрического образца *A* на кривой $\Delta E(T)/E_0$ наблюдается также четкая, но на порядок меньшая аномалия при $T_N = 105$ К (рис. 5). В области магнитного фазового перехода на фоне монотонного изменения $\Delta E(T)/E_0$ наблюдаются скачки модуля Юнга, имеющие место как при нагреве, так и при охлаждении, и воспроизводимые при повторном термоциклировании. С учетом температурного хода на кривых $\Delta E(T)/E_0$ (штриховыми линиями показана экстраполяция температурного хода в области T_N) величины скачков при охлаждении и нагреве практически совпадают и составляют $\delta E(T_N)/E_0 \approx 0.5 \cdot 10^{-2}$ (вставка на рис. 5). Точка фазового перехода T_N соответствует скачку на за-

висимости $\Delta E(T)/E_0$ или максимуму производной $(1/E_0)dE/dT$ модуля Юнга по температуре (вставка на рис. 6). Эти аномалии упругих свойств обусловлены магнитным фазовым переходом второго рода, температура T_N которого близка к литературным данным для иттриевого кобальтита. Аномалия модуля Юнга при T_N сопровождается сильным асимметричным, по-видимому, двойным максимумом поглощения на кривой $q^{-1}(T)$ (кривые 1, 2 на рис. 7).

Для закаленного образца Q (вставка на рис. 6, кривые 1'', 2''), так же как и для образца T с дополнительной термообработкой, аномалия при T_N видна только на температурной производной модуля Юнга. При этом величина аномалии на кривой $(1/E_0)dE/dT$ и характерная температура уменьшаются. Отметим также уменьшение характерной температуры и величины максимума на кривой $q^{-1}(T)$ для образцов Q и T . Этот максимум, как было ранее обнаружено, пропадает в сильно разбавленных кобальтитах $\text{RBaCoZn}_3\text{O}_{7+x}$, что подтверждает его связь с магнитным упорядочением в Со-подсистеме [28]. Модификация упругих свойств образцов Q и T обусловлена небольшим отклонением $x < 0.06$ от стехиометрии из-за поглощения нестехиометрического кислорода при дополнительной термообработке. Таким образом, структура слабонестехиометрических Er-образцов в отличие от Y-кобальтитов искажена и фрустрации сняты, но при этом обнаруживается тенденция к подавлению магнитного перехода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования обнаруживают сильное влияние небольшого отклонения от стехиометрии на структурный и магнитный фазовые переходы, а также на физические свойства слоистого кобальтита $\text{ErBaCo}_4\text{O}_{7+x}$. Согласно рентгеновским исследованиям для стехиометрического образца $\text{ErBaCo}_4\text{O}_7$ при структурном переходе параметр $\Delta a/a$ особенности не обнаруживает, параметры b и c испытывают скачки разного знака и разной величины, что приводит к изменению отношения c/a_{av} для структуры и отрицательному скачку объема $\Delta V/V \approx -1 \cdot 10^{-3}$. В настоящее время отсутствует общепринятое мнение о механизме структурного перехода в R3-кобальтитах и обсуждаются различные модели, такие как зарядовое упорядочение в Со-подсистеме, оптимизация ненасыщенных связей Ва-координационного многогранника или нарушение условия толерантности для структуры. По-

лученные данные об искажении структуры при фазовом переходе свидетельствуют об уменьшении отношения параметров решетки c/a_{av} , которое может быть важным фактором для устойчивости структуры.

Искажение структуры в стехиометрическом образце сопровождается резким скачком модуля Юнга $\Delta E(T)/E_0 \sim 8 \cdot 10^{-2}$. В нестехиометрических соединениях из-за нерегулярного положения ионов избыточного кислорода в решетке структура становится дефектной, что сказывается на характере искажения структуры, а именно уменьшается анизотропная деформация и меняется знак объемной (изотропной) деформации. В результате аномалии упругих характеристик в области T_S резко уменьшаются. Это согласуется с изменением соотношения изотропной и анизотропной деформации при структурном переходе при небольшом отклонении от стехиометрии.

Снятие фрустраций при искажении должно способствовать последующему установлению дальнего магнитного порядка в кобальтовой подсистеме. Для стехиометрического Er-кобальтита наблюдается выраженные аномалии магнитных и упругих свойств в области температуры магнитного фазового перехода в Со-подсистеме при $T_N < T_S$ [13,21,29]. При этом температурные зависимости модуля Юнга и коэффициента внутреннего трения в области T_N аналогичны зависимостям для YBaCo_4O_7 [21], т.е. основную роль в формировании магнитного поведения R3-кобальтитов также играет кобальтовая подсистема. Структуры нестехиометрических образцов Q и T для $x \leq 0.06$ тоже являются искаженными, но наличие беспорядка, вносимого нестехиометрическим кислородом, по-видимому, препятствует установлению дальнего магнитного порядка даже в искаженной фрустрированной системе. В слабонестехиометрических Er-образцах с искаженной структурой, как видно, магнитный переход обнаруживает тенденцию к подавлению.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. C. Chapon, P. G. Radaelli, H. Zheng et al., Phys. Rev. B **74**, 172401 (2006).
2. P. Manuel, L. C. Chapon, P. G. Radaelli et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 037202 (2009).
3. W. Schweika, M. Valldor, and P. Lemmens, Phys. Rev. Lett. **98**, 067201 (2007).

4. V. Caignaert, V. Pralong, A. Maignan et al., *Solid State Commun.* **149**, 453 (2009).
5. V. Caignaert, V. Pralong, V. Hardy et al., *Phys. Rev. B* **81**, 094417 (2010).
6. K. Singh, V. Caignaert, L. C. Chapon et al., *Phys. Rev. B* **86**, 024410 (2012).
7. E. A. Juarez-Arellano, A. Friedrich, D. J. Wilson et al., *Phys. Rev. B* **79**, 064109 (2009).
8. E. V. Tsipis, J. C. Waerenborgh, M. Avdeev et al., *J. Sol. St. Chem.* **182**, 640 (2009).
9. Л. П. Козеева, М. Ю. Каменева, А. И. Смоленцев и др., *ЖСХ* **6**, 1108 (2008).
10. A. Huq, J. F. Mitchell, H. Zheng et al., *J. Sol. St. Chem.* **179**, 1136 (2006).
11. D. D. Khalyavin, L. C. Chapon, P. G. Radaelli et al., *Phys. Rev. B* **80**, 144107 (2009).
12. D. D. Khalyavin, P. Manuel, B. Ouladdiaf et al., *Phys. Rev. B* **83**, 094412 (2011).
13. M. Markina, A. N. Vasiliev, N. Nakayama et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 1249 (2010).
14. M. J. R. Hoch, P. L. Kuhns, S. Yuan et al., *Phys. Rev. B* **87**, 064419 (2013).
15. M. Soda, Y. Yasui, T. Moyoshi et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 054707 (2006).
16. N. Nakayama, T. Mizota, Y. Ueda et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **300**, 98 (2006).
17. V. Caignaert, A. Maignan, K. Singh et al., *Phys. Rev. B* **88**, 174403 (2013).
18. A. Maignan, V. Caignaert, D. Pelloquin et al., *Phys. Rev. B* **74**, 165110 (2006).
19. З. А. Казей, В. В. Снегирев, А. С. Андреевко и др., *ЖЭТФ* **140**, 282 (2011).
20. M. Valldor, Y. Sanders, and W. Schweika, *J. Phys.: Confer. Ser.* **145**, 012076 (2009).
21. З. А. Казей, В. В. Снегирев, Л. П. Козеева и др., *ЖЭТФ* **153**, 782 (2018).
22. Л. П. Козеева, М. Ю. Каменева, А. Н. Лавров и др., *Неорганические материалы* **49**, 668 (2013).
23. А. В. Алексеев, М. Ю. Каменева, Л. П. Козеева и др., *Известия РАН, Сер. физическая* **77**, 173 (2013).
24. M. Karppinen, M. Matvejeff, K. Salomaki et al., *J. Mater. Chem.* **12**, 1761 (2002).
25. З. А. Казей, В. В. Снегирев, М. С. Столяренко, *ЖЭТФ* **158**, 492 (2020).
26. M. Fukuhara, M. Yagi, and A. Matsuo, *Phys. Rev. B* **65**, 224210 (2002).
27. M. L. R. Testardi, *Phys. Rev. B* **12**, 3849 (1975).
28. З. А. Казей, В. В. Снегирев, Л. П. Козеева и др., *ЖЭТФ* **149**, 155 (2016).
29. Z. A. Kazei, V. V. Snegirev, A. A. Andreenko et al., *Solid State Phenomena* **233–234**, 145 (2015).

ОСОБЕННОСТИ ОСЦИЛЛЯЦИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ ПРИ ПЕРЕСТРОЙКАХ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОННЫХ ТРАЕКТОРИЙ НА СЛОЖНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ ФЕРМИ

А. Я. Мальцев*

Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 июля 2021 г.,
после переработки 11 июля 2021 г.
Принята к публикации 13 июля 2021 г.

Рассматривается поведение классических и квантовых осцилляций в металлах со сложными поверхностями Ферми вблизи направлений \mathbf{V} , отвечающих изменениям топологической структуры динамической системы, описывающей квазиклассическое движение квазичастиц по поверхности Ферми. Переход через границы изменения такой структуры сопровождается резкими изменениями в картине осцилляций, вид которых зависит самым существенным образом от топологического типа соответствующей перестройки. Мы перечисляем здесь основные особенности таких изменений для всех топологических типов элементарных перестроек и обсуждаем возможности экспериментальной идентификации таких типов, исходя из этих особенностей.

DOI: 10.31857/S0044451021110092

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе мы хотели бы рассмотреть особенности осцилляционных явлений, наблюдающихся при перестройках топологической структуры системы, описывающей квазиклассическое движение электронов на поверхности Ферми в присутствии внешнего магнитного поля. Как хорошо известно, эта система имеет вид

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}_{gr}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}] = \frac{e}{c} [\nabla\epsilon(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}], \quad (1.1)$$

где $\epsilon(\mathbf{p})$ представляет собой электронное дисперсионное соотношение в кристалле для заданной зоны проводимости. Соотношение $\epsilon(\mathbf{p})$ представляет гладкую 3-периодическую функцию в \mathbf{p} -пространстве с периодами, равными векторам обратной решетки. Как нетрудно видеть, система (1.1) сохраняет значение энергии $\epsilon(\mathbf{p})$ и проекцию квазиимпульса на направление магнитного поля, и, как следствие этого, ее траектории задаются пересечениями пери-

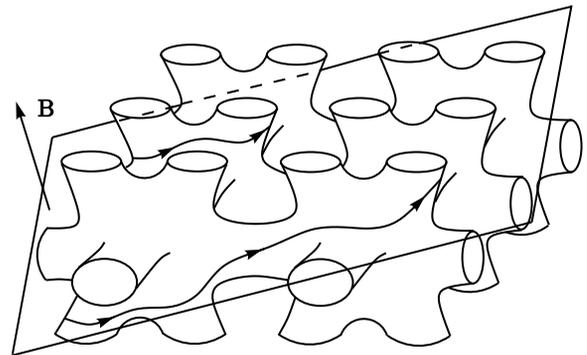


Рис. 1. Геометрия траекторий системы (1.1) в пространстве квазиимпульсов

одических поверхностей $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ плоскостями, ортогональными \mathbf{B} (рис. 1).

С физической точки зрения, точки в \mathbf{p} -пространстве, различающиеся на векторы обратной решетки, представляют собой одно и то же физическое состояние, так что систему (1.1) можно рассматривать, в действительности, как систему на трехмерном торе \mathbb{T}^3 , получаемом из \mathbb{R}^3 факторизацией по векторам обратной решетки. Периодические поверхности $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ после такой факторизации также пред-

* E-mail: maltsev@itp.ac.ru

ставляют собой компактные двумерные поверхности, вложенные в \mathbb{T}^3 (как правило, топологически нетривиальным образом). Как хорошо известно, в теории нормальных металлов среди всех энергетических уровней наиболее важную роль играет энергия Ферми, и, таким образом, наиболее важной является структура траекторий системы (1.1) на поверхности Ферми $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_F$.

Огромная важность геометрии траекторий системы (1.1) для теории гальваномагнитных явлений в металлах была установлена в работах школы И. М. Лифшица в 1950-ые годы (см. [1–8]). В это же время было рассмотрено множество важных и интересных примеров нетривиального поведения траекторий системы (1.1) на сложных поверхностях Ферми, а также рассмотрены соответствующие им режимы поведения магнитопроводимости в сильных магнитных полях. В общем случае, геометрия траекторий системы (1.1) начинает играть определяющую роль при условии $\omega_{B\tau} \gg 1$, что подразумевает также достаточную чистоту исследуемого образца, а также его низкую температуру ($T \sim 1$ К) в процессе соответствующих измерений.

Несколько позднее, в работе Новикова [9] была поставлена задача общей классификации траекторий системы (1.1) для произвольных соотношений $\epsilon(\mathbf{p})$, которая затем весьма плодотворно исследовалась в его топологической школе (см. [10–16]). Топологические результаты, полученные в школе Новикова, позволили, в частности, определить новые топологические характеристики, наблюдаемые в проводимости нормальных металлов [17, 18], а также привели к открытию новых неизвестных ранее типов траекторий системы (1.1) [15, 19], приводящих к новым режимам поведения магнитопроводимости [20, 21]. В целом же, к настоящему моменту можно констатировать, что исследования задачи Новикова привели в конечном итоге к полной классификации всех типов траекторий системы (1.1), а также описанию соответствующих режимов поведения магнитопроводимости в сильных магнитных полях (см., например, [16, 18, 22–25]).

Надо сказать, что весьма важную роль при исследовании задачи Новикова играет исследование множества замкнутых траекторий системы (1.1) на поверхности Ферми. Более того, можно утверждать даже, что знание структуры множества замкнутых траекторий на заданной поверхности Ферми определяет в действительности также типы всех остальных траекторий на ней и, в частности, позволяет описать их глобальные геометрические свойства. Можно отметить также, что множество несингуляр-

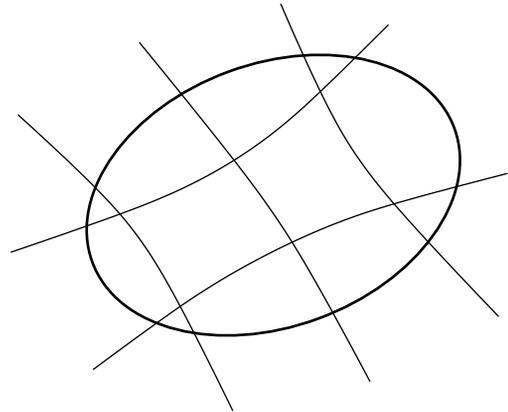


Рис. 2. Области на единичной сфере, отвечающие различным топологическим структурам системы (1.1) на поверхности Ферми и границы перестроек этой структуры, разделяющие эти области (схематично)

ных замкнутых траекторий всегда представляет собой открытое множество на поверхности Ферми и является локально устойчивым по отношению к малым изменениям параметров задачи (в частности, малым изменениям энергии Ферми или направления магнитного поля). Из приведенного факта вытекает, в действительности, что обычно рассматриваемое пространство параметров, определяющих систему (1.1), должно разделяться на области, в которых топологическая структура системы (1.1) может считаться неизменной, в то время как на границах таких областей происходят скачкообразные изменения структуры (1.1). Изменение структуры траекторий (1.1) на поверхности Ферми при этом всегда связано с перестройкой структуры замкнутых траекторий на ней, определяющей, в действительности, также структуру других траекторий.

В данной работе нас будет интересовать прежде всего зависимость топологической структуры системы (1.1) от направления магнитного поля (рис. 2). Типичная картина границ, разделяющих различные топологические структуры (1.1) на соответствующей угловой диаграмме (на единичной сфере S^2), обсуждалась в самом общем случае в работе [26], где было также указано, что наиболее удобным инструментом ее наблюдения является исследование осцилляционных явлений (классических или квантовых) при различных направлениях \mathbf{B} . Последнее обстоятельство обусловлено тем, что при изменениях топологической структуры системы (1.1) всегда происходит исчезновение (и появление новых) экстремальных траекторий, играющих центральную роль в описании осцилляционных явле-

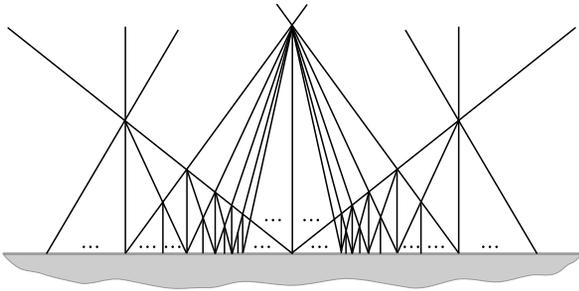


Рис. 3. Плотная сеть границ элементарных перестроек структуры (1.1), накапливающихся вблизи границы появления открытых траекторий на поверхности Ферми (схематично)

ний в сильных магнитных полях (циклотронного резонанса, эффекта де Гааза – ван Альфена, эффекта Шубникова – де Гааза и др.). Таким образом, границы, разделяющие различные топологические структуры системы (1.1), являются в действительности также границами, на которых происходят резкие изменения картины классических или квантовых осцилляций при изменении направления \mathbf{V} .

Как было показано в [26], «сеть» границ, разделяющих угловую диаграмму на области фиксированной топологической структуры системы (1.1), является в общем случае довольно сложной и состоит из «элементарных» сегментов, каждый из которых соответствует некоторой «элементарной» перестройке структуры системы (1.1). Число «элементарных» сегментов может быть в общем случае бесконечным, в частности, плотность таких сегментов становится бесконечной вблизи направлений \mathbf{V} , соответствующих появлению открытых траекторий на поверхности Ферми (рис. 3). В работе [26] были также описаны все «элементарные» перестройки топологической структуры (1.1) на поверхности Ферми, возникающие в ситуации общего положения. Каждой из таких перестроек соответствует, в частности, исчезновение и появление экстремальных траекторий весьма специальной формы, определяемой ее топологическим типом. Как мы уже сказали, каждая из границ перестроек структуры (1.1) (одномерных кривых на рис. 2 и 3) соответствует элементарной перестройке определенного топологического типа, при этом топологические типы перестроек, отвечающих разным кривым, вообще говоря, различны.

Основной целью данной работы является рассмотрение особенностей наблюдения осцилляционных явлений в момент изменения топологической структуры системы (1.1) на поверхности Ферми. Как мы увидим, каждая из «элементарных» пере-

строек этой структуры обладает при этом своими собственными особенностями в поведении осцилляций, что, в частности, может быть весьма полезным при экспериментальном определении топологических типов таких перестроек.

2. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ТИПЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПЕРЕСТРОЕК И ОСОБЕННОСТИ КАРТИНЫ ОСЦИЛЛЯЦИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ ДЛЯ ПЕРЕСТРОЕК РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ

Как мы уже сказали, перестройки топологической структуры системы (1.1) на поверхности Ферми будут для нас означать топологические перестройки множества замкнутых траекторий на этой поверхности. В действительности, как мы уже отмечали выше, знание множества замкнутых траекторий на поверхности Ферми позволяет описать также и траектории других типов на ней. Множество замкнутых траекторий для направлений \mathbf{V} общего положения представляет собой при этом конечный набор (неэквивалентных) цилиндров, ограниченных сингулярными замкнутыми траекториями на своих основаниях (рис. 4). Структура множества цилиндров замкнутых траекторий (их положение на поверхности Ферми и схема их склейки с носителями других траекторий и между собой) является локально устойчивой при малых вращениях направления \mathbf{V} и может изменяться лишь при специальных направлениях \mathbf{V} , когда она становится структурой необщего положения. Более точно, для перестройки топологической структуры (1.1) необходимо изменить направление \mathbf{V} таким образом, чтобы высота одного (или нескольких) цилиндров замкнутых траекторий обратилась в нуль, т. е. произошло исчезновение цилиндра замкнутых траекторий с последующим появлением нового цилиндра малой высоты (или нескольких цилиндров). Множества направлений \mathbf{V} , отвечающих моменту перестройки, представляют собой одномерные кривые на угловой диаграмме (на единичной сфере S^2), объединение которых и образует «сеть» направлений \mathbf{V} , соответствующих перестройкам структуры (1.1) на поверхности Ферми.

Как и в работе [26], мы не будем уделять здесь внимания исчезновению и появлению «тривиальных» цилиндров замкнутых траекторий, т. е. цилиндров, хотя бы одно из оснований которого стягивается в единственную особую точку (рис. 5), и будем рассматривать только перестройки цилиндров, оба основания которых «нетривиальны» (рис. 4). В

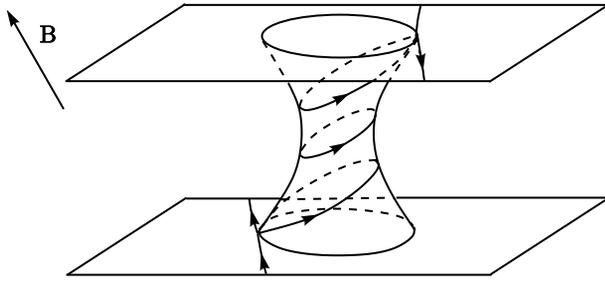


Рис. 4. «Нетривиальный» цилиндр замкнутых траекторий, ограниченный сингулярными траекториями на своих основаниях

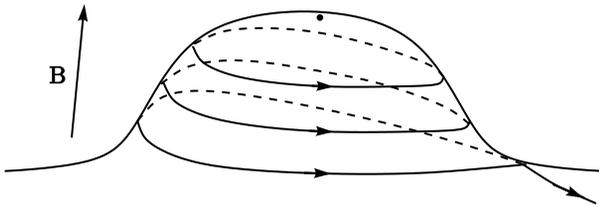


Рис. 5. «Тривиальный» цилиндр замкнутых траекторий на поверхности Ферми

случае общего положения можно считать, что на каждом из оснований таких цилиндров присутствует ровно одна особая точка системы (1.1), а каждое из оснований представляет собой одну из фигур, изображенных на рис. 6. В момент перестройки структуры системы (1.1) возникает «цилиндр нуле-

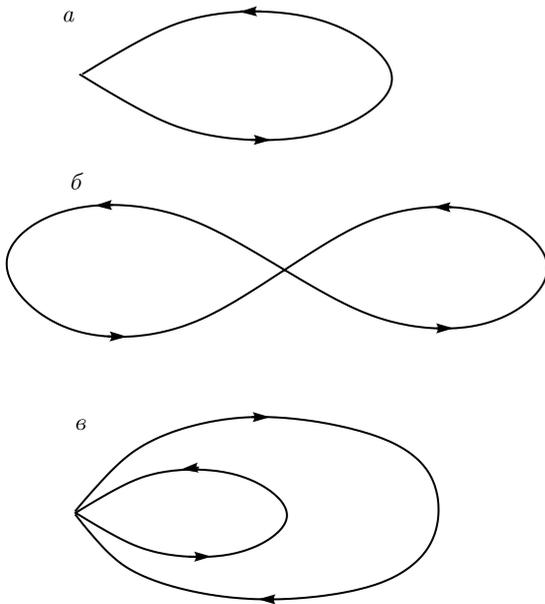


Рис. 6. Возможные типы оснований «нетривиальных» цилиндров замкнутых траекторий

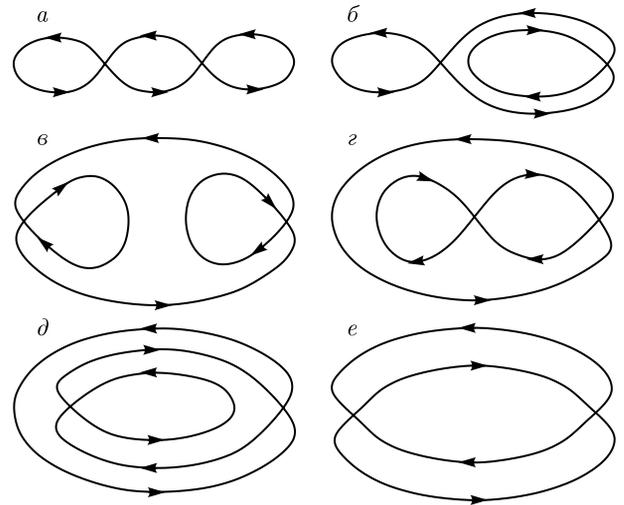


Рис. 7. «Цилиндры нулевой высоты», возникающие в моменты перестройки топологической структуры системы (1.1) на поверхности Ферми

вой высоты», содержащий две особые точки системы (1.1), соединенные сингулярными траекториями. Для каждой из «элементарных» перестроек структуры (1.1) соответствующий «цилиндр нулевой высоты» представляет собой плоский граф, лежащий в плоскости, ортогональной \mathbf{V} , и топологически эквивалентный одной из фигур, изображенных на рис. 7. Как было показано в [26], для определения топологического типа «элементарной» перестройки системы (1.1) достаточно зафиксировать топологический тип соответствующего «цилиндра нулевой высоты» и указать, являются ли групповые скорости в его особых точках сонаправленными, или направленными противоположно друг другу.

Важнейшим обстоятельством в рассматриваемой ситуации является то, что на каждом из цилиндров малой высоты вплоть до его исчезновения присутствуют экстремальные замкнутые траектории системы (1.1) (имеющие экстремальный период обращения или площадь по сравнению с близкими траекториями), исчезающие вместе с соответствующим цилиндром (рис. 8). При появлении нового цилиндра замкнутых траекторий на нем появляются новые экстремальные траектории, отличающиеся от исчезнувших своей геометрией. Как следствие этого, при каждой перестройке топологической структуры системы (1.1) происходит резкое изменение картины осцилляционных явлений в сильном магнитном поле, что является удобным инструментом для наблюдения описанной выше «сети» направлений \mathbf{V} на угловой диаграмме. Надо сказать, что экс-

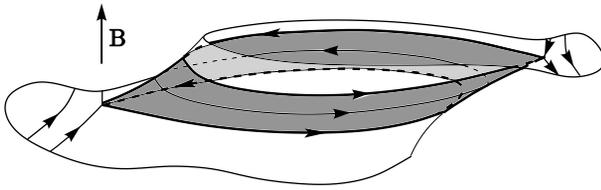


Рис. 8. Экстремальная замкнутая траектория на исчезающем (появляющемся) цилиндре замкнутых траекторий вблизи момента перестройки топологической структуры системы (1.1) на поверхности Ферми

тремальные замкнутые траектории, возникающие на цилиндрах малой высоты, обладают определенными особенностями по сравнению с обычными экстремальными траекториями, а именно, они содержат участки, очень близкие к особым точкам системы (1.1). Данное обстоятельство приводит, в частности, к неограниченному увеличению периода обращения по таким траекториям при уменьшении высоты цилиндра, а также к ряду других особенностей, возникающих, к примеру, при наблюдении явления циклотронного резонанса (см., например, [26]).

В данной работе, однако, нам хотелось бы рассмотреть более подробно особенности экстремальных траекторий и соответствующих им осцилляционных явлений, возникающие при каждой из элементарных перестроек структуры (1.1), что, с нашей точки зрения, может оказаться весьма полезным при экспериментальном изучении полной картины перестроек топологии этой системы на сложных поверхностях Ферми. Как хорошо известно (см., например, [7, 27, 28]), при описании осцилляционных явлений в действительности оказываются важными замкнутые экстремальные траектории двух типов, а именно, траектории, обладающие экстремальным периодом обращения и траектории, обладающие экстремальной площадью по сравнению с близкими к ним траекториями. Траектории первого типа, как правило, играют при этом определяющую роль в описании классических осцилляционных явлений (классический циклотронный резонанс), в то время как траектории второго типа являются важными при описании квантовых осцилляционных явлений (эффект де Гааза – ван Альфена, эффект Шубникова – де Гааза и др.). Нередко, в действительности, одна и та же траектория может быть экстремальной как с первой, так и со второй точки зрения, как правило, это имеет место для центрально-симметричных сечений поверхности Ферми. В большинстве из ситуаций, рассматриваемых нами ниже, однако, это не будет иметь места, поэтому нам надо сразу провести разделение

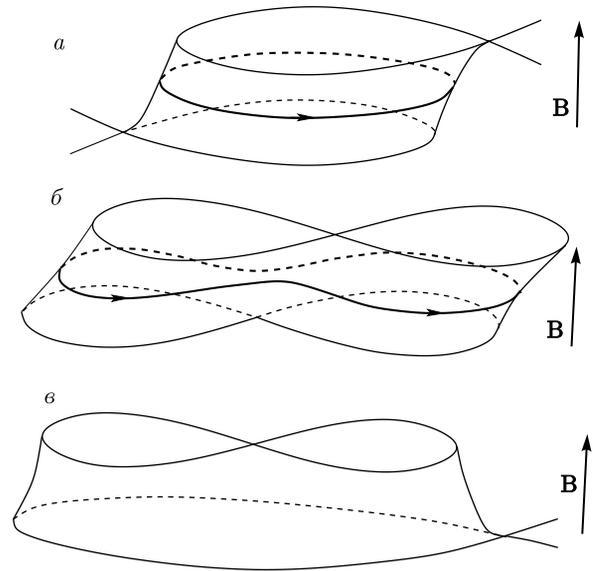


Рис. 9. Цилиндры замкнутых траекторий, содержащие траектории экстремальной (минимальной и максимальной) площади (а, б), и цилиндр, не содержащий траекторий экстремальной площади (в)

экстремальных траекторий на два указанных типа.

Как мы уже сказали, мы будем рассматривать здесь цилиндры замкнутых траекторий с «нетривиальными» основаниями, содержащими по одной особой точке системы (1.1). Нетрудно видеть, что период обращения по замкнутым траекториям на каждом из таких цилиндров неограниченно (логарифмически) возрастает при приближении к каждому из оснований. Как следствие этого, на каждом из таких цилиндров должна присутствовать по крайней мере одна экстремальная траектория, обладающая минимальным периодом обращения по сравнению с близкими к ней траекториями.

Что касается площади замкнутых траекторий, легко видеть, что она остается конечной на основаниях цилиндров. Ее производная по расстоянию до соответствующего основания, однако, обращается в бесконечность (по логарифмическому закону) и может иметь положительный или отрицательный знак в зависимости от геометрии цилиндра. Как и для траекторий первого типа, данное обстоятельство здесь также обусловлено наличием особых точек на основаниях цилиндров и связано с локальной геометрией траекторий вблизи этих точек. В зависимости от знаков производной площади по расстоянию (высоте) до основания цилиндра на обоих основаниях цилиндр замкнутых траекторий может как содержать экстремальные траектории второго типа, так и не содержать их. На рис. 9 представ-

лены примеры как цилиндров, содержащих экстремальные траектории второго типа (*a, б*), так и цилиндра, не содержащего такой траектории (*в*). Можно отметить здесь, что экстремальная траектория на рис. 9*а*, имеет минимальную площадь, в то время как экстремальная траектория на рис. 9*б* имеет максимальную площадь по сравнению с близкими к ним траекториями.

Можно видеть, таким образом, что любая перестройка структуры (1.1) всегда сопровождается резким изменением, например, картины осцилляций при наблюдении циклотронного резонанса, в то время как в картине осцилляций де Гааза – ван Альфена или Шубникова – де Гааза может и не происходить резких изменений (если цилиндры малой высоты по обе стороны от перестройки не содержат траекторий экстремальной площади). Можно особо отметить при этом перестройки (1.1), обладающие центральной симметрией. В этом случае центральные сечения цилиндров малой высоты всегда являются экстремальными траекториями как первого, так и второго типов.

В самом общем случае цилиндры малой высоты могут содержать экстремальные траектории обоих типов, которые, однако, не совпадают друг с другом. В этом случае, хотя перестройка структуры (1.1) сопровождается резким изменением картины осцилляций всех типов, можно наблюдать различие в параметрах соответствующих исчезающих или возникающих осцилляционных членов. Так, например, при наблюдении явления циклотронного резонанса происходит непосредственное измерение периода обращения по экстремальным траекториям, дающим главные члены в общую картину осцилляций. Вместе с тем, период обращения может быть измерен и для траекторий экстремальной площади, например, по температурной зависимости соответствующих квантовых осцилляций [7, 29]. Легко видеть, что эти величины должны совпадать в случае, когда оба типа осцилляций порождаются одной и той же траекторией и отличаются, если разные типы осцилляций отвечают разным экстремальным траекториям.

В качестве примера можно рассмотреть две различные перестройки, приведенные на рис. 10 и 11. Обе перестройки соответствуют в действительности одной и той же топологии «цилиндра нулевой высоты» (первой из приведенных на рис. 7) и отличаются лишь направлениями групповых скоростей в двух седловых особых точках системы (1.1) (разнонаправленные и сонаправленные скорости в особых точках).

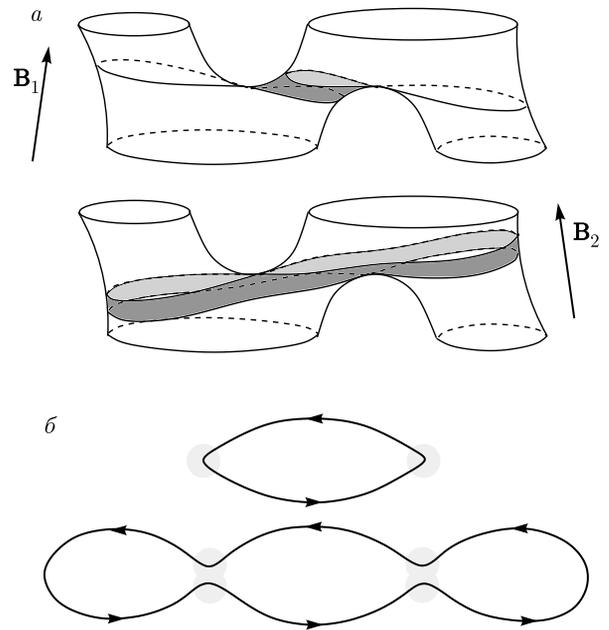


Рис. 10. Одна из наиболее распространенных перестроек топологической структуры системы (1.1) на поверхности Ферми и экстремальные траектории на цилиндрах малой высоты до и после перестройки (цветом обозначены участки, близко подходящие к особым точкам системы (1.1))

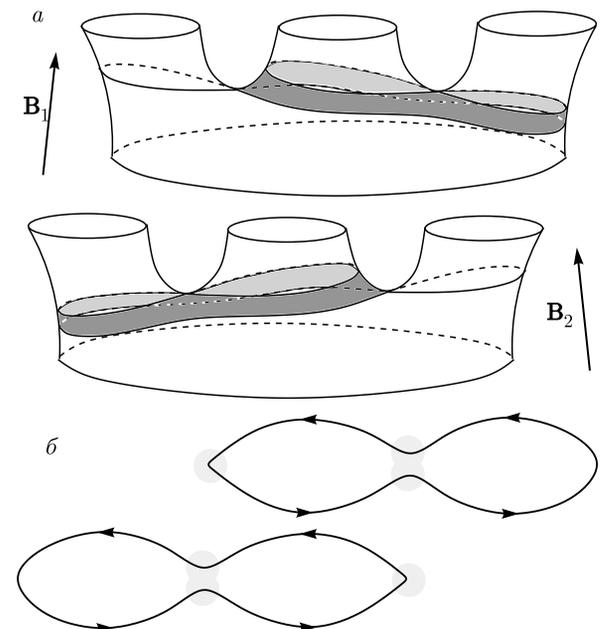


Рис. 11. Одна из возможных перестроек топологической структуры системы (1.1) на поверхности Ферми и экстремальные траектории на цилиндрах малой высоты до и после перестройки (цветом обозначены участки, близко подходящие к особым точкам системы (1.1))

Перестройка, приведенная на рис. 10, может обладать центральной симметрией и, таким образом, возможно ее появление на одном участке поверхности Ферми (наиболее распространенный случай). Впрочем, топологическая структура на рис. 10 может и не обладать центральной симметрией. В этом случае она должна возникать одновременно на двух участках поверхности Ферми, переходящих друг в друга при инверсии в \mathbf{p} -пространстве. Независимо от того, обладает ли структура на рис. 10 центральной симметрией или нет, на соответствующих цилиндрах малой высоты, как до, так и после перестройки, возникают траектории экстремальной площади, при этом одна из них (до перестройки) имеет минимальную площадь, а вторая (после перестройки) — максимальную площадь по сравнению с близкими к ним траекториями. Таким образом, перестройка, приведенная на рис. 10, должна всегда сопровождаться как резким скачком одного из осциллирующих членов в классических осцилляциях (изменение геометрии траектории экстремального периода), так и резким скачком в одном из осциллирующих членов в квантовых осцилляциях (изменении геометрии траектории экстремальной площади). Как траектории экстремального периода, так и траектории экстремальной площади имеют здесь форму, приведенную на рис. 10, при этом в случае наличия центральной симметрии они просто совпадают. Как мы уже говорили выше, в последнем случае периоды обращения, измеренные из классических осцилляций и температурной зависимости квантовых осцилляций соответствующих осцилляционных членов обязаны совпадать.

Перестройка, представленная на рис. 11, не может обладать центральной симметрией и ее появление возможно лишь парами, на участках поверхности Ферми, переходящих друг в друга при инверсии в \mathbf{p} -пространстве. Цилиндры малой высоты, как до, так и после перестройки, совпадают с изображенным на рис. 9в и не содержат траекторий экстремальной площади. На этих цилиндрах, тем не менее, всегда присутствуют траектории с экстремальным периодом обращения, форма которых представлена на рис. 11. При переходе через границу такой перестройки, таким образом, происходит скачок (резкое изменение одного из осцилляционных членов) лишь в картине классических осцилляций (классический циклотронный резонанс и т. п.).

Ниже, на рис. 12–21 представлены все оставшиеся топологические типы «элементарных» перестроек системы (1.1). Кроме изображений самой перестройки на рис. 12–21 приведены также форма ниж-

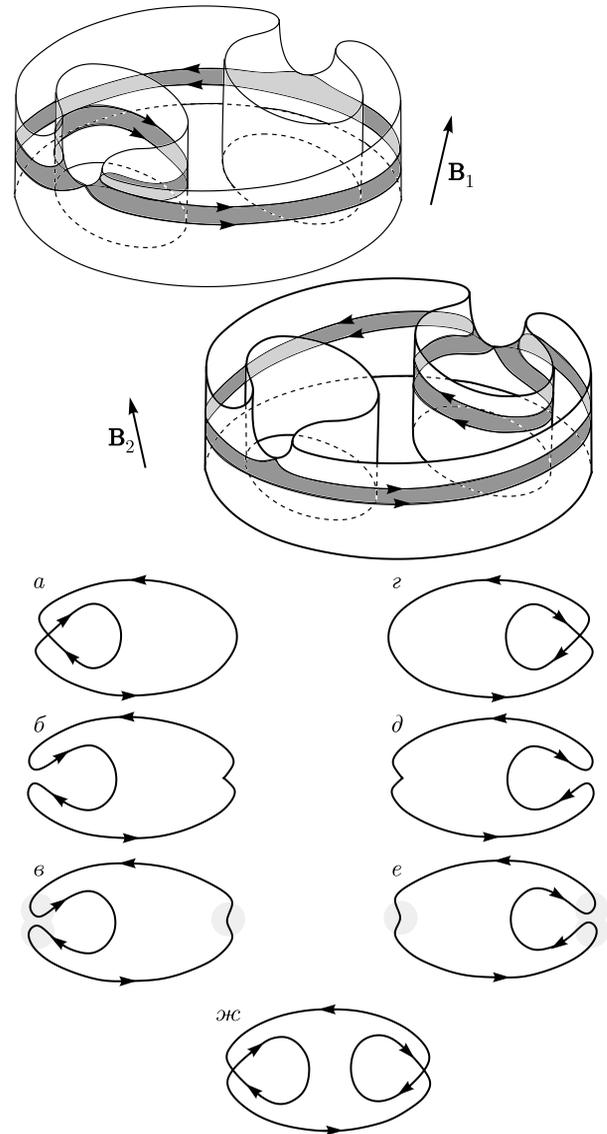


Рис. 12. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты отсутствуют как до перестройки, так и после нее. Траектории минимального периода обращения по разные стороны от перестройки имеют один и тот же тип (электронный или дырочный)

него и верхнего оснований цилиндров малой высоты до и после перестройки (*a, б* и *г, д*), форма экстремальных траекторий на цилиндрах малой высоты (*в* и *е*), а также структура «цилиндра нулевой высоты», возникающего непосредственно в момент перестройки (*жс*). Строго говоря, приведенные рисунки точно передают локальную геометрию экстремальных траекторий вблизи упомянутых выше «участков замедления» на них (закрашенные участки), а также топологию их соединения оставшимися

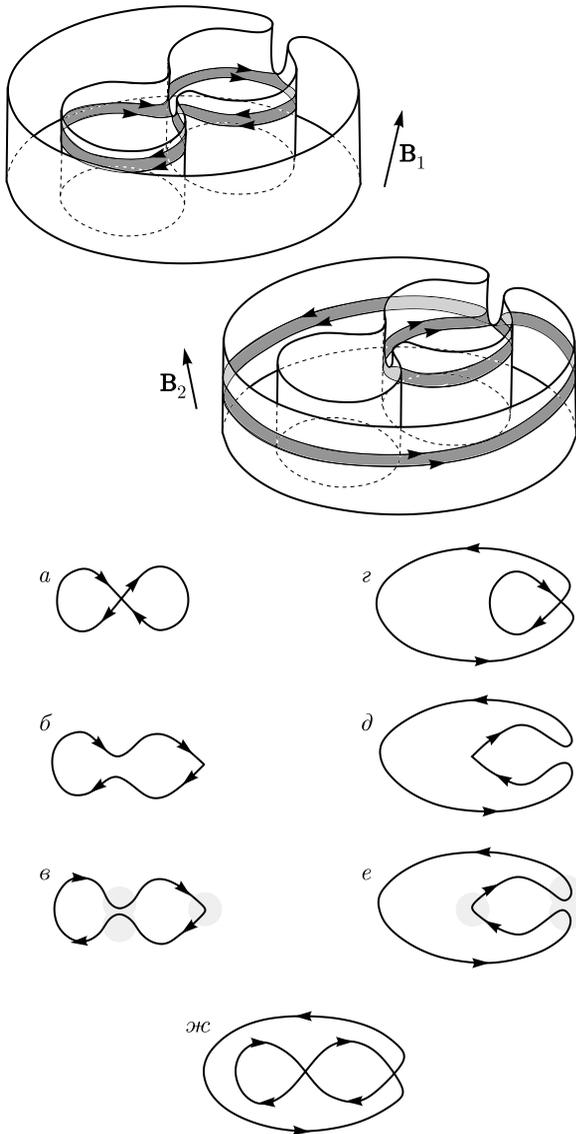


Рис. 13. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты отсутствуют как до перестройки, так и после нее. Траектории минимального периода обращения по разные стороны от перестройки имеют различные типы (электронный — с одной стороны от перестройки и дырочный — с другой)

участками траектории, а в остальном могут быть сложнее геометрически. Для рассматриваемых цилиндров малой высоты экстремальные траектории обоих типов при этом геометрически очень близки друг к другу в p -пространстве (если оба типа траекторий присутствуют на цилиндре), однако могут заметно отличаться друг от друга другими параметрами (например, величиной периода обращения по траектории). Как мы уже говорили выше, ос-

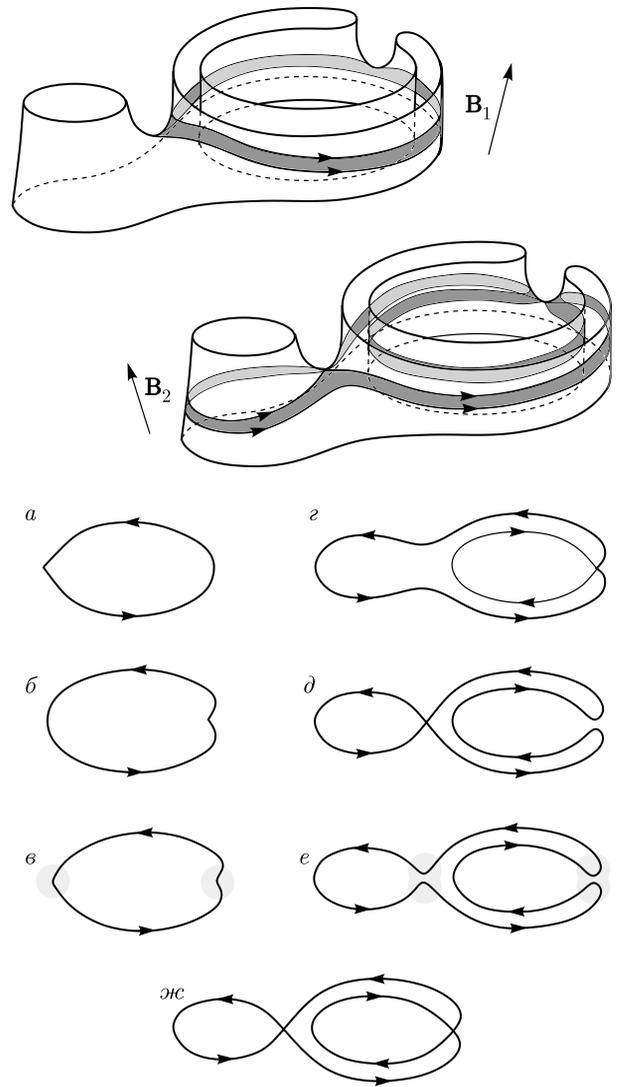


Рис. 14. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты отсутствуют как до перестройки, так и после нее. Траектории минимального периода обращения по разные стороны от перестройки имеют один и тот же тип (электронный или дырочный)

новной целью настоящей работы является описание особенностей осцилляционных (и других) явлений, позволяющих опознавать различные типы «элементарных» перестроек системы (1.1) при их экспериментальном наблюдении.

На рис. 12–16 приведены перестройки, во время которых не появляются и не исчезают траектории экстремальной площади на соответствующих цилиндрах малой высоты. Экстремальные траектории, показанные на этих рисунках, обладают только минимальным периодом обращения среди всех тра-

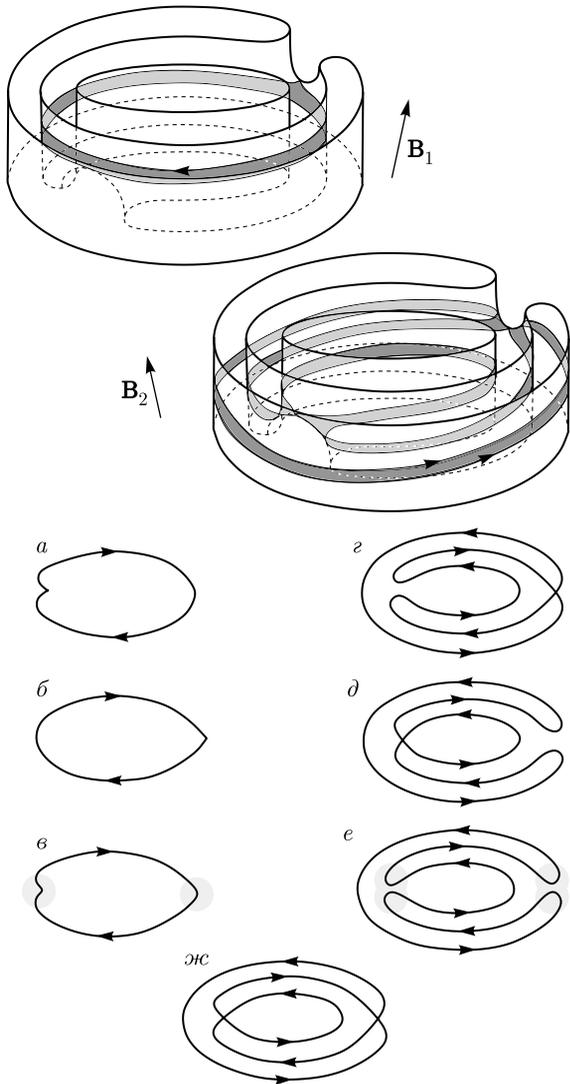


Рис. 15. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты отсутствуют как до перестройки, так и после нее. Траектории минимального периода обращения по разные стороны от перестройки имеют различные типы (электронный — с одной стороны от перестройки и дырочный — с другой)

екторий цилиндра. Вместе с перестройкой, приведенной на рис. 11, такие перестройки можно отнести к перестройкам первой группы. Как мы уже говорили выше, перестройки такого типа отличаются тем, что происходит резкая замена части осцилляционных членов лишь в картине классических осцилляций.

Как нетрудно проверить, во всех перестройках, представленных на рис. 11–16, групповые скорости в двух седловых особых точках сонаправлены друг

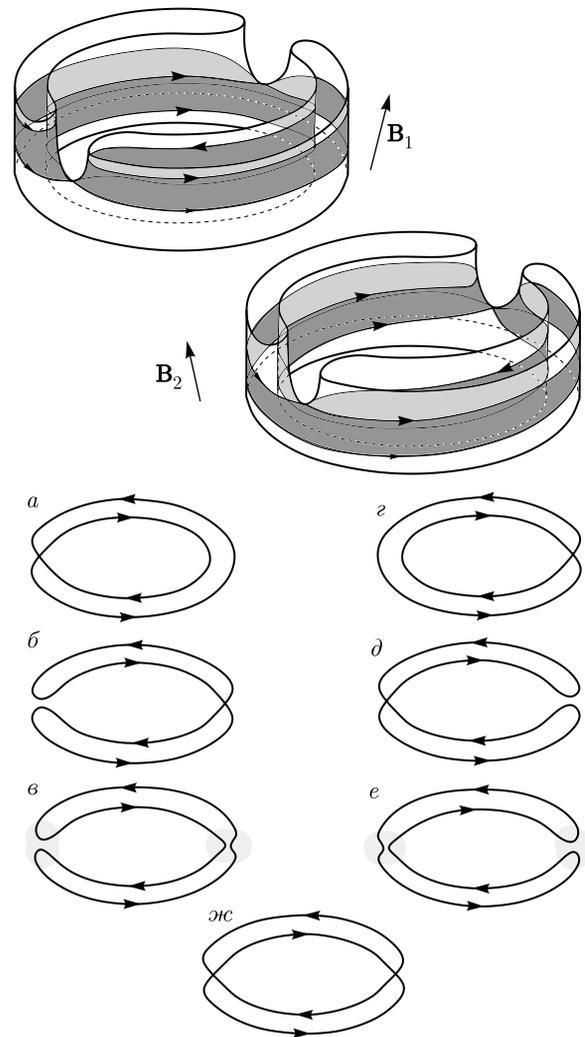


Рис. 16. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты отсутствуют как до перестройки, так и после нее. Траектории минимального периода обращения по разные стороны от перестройки имеют один и тот же тип (электронный или дырочный)

другу. Возвращаясь к описанию элементарных перестроек в терминах топологии «цилиндров нулевой высоты» (рис. 7), легко сформулировать простое правило. А именно, для любого из типов «цилиндров нулевой высоты», приведенных на рис. 7, на соответствующих цилиндрах малой высоты (как до, так и после перестройки) возникают траектории экстремальной площади, если групповые скорости в его особых точках направлены противоположно друг другу.

Приведенное выше правило легко обосновать, используя хорошо известную формулу

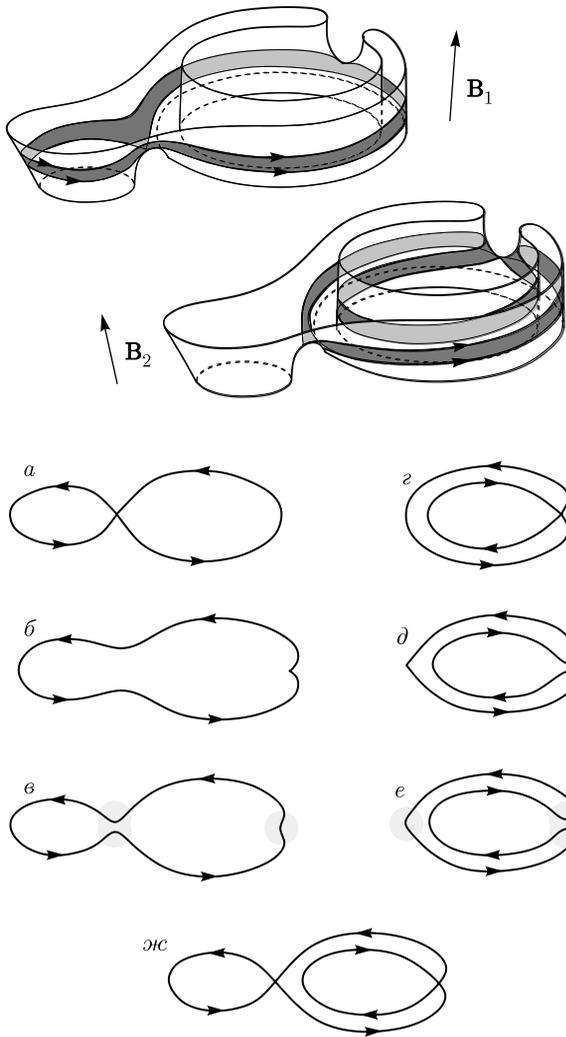


Рис. 17. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты присутствуют как до перестройки (траектория максимальной площади), так и после нее (траектория минимальной площади). Площадь экстремальной траектории до перестройки всегда больше площади экстремальной траектории после перестройки. Экстремальные траектории по обе стороны от перестройки имеют один и тот же (электронный или дырочный) тип

$$\frac{\partial S}{\partial p_z} = \frac{eB}{c} \oint v_{gr}^z dt$$

(где t — время движения по траектории) для площади замкнутой траектории в \mathbf{p} -пространстве $S(p_z)$. Поскольку особые точки вблизи перестройки находятся на основаниях цилиндров малой высоты, а время их прохождения стремится к бесконечности при приближении к основаниям цилиндра, данное соотношение определяет знаки $\partial S/\partial p_z$ вблизи оснований цилиндров. Как также хорошо известно, на

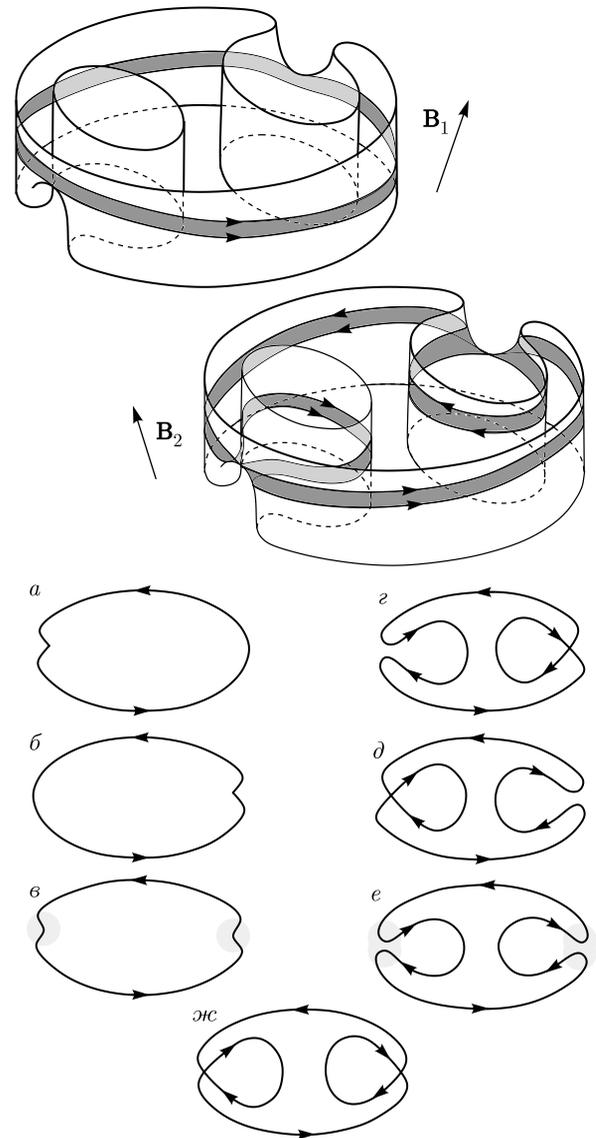


Рис. 18. Перестройка структуры (1.1), которая может обладать центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты присутствуют как до перестройки (траектория максимальной площади), так и после нее (траектория минимальной площади). Площадь экстремальной траектории до перестройки всегда больше площади экстремальной траектории после перестройки. Экстремальные траектории по обе стороны от перестройки имеют один и тот же (электронный или дырочный) тип

траекториях экстремальной площади мы имеем при этом соотношение

$$\oint v_{gr}^z dt = 0.$$

Можно отметить при этом, что экстремальные траектории, приведенные на рис. 12, 13, так же как

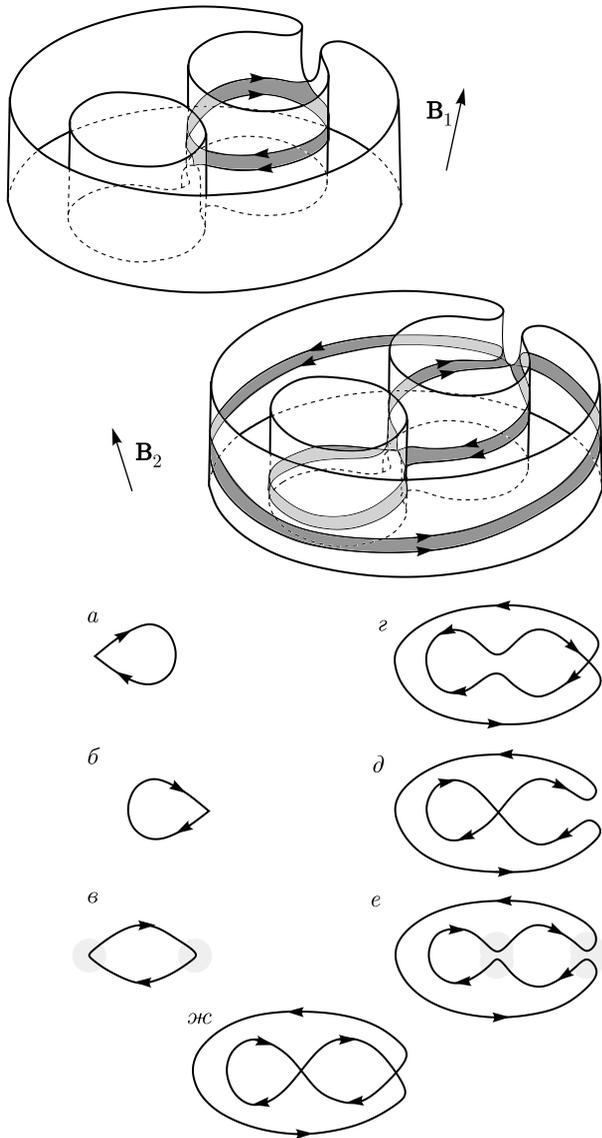


Рис. 19. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты присутствуют как до перестройки (траектория минимальной площади), так и после нее (траектория минимальной площади). Экстремальные траектории по разные стороны от перестройки имеют различные типы (электронный — с одной стороны от перестройки и дырочный — с другой)

и траектории, приведенные на рис. 11, приближаются к седловым особым точкам системы (1.1) три раза (дважды к одной из особых точек и один раз ко второй). При этом по разные стороны от перестройки кратность подхода особой траектории к каждой из особых точек изменяется (до перестройки траектория подходит дважды к одной из особых точек, а после перестройки — к другой). Каждое приближе-

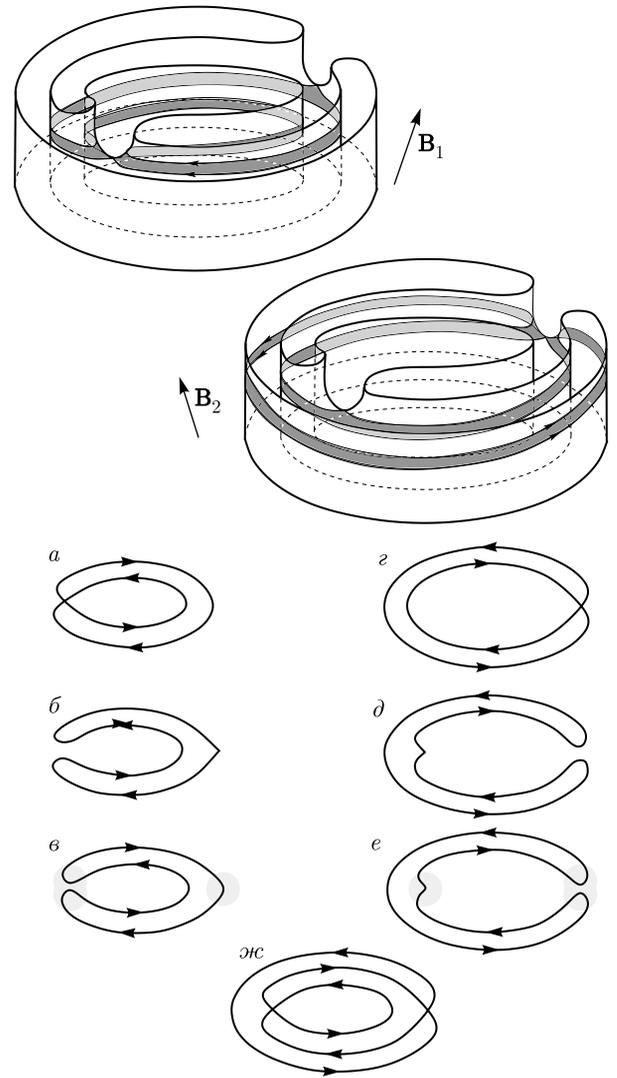


Рис. 20. Перестройка структуры (1.1), не обладающая центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты присутствуют как до перестройки (траектория минимальной площади), так и после нее (траектория минимальной площади). Экстремальные траектории по разные стороны от перестройки имеют различные типы (электронный — с одной стороны от перестройки и дырочный — с другой)

ние к особой точке (1.1) означает наличие «участка замедления» на данном участке траектории, т.е. конечной добавки к периоду обращения по траектории. Соответствующая добавка к периоду обращения растет логарифмически при уменьшении угла α между направлением \mathbf{B} и границей перестройки системы (1.1) и при $\alpha \ll 1$ может быть записана в виде

$$\Delta T_i \simeq \frac{c}{eBv_{gr}^{(i)}} \frac{1}{\sqrt{G_i}} \ln \frac{1}{\alpha},$$

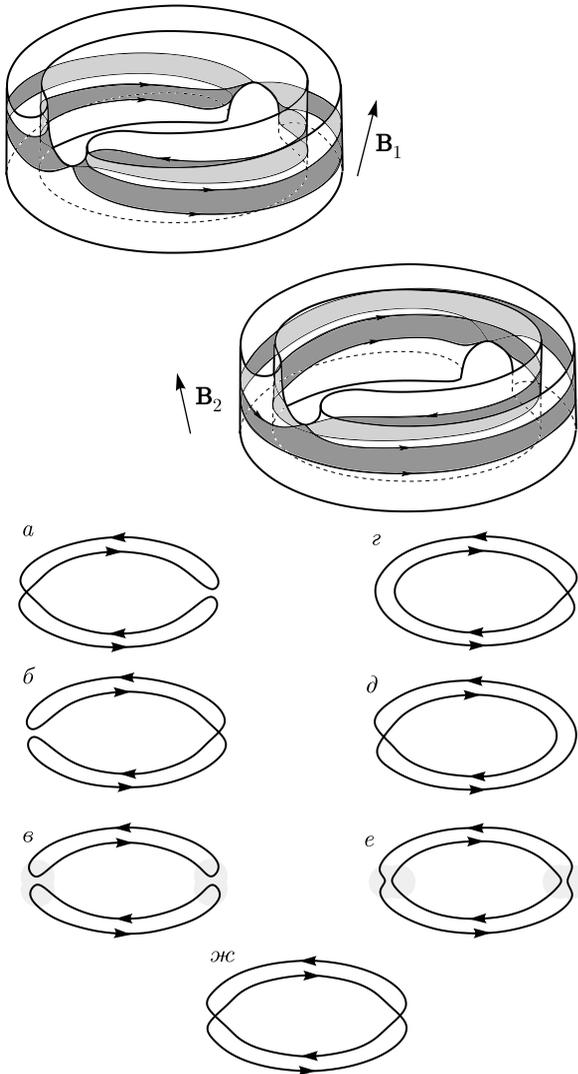


Рис. 21. Перестройка структуры (1.1), которая может обладать центральной симметрией. Траектории экстремальной площади на цилиндрах малой высоты присутствуют как до перестройки (пара траекторий минимальной площади), так и после нее (одна траектория минимальной площади и одна траектория максимальной площади). Пара экстремальных траекторий с одной стороны от перестройки обладает одним и тем же типом. После перестройки возникает пара экстремальных траекторий противоположных типов, причем тип траекторий большей площади совпадает с типом экстремальных траекторий до перестройки

где $v_{gr}^{(i)}$ и G_i — значения соответственно групповой скорости и гауссовой кривизны поверхности Ферми в каждой из особых точек ($i = 1, 2$).

Полные значения $\Delta T(\alpha)$ могут быть измерены при достаточно точном измерении периода обращения в классических осцилляционных явлениях и достаточно близком приближении направления \mathbf{B} к границе перестройки структуры системы (1.1).

Нетрудно видеть при этом, что при пересечении границы соответствующая полная добавка к периоду обращения по экстремальной траектории меняется с величины

$$\Delta T(\alpha) = 2T_1(\alpha) + T_2(\alpha)$$

на величину

$$T_1(\alpha) + 2T_2(\alpha),$$

что выделяет перестройки на рис. 11–13 среди всех перестроек, изображенных на рис. 11–16. Для различения перестроек на рис. 11–13 между собой может, например, использоваться тест на возможность попадания участков замедления на траектории в скин-слое с каждой из сторон от линии соответствующей перестройки (см. [26]).

Для перестроек, приведенных на рис. 14, 15, мы имеем другую ситуацию. А именно, теперь экстремальные траектории имеют по два «участка замедления» с одной стороны от перестройки и по четыре «участка замедления» с другой. Легко видеть, что при переходе через соответствующую границу перестройки полная добавка к периоду обращения за счет «участков замедления» меняется с величины

$$\Delta T(\alpha) = T_1(\alpha) + T_2(\alpha)$$

на величину

$$2(T_1(\alpha) + T_2(\alpha)),$$

что также позволяет выделить эти перестройки среди шести перестроек первой группы.

Для различения перестроек на рис. 14, 15 могут быть использованы, например, их геометрические (и топологические) различия в \mathbf{p} -пространстве, которые переносятся также и в координатное пространство. Например для траектории, изображенной на рис. 14в, большинство ее участков могут находиться в скин-слое у границы образца как до пересечения границы перестройки, так и непосредственно после ее пересечения (мы считаем, что магнитное поле направлено параллельно границе образца). Для траектории, приведенной на рис. 15в, таких участков не существует, что обусловлено существенно другой топологией ее перестройки. Приведенное различие для рассматриваемых перестроек может быть установлено, например, по отсутствию или наличию скачка в направлении \mathbf{v}_{gr} на участке, попадающем в скин-слое, при пересечении границы перестройки. Отметим здесь также, что измерение соответствующего направления \mathbf{v}_{gr} практически всегда проводится при наблюдении классического циклотронного резонанса.

Перестройка, приведенная на рис. 16, отличается от всех других перестроек, рассмотренных выше, а именно, здесь каждая из экстремальных траекторий имеет четыре «участка замедления» (с каждой из сторон от границы перестройки). При переходе через соответствующую границу перестройки полная добавка к периоду обращения за счет «участков замедления» при этом не меняется и остается равной $2(T_1(\alpha) + T_2(\alpha))$. Легко видеть, что данное свойство позволяет однозначно идентифицировать приведенную перестройку среди всех перестроек первой группы.

Приведенные на рис. 17–21 оставшиеся типы перестроек системы (1.1), напротив, обладают тем свойством, что в них на цилиндрах малой высоты присутствуют траектории экстремальной площади, как до, так и после перестройки. Вместе с перестройкой, показанной на рис. 10, они образуют второй класс перестроек, дополняющий класс перестроек, приведенных на рис. 11–16. Все эти перестройки экспериментально легко отличимы от перестроек из первого класса, поскольку наряду со скачком в картине классических осцилляций в них происходит также скачок в картине квантовых осцилляций (резкая замена одних осцилляционных членов другими). Для экспериментального различения перестроек этого класса между собой могут быть также использованы описанные выше (а также другие) особенности осцилляционной картины при наблюдении классических осцилляций. Но, конечно, эти перестройки также отличаются друг от друга особенностями изменений в картине квантовых осцилляций, на которых нам и хотелось бы остановиться ниже.

Отметим сразу, что перестройки, приведенные на рис. 10, 17, 18, отличаются от перестроек, приведенных на рис. 19–21. А именно, для всех перестроек, изображенных на рис. 10, 17, 18, траектории экстремальной площади имеют минимальную площадь с одной стороны от перестройки и максимальную с другой стороны. В данном случае минимальность (максимальность) площади траектории означает, что площади траекторий увеличиваются (уменьшаются) при приближении к основаниям соответствующего цилиндра замкнутых траекторий при фиксированном направлении \mathbf{V} . Это, как мы уже говорили, происходит из-за наличия особых точек на основании таких цилиндров. В действительности, по той же причине, такое же увеличение (уменьшение) минимальной (максимальной) площади траектории (с неограниченно растущей производной) происходит и при приближении направле-

ния магнитного поля к границе перестройки структуры системы (1.1) (и уменьшении высоты соответствующего цилиндра замкнутых траекторий до нуля). Данное обстоятельство позволяет легко идентифицировать описываемые нами здесь траектории минимальной и максимальной площади, и, в частности, отличать экспериментально перестройки, приведенные на рис. 10, 17, 18, от перестроек, приведенных на рис. 19–21. Как также видно на рис. 10, 17, 18, во всех этих случаях траектории максимальной площади имеют большую площадь, нежели траектории минимальной площади.

Кроме указанного выше обстоятельства, можно еще отметить, что во всех перестройках, приведенных на рис. 10, 17, 18, траектории экстремальной площади имеют один и тот же тип (электронный или дырочный) до и после перестройки. Это обстоятельство может также быть легко установлено экспериментально по поведению квантовых осцилляций поперечной (холловской проводимости), что также позволяет отличить эти перестройки от приведенных на рис. 19–21.

Что касается различия перестроек, приведенных на рис. 10, 17, 18, то здесь, как и выше, можно сразу отметить отличие перестройки на рис. 17, состоящее в наличии трех участков замедления на траекториях цилиндров малой высоты, как по одну, так и по другую сторону от перестройки. Это обстоятельство позволяет сразу отличить перестройку на рис. 17 от двух других, например, по измерению периода обращения по траектории при наблюдении классических осцилляций или температурной зависимости квантовых осцилляций (замена $\Delta T(\alpha) = 2T_1(\alpha) + T_2(\alpha)$ на $T_1(\alpha) + 2T_2(\alpha)$). Но в действительности, этот факт легко установить также и при простом наблюдении квантовых осцилляций по поведению площади $S(\alpha)$ экстремальной траектории вблизи границы перехода, где ее главная зависимость от α обусловлена именно подходами к особым точкам системы (1.1). Для различения перестроек, приведенных на рис. 10 и рис. 18, можно, например, исследовать возможность попадания участка замедления в скин-слой у границы образца [26] при наблюдении циклотронного резонанса (оно возможно с одной стороны от перестройки для перестройки на рис. 10 и невозможно для перестройки на рис. 18 в силу особенностей геометрии траекторий).

Для перестроек, представленных на рис. 19, 20, экстремальные траектории имеют минимальную площадь как на исчезающем, так и на появляющемся цилиндре замкнутых траекторий. В обеих этих перестройках экстремальные траектории име-

ют разные типы (электронный и дырочный) по разные стороны от перестройки. Оба указанных обстоятельства могут быть легко установлены при наблюдении квантовых осцилляций различного типа (эффект Де Гааза – ван Альфена, эффект Шубникова – Де Гааза) и отличают перестройки на рис. 19, 20 от всех остальных перестроек. Различие между перестройками, приведенными на рис. 19 и рис. 20, заключается, например, в количестве участков замедления на соответствующих траекториях до и после перестройки. Как мы уже видели выше, это различие может быть также легко установлено при наблюдении как классических, так и квантовых осцилляций.

Перестройка, приведенная на рис. 21, как легко видеть, во многих аспектах отличается от всех рассмотренных нами ранее перестроек. В этой перестройке происходит исчезновение и появление сразу пары экстремальных траекторий. С одной стороны от перестройки обе траектории имеют один тип (электронный или дырочный), в то время как с другой стороны возникает пара траекторий различных типов. Данное обстоятельство может быть, в частности, установлено при наблюдении квантовых осцилляций проводимости, что позволяет сразу идентифицировать данную перестройку экспериментально. Отметим здесь также, что перестройка, приведенная на рис. 21, может обладать центральной симметрией, что позволяет практически всегда предполагать такую симметрию для реальных поверхностей Ферми.

Все наши рассуждения выше проводились без учета спина электронов. Легко видеть, что учет спиновых состояний приводит к расщеплению каждого из осцилляционных членов на два в соответствии с направлением спина вдоль или против направления \mathbf{B} . Кроме того, в рассмотрении мы не учитывали также влияния фазы Берри, которое может проявляться в материалах с отсутствием центра инверсии или симметрии по отношению к обращению времени. Возникновение ненулевой кривизны Берри в таких материалах может также привести к ряду интересных эффектов в рассматриваемой ситуации.

В заключение, нам хотелось бы упомянуть здесь еще явление магнитного пробоя, которое может наблюдаться в описываемой ситуации. Как хорошо известно, явление (внутризонного) магнитного пробоя наблюдается во многих веществах в достаточно сильных магнитных полях и, в частности, может приводить ко многим интересным эффектам, возникая на траекториях системы (1.1) различной геометрии (см., например, [7, 30–35]). Можно ожидать,

таким образом, что возникновение магнитного пробоя на описанных выше специальных экстремальных траекториях также должно привести к интересным явлениям, в частности, существенно повлиять на квантование электронных уровней для траекторий экстремальной площади. Надо сказать, однако, что возникновение магнитного пробоя на описанных траекториях может происходить лишь при довольно больших значениях B и лишь при очень точном приближении направления магнитного поля к границе перестройки топологической структуры системы (1.1) (см. [26]). Как следствие этого, ясная картина соответствующих эффектов должна наблюдаться лишь в весьма прецизионных экспериментах, позволяющих задавать направления магнитного поля с весьма большой точностью (и может быть отмечена лишь как некоторое размытие описанных выше резких изменений в осцилляционной картине в весьма узкой области вблизи границы перестройки при меньшем разрешении). В этой ситуации, безусловно, зависимость картины осцилляций (в особенности квантовых) от топологического типа перестройки в условиях развитого магнитного пробоя также представляет большой интерес.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены особенности осцилляционных явлений в металлах вблизи границ перестройки топологической структуры системы, описывающей адиабатическую динамику квазичастиц на сложных поверхностях Ферми. Каждая элементарная перестройка такой структуры связана с изменением картины замкнутых траекторий на поверхности Ферми, состоящей в исчезновении части цилиндров замкнутых траекторий и возникновением новых. Каждая из таких перестроек обладает своей топологической структурой, при этом имеется конечное число топологических типов таких перестроек. Важнейшим обстоятельством в каждой из перестроек является исчезновение части замкнутых траекторий, обладающих экстремальными значениями площади или периода обращения, что приводит к резким наблюдаемым изменениям в картине осцилляционных явлений в процессе перестройки. Особенности таких изменений при этом непосредственно связаны с геометрией исчезающих и появляющихся экстремальных траекторий, определяемой топологическим типом перестройки. В работе представлено детальное сопоставление особенностей изменения картины классических и квантовых ос-

цилляций в момент перестройки с ее топологическим типом и предложены методы идентификации топологических типов по этим особенностям. Предложенные методы, на наш взгляд, могут оказаться весьма полезными при исследовании геометрии достаточно сложных поверхностей Ферми с помощью классических или квантовых осцилляций в сильных магнитных полях.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-11-00331).

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *ЖЭТФ* **31**, 63 (1956).
2. И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **35**, 1251 (1958).
3. И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **38**, 188 (1960).
4. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, *УФН* **69**, 419 (1959).
5. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, *УФН* **78**, 411 (1962).
6. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, *УФН* **87**, 389 (1965).
7. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
8. M. I. Kaganov and V. G. Peschansky, *Phys. Rep.* **372**, 445 (2002).
9. С. П. Новиков, *УМН* **37**, 3 (1982).
10. А. В. Зорич, *УМН* **39**, 235 (1984).
11. И. А. Дынников, *УМН* **47**, 161 (1992).
12. И. А. Дынников, *Математические заметки* **53**, 57 (1993).
13. A. V. Zorich, *Proc. Geometric Study of Foliations*, (Tokyo, November 1993), ed. by T. Mizutani et al., World Scientific, Singapore (1994), p. 479.
14. I. A. Dynnikov, *Surfaces in 3-torus: Geometry of Plane Sections*, Proc. of ECM2, BuDA (1996).
15. I. A. Dynnikov, *Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2*, Vol. 179, AMS, Providence, RI (1997), p. 45.
16. И. А. Дынников, *УМН* **54**, 21 (1999).
17. С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, *Письма в ЖЭТФ* **63**, 809 (1996).
18. С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, *УФН* **168**, 249 (1998).
19. С. П. Царев, *Частное сообщение* (1992-93).
20. А. Я. Мальцев, *ЖЭТФ* **112**, 1710 (1997).
21. А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, *Труды МИАН* **302**, 296 (2018).
22. A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, *Solid State Phys., Bulletin of Braz. Math. Society, New Series* **34**, 171 (2003).
23. A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, *J. Stat. Phys.* **115**, 31 (2004).
24. А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, *УМН* **74**, 149 (2019).
25. С. П. Новиков, Р. Де Лео, И. А. Дынников, А. Я. Мальцев, *ЖЭТФ* **156**, 761 (2019).
26. А. Я. Мальцев, *ЖЭТФ* **158**, 1139 (2020).
27. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
28. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
29. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, *ДАН СССР* **96**, 963 (1954).
30. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **32**, 296 (1957).
31. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **33**, 387 (1958).
32. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **34**, 748 (1958).
33. М. Я. Азбель, *ЖЭТФ* **39**, 1276 (1960).
34. А. А. Слуцкий, *ЖЭТФ* **53**, 767 (1967).
35. A. Alexandradinata and L. Glazman, *Phys. Rev. B* **97**, 144422 (2018).

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ МНЕНИЯ В МУЛЬТИАГЕНТНОЙ СИСТЕМЕ С ИЗМЕНЯЮЩЕЙСЯ СТРУКТУРОЙ СВЯЗЕЙ В УСЛОВИЯХ ИНФОРМАЦИОННОГО ДАВЛЕНИЯ

Н. Е. Савицкая^{a*}, *Т. А. Федорова*^b

^a *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

^b *Санкт-Петербургский государственный морской технический университет
190121, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 24 апреля 2021 г.,
после переработки 1 июня 2021 г.
Принята к публикации 7 июня 2021 г.

Предложена модель динамики мнений в мультиагентной системе, представляющая изменение мнения агента как результат двух процессов. Первый — лавинообразное распространение информации между агентами по существующим в системе связям, в ходе которого участвующие в нем агенты под влиянием информационного давления со стороны соседей могут копировать их мнение. Второй — независимое изменение мнения агентами, не участвующими в информационной лавине, но находящимися в условиях избыточного информационного давления. Вероятности участия агента в том или другом процессе определяются основными параметрами модели: активностью агентов a , которая определяет вероятность для агента установить связи со своими соседями, и вероятностью p независимого изменения мнения агентом под давлением полученной информации. Показано, что в зависимости от соотношения этих параметров в системе возможна реализация одного из трех динамических режимов (фаз). Первый из них представляет собой состояние, близкое к динамическому паритету, и характеризуется унимодальной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения m с максимумом $m_0 = 0$. Во втором режиме система большую часть времени проводит в состояниях, близких к консенсусам. Этот режим описывается бимодальной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения с максимумами $m_{1,2} = \pm 1$. Третья динамическая фаза является переходной и в ней все значения среднего по системе мнения практически равновероятны, а функция плотности вероятности этой величины близка к таковой для равномерного распределения. Также показано, что предложенная модель позволяет исследовать процесс формирования мнения в мультиагентных системах в условиях, рассмотрение которых было невозможно в ранее разработанных моделях. В качестве примера рассмотрено влияние времени существования установившихся в системе связей на реализацию различных динамических режимов в ней. Показано, что при уменьшении этого времени область значений параметров, при которых реализуется бимодальный режим, сужается, т. е. достижение консенсуса в системе затрудняется.

DOI: 10.31857/S0044451021110109

1. ВВЕДЕНИЕ

Физика нелинейных неравновесных систем, состоящих из большого числа взаимодействующих элементов, является одним из наиболее актуальных

и перспективных направлений современной науки. Коллективная динамика в таких системах отличается широким спектром возможных режимов, реализация которых зависит от совокупности внешних и внутренних факторов, в том числе и стохастических [1]. Поскольку коллективные явления в многоэлементных системах представляют собой предмет исследований не только в физике, но также в биологии, химии, экологии и социальных науках, раз-

* E-mail: savitska@inbox.ru

работанные и развитые физиками методы и подходы для их изучения становятся в настоящее время востребованными для исследования таких разнообразных явлений, как распространение эпидемий [2], функционирование головного мозга [3], распространение слухов [4], разделение социальных сообществ по языковым, расовым и другим признакам [5] или динамика общественного мнения [6].

В качестве основного объекта изучения при математическом моделировании динамики мнений рассматривается мультиагентная система, представляемая в виде сети, в которой каждый узел — это агент, характеризующийся переменной, обозначающей его мнение, а наличие связи между узлами обозначает возможность взаимодействия соответствующих агентов. В модели также задаются вероятности изменения мнений агентов. Они определяются тем, какие факторы, влияющие на этот процесс, учитываются в данной модели. Это могут быть влияние ближайшего окружения, давление социальной группы или внешней информации, а также различные индивидуальные характеристики агентов [7].

Несмотря на то, что современные модели динамики мнений достаточно хорошо описывают характерные особенности этого явления, процесс их совершенствования ради дальнейшего приближения к реальности до сих пор далек от завершения. Одним из перспективных направлений этой работы является создание моделей, учитывающих, что агенты могут менять свое мнение, не только ориентируясь на окружение, но и спонтанно, независимо от него. Примером является стохастическая модель выборщика (noisy voter model) [8]. Ненулевая вероятность спонтанного изменения мнения агентом приводит, в частности, к тому, что описываемая такой моделью мультиагентная система никогда не достигает стабильного состояния, а постоянно мигрирует по ансамблю метастабильных состояний. При этом в зависимости от соотношения параметров модели в ней возможно возникновение различных динамических режимов [9]. Приобретенные благодаря собственной стохастичности динамические свойства таких моделей открывают широкие возможности их применения не только для описания динамики мнений [10], но и для моделирования экономических процессов [11], таких как формирование и колебания цен или устойчивость финансовых рынков. Однако как следствие того, что моделирование динамики мнений исторически базировалось на моделях спиновых систем, в частности, на модели Изинга и ее модификациях [12], в существующих на настоящий момент моделях агент, меняющий мнение на данном шаге эво-

люции, как правило, выбирается случайно, также случайно определяется, меняет ли агент свое мнение под влиянием окружения либо спонтанно, независимо от него.

В связи с этим, важным шагом нам представляется создание моделей динамики мнений, которые описывают и допускают исследование не только самого процесса, но и причин, побуждающих агента менять свое мнение определенным образом в тот или иной момент времени. Наиболее естественной причиной при этом можно считать информационное давление, испытываемое агентом в данный момент. В этом случае вполне логично выбирать способ изменения мнения агента в зависимости от того, оказывается ли это давление окружением в системе или извне. Так, если в текущий момент агент связан со своими соседями и получает от них информацию, то он принимает мнение соседа, а при отсутствии связей с окружением — изменяет мнение независимо.

Исходя из этих соображений, в настоящей работе мы построим модель динамики мнений, которая предполагает, что агенты могут менять свое мнение в результате двух процессов. Первый связан с обменом информацией между агентами внутри системы, по существующим на данный момент связям. В ходе этого процесса агенты под действием информационного давления со стороны своих соседей могут принимать их мнение. Второй процесс состоит в независимом изменении мнения агентами, не участвующими в данный момент в процессе обмена информацией, но испытывающими информационное давление, превосходящее некоторое критическое значение.

Для создания математической модели динамики такого типа необходимо, во-первых, рассмотреть мультиагентную систему, в которой агенты в каждый момент времени имеют возможность быть либо связанными со своими соседями, либо нет, и, во-вторых, описать процесс распространения информации в такой системе и вызываемые им изменения информационного давления на агентов. В предлагаемой нами модели система агентов будет представлена как динамическая квадратная решетка, система связей в которой будет меняться согласно алгоритму, впервые предложенному в работе [13]. Ключевым моментом при построении такой решетки является введение для каждого узла понятия «активности», определяющей вероятность данному узлу установить связи со своими ближайшими соседями в единицу времени. Далее, поскольку распространение информации в мультиагентных системах чаще всего рассматривается как лавинообразный процесс [14], мы положим, что информационное давление на

агентов также меняется лавинообразно. Для описания лавин информационного давления мы воспользуемся алгоритмами модели кучи песка [15], модифицированными для случая развития лавины на сети с меняющейся структурой связей [16, 17]. В отличие от классической абелевой модели кучи песка [18], в этом случае лавины, инициируемые поступлением внешней информации в систему, распространяются только по кластерам агентов, между которыми на данный момент существуют связи. Чтобы описать происходящие процессы, помимо бинарной переменной, обозначающей мнение, в модель будут введены две новые характеристики агентов: «активность» a , которая определяет вероятность агенту установить связи со своими ближайшими соседями, и динамическая пороговая переменная, имеющая смысл величины информационного давления, испытываемого агентом.

Динамика мнений в нашей системе развивается следующим образом. В каждый момент времени часть агентов становятся «активными», т. е. устанавливают связи со своими ближайшими соседями, формируя тем самым кластеры связанных между собой агентов. Возникающие связи будут существовать в системе на протяжении заранее заданного времени. Одновременно в систему извне поступает информация, что увеличивает информационное давление на агентов. В результате в некоторый момент времени информационное давление на одного или несколько агентов может превысить заранее заданное критическое значение. Если агент, информационное давление на которого превышает пороговое значение («надкритический» агент), в данный момент неактивен, т. е. не связан со своими ближайшими соседями, то он независимо от окружения с заданной вероятностью p меняет свое мнение на противоположное. Если же «надкритический» агент активен, то он понижает испытываемое им информационное давление, передавая информацию о своем мнении ближайшим соседям, и если они также активны, то принимают его мнение. Кроме того, увеличение информационного давления на этих агентов со стороны «надкритического» соседа также может сделать их «надкритическими», что приведет к лавине перераспределений информационного давления в системе и соответственно к лавине изменений мнения активных на данный момент агентов.

Таким образом, динамика в нашей системе будет представлять собой последовательность лавин изменений информационного давления, инициируемых поступлением в систему внешней информации, которые развиваются на кластерах связанных между

собой агентов. При развитии информационных лавин происходят также соответствующие изменения мнений: активные агенты принимают мнение своих соседей, со стороны которых информационное давление на них увеличивается, а неактивные «надкритические» агенты могут менять свое мнение независимо от окружения. Как и в случае стохастической модели выборщика (noisy voter model) [8], мультиагентная система, описываемая нашей моделью, при $p \neq 0$ и $a \neq 1$ никогда не приходит в стабильное состояние, в котором мнения агентов больше не менялись бы со временем, а мигрирует по целому набору метастабильных состояний.

Задачей настоящей работы является аналитическое и численное исследование динамических свойств мультиагентной системы, описываемой предлагаемой нами моделью. Мы планируем показать, что введение в модель новых параметров позволит расширить возможности изучения динамики мнений, раскрывая механизмы возникновения тех или иных режимов функционирования, в том числе и в условиях, рассмотрение которых было невозможно в ранее разработанных моделях.

Основным результатом работы будет построение фазовой диаграммы динамических режимов исследуемой системы в пространстве ее основных параметров: активности агентов a , которая определяет вероятность участия агента в информационной лавине, и вероятности p независимого изменения мнения агентом под давлением полученной информации. Мы покажем, что в зависимости от соотношения этих параметров в системе возможна реализация одного из трех динамических режимов (фаз). Первый из них представляет собой состояние, близкое к динамическому паритету. В этой фазе мнения агентов могут меняться, но среднее число агентов с положительным и отрицательным значениями мнений в каждый момент времени примерно одинаково. Эта фаза описывается унимодальной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения m с максимумом $m_0 = 0$. Находясь во втором режиме, система большую часть времени проводит в состояниях, близких к консенсусам, в которых значения мнений всех агентов либо положительны, либо отрицательны. Этот режим описывается бимодальной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения с максимумами $m_{1,2} = \pm 1$. Третья динамическая фаза является переходной и в ней все значения среднего по системе мнения практически равновероятны, а функция плотности вероятности этой величины близка к таковой для равномерного распределения.

Мы также изучим поведение нашей системы при различных временах существования установившихся между агентами связей, сравним два предельных случая. В первом из них система связей между агентами будет меняться только между очередными информационными лавинами, а в течение лавины будет оставаться неизменной, а во втором — будет меняться во время прохождения лавины. В результате мы покажем, что область значений параметров системы, при которых реализуется бимодальный режим, во втором случае несколько сужается, поскольку формирование консенсуса в этой ситуации усложняется тем, что в течение лавины один и тот же агент может и принять мнение соседа, и изменить его независимо.

Работа имеет следующую структуру. Раздел 2 посвящен построению и анализу модели динамики мнений в мультиагентной системе с меняющейся структурой связей. Здесь мы представим алгоритмы, описывающие процесс, а также из решения уравнения Фоккера–Планка для плотности вероятности среднего по системе мнения получим аналитическую оценку значений параметров системы, соответствующих каждому из возможных режимов ее функционирования. В разд. 3 приведем результаты численного моделирования поведения системы в различных режимах, а также при различных временах существования связей. Там же мы сравним результаты аналитического и компьютерного изучения системы и определим границы применимости используемого аналитического подхода. В заключении будут сформулированы основные выводы работы, представлены перспективы ее развития и описаны возможности применения результатов.

2. МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ МНЕНИЙ В МУЛЬТИАГЕНТНОЙ СИСТЕМЕ С ИЗМЕНЯЮЩЕЙСЯ СТРУКТУРОЙ СВЯЗЕЙ В УСЛОВИЯХ ИНФОРМАЦИОННОГО ДАВЛЕНИЯ

Рассматриваемая нами мультиагентная система будет представлена узлами квадратной решетки размером $L = N \times N$ на плоскости (x, y) , координаты которых будем обозначать (i, j) . Каждому агенту (узлу) в системе приписываются две динамические переменные: бинарная переменная $s_{i,j} = \pm 1$, обозначающая мнение данного агента, и пороговая переменная $z_{i,j}$, соответствующая величине информационного давления, которое испытывает агент. Также каждый агент имеет активность $a_{i,j}$, величина которой определяет вероятность агенту установить связи со своими ближайшими соседями в данный

момент времени. В настоящей работе мы рассмотрим наиболее простой случай, когда активности всех агентов одинаковы, $a_{i,j} = a$. Будем предполагать, что до начала эволюции системы значения $s_{i,j}$ на узлах распределены таким образом, что усредненное по системе мнение агентов равняется нулю, а величины $z_{i,j}$ распределены равномерно в интервале $[0, z_c]$, где $z_c = 4.5$ — пороговое значение для переменной $z_{i,j}$. Для каждой реализации процесса мы будем задавать величину p , определяющую вероятность агенту изменить свое мнение независимо от окружения, и время t_l , на протяжении которого будут существовать установившиеся в решетке связи. Варианты выбора t_l обсудим ниже.

Как было сказано выше, динамика мнений в нашей системе представляет собой последовательность лавинообразных изменений информационного давления, которые, в свою очередь, вызывают изменения мнений агентов. Используя алгоритмы из работы [17], развитие каждой информационной лавины и соответствующие изменения мнений агентов можно представить в виде следующей последовательности повторяющихся шагов.

1. Поступление внешней информации в систему.

В начале каждой лавины исследуемая мультиагентная система представляет собой набор узлов, связи между которыми пока не установлены. В этот момент случайно выбирается один из агентов, к которому поступает внешняя информация, и информационное давление z_{i_1, j_1} на нем увеличивается на единицу. Мы будем нумеровать акты поступления информации и следующие за этим информационные лавины индексом n .

2. Формирование кластеров связанных агентов.

Все множество агентов разделяется на два подмножества: активных и неактивных агентов. Вероятность агенту стать активным в данный момент времени k определяется величиной a . Каждый активный в данный момент времени агент устанавливает связи с четырьмя своими ближайшими соседями одновременно, независимо от того, активны они или нет. Возникает подрешетка G_l , представляющая собой набор связанных кластеров, в которых имеются активные и неактивные узлы (агенты). Индекс l нумерует возникающие подрешетки на протяжении всего времени эволюции системы.

3. Независимое изменение мнений неактивными агентами.

Неактивные в данный момент времени агенты, которые являются «надкритическими» ($z_{i_0, j_0}(k) > z_c$), с заданной вероятностью p меняют свое мнение на противоположное.

4. Изменение мнений активными агентами в результате «осыпания» их активных «надкритических» соседей.

Рассматриваются значения $z_{i,j}(k)$ на всех активных узлах существующей в данный момент подрешетки G_l . Если хоть один из узлов является «надкритическим» ($z_{i_0,j_0}(k) > z_c$), то происходит процесс его «осыпания» (“toppling”) и величина информационного давления z_{i_0,j_0} на данном узле уменьшается на $\Delta z = 4$. При этом мы считаем, что «осыпающийся» агент передает информацию о своем мнении ближайшим соседям, увеличивая тем самым величину информационного давления на них на единицу.

Активные на данный момент времени ближайшие соседи «осыпавшегося» агента меняют свое мнение на мнение этого агента.

На неактивных узлах подрешетки G_l информационное давление может только увеличиваться, но сами они не «осыпаются» и агенты не меняют мнения при «осыпании» соседей.

Мы считаем нашу систему открытой, поэтому в случае, если «осыпается» узел на границе решетки, имеющий меньше четырех ближайших соседей, то одна или две единицы $z_{i,j}$ уходят из системы.

Если в подрешетке G_l в данный момент времени k обнаруживается сразу несколько активных «надкритических» узлов, то они «осыпаются» одновременно.

Процессы «осыпания» всех «надкритических» на данный момент агентов и соответствующие изменения мнений активными и неактивными агентами (пункты 3, 4) происходят за одну единицу времени $\Delta k = 1$ и называются волной лавины.

5. В зависимости от заданного времени существования установившихся связей в решетке t_l действия повторяются следующим образом.

5а. Установившиеся в системе связи существуют на протяжении всего времени развития лавины ($t_l = T_{av}(n)$). В этом случае мы повторяем действие из пункта 4 до тех пор, пока все активные узлы сформированной подрешетки G_l не станут «подкритическими». На этом информационная лавина заканчивается и мы переходим к пункту 6.

Заметим, что в этом случае времена существования всех подрешеток t_l различны, как и длительности лавин $T_{av}(n)$, а индекс l , нумерующий шаги эволюции решетки, совпадает с индексом n , нумерующим лавины, $l = n$. При таких условиях подмножества активных и неактивных агентов в течение лавины не изменяются и, следуя пункту 3, неак-

тивные в данной лавине агенты могут менять свое мнение только один раз.

5б. Система связей в решетке меняется после каждой волны лавины ($t_l = 1$). В этом случае действия из пункта 4 проводятся один раз, после чего все связи в решетке аннулируются и повторяются действия из пунктов 2–5б. Лавина считается завершенной, если все узлы вновь возникшей согласно пункту 2 подрешетки являются «подкритическими».

В этом случае подмножества активных и неактивных узлов меняются после каждой волны лавины и каждый раз после их изменения ставшие неактивными узлы меняют свое мнение согласно пункту 3.

6. По окончании лавины все связи в существующей подрешетке аннулируются и процесс повторяется, согласно пунктам 1–6.

В рамках нашей модели мы считаем, что процессы аннулирования существующих связей и установления новых происходят за времена значительно меньшие, чем $\Delta k = 1$, т. е. практически мгновенно. Тогда мы можем представить описанные выше алгоритмы изменения переменной $z_{i,j}(k)$ в виде следующих конечно-разностных уравнений:

$$z_{i,j}(k+1) = z_{i,j}(k) - 4\delta_{i,j}(k)\theta[z_{i,j}(k) - z_c] + \delta_{i+1,j}(k)\theta[z_{i+1,j}(k) - z_c] + \delta_{i-1,j}(k)\theta[z_{i-1,j}(k) - z_c] + \delta_{i,j-1}(k)\theta[z_{i,j-1}(k) - z_c] + \delta_{i,j+1}(k)\theta[z_{i,j+1}(k) - z_c] + \xi_{i,j}(k). \quad (1)$$

Граничные условия для агентов на левой границе решетки записываются как

$$z_{1,j}(k+1) = z_{1,j}(k) - 4\delta_{1,j}(k)\theta[z_{1,j}(k) - z_c] + \delta_{2,j}(k)\theta[z_{2,j}(k) - z_c] + \delta_{1,j-1}(k)\theta[z_{1,j-1}(k) - z_c] + \delta_{1,j+1}(k)\theta[z_{1,j+1}(k) - z_c] + \xi_{1,j}(k). \quad (2)$$

Для агентов на других границах и угловых агентов граничные условия получаются из (1) аналогичным образом.

Здесь функция $\theta[x] = 1$ при $x > 0$ и $\theta[x] = 0$ при $x \leq 0$. Функция $\xi_{i,j}(k)$ описывает поступление внешней информации в систему, $\xi_{i,j}(k) = 1$ в момент начала очередной лавины k_{beg}^n и $\xi_{i,j}(k) = 0$ в остальные моменты времени. Функция $\delta_{i,j}(k)$ учитывает эволюцию решетки и зависит от того, активен ли узел (i, j) в данный момент времени или нет: $\delta_{i,j}(k) = 1$, если узел активен, и $\delta_{i,j}(k) = 0$, если узел неактивен в момент времени k . Так, если изменения решетки происходят только между лавинами, то на

протяжении лавины $\delta_{i,j}(k) = \delta_{i,j}(k_{beg}^n)$. Классическая модель кучи песка [18] получается из данных уравнений при $\delta_{i,j}(k) = 1$ для всех узлов (i, j) во все моменты времени k .

Происходящие одновременно с лавиной перераспределений информационного давления (1) измене-

ния мнений агентов $s_{i,j}$ можно описать следующим образом.

Если система связей в решетке не меняется в течение лавины, т. е. при $t_l = T_{av}(n)$, имеем

$$s_{i,j}(k+1) = \begin{cases} -s_{i,j}(k_{beg}^n) & \text{для } k = k_{beg}^n \text{ с вероятностью } p, \text{ при } (\delta_{i,j}(k_{beg}^n) = 0) \text{ и } (\theta[z_{i,j}(k_{beg}^n) - z_c] = 1), \\ s_{nn(i,j)}(k) & \text{при } (\delta_{i,j}(k_{beg}^n) = 1) \text{ и } (\delta_{nn(i,j)}(k_{beg}^n) = 1; \theta[z_{nn(i,j)}(k) - z_c] = 1), \\ s_{i,j}(k) & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (3)$$

Здесь индекс $nn(i, j)$ обозначает координаты ближайших соседей агента с координатами (i, j) .

Если система связей в решетке меняется после каждой волны лавины (при $t_l = 1$), то

$$s_{i,j}(k+1) = \begin{cases} -s_{i,j}(k) & \text{с вероятностью } p, \text{ если } (\delta_{i,j}(k) = 0) \text{ и } (\theta[z_{i,j}(k) - z_c] = 1), \\ s_{nn(i,j)}(k), & \text{если } (\delta_{i,j}(k) = 1) \text{ и } (\delta_{nn(i,j)}(k) = 1; \theta[z_{nn(i,j)}(k) - z_c] = 1), \\ s_{i,j}(k) & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (4)$$

Различия между алгоритмами (3) и (4) отражают тот факт, что при $t_l = T_{av}(n)$ подмножества активных и неактивных агентов не изменяются в течение лавины и неактивные агенты имеют возможность изменить свое мнение лишь один раз за лавину. В случае же $t_l = 1$ эти подмножества меняются после каждой волны лавины и также в начале каждой волны неактивные агенты могут поменять свое мнение. Также из (3) и (4) видно, что при $p = 0$ или $a = 1$ система утрачивает собственную стохастичность и в процессе развития лавин агенты могут только копировать мнение своих ближайших соседей. В этом случае наша модель становится подобной классической «модели выборщика» (voter model) (см., например, [7]) и, как следствие, в результате динамики система конечного размера всегда приходит в стабильное состояние.

мных агентов в соответствующие моменты времени.

На рис. 1 и 2 представлен процесс прохождения n -й информационной лавины и вызываемая ею динамика мнений в мультиагентной системе размером $L = 5 \times 5$ при $t_l = T_{av}(n)$ и $t_l = \Delta k = 1$ соответственно. Величина активности в этих случаях задана $a = 0.08$, а вероятность изменения мнения для неактивных «надкритических» агентов $p = 0.5$. На этих рисунках черные кружки обозначают агентов, для которых $s_{i,j}(k) = 1$, а светлые кружки — агентов с $s_{i,j}(k) = -1$. В скобках указаны величины информационного давления $z_{i,j}(k)$ для рассматриваемых

Рисунок 1 иллюстрирует случай, когда система связей между агентами не меняется во время прохождения очередной лавины $t_l = T_{av}(n)$. Это означает, что подмножества активных и неактивных агентов, сформированные в момент начала лавины, на ее протяжении не изменяются. На рис. 1а представлена наша мультиагентная система в момент поступления в нее внешней информации, который является моментом начала n -й лавины $k = k_{beg}^n$. Система представляет собой набор несвязанных узлов, так как по окончании предыдущей лавины все связи в решетке были аннулированы. Информация поступает к агенту с координатами $(2, 4)$, увеличивая информационное давление на него на единицу ($\xi_{i,j}(k_{beg}^n) = 1$). В этот же момент часть агентов, определяемая заданной величиной a ($L^{act} = 2$), становятся активными и устанавливают связи со своими ближайшими соседями. На рис. 1б видно, что активными становятся агенты с координатами $(4, 2)$ и $(4, 3)$ ($\delta_{4,2}(k_{beg}^n) = \delta_{4,3}(k_{beg}^n) = 1$). Остальные агенты в системе неактивны. Далее происходят следующие изменения. Один из двух неактивных «надкритических» агентов с координатами $(2, 3)$ ($\delta_{2,3}(k_{beg}^n) = 0$, $\theta[z_{2,3}(k_{beg}^n) - z_c] = 1$) независимо меняет свое мнение на противоположное. Активный «надкритический» агент с координатами $(4, 2)$ ($\delta_{4,2}(k_{beg}^n) = 1$, $\theta[z_{4,2}(k_{beg}^n) - z_c] = 1$) понижает испытываемое им информационное давление на $\Delta z = 4$ за счет пере-

дачи информации о своем мнении ближайшим соседям, увеличивая тем самым информационное давление на них. Направления перераспределения информационного давления обозначены стрелками. Одновременно активный агент с координатами (4, 3) ($\delta_{4,3}(k_{beg}^n) = 1$) копирует мнение своего «осыпавшегося» соседа. Все эти изменения происходят в течение первой волны информационной лавины, и к моменту ее окончания $k = k_{beg}^n + 1$ распределение мнений и информационного давления по агентам представлено на рис. 1в. Согласно уравнениям (1) и алгоритмам (3) имеем, например, для агентов с координатами (2, 3) и (4, 3):

$$\begin{aligned} z_{4,3}(k_{beg}^n + 1) &= z_{4,3}(k_{beg}^n) + \\ + \delta_{4,2}(k_{beg}^n)\theta[z_{4,2}(k_{beg}^n) - z_c] &= 4 + 1 = 5, \\ s_{4,3}(k_{beg}^n + 1) &= s_{4,2}(k_{beg}^n) = 1, \\ s_{2,3}(k_{beg}^n + 1) &= -s_{2,3}(k_{beg}^n) = -1. \end{aligned}$$

Аналогично можно представить и другие изменения информационного давления и мнений за первую волну лавины. Далее, после «осыпания» агента (4, 2), активный агент (4, 3) становится «надкритическим» и, следовательно, начинается вторая волна информационной лавины, в течение которой «осыпается» агент (4, 3) и информационное давление перераспределяется по его ближайшим соседям, согласно (1). Среди них нет ни одного активного агента с мнением, противоположным мнению агента (4, 3), поэтому согласно (3) за вторую волну лавины ни один агент своего мнения не меняет. Поскольку на момент окончания второй волны лавины $k = k_{beg}^n + 2$ оказывается, что ни для одного активного агента существующей подрешетки информационное давление не превышает критического значения, лавина заканчивается (рис. 1г). Информационное давление на неактивных узлах (4, 1) и (4, 4) превышает критическое значение, но в процессе данной лавины они не осыпаются, а лишь накапливают его. После того как лавина заканчивается, подрешетка G_l перестает существовать и система вновь имеет вид несвязанного набора агентов. Далее происходит очередное поступление информации в систему (пункт 1) и возникает подрешетка G_{l+1} , на которой будет развиваться следующая лавина.

Рисунок 2 иллюстрирует случай, когда система связей между агентами меняется после каждой волны лавины, $t_l = 1$. На рис. 2а представлены изменения, происходящие за первую волну лавины, которая развивается, как и в предыдущем случае, вызывая те же изменения мнений. Так как $t_l = 1$, то после осыпания узла (4, 2) и изменения мнения его активным соседом (4, 3) подрешетка G_l , сформиро-

вавшаяся в момент времени (k_{beg}^n) перестает существовать и мгновенно формируется новая подрешетка G_{l+1} . Она состоит из активных узлов (3, 3) и (4, 2) ($\delta_{3,3}(k_{beg}^n + 1) = \delta_{4,2}(k_{beg}^n + 1) = 1$) и соседних с ними неактивных узлов (рис. 2б). Согласно (4) два из четырех неактивных «надкритических» агентов сформировавшейся подрешетки (4, 1) и (5, 4) меняют свое мнение на противоположное, поскольку

$$\delta_{4,1}(k_{beg}^n + 1) = \delta_{5,4}(k_{beg}^n + 1) = 0,$$

$$\theta[z_{4,1}(k_{beg}^n) - z_c] = \theta[z_{5,4}(k_{beg}^n + 1) - z_c] = 1.$$

Так как активные узлы существующей на момент времени $k = k_{beg}^n + 1$ подрешетки являются «подкритическими», то лавина на шаге $k = k_{beg}^n + 2$ заканчивается (рис. 2в) и подрешетка G_{l+1} перестает существовать. Далее происходит очередное возмущение системы (пункт 1) и возникает подрешетка G_{l+2} , на которой начнет развиваться следующая лавина.

Рисунки 1 и 2 на примере одной лавины демонстрируют, что время существования установившихся в системе связей t_l влияет на ее пространственно-временное развитие и, соответственно, на динамику мнений агентов.

Прежде чем перейти к моделированию поведения нашей системы, сделаем аналитические оценки ожидаемых результатов.

В качестве основной характеристики при изучении динамики мнений будем рассматривать среднее по системе мнение агентов

$$m(t) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} s_{i,j}(t).$$

При аналитическом изучении процесса перейдем к обозначению времени t , чтобы подчеркнуть, что в отличие от шага дискретного времени $\Delta k = 1$ величина Δt будет принимать любые значения. Поскольку динамика нашей системы стохастическая, характеризовать ее удобнее всего функцией $\rho(m, t)$ — плотностью вероятности для среднего по системе мнения иметь значение m в момент времени t . Аналитическое выражение для $\rho(m, t)$ мы можем получить, решив уравнение Фоккера – Планка. Предположим, что за некоторый малый промежуток времени Δt величина m может возрасти или уменьшиться на Δm , или же остаться прежней. Тогда получим следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \rho(m, t + \Delta t) &= (1 - w^-(m) - w^+(m))\rho(m, t) + \\ &+ w^+(m - \Delta m)\rho(m - \Delta m, t) + \\ &+ w^-(m + \Delta m)\rho(m + \Delta m, t), \quad (5) \end{aligned}$$

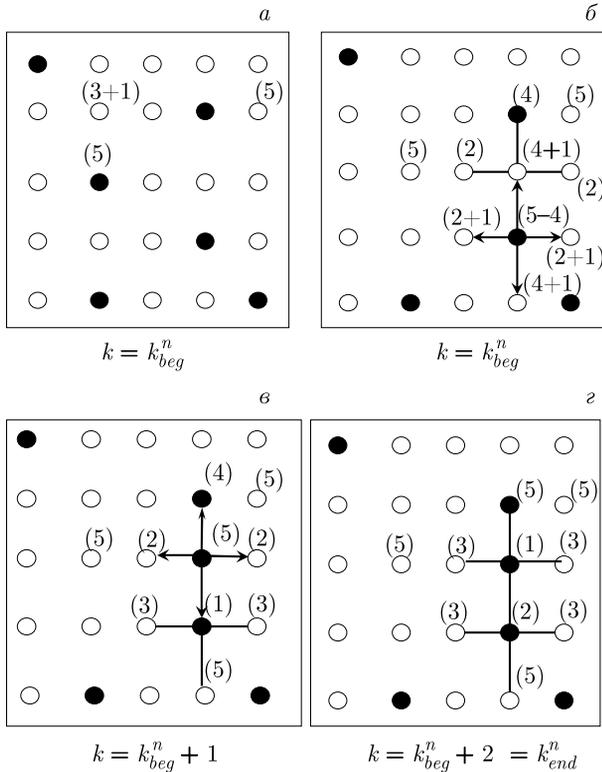


Рис. 1. Изменение мнений в группе агентов в результате прохождения информационной лавины при $t_l = T_{av}(n)$. Агенты с $s_{i,j} = 1$ обозначены черными кружками, а с $s_{i,j} = -1$ — светлыми кружками. Направления перераспределения информационного давления при «осыпании» агента указаны стрелками на соответствующих связях, цифры в скобках обозначают величину $z_{i,j}$ для агента в момент времени k . а) Начало первой волны лавины. К агенту с координатами (2, 3) поступает информация. б) Продолжение первой волны лавины. Активные агенты устанавливают связи со своими соседями. Неактивный «надкритический» агент с координатами (2, 3) меняет свое мнение. Происходит «осыпание» активного агента с координатами (4, 2), в результате агент с координатами (4, 3) меняет мнение на мнение агента с координатами (4, 2), от которого получает информацию. в) Окончание первой и начало второй волн лавины. Активный агент с координатами (4, 3) становится «надкритическим» и осыпается, неактивные узлы принимают по единице энергии, но в течение данной лавины не осыпаются. г) Окончание второй волны и лавины в целом. После осыпания активного агента (4, 3) информационное давление на соседних неактивных агентов увеличивается, но в течение данной лавины они не осыпаются и не меняют своего мнения. Поскольку для всех активных агентов в существующей подрешетке $z_{i,j} \leq z_c$, лавина заканчивается, все существующие в системе связи аннулируются

где функции $w^\pm(m)$ определяют вероятность величине m увеличиться (уменьшиться) на Δm за промежуток времени Δt . Разложив $w^\pm(m)$ и $\rho(m, t)$ в ряд по малой величине Δm до второго порядка, мы можем записать

$$\begin{aligned} \frac{\rho(m, t + \Delta t) - \rho(m, t)}{\Delta t} &= \\ &= -\frac{\partial}{\partial m} \frac{\Delta m}{\Delta t} (w^+(m) - w^-(m))\rho(m, t) + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m^2} \frac{\Delta m^2}{\Delta t} (w^+(m) + w^-(m))\rho(m, t). \end{aligned} \quad (6)$$

Чтобы получить выражение для $\rho(m, t)$, мы сделаем предположение, что в нашей системе возможно ввести малую величину изменения времени $\Delta t \sim L^{-1}$, за которую только один агент меняет свое мнение, т.е. происходит изменение m на $\Delta m = 2/L \ll 1$. Тогда, переходя к пределу $\Delta t \rightarrow 0$ в (6), получим уравнение Фоккера – Планка для $\rho(m, t)$ и для интересующей нас стационарной плотности вероятности $\rho^{st}(m)$ –

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(m, t) &= -\frac{\partial}{\partial m} \frac{\Delta m}{\Delta t} \times \\ &\times (w^+(m) - w^-(m))\rho(m, t) + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m^2} \frac{\Delta m^2}{\Delta t} (w^+(m) + w^-(m))\rho(m, t), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \rho^{st}(m) &= \frac{C}{w^+(m) + w^-(m)} \times \\ &\times \exp \left(L \int \frac{(w^+(m') - w^-(m'))}{(w^+(m') + w^-(m'))} dm' \right), \end{aligned}$$

где C – нормировочная константа, которая получается из условия

$$\int_{-1}^1 \rho^{st}(m) dm = 1.$$

Для того чтобы проанализировать поведение $\rho^{st}(m)$ в зависимости от параметров системы, необходимо определить функции $w^\pm(m)$. Для этого рассмотрим величины ρ^\pm – доли агентов соответственно с положительным и отрицательным мнением, причем $m = \rho^+ - \rho^-$, а $\rho^+ + \rho^- = 1$. Тогда вероятность агенту с мнением $s_{i,j} = 1$ находиться в окружении u агентов с $s_{i,j} = 1$ и $(4 - u)$ агентов с $s_{i,j} = -1$ можно представить как $\rho^{u+1} \rho^{-(4-u)}$. Аналогичное выражение можно записать и для агентов с отрицательным мнением. Также обозначим через $g(t)$ вероятность агенту иметь $z_{i,j} > z_c$ в момент времени t . Тогда вероятность осыпания узла можно представить как совместную вероятность $g(t)a$, а

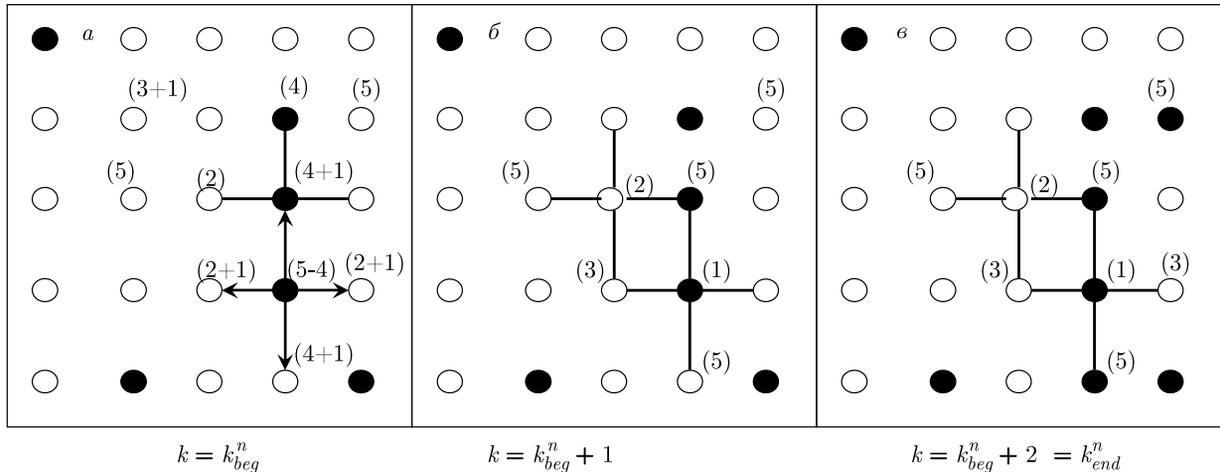


Рис. 2. Изменение мнений в группе агентов в результате прохождения информационной лавины в случае $t_l = 1$. Агенты с $s_{i,j} = 1$ обозначены черными кружками, а с $s_{i,j} = -1$ — светлыми кружками. Направления перераспределения информационного давления указаны при «осыпании» агента стрелками на соответствующих связях, цифры в скобках обозначают величину $z_{i,j}$ на узле в момент времени k . а) Первая волна лавины протекает так же, как на рис. 1а,б,в. После ее прохождения все существующие в системе связи аннулируются. б) Состояние системы на момент окончания первой и начала второй волн лавины. Возникает новая подрешетка, сформированная активными агентами с координатами (3, 3) и (4, 2). в) Состояние системы на момент окончания второй волны лавины. За вторую волну независимо от окружения мнение меняют неактивные «надкритические» агенты с координатами (4, 1) и (5, 4). Так как все активные агенты в существующей подрешетке имеют $z_{i,j} < z_c$, то «осыпаний» не происходит и, соответственно, ни один активный агент не меняет своего мнения. Лавина заканчивается и все существующие связи аннулируются

вероятность агенту изменить мнение независимо от соседей — как $pg(t)(1 - a)$. Учитывая, что активный агент может поменять свое мнение, если у него имеется хотя бы один сосед с противоположным мнением, который осыпается на данном шаге, мы можем записать следующие выражения для $w^\pm(m)$:

$$w^+ = \frac{1}{4}g(t)a^2(4\rho^+\rho^{-4} + 12\rho^{+2}\rho^{-3} + 12\rho^{+3}\rho^{-2} + 4\rho^{+4}\rho^-) + \rho^-(1 - a)g(t)p = \frac{1}{4}g(t)a^2(1 - m^2) + \rho^-(1 - a)g(t)p, \quad (8)$$

$$w^- = \frac{1}{4}g(t)a^2(4\rho^-\rho^{+4} + 12\rho^{-2}\rho^{+3} + 12\rho^{-3}\rho^{+2} + 4\rho^{+4}\rho^+) + \rho^+(1 - a)g(t)p = \frac{1}{4}g(t)a^2(1 - m^2) + \rho^+(1 - a)g(t)p, \quad (9)$$

$$w^+ - w^- = -(1 - a)g(t)pm, \quad (10)$$

$$w^+ + w^- = \frac{1}{2}g(t)a^2(1 - m^2) + (1 - a)g(t)p. \quad (11)$$

Как видно из выражений (8)–(11), соответствующие вероятности зависят от величин $g(t)$, т.е.

от вероятности агенту испытывать в данный момент «надкритическое» информационное давление, а они, в свою очередь, определяются тем, как развивается информационная лавина.

Ранее в работе [17] было исследовано развитие лавин на решетке с изменяющейся структурой связей при различных значениях активностей узлов a и времени существования установившихся связей t_l . Было показано, что величиной, определяющей характер лавинообразного процесса, является среднее число узлов (агентов), остающихся «надкритическими» на момент окончания очередной лавины $\langle N_a \rangle$. Становясь активными на следующем шаге эволюции, эти узлы дают начало новым каскадам «осыпаний» в следующей лавине. Если их число велико, то возникающая лавина будет представлять собой совокупность независимых каскадов «осыпаний» примерно одинаковых размеров, возникающих на разных участках решетки. В случае же, когда начало лавине может дать малое число узлов, она локализуется на едином кластере узлов, размер которого может быть любым, как малым, так и катастрофически большим. Также существует переходный режим, в котором лавина может состоять из отдельных каскадов «осыпаний», возникающих на

различных участках решетки, но при этом размеры этих каскадов различны. Эти три типа лавинообразной динамики характеризуются различным поведением функции плотности вероятности для размеров возникающих в системе лавин $\rho(S)$. Размер лавины при этом вычисляется как полное число актов осыпания за время лавины:

$$S(n) = \sum_{k=k_{beg}^n}^{k=k_{end}^n} \sum_l \sum_{G_l} \theta \left[z_{i,j}^{a,l}(k) - z_c \right], \quad (12)$$

где первое суммирование проводится по всему времени (или по всем волнам) лавины k от ее начала $k = k_{beg}^n$ до окончания $k = k_{end}^n$, второе суммирование — по всем подрешеткам, которые возникают во время данной n -й лавины, третье суммирование — по узлам существующей в данный момент времени подрешетки G_l . Таким образом, величина $S(n)$ имеет смысл полного числа активных агентов, осыпавшихся во время лавины, при этом «осыпающийся» узел будет учтен столько раз, сколько раз он осыпался за время лавины.

Плотность вероятности размеров лавин $\rho(S)$ при $\langle N_a \rangle \gg 1$ близка к таковой для нормального распределения. В случае малого $\langle N_a \rangle$ она демонстрирует степенное поведение: $\rho(S) \sim S^{-\alpha}$. При переходном режиме $\rho(S)$ убывает по экспоненциальному закону: $\rho(S) \sim \exp(-S/\beta)$. В работе [17] также было показано, что величина $\langle N_a \rangle$ зависит как от активностей агентов a , так и от времени существования установившихся связей t_l , и была получена аналитическая оценка для $\langle N_a \rangle$. В случае, когда структура связей в решетке на протяжении очередной лавины остается неизменной, имеем

$$\langle N_a \rangle \approx \frac{(1-a)\langle S \rangle}{a},$$

где $\langle S \rangle$ — средний по реализации процесса размер лавины. В случае, когда структура связей меняется на каждом шаге лавины, $\langle N_a \rangle \rightarrow 0$ практически для всех a .

Возвращаясь к уравнениям (7), воспользуемся результатами работы [17] и сделаем на их основе ряд упрощающих предположений. Проанализируем сначала случай, когда структура связей в решетке остается неизменной все время развития информационной лавины. Поскольку в этом случае на протяжении всей лавины неактивными остаются одни и те же агенты и их число

$$\langle N_a \rangle = \frac{(1-a)\langle S \rangle}{a},$$

вероятность изменить мнение независимо от соседей для них можно представить как

$$p \frac{\langle N_a \rangle}{L} \quad \text{или} \quad p \frac{\langle s \rangle (1-a)}{a}.$$

Мы также допустим, что в выражениях (8) и (9) вероятность узлу «осыпаться» $g(t)a$ можно оценить как среднюю вероятность узлу «осыпаться» за время лавины $\langle s \rangle = \langle S \rangle / L$. При подобных допущениях, ограничения для которых мы обсудим в следующем разделе, из (7) получим для $\rho^{st}(m)$ в случае, когда установившиеся связи существуют на протяжении всего времени лавины:

$$\begin{aligned} \rho^{st}(m) &= \\ &= C \left(\frac{1}{2} \langle s \rangle a (1-m^2) + \frac{(1-a)^2 \langle s \rangle p}{a} \right)^{P-1}, \quad (13) \end{aligned}$$

$$P = L p \frac{(1-a)^2}{a^2}. \quad (14)$$

Из выражения (13) видно, что в зависимости от величины параметра P изменяется вид функции $\rho^{st}(m)$, а следовательно, и режим динамики системы. При $P < 1$ стационарная плотность вероятности $\rho^{st}(m)$ имеет два максимума при $m = \pm 1$. В соответствующем такому бимодальному виду $\rho^{st}(m)$ режиме система большую часть времени эволюции находится в состояниях «положительного» или «отрицательного» консенсуса, для которых значение m равно соответственно $m = \pm 1$. Переходы между этими состояниями происходят относительно быстро. При $P = 1$ плотность вероятности $\rho^{st}(m)$ соответствует равномерному распределению m . В этом случае система может равновероятно находиться в состояниях с любым значением $m \in [-1, 1]$. При $P > 1$ стационарная функция плотности вероятности имеет единственный максимум при $m = 0$. Соответствующий такому унимодальному виду $\rho^{st}(m)$ режим является состоянием «динамического паритета». Это означает, что большую часть времени эволюции число агентов с мнением $s_{i,j} = 1$ в системе равно числу агентов с мнением $s_{i,j} = -1$ и $m(n) = 0$, хотя значения $s_{i,j}$ на узлах меняются.

Из (13) видно, что параметр P пропорционален отношению вероятностей двух процессов, в результате которых агент в нашей модели может изменить свое мнение. Величина $p \langle s \rangle (1-a)^2 / a$ характеризует вероятность независимого изменения мнения неактивным агентом, а величина $\langle s \rangle a$ — вероятность активному агенту принять мнение соседа в ходе информационной лавины. Однако коэффициент пропорциональности является размер системы L . Чтобы понять природу этой зависимости, рассмотрим случай $p = 0$, т. е. ситуацию, когда агенты

в системе не имеют возможности менять свое мнение независимо, а могут лишь копировать мнение соседей в ходе информационных лавин. Как видно из выражений для $w^\pm(m)$ и уравнения (13), в этом случае в системе возможна реализация только «положительного» или «отрицательного» консенсуса. При этом, достигнув одного из них, система будет в нем оставаться, потому что именно возможность независимого от соседей изменения мнений агентами обеспечивает разрушение консенсусов и дальнейшую динамику. Пользуясь тем же приемом, что и для получения выражения для $\rho(m, t)$, мы можем написать уравнение для определения времени $T(m)$, которое требуется системе для достижения консенсуса из состояния со средним по системе мнением равным m , при условии $p = 0$ [7]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial m} \frac{\Delta m}{\Delta t} (w^+(m) - w^-(m))T(m) + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial m^2} \frac{\Delta m^2}{\Delta t} (w^+(m) + w^-(m))T(m) = -1, \\ & T(-1) = T(1) = 0, \\ & w^+(m) - w^-(m) = 0, \\ & w^+(m) + w^-(m) = \frac{1}{2} \langle s \rangle a (1 - m^2), \\ & T(m) = \frac{1}{2} \frac{L}{\langle s \rangle a} (\ln 4 + (1 - m) \ln(1 - m) - \\ & \quad - (1 + m) \ln(1 + m)). \end{aligned} \tag{15}$$

Таким образом, время, которое необходимо системе для достижения консенсуса при $p = 0$, зависит от размера системы. Учитывая полученное, мы видим, что управляющий параметр P можно представить как произведение величины, пропорциональной $T(0)$, и вероятности независимого изменения мнения агентом. Физически мы можем трактовать данный параметр как количество агентов, меняющих свое мнение независимо от соседей за время, необходимое системе для достижения консенсуса из состояния $m = 0$ при условии $p = 0$. Эта величина качественно характеризует процесс разрушения кластеров агентов с единым мнением, возникающих за счет копирования мнения соседей агентами, участвующими в лавине. То есть при $P < 1$ процесс копирования мнения соседей превалирует над независимым от окружения изменением мнения, что приводит к формированию консенсуса, а при $P > 1$ формирование кластеров агентов с единым мнением идет медленнее, чем их разрушение, что приводит к реализации динамического паритета.

При переходе к случаю, когда система связей в решетке будет меняться на каждом шаге лавины

$t_l = 1$, мы также сделаем упрощающее предположение, что $g(t) = \langle g \rangle$, где $\langle g \rangle$ — средняя доля агентов с $z_{i,j} > z_c$ на одном шаге лавины. Тогда мы получим

$$\begin{aligned} \rho^{st}(m) &= \\ &= C^* \left(\frac{1}{2} \langle g \rangle a^2 (1 - m^2) + (1 - a) \langle g \rangle p \right)^{P^* - 1}, \end{aligned} \tag{16}$$

$$P^* = Lp \frac{1 - a}{a^2}, \tag{17}$$

где C^* — нормировочная константа.

Из (16) видно, что в системе возможны те же режимы динамики, что и в случае, когда система связей не меняется в течение лавины. Однако при фиксированных значениях $a \neq 0$ ($a \neq 1$) и $p \neq 0$ параметр P^* больше параметра $P = P^*(1 - a)$. Это означает, что область реализации бимодального режима в системе сужается по сравнению со случаем, когда система связей в системе на протяжении лавины неизменна. Этот результат адекватно отражает реальную ситуацию формирования единого мнения в мультиагентной системе, поскольку при частом изменении структуры связей один и тот же агент на протяжении лавины может на одном шаге принять мнение соседа, находясь с ним в связи, а на следующем изменить свое мнение независимо от окружения, будучи не связанным с другими агентами. Это приводит к более медленному формированию консенсуса.

Таким образом, опираясь на полученные при сделанных упрощающих предположениях оценки, в нашей системе можно ожидать реализации трех динамических режимов (фаз), каждый из которых описывается характерной стационарной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения $\rho^{st}(m)$. Реализация той или иной фазы зависит от величины параметра P или P^* , пропорционального отношению вероятностей двух основных процессов, влияющих на изменение мнений агентов: копирования агентом мнения соседа, с которым он связан и от которого он получает информацию в ходе лавины, и независимого от окружения изменения мнения агентом, не связанным в данный момент со своими соседями. При $P < 1$ ($P^* < 1$) функция $\rho^{st}(m)$ бимодальна, что отражает тот факт, что система большую часть времени своей эволюции проводит в состояниях «положительного» ($m = 1$) или «отрицательного» ($m = -1$) консенсуса. При $P > 1$ ($P^* > 1$) функция унимодальна, что соответствует режиму динамического паритета с $m = 0$. При $P = 1$ ($P^* = 1$) функция $\rho^{st}(m)$ соответствует равномерному распределению m на интервале $[-1, 1]$.

3. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА РЕЖИМОВ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МУЛЬТИАГЕНТНОЙ СИСТЕМЫ С ИЗМЕНЯЮЩЕЙСЯ СТРУКТУРОЙ СВЯЗЕЙ В УСЛОВИЯХ ИНФОРМАЦИОННОГО ДАВЛЕНИЯ

В данном разделе мы представим результаты компьютерного моделирования поведения системы, описываемой нашей моделью, и сравним их с аналитическими оценками, полученными выше.

Расчеты проводились для систем различных размеров ($L = 10^4$, $L = 2500$, $L = 900$) при различных значениях активности агентов a и вероятности независимого изменения мнений p , при двух временах существования установившихся связей $t_l = T_{av}(n)$ и $t_l = 1$.

Во всех случаях, эволюционируя по описанным выше алгоритмам, система после некоторого переходного периода достигала стационарного (нестабильного) состояния. Ориентируясь на критерии, используемые в расчетах для модели кучи песка [18], мы считали, что система находится в стационарном состоянии, если среднее значение информационного давления в системе на момент окончания лавины

$$z(k_{end}^n) = \frac{1}{L} \sum z_{i,j}(k_{end}^n)$$

лишь незначительно флуктуирует вокруг средней по лавинам величины z_{av} . В этом состоянии мы следили за системой на протяжении N_{av} лавин, причем величина N_{av} менялась в пределах 10^7 – 10^9 лавин для различных размеров системы и величин a и p .

В качестве характеристики, описывающей динамику мнений в системе в стационарном состоянии, мы рассматривали среднее по системе мнение на момент окончания n -й лавины $m(n)$:

$$m(n) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} s_{i,j}(k_{end}^n), \quad (18)$$

где $s_{i,j}(k_{end}^n)$ — мнение агента на узле (i, j) на момент окончания n -й лавины. По окончании реализации процесса длительностью N_{av} лавин мы рассчитывали плотность вероятности $\rho^{st}(m)$, которая характеризует режим функционирования системы.

Первым важным результатом моделирования является тот факт, что при изучении эволюции среднего по системе мнения $m(n)$ для систем всех рассмотренных нами размеров при различных t_l мы наблюдали изменение вида функции $\rho^{st}(m)$ в зависимости от величины параметра P (P^*), адекватно описываемое оценками (13), (16).

Для иллюстрации на рис. 3 представлены типичные реализации $m(n)$ и соответствующие им функции плотности вероятности $\rho^{st}(m)$ для системы размером $L = 10^4$ в случае, когда система связей между агентами в течение информационной лавины не меняется, $t_l = T_{av}(n)$. На рис. 3а,з представлены результаты для $a = 0.85$, $p = 0.0003$ ($P = 0.11$). Как мы видим, функция $\rho^{st}(m)$ имеет два максимума при значениях $m = \pm 1$. Поведение $m(n)$ в этом режиме показывает, что система большую часть времени эволюции проводит в состоянии консенсусов с $m(n) = \pm 1$, переходы между этими состояниями совершаются относительно быстро. На рис. 3в,е представлены зависимости $\rho^{st}(m)$ и $m(n)$ для $a = 0.85$, $p = 0.03$ ($P = 11.2$). Мы видим, что функция $\rho^{st}(m)$ имеет один максимум при $m = 0$, а значения $m(n)$ колеблются в окрестности $m = 0$, не достигая значений $m = \pm 1$. Рисунки 3б,д иллюстрируют случай $a = 0.85$, $p = 0.0036$ ($P = 1.3$). Здесь функция $\rho^{st}(m)$ не является ни унимодальной, ни бимодальной, а близка к плотности вероятности равномерного распределения на интервале $m \in [-1, 1]$, и величина $m(n)$ может принимать любое значение из данного интервала.

Нашей основной задачей было построение фазовой диаграммы для режимов функционирования рассмотренной нами системы в пространстве ее параметров a и p для различных времен существования связей ($t_l = 1$ и $t_l = T_{av}(n)$). В качестве критерия для определения значений a и p , при которых происходит смена динамических фаз и переход от бимодальной к унимодальной функции $\rho^{st}(m)$, мы, следуя работе [19], использовали тот факт, что при данном переходе все значения для $m(n)$ равновероятны, и это означает, что величина усредненного по реализации модуля среднего по системе мнения должна быть $\langle |m| \rangle \approx 0.5$ и стандартное квадратичное отклонение этой величины $\sigma(\langle |m| \rangle) \approx 0.2886$.

На рис. 4а,б представлены фазовые диаграммы динамических режимов систем размером $L = 900$ и $L = 2500$ в пространстве параметров a и p в случае, когда система связей между агентами не меняется в течение лавины ($t_l = T_{av}(n)$). В свою очередь, на рис. 4в,г представлены фазовые диаграммы для динамических режимов систем размером $L = 900$ и $L = 2500$ в пространстве параметров a и p в случае, когда система связей между агентами меняется после каждой волны лавины ($t_l = 1$). На основных графиках параметр a меняется от нуля до $a = 0.75$, на вставках представлен участок $a \in [0.75, 1]$. В областях параметров, отмеченных 1, реализуется режим динамического паритета с унимодальной $\rho^{st}(m)$, в

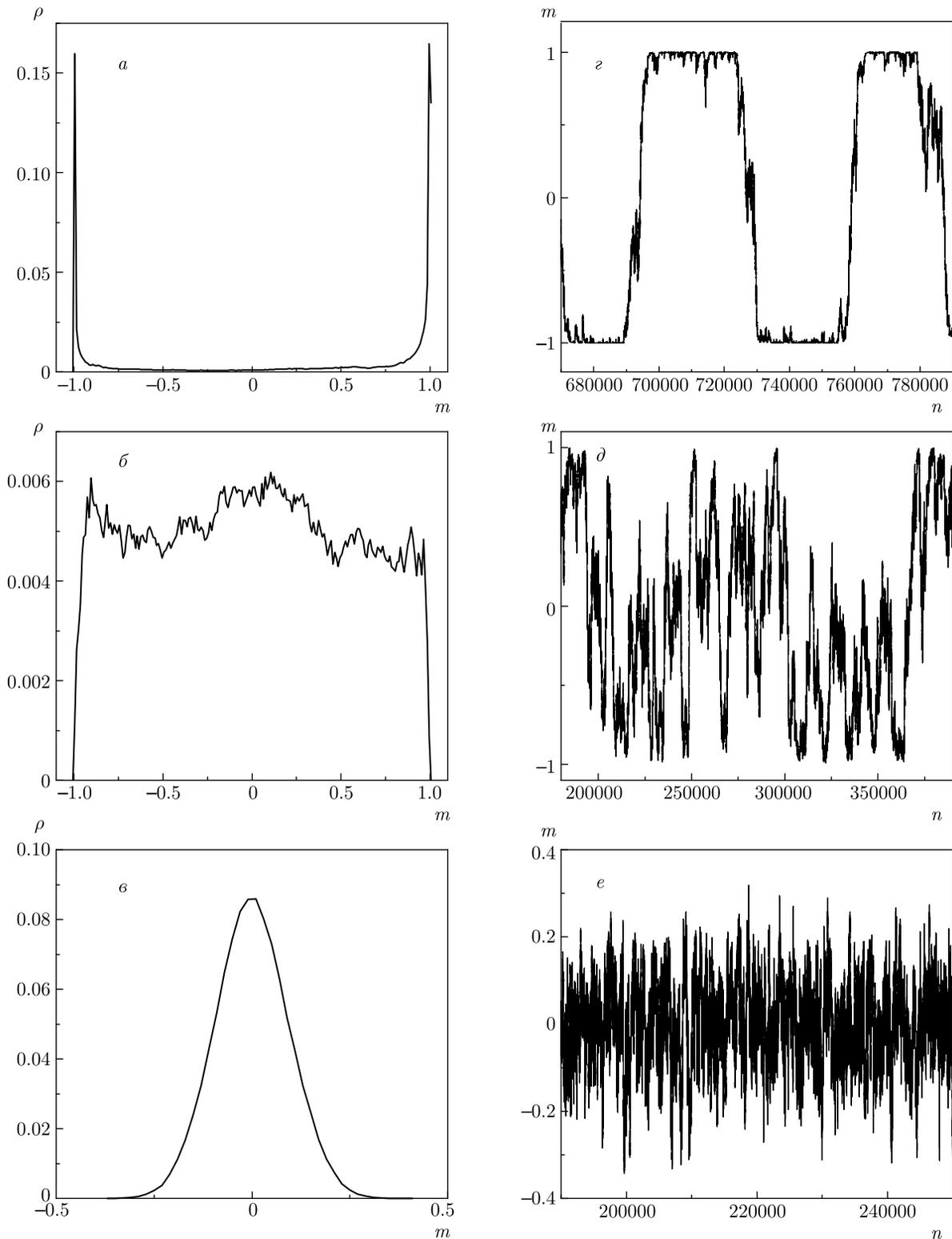


Рис. 3. *а,б,в*) Функция плотности вероятности среднего по системе мнения в стационарном состоянии $\rho^{st}(m)$ в системе размером $L = 10^4$ для $a = 0.85$ при $P = 0.11$ ($p = 0.0003$), $P = 1.3$ ($p = 0.0036$), $P = 11.2$ ($p = 0.03$) соответственно. *г,д,е*) Типичная реализация $m(n)$ на момент окончания n -й лавины для тех же значений параметра системы. При увеличении параметра P и последующем переходе его через значение $P = 1$ происходит изменение динамического режима в системе от бимодального к унимодальному, как и предсказывает оценка (13)

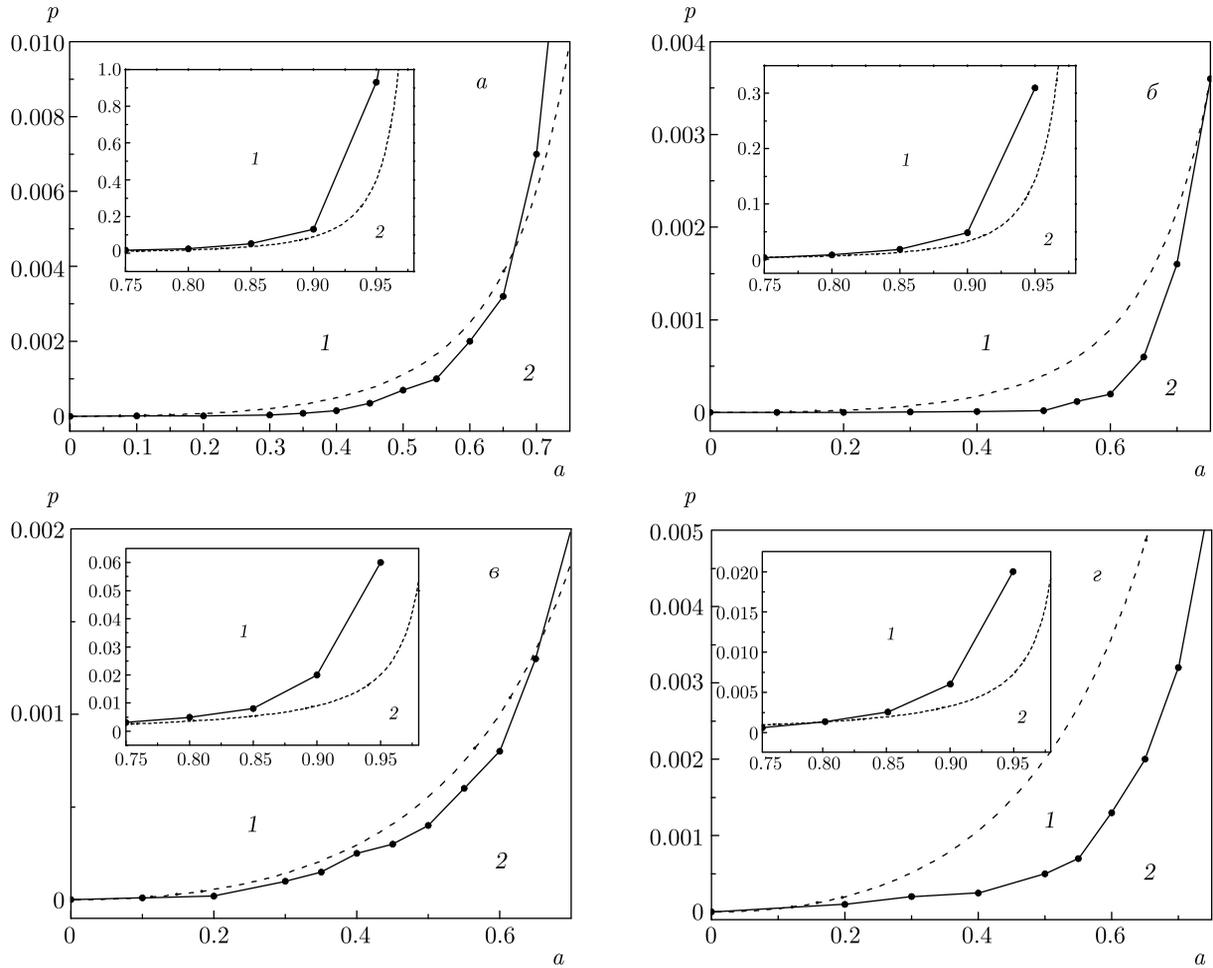


Рис. 4. Фазовые диаграммы динамических режимов мультиагентных систем: а) $L = 900, t_l = T_{av}(n)$; б) $L = 2500, t_l = T_{av}(n)$; в) $L = 900, t_l = 1$; г) $L = 2500, t_l = 1$. На основных графиках параметр a меняется от нуля до $a = 0.75$, на вставках дополнительно представлен участок $f \in [0.75, 1]$. 1 — область реализации режима динамического паритета, характеризующегося унимодальной функцией плотности вероятности $\rho^{st}(m)$, 2 — область реализации режима консенсусов, характеризующегося с бимодальной $\rho^{st}(m)$. Точки на сплошных кривых отвечают полученным при численном моделировании значениям a и p , при которых происходит переход между двумя режимами. Пунктирные кривые отвечают оценкам $p = a^2/(L(1 - a)^2)$ (13) и $p = a^2/(L(1 - a))$ (16)

областях, отмеченных 2 — фаза консенсусов, отвечающая бимодальной функции $\rho^{st}(m)$. Точки на сплошных кривых отвечают полученным при численном моделировании значениям a и p , при которых происходит переход между двумя режимами. На рис. 4 также приведены кривые (пунктирные линии), отвечающие соотношению $P = 1$ и $P^* = 1$, т. е. $p = a^2/(L(1 - a)^2)$ и $p = a^2/(L(1 - a))$ соответственно (13), (16).

Как видно из представленных на рис. 4 результатов, сделанные нами выше оценки значений a и p для реализации того или иного динамического режима качественно адекватно отражают карти-

ну поведения системы. Так, согласно оценкам (13), (16) для реализации в системе режима, отвечающего бимодальной функции плотности вероятности $\rho^{st}(m)$, при уменьшении активностей агентов a требуется, чтобы вероятность независимого изменения мнения агентами p также уменьшалась, что и подтверждается результатами моделирования. Сравнивая рис. 4а и 4б, а также рис. 4б и 4г, мы видим, что область параметров, при которых реализуется режим консенсусов, как и предсказывают оценки (13), (16), заметно сужается в случае, когда система связей в решетке меняется после каждой волны лавины.

Однако из рис. 4 также видно, что удовлетворительное количественное совпадение аналитических и численных результатов можно наблюдать только в определенных промежутках значений параметров. Возникающее расхождение аналитических и численных результатов можно объяснить следующими факторами. Во-первых, как видно из рис. 1 и 2, величина

$$\Delta m(n) = m(n+1) - m(n)$$

включает в себя все изменения мнений агентов за время лавины, в то время как аналитические результаты возможно получить лишь при рассмотрении малых промежутков времени $\Delta t \sim L^{-1}$, за которые меняет мнение только один агент. Во-вторых, при расчете вероятности узлу осыпаться мы заменили величину $g(t)a$ на $\langle g(t) \rangle a$ для случая $t_l = 1$ и на $\langle s \rangle$ для случая $t_l = T_{av}(n)$. Подобная замена не учитывает характер развития лавинообразного процесса, который меняется в зависимости от величины a . Так, в случае $t_l = T_{av}(n)$ при a близких к единице, а в случае $t_l = 1$ и в более широком диапазоне a , когда функция плотности вероятности размеров лавин носит степенной характер $\rho(S) \sim S^{-\alpha}$ [17], такая замена будет заметно искажать результат, что мы и видим на вставках на рис. 3. Возможность и способ введения поправок, учитывающих эти факторы, требуют отдельного исследования. Кроме того, необходимо учесть, что зависимость параметра P (P^*) от размера системы приводит к тому, что при увеличении L для обнаружения фазы с бимодальной функцией $\rho^{st}(m)$ понадобится экстремально большое время наблюдения $T \sim L/a$. Поэтому расхождение аналитических оценок и численных результатов может быть вызвано еще и неоптимально подобранной длиной реализации процесса.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе построена новая модель динамики мнений в мультиагентной системе, которая, в отличие от уже существующих, представляет изменение мнения агента как результат двух протекающих в системе процессов. Первый — лавинообразное распространение информации между агентами по существующим в системе связям, в ходе которого участвующие в нем агенты под влиянием информационного давления со стороны соседей могут копировать их мнение, второй — независимое изменение мнения агентами, не участвующими в информационной лавине, но находящимися в условиях избыточ-

ного информационного давления. Вероятности участия агента в том или другом процессе определяются основными параметрами модели: активностью агентов a , которая определяет вероятность участия агента в информационной лавине, и вероятностью независимого изменения мнения агентом под давлением полученной информации p . По результатам аналитического и численного исследований динамики мнений в нашей модели можно сделать вывод, что в зависимости от соотношения этих параметров в системе возможна реализация одного из трех динамических режимов (фаз). Первый из них представляет собой состояние, близкое к динамическому паритету. В этой фазе мнения агентов могут меняться, но среднее число агентов с положительным и отрицательным значениями мнений в каждый момент времени примерно одинаково. Эта фаза описывается унимодальной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения m с максимумом $m_0 = 0$. Находясь во втором режиме, система большую часть времени проводит в состояниях, близких к консенсусам, в которых значения мнений всех агентов либо положительны, либо отрицательны. Этот режим описывается бимодальной функцией плотности вероятности для среднего по системе мнения с максимумами $m_{1,2} = \pm 1$. Третья динамическая фаза является переходной и в ней все значения среднего по системе мнения практически равновероятны, а функция плотности вероятности этой величины близка к таковой для равномерного распределения.

Благодаря тому, что предлагаемая в работе модель динамики мнений описывает не только сам процесс, но и причины, вызывающие его, она имеет ряд преимуществ перед ранее разработанными моделями. Новые параметры, введенные в модель, позволяют рассматривать влияние различных факторов на процессы формирования мнения в мультиагентных системах. Так, в настоящей работе мы рассмотрели влияние времени существования установившихся в системе связей на реализацию различных динамических режимов в ней, сравнив результаты для двух вариантов изменения структуры связей. В первом случае система связей между агентами менялась только между очередными информационными лавинами, а в течение лавины оставалась неизменной, а во втором она менялась во время прохождения лавины. В результате мы показали, что область значений параметров системы, при которых реализуется бимодальный режим, во втором случае несколько сужается. Этот результат вполне адекватно отражает реальную ситуацию, когда более ак-

тивный обмен мнениями в мультиагентной системе усложняет формирование консенсуса.

В дальнейшем, используя возможности предложенной модели, можно рассмотреть динамику мнений в нашей системе при различных условиях, например, в случае, когда поступающая в систему информация имеет определенный знак и агенты, меняя свое мнение, могут ориентироваться не только на мнение соседей, но и на знак внешней информации. Также интересной задачей является изучение системы при условии, что значения активностей агентов различны или изменяются со временем. Еще одним важным обобщением модели будет рассмотрение мультиагентной системы не на базе решетки, а на сложных сетях, с учетом информационного давления не только со стороны ближайших соседей.

Важно также отметить, что ясный физический смысл параметров, определяющих поведение системы, позволяет адаптировать ее к описанию различных систем, что может открыть широкие возможности для практического применения нашей модели, например, в задачах о динамике рыночных цен, подобных рассмотренным в [20], стабилизации процессов на финансовых рынках [21] или в исследовании эффекта «эхо-камеры» в социальных сетях [22].

Финансирование. Т. Ф. благодарит Министерство науки и высшего образования Российской Федерации за финансовую поддержку работы в рамках реализации программы Научного центра мирового уровня по направлению «Передовые цифровые технологии» (соглашение от 16.11.2020 № 075-15-2020-903).

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Holovatch, R. Kenna, and S. Thurner, *Eur. J. Phys.* **38**, 023002 (2017).
2. R. Dickman, *Physica A* **306**, 90 (2002).
3. H. Haken, J. A. S.Kelso, and H. Bunz, *Biol. Cybernetics* **51**, 347 (1985).
4. J. Borge-Holthoefer and Y. Moreno, *Phys. Rev. E* **85**, 026116 (2012).
5. V. Avetisov, A. Gorsky, S. Maslov, S. Nechaev, and O. Valba, *Phys. Rev. E* **98**, 032308 (2018).
6. S. Galam, *Int. J. Mod. Phys. C* **19**, 409 (2008).
7. S. Redner, *Compt. Rend. Phys.* **20**(4), 275 (2019).
8. A. Carro, R. Toral, and M. San Miguel, *Sci. Rep.* **6**, 24775 (2016).
9. L. Rozanova and M. Boguna, *Phys. Rev. E* **96**, 012310 (2017).
10. J. Fernandez-Gracia, K. Suchecki, J. J. Ramasco, M. San Miguel, and V. Eguiluz, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 158701 (2014).
11. A. Kirman, *Quart. J. Economics* **108**(1), 137 (1993).
12. A. Sirbu, V. Loreto, V. D. P. Servedio, and F. Tria, *Participatory Sensing, Opinions and Collective Awareness*, pp. 363–401, *Understanding Complex Systems*, Springer (2016).
13. N. Perra, B. Goncalves, R. Pastor-Satorras, and A. Vespignani, *Nature Sci. Rep.* **2**, 469 (2012).
14. H. Borge-Holthoefer, R. A. Banos, S. Gonzalez-Bailon, and Y. Moreno, *J. Complex Networks* **1**(1), 3 (2013).
15. D. Markovic and C. Gros, *Phys. Rep.* **536**, 41 (2014).
16. Н. Е. Савицкая, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 225 (2016).
17. А. В. Накин, Н. Е. Савицкая, *ЖЭТФ* **152**, 812 (2017).
18. D. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1613 (1990).
19. A. F. Peralta, A. Carro, M. San Miguel, and R. Toral, *New J. Phys.* **20**, 103045 (2018).
20. A. E. Biondo, A. Pluchino, A. Rapisarda, and D. Helbing, *Phys. Rev. E* **88**, 062814 (2013).
21. S. M. Krause and S. Bornholdt, *Phys. Rev. E* **86**, 056106 (2012).
22. F. Baumann, P. Lorenz-Spreen, I. M. Sokolov, and M. Starnini, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 048301 (2020).

БОЛЬШИЕ ЧИСЛА, ПОРОЖДАЕМЫЕ ДЗЕТА-ФУНКЦИЕЙ РИМАНА

Ю. Н. Овчинников*

*Max-Planck Institute for Physics of Complex Systems
01187, Dresden, Germany*

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 2021 г.,
после переработки 9 июля 2021 г.
Принята к публикации 12 июля 2021 г.

Исследуются аномально большие числа, порожденные дзета-функцией Римана. Исследовано множество простых чисел Мерсенна. Получено уравнение, связывающее величины простых чисел Мерсенна с их номерами. Полученные результаты важны для понимания причин дисбаланса между теорией и экспериментом, возникающего при изучении флуктуационных поправок к проводимости квазидвухмерных сверхпроводников.

DOI: 10.31857/S0044451021110110

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] было показано, что плотность простых чисел δ как функция величины простого числа P может быть записана в виде $\delta = 1/\ln(P/\kappa)$, где функция $\kappa(P)$ бесконечное число раз проходит через значение $\kappa = 1$. При этом ширина интервалов, на концах которых κ обращается в 1, оказывается аномально большой. В частности, оценка первого такого интервала дает значение порядка 10^{32} . Это обстоятельство открывает широкие возможности для установления номеров простых чисел по их величине. В качестве примера мы рассмотрим простые числа в окрестности $P \sim 10^{14}$, поскольку эта область может быть достигнута сравнительно быстро при расширении банка данных простых чисел.

Аномальная ширина интервала прохождения κ через единицу связана с наличием бесконечного числа связей между величинами простых чисел и их номерами, устанавливаемых уравнением Эйлера, и наличием у дзета-функции Римана простого полюса с вычетом единицы в точке $z = 1$ [2].

Метод нумерации простых чисел мы применим для чисел Мерсенна. Мы получим выражение, поз-

воляющее установить с хорошей точностью номер простого числа в подмножестве простых чисел Мерсенна.

Используемые методы могут быть также применены для исследования флуктуационных явлений в сверхпроводниках.

Термодинамика сверхпроводников хорошо описывается функционалом Гинзбурга–Ландау [3] в широкой окрестности точки перехода T_c . Ширина флуктуационной области в чистом массивном сверхпроводнике, полученная в работе [4], оказывается очень малой — порядка 10^{-15} К. Для описания динамики сверхпроводника использование функционала Гинзбурга–Ландау оказывается недостаточным. В физике применяются уравнения БКШ и температурная техника [5], в которой необходимо использовать аналитическое продолжение по частоте с целых точек. Вблизи точки перехода можно выделить три типа флуктуационных поправок. Одна из них — флуктуационный сдвиг температуры перехода [6], две другие — поправки к проводимости: парапроводимость (поправка Асламазова–Ларкина, AL) [7] и поправка Маки–Томсона (MT) [8, 9]. Сдвиг температуры перехода в «грязных» сверхпроводящих пленках оказывается большим и в эксперименте практически всегда наблюдается лишь поправка AL [10]. Аномальная поправка MT оказывается подав-

* E-mail: ovc@itp.ac.ru

Таблица 1. Простые числа в интервале 8796093021493–8796093022853

8796093021493	8796093021517	8796093021523
8796093021533	8796093021587	8796093021607
8796093021671	8796093021743	8796093021763
8796093021769	8796093021791	8796093021803
8796093021839	8796093021889	8796093021899
8796093021917	8796093021941	8796093021953
8796093022033	8796093022091	8796093022141
8796093022151	8796093022237	8796093022247
8796093022261	8796093022313	8796093022349
8796093022391	8796093022393	8796093022427
8796093022501	8796093022513	8796093022567
8796093022601	8796093022609	8796093022657
8796093022667	8796093022711	8796093022723
8796093022777	8796093022807	8796093022811
8796093022853		

лена и степень подавления определяется величиной сдвига температуры перехода.

Метод аналитического продолжения, используемый при вычислении поправок МТ, аналогичен методике вычисления функции κ , изучаемой в данной работе. Поэтому можно надеяться, что полученные здесь результаты помогут понять механизм подавления аномальных поправок МТ в проводимость тонких сверхпроводящих пленок. Эта задача потребует глубокого изучения области частот $\omega \gg T$. Существенно, что при этом возникает новый физический параметр — флуктуационный сдвиг температуры перехода. Примером такого подавления служат условно сходящиеся ряды в работе [1].

Эффект связан с аналитическим продолжением с дискретных частот ω_n . Для его учета необходимо расширять пространство — добавить к флуктуационным полям модуля и фазы параметра порядка еще и флуктуации скалярного поля ϕ на высоких частотах. Эта работа выполняется в настоящее время.

2. ПРОСТЫЕ ЧИСЛА В ОКРЕСТНОСТИ
 $P \sim 10^{14}$

В табл. 1 мы приводим значения простых чисел в интервале $8796093021493 \leq P \leq 8796093022853$.

Таблица 2

$\ln(P/\kappa)$	κ
15.4917121040215111	2.9166686711853
16.65991828181654	2.907305274520592
18.8927990341525	2.8838266274785
19.648249409415	2.87634920124975

Среднее значение P в этом интервале равно

$$\tilde{P} = 8796093022164.395348837. \tag{1}$$

Для определения величины κ в этой точке мы воспользуемся скоррелированной интерполяционной формулой работы [1]. Три свободных параметра, входящих в такое уравнение, могут быть получены минимизацией по этим параметрам суммы квадратов расстояний от четырех базовых точек до рассматриваемой кривой. Выбирая в качестве точек величины из табл. 2, получаем следующее модифицированное уравнение для функции κ :

$$\begin{aligned} \kappa = & 2.884464805304654 - 1.094564193816 \cdot 10^{-2} \times \\ & \times \left(\ln \left(\frac{P}{\kappa} \right) - 18.89277990341552 \right) - \\ & - 4.150905361667447 \cdot 10^{-4} \times \\ & \times \left(\ln \left(\frac{P}{\kappa} \right) - 18.8927990341552 \right)^2. \tag{2} \end{aligned}$$

Подставляя в уравнение (2) значение $P = \tilde{P}$ из формулы (1), находим значение $\kappa(\tilde{P})$:

$$\kappa(\tilde{P}) = 2.735299388293696. \tag{3}$$

Используя уравнение для связи величины простого числа с его номером N , выведенным в работе [1], получим значение \tilde{N} для простого числа 8796093022151:

$$\tilde{N} \approx 305429569932. \tag{4}$$

Это значение \tilde{N} следует сопоставить с неизвестным сейчас точным значением номера \tilde{N} числа 8796093022151.

Знание точного значения \tilde{N} позволит уточнить значение величины κ в точке \tilde{P} и улучшить уравнение (2). Для этого точку $\{\tilde{P}, \kappa\}$ следует добавить к четырем точкам табл. 2 и использовать так расширенный базис для получения четырехпараметрического уравнения для функции κ , включающего в себя кубический член

$$\left(\ln \left(\frac{P}{\kappa} \right) - \ln \left(\frac{P_0}{\kappa(P_0)} \right) \right)^3.$$

В этом случае целесообразно использовать в качестве P_0 точку

$$\ln \left(\frac{P_0}{\kappa(P_0)} \right) = 19.648249409415.$$

Используя уравнение (2) для грубой оценки величины P_1 , при которой $\kappa(P_1) = 1$, находим

$$P_1 \sim 10^{32}. \tag{5}$$

Четырехпараметрическое уравнение для функции κ позволит существенно улучшить оценку величины P_1 .

Важное утверждение состоит том, что приближение Лежандра и приближение логарифмическим интегралом $\text{Li}(x)$ не описывают достаточно хорошо зависимость $N(P)$ при больших значениях P . Масштабом больших P являются не числа порядка $5 \cdot 10^7$, а числа порядка 10^{32} — ожидаемая величина первого интервала, на концах которого функция $\kappa(P)$ переходит через единицу. Величина 10^{32} лишь первая грубая оценка этого расстояния. Рассмотрение значений небольшого блока последовательных простых чисел при $P \approx 10^{14}$ — лишь второй шаг на пути установления номера простого числа в центре этого интервала, и тем самым очень точного установления величины $\kappa(\tilde{P})$. В работе [11] зависимость $N(P)$ рассматривается лишь в области $P \leq 982451653$ ($N = 5 \cdot 10^7$). Отметим, что условно сходящиеся ряды в уравнениях (4) работы [1] оказываются более информативными, чем выражение для величины $\sum_{P < x} P^{-1}$, приведенное в Замечании 15 работы [11]. Это связано со сравнительно быстрой сходимостью ряда

$$S_0 = \sum_N \left(\frac{1}{P} - \frac{1}{N \ln P} \right)$$

относительно условно сходящихся рядов в уравнениях (4) работы [1]. Точность вычисления величины S_0 можно существенно повысить, используя интерполяционную формулу (2) для величины $\kappa(P)$ в интервале $5 \cdot 10^7 < N < 10^{25}$. Переход от функции $\pi(x)$ и простых чисел P к исследованию функций $\{\kappa(P), \xi(P)\}$ [1] позволил доказать прохождение бесконечное число раз функцией $\kappa(P)$ через значение единица и выявить проблемы при определении величины даже первого такого интервала разбиения.

3. НУМЕРАЦИЯ ПРОСТЫХ ЧИСЕЛ МЕРСЕННА

Числа вида

$$P = 2^n - 1, \quad n = 2, 3, 4, \dots \tag{6}$$

образуют множество чисел Мерсенна. Подмножество простых чисел P образует подмножество простых чисел Мерсенна. База данных простых чисел Мерсенна приведена в [12]. Важным обстоятельством является возможность установить принадлежность данного числа Мерсенна к подмножеству простых чисел без установления его номера, подобно тому как это имеет место для простых чисел [13]. Для простых чисел существует связь величины простого числа с его номером, осуществляемая функцией κ [1]. Подобная связь существует и на множестве чисел Мерсенна. Она реализуется двумя функциями $\{M, \mu\}$ параметра P :

$$M = \frac{1.8}{\ln 2} \int_0^P \frac{dP_1}{(P_1 + 1) \ln(P_1/\kappa)} + \mu. \tag{7}$$

Функция M на множестве простых чисел Мерсенна равна порядковому номеру числа, тем самым функция μ однозначно определена на данном множестве. Наше предположение состоит в том, что μ ограничена.

Структурный коэффициент 1.8 связан с тем, что все числа Мерсенна оканчиваются на $\{1, 3, 5, 7\}$, а все простые числа Мерсенна, кроме первого, оканчиваются на 1 или 7. В области $\ln P \gg 1$ находим

$$M = \frac{1.8}{\ln 2} \left\{ \ln n - \frac{\ln \kappa}{n \ln 2} + D \right\} + \mu, \tag{8}$$

где D — константа.

Используя данные [1], получаем для величины D значение

$$D = 0.832925673. \tag{9}$$

Функцию μ целесообразно записать в виде

$$\mu = \mu_0 + \mu_1, \tag{10}$$

где μ_0 — среднее значение μ . Используя базу данных [12] и формулы (7), (8), находим значение константы μ_0 ,

$$\mu_0 = -3.753494642, \tag{11}$$

и функцию μ_1 на подмножестве простых чисел Мерсенна. Эти значения приведены в табл. 3.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дзета-функция Римана порождает аномально большие числа, возникающие при исследовании свя-

Таблица 3. Значение функции μ_1 на множестве простых чисел Мерсенна; M — номер простого числа Мерсенна, n — параметр, определяющий величину простого числа M

M	n	μ_1
1	2	1.8293766895
2	3	1.694038612
3	5	1.137035997
4	7	1.082091498
5	13	0.207859618
6	17	0.428468746
7	19	1.111903997
8	31	0.752828242
9	61	-0.06715266
10	89	-0.063024914
11	107	0.456372999
12	127	1.010875533
13	521	-1.654740498
14	607	-1.051484157
15	1279	-1.986930274
16	2203	-2.39894609
17	2281	-1.489300602
18	3217	-1.382189683
19	4253	-1.107166537
20	4423	-0.208946434
21	9689	-1.24532699
22	9941	-0.312004771
23	11213	0.375318259
24	19937	-0.119178578
25	21701	0.660657686
26	23209	1.486196577
27	44497	0.7959539
28	86243	0.077495176
29	110503	0.433803893
30	132049	0.971225783
31	216091	0.692207684
32	756839	-1.562817719
33	859433	-0.892935453
34	1257787	-0.881910444
35	1398269	-0.156868192

Таблица 3. Продолжение

M	n	μ_1
36	2976221	-1.118579695
37	3021378	-0.157683891
38	6972593	-1.3293642
39	13466917	-2.03873858
40	20996011	-2.191990747
41	24036583	-1.543200557
42	25964951	-0.743601187
43	30402457	-0.153321539
44	32582657	0.666829059
45	37156667	1.325698746
46	42643801	1.968011852
47	43112609	2.939618951

зи простых чисел с их номерами. Полученные результаты позволяют надеяться, что по крайней мере вторая–третья точки, в которых функция κ проходит через единицу, будут установлены с приличной точностью в ближайшее время. В работе [1] показано, что число точек, в которых κ проходит через единицу, бесконечно велико. Нами показано, что число элементов на подмножестве простых чисел Мерсенна определяется формулами (8), (9) и расстояние между ними быстро растет с увеличением номера. Сорок семь первых таких точек приведены в табл. 3 вместе со значениями функции μ_1 в них. Отметим, что относительная точность предсказания ожидаемой величины P возрастает с увеличением номера M .

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **160**, 132 (2021).
2. H. M. Edwards, *Riemann's Zeta Function*, Academic, New York, London (1974).
3. В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **20**, 1064 (1950).

4. В. Л. Гинзбург, ФТТ **2**, 2031 (1960).
5. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматлит, Москва (1962).
6. Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **64**, 719 (1973).
7. L. G. Aslamazov and A. I. Larkin, Phys. Lett. A **26**, 238 (1968).
8. К. Маки, Progr. Theor. Phys. **40**, 193 (1968).
9. R. S. Thompson, Phys. Rev. B **1**, 327 (1970).
10. А. А. Варламов, А. И. Ларкин, *Теория флуктуаций в сверхпроводниках*, Добросвет, Москва (2007).
11. Don Zagier, Math. Intelligencer **1**, 7 (1977).
12. *Great Internet Mersenne Prime Search GIMPS*.
13. G. M. Ziegler, Notices Amer. Math. Soc. **51**, 414 (2004).

СЖИМАЕМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ДЕЙТЕРИЯ И ГЕЛИЯ ДО 20 ТПа

М. А. Мочалов ^{a,d}, Р. И. Илькаев ^a, **В. Е. Фортон** ^b, С. В. Ерунов ^{a,d}, В. А. Аринин ^a,
 А. О. Бликов ^{a,d*}, В. А. Комраков ^a, И. П. Максимкин ^a, В. А. Огородников ^{a,d},
 А. В. Рыжков ^a, В. К. Грязнов ^c, И. Л. Иосилевский ^b, П. Р. Левашов ^b,
 Я. С. Лавриненко ^b, И. В. Морозов ^b, Д. В. Минаков ^b,
 М. А. Парамонов ^b, А. В. Шутков ^c

^a Российский федеральный ядерный центр –
 Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
 607188, Саров, Нижегородская обл., Россия

^b Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
 125412, Москва, Россия

^c Институт проблем химической физики Российской академии наук
 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^d Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева
 603155, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 23 июня 2021 г.,
 после переработки 11 июля 2021 г.
 Принята к публикации 12 июля 2021 г.

Представлены экспериментальные результаты по сжимаемости сильнонеидеальной вырожденной плазмы дейтерия и гелия, квазиизэнтропически сжатой до давлений $P \sim 20$ ТПа в устройствах сферической геометрии. Траектории движения металлических оболочек, сжимающих плазму, регистрировались с помощью мощных импульсных источников рентгеновского излучения (бетатронов) с граничной энергией электронов 60 МэВ. Впервые в экспериментах в качестве источника рентгеновского излучения использован сильноточный ускоритель с просвечивающей способностью объектов с эквивалентной толщиной 250 мм свинца. Значения плотностей плазмы до $\rho \approx 14$ г/см³ определены по измеренной величине радиуса оболочки в момент ее «остановки». Давление сжатой плазмы получено на основе газодинамических расчетов, учитывающих реальные характеристики экспериментальных устройств.

DOI: 10.31857/S0044451021110122

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе показаны возможности экспериментальной физики высоких плотностей энергии в области генерации экстремальных состояний вещества, типичных для ряда астрофизических объектов во Вселенной, в лабораторных условиях. С использованием метода квазиизэнтропического сжатия в течение 2007–2020 годов в РФЯЦ-ВНИИЭФ была исследована сжимаемость неидеальной плаз-

мы дейтерия и гелия в диапазоне давлений до 12 ТПа [1–14]. В новых экспериментах, проведенных в РФЯЦ-ВНИИЭФ и описанных в данной работе, измерено сжатие неидеальной плазмы дейтерия и гелия до плотности 14 г/см³ давлением до 20 ТПа (200 млн. атмосфер).

Дополнительно проведен новый эксперимент в области давлений $P \approx 5.5$ ТПа, уточняющий положение точки МБ4 из работ [4, 5].

2. ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для изучения сжимаемости неидеальной плазмы газов в области давлений мегабарного диапазо-

* E-mail: mcleodjr@mail.ru

на использован динамический метод создания высоких давлений под действием энергии мощных ударных волн. Для достижения давлений указанного диапазона в РФЯЦ-ВНИИЭФ разработаны устройства цилиндрической и сферической геометрии [1–14]. Сжатие газа и образующейся плазмы в таких устройствах осуществляется системой ударных волн, циркулирующих в ее объеме, и под действием стальных оболочек, сходящихся к центру. Этот процесс получил название квазиизэнтропического, так как после прохождения первой ударной волны темп роста температуры плазмы при дальнейшем сжатии существенно замедляется. В конечном итоге, при возрастании давления внутри исследуемого вещества, сжимающая его оболочка останавливается (момент «остановки»), а затем разлетается. Целью экспериментов является регистрация траектории $R(t)$ движения оболочки экспериментального устройства и определение ее размера в момент остановки, когда достигается максимальное сжатие исследуемого вещества. На рис. 1 приведена схема эксперимента на рентгенографическом комплексе РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Экспериментальное устройство 1 размещается между двумя бетонными сооружениями 2, в которых находятся источники рентгеновского излучения. В левом (на рис. 1а) размещены два безжелезных импульсных бетатрона 3 БИМ234.3000 [15] с граничной энергией электронов 60 МэВ, работающих в режиме последовательной генерации трех импульсов рентгеновского излучения длительностью 150–180 нс. Использование бетатронов в таком режиме генерации позволяет просвечивать объекты с массовой толщиной до 230 г/см^2 , что эквивалентно толщине до 200 мм свинца.

В опытах использовалась оптико-электронная система детектирования 4, которая активируется синхронно с импульсами бетатрона. В качестве преобразователей рентгеновского излучения в видимое в данной системе использовались монокристаллы йодистого натрия и силикат лютеция. Для устранения влияния рассеянного излучения на высокочувствительные детекторы 4 размер поля регистрации в каждой из двух проекций ограничивается свинцовыми коллиматорами 5. Для защиты бетатронов 3 и оптико-электронных регистраторов рентгеновского излучения 4 применены алюминиевые конусы 6.

Ожидаемая в экспериментах плотность сжатой плазмы оценивалась величиной 14 г/см^3 . Для надежного просвечивания объема с плазмой такой плотности впервые был использован линейный индукционный ускоритель 7 ЛИУ-Р-Т [16], располо-

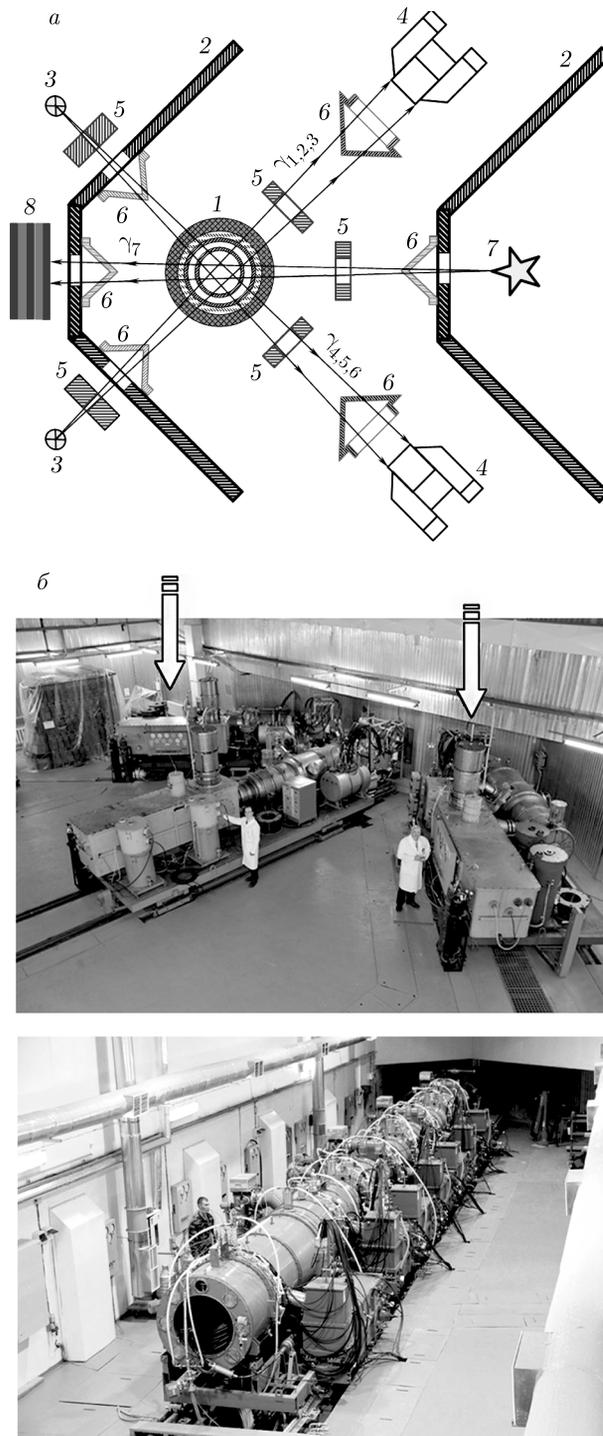


Рис. 1. (В цвете онлайн) а) Схема эксперимента: 1 — экспериментальное устройство; 2 — защитные сооружения; 3 — источники излучения (бетатроны); 4 — детекторы; 5 — коллиматоры (Pb); 6 — конусы (Al); 7 — линейный сильноточный ускоритель ЛИУ-Р-Т; 8 — набор фотохромных экранов. б) Общий вид зала с расположенными бетатронами (вверху; в эксперименте использовали две установки, которые отмечены стрелками) и ЛИУ-Р-Т (внизу)

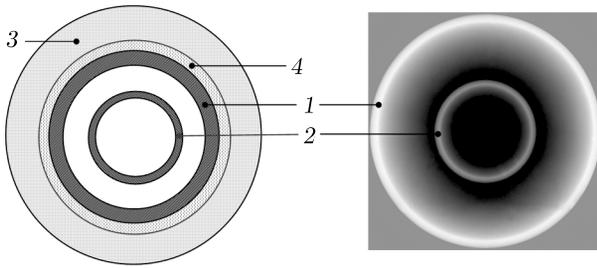


Рис. 2. (В цвете онлайн) Двухкаскадное сферическое экспериментальное устройство: слева — схема конструкции; справа — рентгенограмма устройства в исходном состоянии (1 — внешняя оболочка Fe1, 2 — внутренняя оболочка Fe2, 3 — ВВ, 4 — оргстекло)

женный в правом (рис. 1а) сооружении 2 со следующими техническими характеристиками: граничная энергия электронов 12 МэВ, ток пучка до 20 кА, длительность импульса излучения не более 50 нс, доза излучения на 1 м от мишени до 300 Р. Использование ЛИУ-Р-Т в оптимальном режиме позволяет просвечивать объекты с массовой толщиной до 300 г/см, что эквивалентно толщине 250 мм свинца. В качестве регистратора рентгеновского излучения ЛИУ-Р-Т в эксперименте был использован набор из десяти плотно сжатых фотохромных экранов 8 на основе галогенида бария, активированного европием (ADC-экраны).

Основу экспериментального устройства (рис. 2) составляет заполненная газом сферическая камера, состоящая из двух оболочек, 1 и 2, изготовленных из высокопрочной стали методом пайки из двух полусфер каждая [17].

Для заполнения экспериментального устройства нерадиоактивными изотопами водорода использовалась система напуска, основу которой составляют термодесорбционные источники [18]. Камеры заполнялись гелием с помощью термокомпрессора.

Величина давления газов в процессе заполнения измерялась датчиком S-10 фирмы WIKA (класс точности 0.25). Начальная температура контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, расположенной внутри трубопровода, использованного для напуска газов. Давление газа в полостях оболочек 1 и 2 (см. рис. 2) было одинаковым.

Начальные параметры газов на момент подрыва экспериментальных устройств приведены в табл. 1. Начальная плотность дейтерия рассчитана с использованием справочных данных [19]. Для определения начальной плотности гелия использовали табличные данные [20].

Таблица 1. Начальные параметры газов в экспериментах

Начальное состояние газов					
№	Газ	P_0 , ГПа	t , °С	ρ_0 , г/см ³	R_0 , мм
1	Дейтерий	0.01831	-9.2	0.03	29.5
2	Гелий	0.01862	-0.55	0.03	29.5
3	Дейтерий	0.02587	25.5	0.036	40

Примечание: R_0 — начальный радиус внутренней границы оболочки 2 (см. рис. 2), P_0 и T_0 — начальные давление и температура газов, ρ_0 — начальная плотность.

Для сжатия газов в экспериментах № 1 и № 2 использованы заряды взрывчатого вещества (ВВ) (3 на рис. 2) с массой 85 кг в тротиловом эквиваленте; масса ВВ в опыте № 3, уточняющем положение точки МБ4 из работ [4,5], составляла 55 кг тротила. Также в этом экспериментальном устройстве отсутствует оболочка из оргстекла.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Для тестирования нового экспериментального устройства, использованного в экспериментах № 1 и № 2, в начальной фазе работы, когда влиянием газа можно пренебречь, был проведен предварительный газодинамический опыт с полусферическим макетом, моделирующим геометрию конструкции и технологию эксперимента. Конструкция полусферического макета (рис. 3), использованного в газодинамическом опыте, аналогична описанной в работах [9–11]. В эксперименте использовали следующие методики: электроконтактную для регистрации движения ударной волны по оргстеклу (датчики располагали на двух уровнях, $K1$ и $K2$); рентгенографическую для регистрации движения оболочек; гетеродин-интерферометрическую с PDV-датчиками [21] для измерения скорости полета стальных оболочек (8 датчиков). Результаты проведенного опыта представлены на рис. 3.

Характерные экспериментальные рентгенограммы, зарегистрированные в экспериментах с дейтерием (опыт № 1) и гелием (опыт № 2), приведены на рис. 4 и 5. Там же показаны результаты трассировки внутренних границ оболочек экспериментальных устройств.

Для трассировки границ сферических оболочек, как и в работах [1–13], применен функциональный

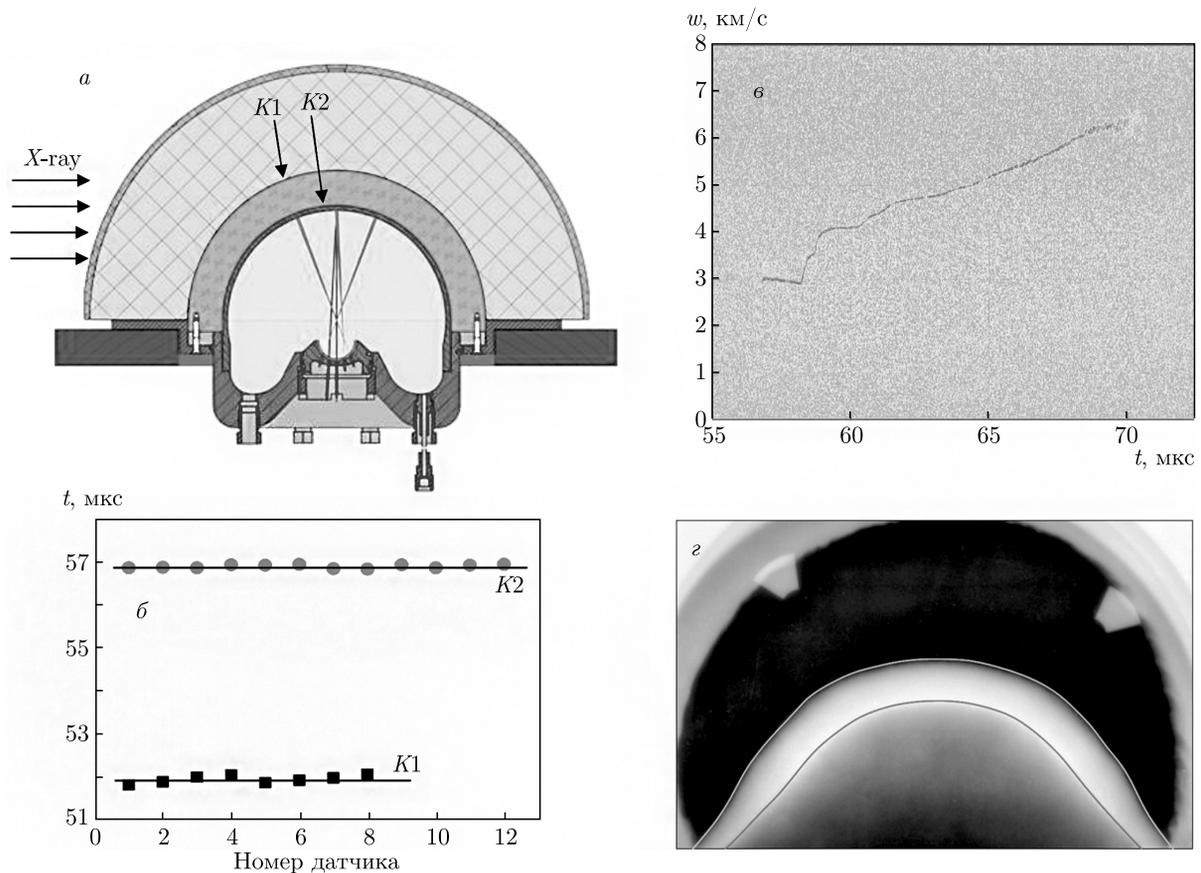


Рис. 3. (В цвете онлайн) Экспериментальный полусферический макет (а) и результаты опыта: данные электроконтактных датчиков (б); растрограмма с PDV-датчика [21] (в); рентгенограмма оболочки в момент $t = 66.81$ мкс (г)

метод [22], в основе которого лежит использование априорной информации о функции плотности по чернению фотоматериала в окрестности протяженных границ. Сущность этого метода — экстраполяция функций, лежащих слева и справа от границы, с целью нахождения точки их пересечения, которая и принимается за координату границы.

С учетом сохранения массы сжатого вещества его плотность вычисляется из выражения

$$\rho = \rho_0 (R_0 / R_{min})^n, \quad (1)$$

где ρ_0 — начальная плотность газа, R_0 и R_{min} — внутренние радиусы оболочки соответственно в исходном состоянии и в момент ее остановки, $n = 3$ для сферической геометрии.

Расчет характеристик экспериментальных устройств выполнен по одномерной газодинамической программе [23], предназначенной для численного моделирования неустановившихся движений сплошной среды, тестированной по экспериментальным данным, полученным в России и

за рубежом. В газодинамических расчетах использовали уравнения состояния (УРС) материалов, введенные в газодинамический расчетный комплекс РФЯЦ-ВНИИЭФ, которые неоднократно приводились в работах [1–13]. Для описания свойств дейтерия было использовано УРС из работы [24]. В расчетах гелия использовалось УРС в табличной форме, разработанное Хрусталевым на основе модифицированной модели сжимаемого коволюма [24–26], в которой учитывались результаты расчетов термодинамических свойств жидкости, выполненных методом Монте-Карло, с обратным степенным потенциалом взаимодействия между частицами.

Полученные в экспериментах $R(t)$ -данные по сжимаемости плазмы дейтерия и гелия приведены на рис. 6 и 7 вместе с результатами выполненных газодинамических расчетов. На тех же графиках нанесены и экспериментальные результаты, полученные в модельном полусферическом эксперименте и использованные для тестирования расчетов. На рис. 6 и 7 видно, что газодинамические расчеты с помощью

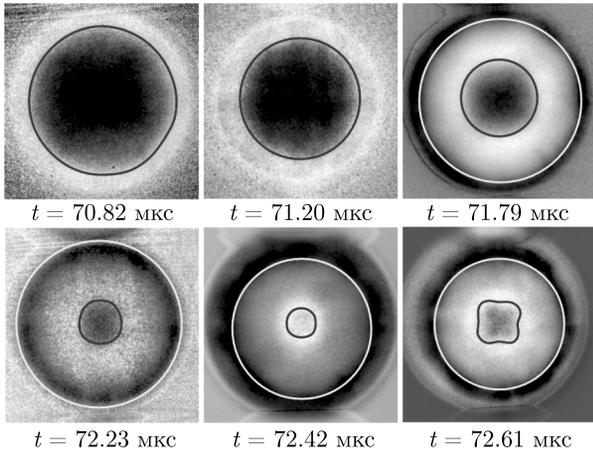


Рис. 4. (В цвете онлайн) Рентгенограммы сферической полости со сжатой плазмой дейтерия: темная окружность — полость сжатой плазмы, светлая окружность — внешняя граница внутренней оболочки 2 (см. рис. 2)

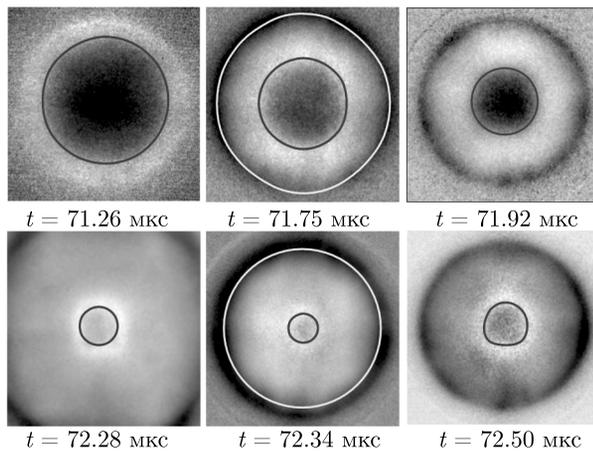


Рис. 5. (В цвете онлайн) Рентгенограммы сферической полости со сжатой плазмой гелия: темная окружность — полость сжатой плазмы, светлая окружность — внешняя граница внутренней оболочки 2 (см. рис. 2)

выбранной тактики счета хорошо описывают все контрольные точки (*p.1*, *p.2*, *p.3*) движения ударной волны по оргстеклу и стальной оболочке первого каскада (Fe1), а также измеренные рентгенографическим методом значения границ внешней оболочки экспериментальных устройств. Данные расчета воспроизводят также динамику движения внутренней границы оболочки (Fe1), зарегистрированную методом гетеродин-интерферометра [21].

Давление в сжатой плазме дейтерия и гелия определяли из газодинамических расчетов с учетом реальных термодинамических и прочностных свойств всех элементов экспериментальных

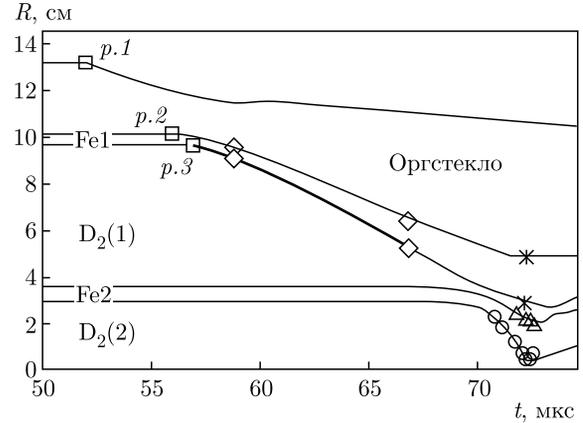


Рис. 6. Дейтерий. Сравнение экспериментальных данных и рассчитанных $R(t)$ -диаграмм: тонкие линии — расчет; \square — электроконтактная методика, \diamond — данные рентгенографирования из модельного эксперимента, толстая линия — PDV-методика; \circ , \square и $*$ — данные основного эксперимента

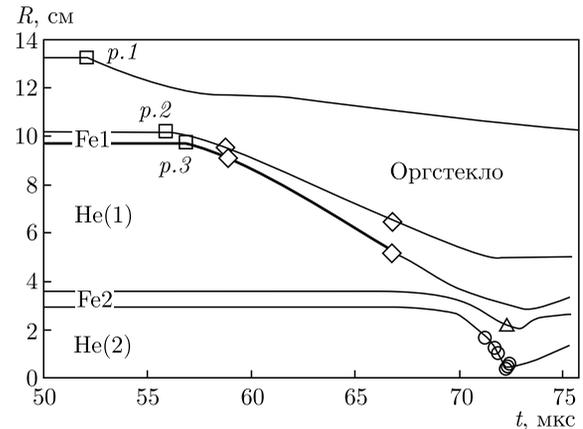


Рис. 7. Гелий. Обозначения, как на рис. 6

устройств и их УРС. Основным критерием истинности получаемого в расчетах давления можно считать удовлетворительное описание всех $R(t)$ -траекторий движения оболочек экспериментальных устройств. Из расчетов кроме $R(t)$ -диаграмм получены распределения по радиусу сжатой полости для давлений $P(R)$, температур $T(R)$ и плотностей $\rho(R)$ в плазме исследуемых газов. Учитывая кумулятивный характер процесса сжатия в сферических устройствах, для оценки термодинамических параметров авторы использовали значения давления и температуры в плазме в момент ее максимального сжатия, полученные усреднением расчетных значений $P(R)$ и $T(R)$ по массе. Здесь и далее погрешность данных соответствует максимальному отклонению их профилей от средневзвешенных значений.

Таблица 2. Расчетные и экспериментальные параметры плазмы дейтерия. Расчет термодинамики дейтерия по УРС ВНИИЭФ [24]

Дейтерий						
Фазы сжатия	t , мкс	R , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	ρ_{exp} , г/см ³	T_{calc} , кК
1	70.82	22.48	2.75 ± 2.04	0.072	0.068 ± 0.009	2.2 ± 1.7
2	71.2	18.41	4.37 ± 1.95	0.121	0.12 ± 0.016	3.5 ± 2.1
3	71.79	11.99	27.2 ± 8.2	0.465	0.447 ± 0.058	6.2 ± 2.6
4	72.06	7.17	280 ± 129	1.762	2.09 ± 0.27	11.2 ± 9.6
5	72.23	4.59	7650 ± 510	8.67	7.97 ± 1.04	39.2 ± 23.0
6	72.42	4.60	14619 ± 189	12.17	7.92 ± 1.03	52.0 ± 32.6
7	72.61	7.06	5577 ± 80	7.42	2.19 ± 0.285	35.0 ± 21.0

Таблица 3. Расчетные и экспериментальные параметры плазмы гелия. Расчет термодинамики гелия по УРС ВНИИЭФ [25, 26]

Гелий						
Фазы сжатия	t , мкс	R , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	ρ_{exp} , г/см ³	T_{calc} , кК
1	71.26	1.643	–	–	–	–
2	71.75	1.242	6.57 ± 2.23	0.151	0.17 ± 0.03	9.2 ± 5.5
3	71.92	1.018	41.0 ± 14.7	0.492	0.40 ± 0.06	20.0 ± 9.2
4	72.28	0.390	149 ± 45	1.074	0.73 ± 0.11	32.2 ± 17.2
5	72.34	0.425	16700 ± 228	13.16	13.0 ± 1.95	139.6 ± 59.0
6	72.5	0.571	15016 ± 506	12.43	10.05 ± 1.5	13.54 ± 59.0

Совокупность полученных расчетных и экспериментальных данных для различных состояний сжатой плазмы дейтерия и гелия приведены в табл. 2 и 3.

Как известно, сжатие в сферических устройствах происходит серий ударных волн, циркулирующих в объеме плазмы, и под действием сходящейся к центру оболочки. На рис. 8 для примера приведен фрагмент рассчитанных траекторий движения ударных волн в эксперименте с дейтерием вместе с $R(t)$ -диаграммами движения оболочек внешнего Fe1 и внутреннего Fe2 каскадов. Как видно на этом рисунке, после ряда отражений первой ударной волны SW1 в слоях D₂(1) и Fe2 формируется суммарная ударная волна SW⁺, которая, двигаясь в полости

D₂(2) к центру, сжимает и нагревает газ. Таким образом, в этой фазе, пока ударная волна не достигнет центра устройства, реализуется процесс ударно-волнового сжатия.

Рассмотрим фрагмент $R(t)$ -диаграммы движения оболочки второго каскада Fe2 вблизи момента максимального сжатия в эксперименте с дейтерием, приведенный на рис. 9, а для простоты ограничимся циркуляцией лишь первой ударной волны SW⁺ в полости сжатой плазмы.

На рис. 9 видно, что первая ударная волна SW⁺ в момент времени F достигает центра устройства и отражается, а в момент контакта отраженной ударной волны с внутренней границей оболочки Fe2 в состоянии К плазма оказывается уже дважды (ква-

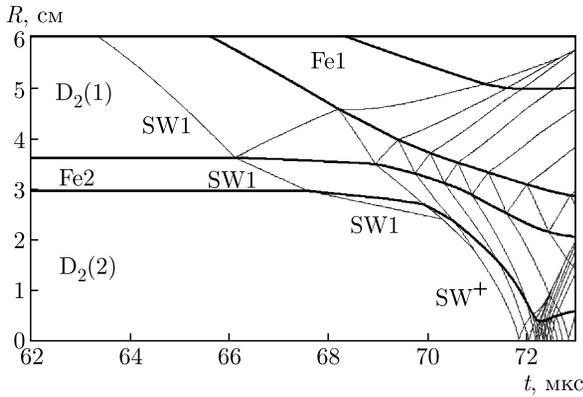


Рис. 8. $R(t)$ -диаграммы для эксперимента с дейтерием: жирные линии — границы оболочек Fe1 и Fe2; тонкие линии — ударные волны в полостях $D_2(1)$ и $D_2(2)$, SW1 — первая ударная волна, SW^+ — суммарная первая ударная волна в полости $D_2(2)$

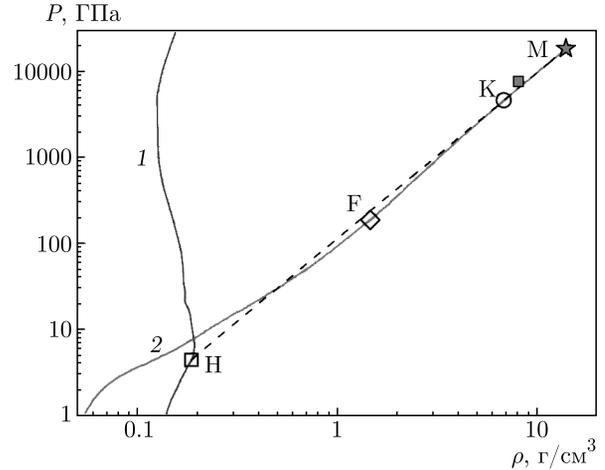


Рис. 10. (В цвете онлайн) Особенности процесса сжатия дейтерия в P - ρ -координатах: 1 — ударная адиабата, 2 — кривая сжатия дейтерия, штриховая кривая — изэнтропа; F — состояние фокусировки первой ударной волны, K — состояние контакта отраженной ударной волны с внутренней границей стальной оболочки Fe2, M — максимальное сжатие, H — точка пересечения изэнтропы и ударной адиабаты ($P = 4.51$ ГПа, $\rho = 0.18$ г/см³), красный квадрат — состояние плазмы дейтерия в момент пятого рентгенографирования (см. табл. 2)

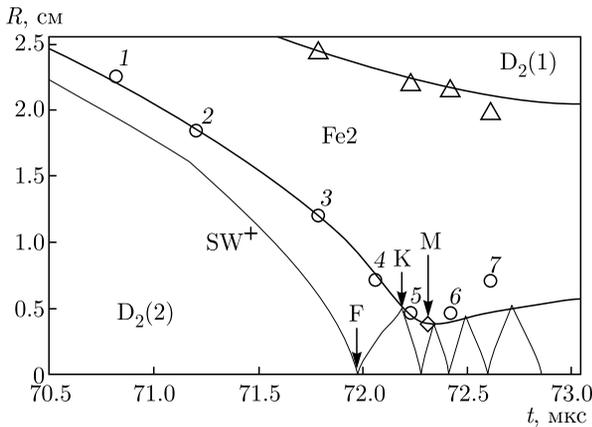


Рис. 9. Фрагмент $R(t)$ -диаграммы для эксперимента с дейтерием. Эксперимент: Δ — наружная граница оболочки Fe2, \circ — внутренняя граница оболочки Fe2. Расчет: SW^+ — первая ударная волна; F — момент фокусировки ударной волны; K — момент отражения ударной волны от движущейся оболочки Fe2, \diamond — максимальное сжатие (M); 1–7 — фазы сжатия

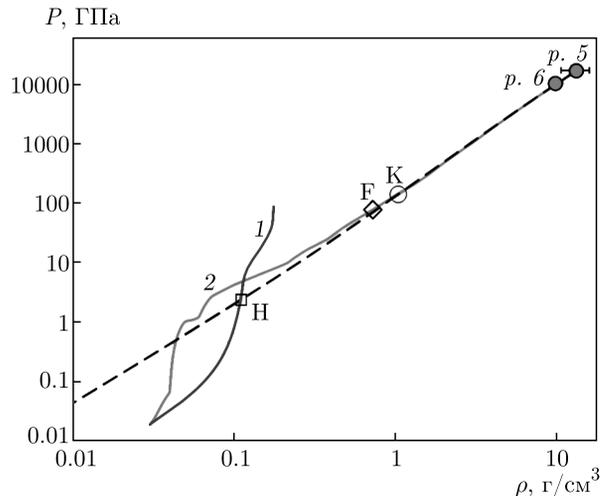


Рис. 11. (В цвете онлайн) Особенности процесса сжатия гелия в P - ρ -координатах: красные кружки — состояния плазмы гелия в момент пятого и шестого рентгенографирования (см. табл. 3). Обозначения, как на рис. 10

зиизэнтропически) сжатой. Рассчитанные термодинамические параметры для плазмы дейтерия в состояниях F, K и M приведены в табл. 4, а аналогичные значения для плазмы гелия — в табл. 5.

С учетом того, что имеются дополнительное сжатие плазмы оболочкой, кумуляция термодинамических параметров за фронтом сходящейся ударной волны и ее поглощение последующими волнами на этапе движения к центру устройства, в некоторый момент времени между состояниями F и K реализуется квазиизэнтропическое сжатие плазмы. По-

этому, начиная с состояния K и во все последующие моменты времени, получаемые экспериментальные данные можно отнести к результатам измерения квазиизэнтропической сжимаемости плазмы. Эти особенности сжатия дейтерия и гелия показаны на рис. 10 и 11, где в P - ρ -координатах представле-

Таблица 4. Термодинамические параметры плазмы дейтерия (опыт №1) в состояниях фокусировки (F), первого отражения (K) и максимального сжатия (M, M*)

Состояние	t , мкс	R_{Fe-2} , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	T_{calc} , К
F	72.0	0.919	188	1.45	9800
K	72.2	0.5	4639	6.75	32600
M	72.33	0.382	18100	13.81	56800
M*	72.33	0.3829	17950	13.67	—

Примечание: M* — результаты двумерного расчета.

Таблица 5. Термодинамические параметры плазмы гелия (опыт №2) в состояниях фокусировки (F) и первого отражения (K)

Состояние	t , мкс	R_{Fe-2} , см	P_{calc} , ГПа	ρ_{calc} , г/см ³	T_{calc} , К
F	72.0	0.919	188	1.45	9800
K	72.2	0.5	4639	6.75	32600

ны рассчитанный ход сжатия плазмы для проведенных экспериментов, ударные адиабаты и изэнтропы из состояний максимального сжатия. Как видно на рис. 10, уже при плотности сжатой плазмы дейтерия $\rho \approx 4$ г/см³ рассчитанная изэнтропа хорошо согласуется с кривой 2 сжатия дейтерия, что указывает на изэнтропический характер процесса. Для плазмы гелия (рис. 11) изэнтропический характер сжатия начинается еще раньше, практически с момента F фокусировки первой ударной волны.

В условиях настоящих экспериментов с учетом малости временного интервала процесса разворота оболочки Fe2 (около 0.1 мкс), а также колебаний параметров экспериментального устройства и разброса работы его элементов зарегистрировать полость оболочки точно в момент ее остановки весьма проблематично. Действительно, в эксперименте с дейтерием (см. рис. 9) этого сделать не удалось — расчетное положение состояния максимального сжатия M находится между экспериментальными данными. Для этого состояния рассчитанные по одномерной программе термодинамические параметры сжатой плазмы дейтерия имеют следующие значения: $P = 18100 \pm 600$ ГПа, $\rho = 13.8 \pm 2.1$ г/см³, $T = 53800 \pm 3470$ К при степени сжатия $\sigma = 460 \pm 70$. Дополнительно, на этот момент времени был проведен двумерный (2D) расчет сжатия плазмы дейтерия, в котором получены практически такие же значения давления сжатия и плотности, что и в одно-

мерном (1D) расчете. Результаты 2D-расчета приведены в табл. 4. Совокупность данных, рассчитанных по 1D- и 2D-программным комплексам, а также хорошее согласие рассчитанной $R(t)$ -диаграммы дейтерия с экспериментальными данными позволяют утверждать, что при максимальном сжатии плазмы дейтерия достигнуты параметры, приведенные в табл. 4.

Результаты настоящей работы по квазиизэнтропическому сжатию плазмы дейтерия вместе с совокупностью данных из работ [1–7, 27–29] представлены на рис. 12. Как следует из рисунка, полученные в настоящей работе экспериментальные точки не противоречат общему ходу зависимости $P(\rho)$.

На рис. 12 видно, что экспериментальная точка MB4 (∇) из ранее опубликованных работ [4, 5], отклоняется из общей гладкой зависимости $P(\rho)$ дейтерия в исследованной области давлений. Для уточнения положения этой точки в настоящей работе был проведен дополнительный эксперимент с более высокой чувствительностью регистраторов, чем в работах [4, 5]. Рентгенограммы проведенного эксперимента показаны на рис. 13.

Полученные в эксперименте №3 $R(t)$ -данные по сжимаемости плазмы дейтерия приведены на рис. 14 вместе с результатами газодинамического расчета вблизи момента максимального сжатия.

Минимальный радиус $R_{min} = 0.707$ см оболочки Fe2 зарегистрирован в момент времени $t =$

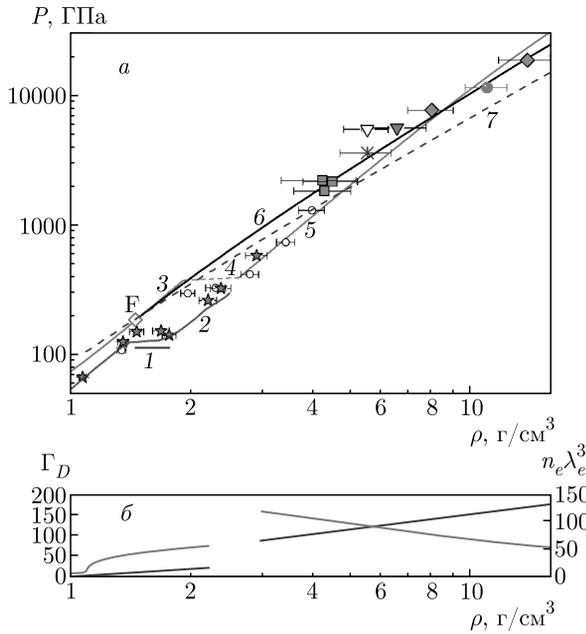


Рис. 12. (В цвете онлайн) *a*) Квазиизэнтропическая сжимаемость плазмы дейтерия. Эксперимент (настоящая работа): зеленые ромбы — опыт № 1; красный перевернутый треугольник — опыт № 3; \circ — данные работ [27–29]; красные звезды — [1, 5]; зеленые квадраты — [2–5]; ∇ — [4, 5]; красный кружок — [6]; фиолетовая звезда — [7]. Расчет: 1 — межфазная граница плазменного фазового перехода [30]; 2 — изэнтропа [31]; настоящая работа: 3, 4, 5 — изэнтропа ($S = 34.5$ Дж/г·К) с диссоциативно-плазменным фазовым переходом [14], проходящая через точку фокусировки F (УРС SAHA); 6 — изэнтропа [1] из точки фокусировки F (QMD-моделирование); 7 — то же в модифицированном методе WPMD–DFT [59]. *б*) Дебаевский параметр кулоновской неидеальности Γ_D (красная кривая) и параметр вырождения свободных электронов $n_e \lambda_e^3$ (синяя кривая) на изэнтропе $S = 34.5$ Дж/г·К

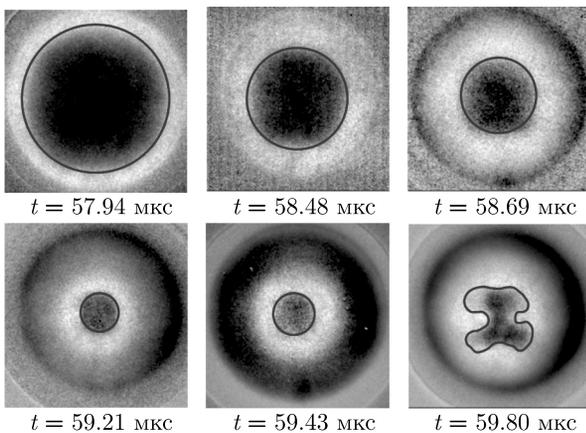


Рис. 13. (В цвете онлайн) Экспериментальные рентгенограммы в опыте № 3 (см. табл. 1)

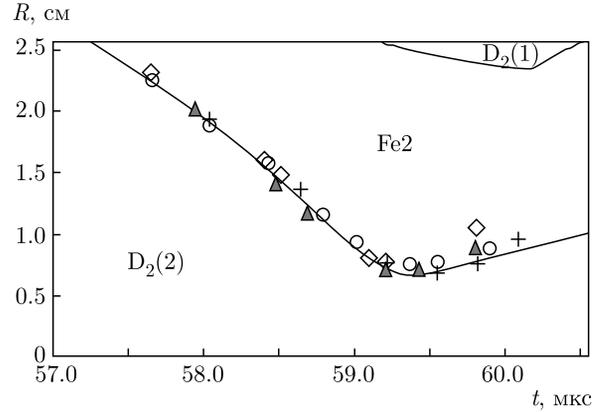


Рис. 14. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных данных и рассчитанной $R(t)$ -диаграммы в эксперименте № 3 с дейтерием. Сплошные линии — расчет. Эксперимент: красные треугольники — настоящая работа; \diamond , \circ — из работ [4, 5], + — данные по гелию в эксперименте с аналогичным устройством [8]

= 59.43 мкс. Термодинамические параметры для дейтерия в этот момент времени имеют следующие значения: $P = 5620 \pm 600$ ГПа, $\rho = 6.5 \pm 1.1$ г/см^3 , $T = 26800 \pm 3470$ К при степени сжатия $\sigma = 180$. Неопределенность данных по давлению и температуре соответствует максимальному отклонению их профилей от средневзвешенных значений. Результат эксперимента, полученный в настоящей работе при использовании регистраторов с более высокой чувствительностью, чем в работах [4, 5], приведен на рис. 12 и указывает на отсутствие особенности сжатия плазмы дейтерия в этой области давления.

Результаты по квазиизэнтропическому сжатию плазмы гелия из работ [3, 4, 7–12] и настоящей работы представлены на рис. 15.

Отметим особенности экспериментальных данных по сжимаемости неидеальной плазмы дейтерия, полученных в экспериментах № 1 и № 2 (см. табл. 1), данных работ [4, 5] и результатов по гелию [8], приведенных на рис. 14. Как показывает анализ полученных данных, для использованных в этих работах аналогичных экспериментальных устройств и практически одинаковых начальных состояний газов рассчитанные $R(t)$ -диаграммы движения внутренних границ оболочек Fe2 для гелия и дейтерия совпадают, а до состояния максимального сжатия и вблизи него хорошо согласуются с экспериментальными данными. Фактически это означает, что в достигнутых в настоящих экспериментах условиях высоких температур и плотностей параметры динамического сжатия сильнонеидеальной и вырожденной

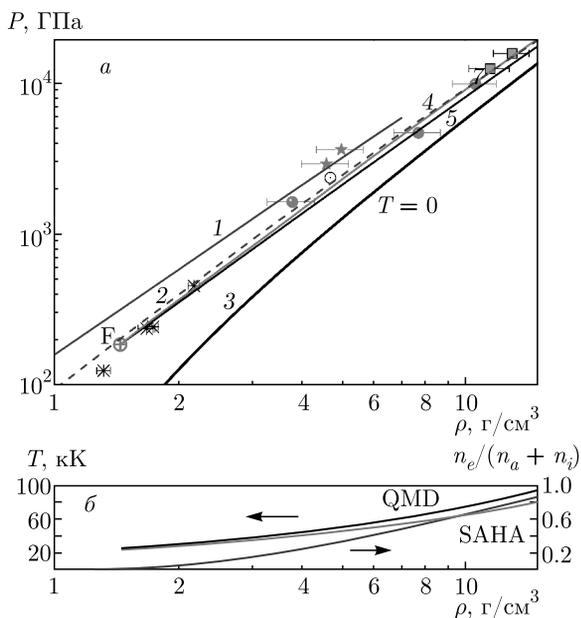


Рис. 15. (В цвете онлайн) Квазиизэнтропическая сжимаемость плазмы гелия. Эксперимент (настоящая работа): голубые квадраты — фазы сжатия 5 и 6 (см. табл. 3). Красные кружки — данные работ [3, 4, 11]; * — [12], красные звезды — [9, 10], \circ — [7]. Расчет [11] (УРС ВНИИЭФ): 1 — изэнтропа $S = 16$ Дж/г·К; 2 — изэнтропа $S = 14.9$ Дж/г·К (синие штрихи); 3 — изотерма $T = 0$; расчет (настоящая работа) из начальной точки F ($P_0 = 188$ ГПа; $\rho_0 = 1.45$ г/см³): 4 — изэнтропа $S = 24.04$ Дж/г·К (красная линия, УРС SAHA); 5 — изэнтропа (QMD-моделирование). б) Температура (красная линия) и степень ионизации (синяя линия) гелия вдоль изэнтропы из точки F (расчеты по УРС SAHA); черная линия — расчет температуры в рамках QMD-моделирования

плазмы гелия и дейтерия очень близки и не различимы в пределах точности настоящего эксперимента. Это, в свою очередь, означает [53] близость в этом диапазоне параметров для усеченного calorического УРС гелия и дейтерия, $U(P, V)$. Вместе с тем следует подчеркнуть [57], что близость calorического УРС $U(P, V)$ еще не означает полной тождественности термодинамических свойств обсуждаемой плазмы дейтерия и гелия, что подтверждается выполненными в настоящей работе вдоль траекторий динамического сжатия расчетами термического УРС $T(P, V)$ в рамках как химической модели SAHA, так и *ab initio* подходов квантовой молекулярной динамики (quantum molecular dynamics, QMD) и молекулярной динамики волнового пакета (wave packet dynamics, WPMD) см. ниже рис. 18.

Аналогичная особенность в сжимаемости неидеальной вырожденной плазмы гелия и дейтерия на-

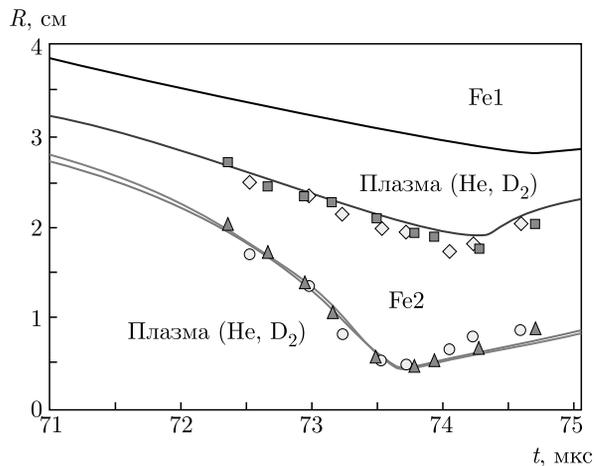


Рис. 16. (В цвете онлайн) Фрагменты $R(t)$ -диаграмм для экспериментов с дейтерием и гелием в области давлений $P \sim 10000$ ГПа. Экспериментальные данные: желтые кружки и ромбы — He, зеленые квадраты и треугольники — D₂. Сплошные линии — расчет: зеленая — дейтерий; красная — гелий

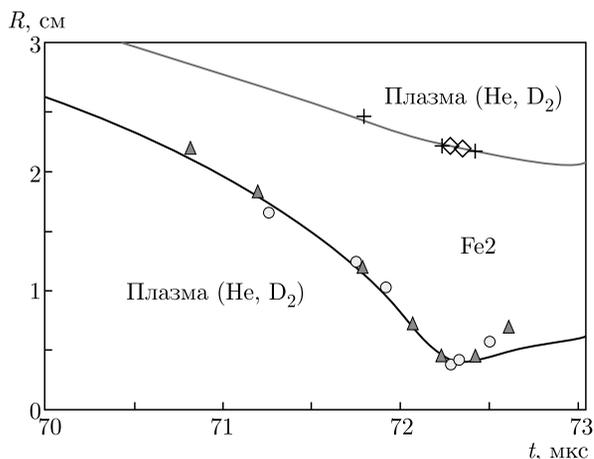


Рис. 17. (В цвете онлайн) Фрагменты $R(t)$ -диаграмм для экспериментов с дейтерием и гелием в области давлений $P \sim 20000$ ГПа. Экспериментальные данные: желтые кружки, \diamond — гелий; зеленые треугольники, + — дейтерий. Сплошные линии — расчет

блюдается и для экспериментальных данных в области давлений $P \sim 10000$ ГПа (рис. 16) и $P \sim 20000$ ГПа (рис. 17).

Как правило, после момента остановки данные эксперимента демонстрируют более резкий разворот границ по сравнению с рассчитанными $R(t)$ -траекториями. Это объясняется двумя обстоятельствами: 1) наличием неустойчивостей, которые начинают сильно развиваться с момента резкого торможения

обжимающей оболочки (указанные неустойчивости наша 1D-программа [23] не учитывает); 2) большой ошибкой обработки экспериментальных рентгенограмм в «разлетной» фазе. Например, на рис. 4 в опыте с дейтерием на последней рентгенограмме полость существенно несферическая, и процесс ее выделения чисто условный — по функциональному признаку. Различием расчета и эксперимента в разлетной фазе мы пренебрегаем.

Для получения проекции реальной полости на плоскость необходимо использовать «томографию» — регистрацию с нескольких ракурсов. Сделать такую томографию на нашей установке очень проблематично — можно лишь в каждом эксперименте получать не более трех состояний полости с трех ракурсов. Поэтому считается хорошим согласием расчета и эксперимента, если описываются характерные моменты движения ударных волн и оболочек, регистрируемые в отдельных модельных экспериментах, момент первого рентгенографирования, когда влиянием УРС сжимаемого газа можно пренебречь и «автоматически» описывается весь дальнейший ход сжатия вплоть до момента остановки оболочки.

4. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ТЕОРИИ СИЛЬНОНЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

4.1. Расчеты параметров динамического сжатия дейтерия и гелия по модели SAHA

Для анализа результатов экспериментов, полученных в данной работе, были проведены расчеты ударного и изэнтропического сжатия по теоретической модели SAHA, развитой для описания термодинамики многокомпонентной сильнонеидеальной плазмы с возможными фазовыми превращениями [32, 33]. Ее применение показало удовлетворительное согласие расчетов со всей совокупностью имевшихся к тому времени экспериментальных данных по ударному сжатию дейтерия (и водорода) в твердом, жидком и предварительно сжатом газовом состоянии с начальными плотностями в диапазоне от 0.13 до 0.33 г/см³, полученных как в России [34–36], так и за рубежом [37, 38]. Для описания УРС дейтерия и гелия в области рекордно высоких сжатий настоящей работы был использован модифицированный вариант модели SAHA [33], показавший хорошее согласие при описании результатов предыдущей серии экспериментов по квазиизэнтропическо-

му сжатию плазмы дейтерия до давлений 5000 ГПа [5]. Модель SAHA была разработана для расчета состава и термодинамических функций плотного сильнонеидеального и частично ионизованного водорода (дейтерия) и других молекулярных и инертных газов в широком диапазоне температур и давлений, достигаемых в современном динамическом эксперименте. Расчеты по модели SAHA имеют правильную асимптотику в пределах как высоких, так и низких температур. В первом случае они совпадают с высокотемпературными характеристиками ударных адиабат, рассчитанных с использованием как асимптотически точного аналитического приближения (код SAHA-S) [39], так и *ab initio* подхода — так называемых интегралов по траекториям (path integral Monte Carlo, PIMC) [40]. В пределе низких температур расчеты по модели SAHA-D находятся в удовлетворительном согласии, во-первых, с результатами расчета параметров ударных адиабат, полученных с использованием «неэмпирического атом-атомного приближения» [41, 42], а во-вторых, с результатами расчета в рамках *ab initio* подхода — QMD [43].

В варианте химической модели, реализованном в коде SAHA, плотная и горячая плазма дейтерия и/или гелия описывается как равновесная сильно-взаимодействующая («неидеальная») смесь атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов. Последние могут быть частично вырожденными. Этот подход известен как метод минимизации свободной энергии [44, 45] и фактически сводится к решению системы нелинейных уравнений химического и ионизационного равновесия с учетом различных «поправок» на взаимодействие, учитывающих как эффект кулоновского взаимодействия зарядов, так и влияние интенсивного короткодействующего отталкивания и притяжения. При этом во всех вышеуказанных реакциях учитывается сдвиг равновесия вследствие частичного вырождения электронов.

В рамках принятого в модели SAHA способа учета короткодействующего отталкивания (приближение «мягких сфер» [46]) определяющими при расчетах плотной и нагретой плазмы водорода и гелия являются принятые эффективные «собственные размеры» каждого сорта частиц, а также показатель степенного отталкивания в эффективном потенциале мягких сфер. При этом по своему влиянию на итоговые термодинамические характеристики плазмы в случае дейтерия доминируют три величины — эффективные «диаметры» молекул, атомов и ионов дейтерия — D₂, D, D⁺. При описании гелия — это

эффективные диаметры атома и одно- и двукратно ионизованных ионов гелия — He и He⁺ и He⁺⁺. При расчетах плазмы дейтерия в методике кода SANA-D указанные выше диаметры молекул D₂ и атомов D выбираются в максимальном соответствии с рекомендациями неэмпирического атом-атомного приближения [41, 42]. Соответственно этому в предыдущих расчетах параметров ударного сжатия дейтерия (водорода) [34] отношение эффективных диаметров молекулы D₂ и атома D принималось равным 1.25 при выбранном показателе степенного отталкивания $m = 6$. Величина диаметра молекулы D₂ определялась из условия наилучшего описания параметров «холодной» кривой (изотермы $T = 0$) [47].

В области высоких температур и развитой ионизации расчет влияния короткодействующего отталкивания в модели SANA дополняется выбором параметров, описывающих участие в этом механизме взаимодействия заряженных компонент. В качестве эффективного диаметра для молекулярного иона D₂⁺ в расчетах настоящей работы был принят размер, равный среднему значению между размером молекулы D₂ и атома D. Ионы D⁺ и электроны в рамках методики SANA считаются также участвующими в механизме короткодействующего межчастичного отталкивания, но с радиусами, равными нулю. Это физически соответствует учету вклада ионов D⁺ и электронов в рамках условия непроницаемости для них всех составных частиц, D, D₂, D₂⁺. Это соответствует исходной концепции «химической модели плазмы» [44, 45, 48] как равновесной совокупности по определению непроницаемых «свободных» составных частиц, занимающих разделенные участки фазового пространства, недоступные для остальных «свободных» комплексов.

Процедуру расчета, реализованную в модели и коде SANA, дополняет расчет возможных фазовых расслоений системы. Подчеркнем, что помимо расчета простых вандерваальсовых («энтальпийных» [49]) переходов типа газ–жидкость, но при этом в неконгруэнтном варианте [50, 51] методология химической модели плазмы и, в частности, код SANA приспособлены для описания необычных, энтропийных («делокализационных») фазовых переходов [52] в плотном горячем флюиде водорода и/или гелия. В частности, это диссоциативно-плазменный [32] и чисто плазменный [53] фазовые переходы в водороде (дейтерии) и двухстадийный плазменный переход в гелии в версии работы [54] или одностадийный с двукратной ионизацией гелия в версии работы [55].

В области высоких температур и плотностей плазмы с частичной или полной ионизацией су-

щественную роль играют поправки, учитывающие сильное кулоновское взаимодействие. Для описания этих эффектов в модели SANA используется модифицированный вариант псевдопотенциального приближения [50, 56, 57]. Кулоновские поправки в этом приближении практически совпадают с известным дебаевским приближением в пределе слабой неидеальности и отличаются от него более слабой зависимостью этих поправок от интенсивности взаимодействия в пределе сильной неидеальности $\Gamma_D = (e^2/kT)r_D > 1$ (r_D — дебаевский радиус). Приближение из работ [50, 56] построено в терминах бинарных корреляционных функций, при выборе которых в основу положено точное выполнение ряда общих соотношений, наложенных на эти функции и не связанных условием малости параметра Γ_D .

В области плотной горячей плазмы методика, реализованная в коде SANA, учитывает эффект вырождения электронов. Эффекты вырождения электронов в методике модели SANA проявляются двояко. Прежде всего — в идеально-газовом слагаемом, описывающем вклад свободных электронов. Помимо этого в рамках принятой модификации псевдопотенциального приближения [50, 51] вырождение также учитывается в уменьшении (с ростом вырождения) участия электронов в экранировании зарядов. В результате в пределе сильного вырождения электронов все экранирование ионов реализуется за счет ион-ионных корреляций (см. подробнее работу [57]). Согласно проведенным ранее расчетам [5], в случае квазиизэнтропического сжатия дейтериевой и гелиевой плазмы эффект вырождения электронов сказывается при высоких давлениях квазиизэнтропического сжатия мегабарного диапазона.

Расчеты динамического сжатия дейтерия и гелия по модели SANA настоящей работы проводились в режиме изэнтропии с начальными параметрами, соответствующими моменту фокусировки первой ударной волны в центре сферической полости с исследуемым газом (состояние F в табл. 4 и 5). Результаты этих расчетов в сравнении с экспериментальными данными в координатах давление–плотность и температура–плотность приведены на рис. 12 и 18.

Эффективные размеры атома и молекулы, рекомендуемые неэмпирическим атом-атомным приближением [41, 42], не являются постоянными, а плавно уменьшаются с ростом температуры и плотности. В методике, используемой в коде SANA, величины эффективных размеров всех сортов частиц считаются фиксированными. Этим объясняется тот факт [5, 53], что точность описания эксперименталь-

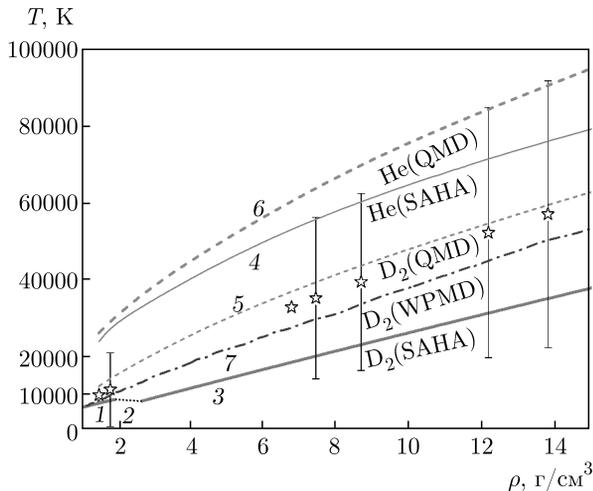


Рис. 18. Температура изэнтропически сжимаемой плазмы дейтерия и гелия. Расчеты настоящей работы вдоль изэнтроп дейтерия и гелия из начальной точки F с совпадающими параметрами $P_0 = 188$ ГПа, $\rho_0 = 1.45$ г/см³: 1, 2, 3 — изэнтропа дейтерия согласно УРС SAHA; 4 — изэнтропа гелия согласно УРС SAHA; 5, 6 — изэнтропы дейтерия и гелия в рамках QMD-моделирования; 7 — изэнтропа дейтерия в рамках моделирования методом WPMD-DFT. Значки — температура плазмы дейтерия согласно УРС ВНИИЭФ

ных данных, даваемая расчетами по модели SAHA с фиксированными эффективными размерами атома и молекулы, падает с ростом плотности. По этой причине в работах [5, 53] и в настоящей работе при описании экспериментальных данных в области давлений выше 300 ГПа эффективное отношение размеров атома D и молекулы D₂ уменьшалось до величины, равной 0.6 [32] от величины 0.8, принятой в области низких давлений [34]. Важным физическим следствием такого уменьшения является то, что суммарный эффективный «объем» двух атомов дейтерия в реакции диссоциации становится меньше «объема» диссоциировавшей молекулы. Результатом этого является отмеченное ранее [32] резкое увеличение степени диссоциации и ионизации дейтерия на исследуемой изэнтропе в районе давлений выше 300 ГПа и появление в расчетах по модели SAHA-D второй, говоря условно, такой «атомарной» ветви изэнтропы, что переход между ветвями имеет вид фазового перехода первого рода. В условиях обсуждаемого в настоящей работе эксперимента по интенсивному динамическому сжатию последовательность термодинамических состояний в процессе реверберации серии затухающих ударных волн, согласно расчетам, проходит заметно выше области указанного фазового расслоения, слабо

влияя на поведение изэнтропы дейтерия, получаемой в расчете по методике SAHA в области давлений 5000–20000 ГПа. Результаты этого расчета в сравнении с результатами настоящего эксперимента в плоскости P–ρ приведены выше на рис. 12, а в плоскости T–ρ — на рис. 18 вместе результатами *ab initio* подходов в рамках методов QMD [58], а во вторых, WPMD с применением теории функционала плотности (WPMD-DFT) [59]. Краткая информация о деталях указанных методик расчетов QMD и WPMD-DFT приведена ниже. Обсуждение физических следствий, которые можно сделать из проведенного сравнения теории и эксперимента, приведены в разд. 5.

4.2. Расчет параметров динамического сжатия плазмы гелия в модели SAHA

Специфика применения модели и кода SAHA к расчетам параметров динамического сжатия плазмы гелия обусловлена прежде всего иным составом плазмы гелия в сравнении с плазмой дейтерия — в плазме гелия отсутствуют сильносвязанные молекулы и связанные с этим особенности термодинамики, в частности, возможность плавной или разрывной диссоциации давлением, но при этом при высоких температурах в процессе сжатия появляется возможность заметной двукратной ионизации гелия. Как и в случае дейтерия, при расчете параметров горячей плотной плазмы гелия в рамках методики SAHA важным является выбор величин собственных размеров атома и ионов гелия — He, He⁺ и He⁺⁺. В настоящих расчетах плазмы гелия использовалась методика и код SAHA-He, уже показавшие ранее свою эффективность в описании результатов эксперимента по динамическому сжатию плазмы гелия в более низком диапазоне давлений [12, 33]. Как и в случае дейтерия, в настоящих расчетах плазмы гелия использовался модифицированный вариант псевдопотенциальной модели кулоновской неидеальности, обобщенный на случай многократной ионизации [51]. Самосогласованная граница сверху вклада возбужденных состояний атома и иона гелия, одновременно являющаяся границей снизу («глубиной») эффективного притяжения в модифицированном кулоновском потенциале электрон-ион, в настоящих расчетах фиксировалась на энергии связи пары электрон-ион на среднем расстоянии между «тяжелыми» частицами, т. е. ионами и атомами [12]. Собственный размер (диаметр) атома гелия определялся из условия оптимального описания «холодной кривой» гелия. Отношение

диаметров ионов гелия He^+ и He^{++} к диаметру атома определялось в результате специальных расчетов методом Хартри–Фока зависимости спектров атома и ионов при их сжатии в рамках приближения «ограниченного атома» [45, 60]. Вклад вырождения электронов в термодинамику плазмы гелия учитывался в рамках той же процедуры, что и в расчетах плазмы дейтерия. Результаты расчета параметров динамического сжатия плазмы гелия до давлений 20000 ГПа в сравнении с результатами настоящего эксперимента в плоскости P – ρ приведены на рис. 15, а в плоскости T – ρ — на рис. 18.

4.3. Расчеты параметров изэнтропического сжатия дейтерия и гелия в рамках *ab initio* подходов метода квантовой молекулярной динамики (QMD)

Помимо квазихимического представления (код SAHA) в настоящей работе были проведены расчеты параметров динамического сжатия плазмы дейтерия и гелия в рамках двух вариантов *ab initio* подхода. В первом, QMD, электронная подсистема описывается в рамках метода функционала плотности (DFT) [61, 62]. Во втором, WPMD-DFT, динамика электронной подсистемы описывается в рамках метода волновых пакетов [59]. Результатом этого расчета является (неоднородное) пространственное распределение электронов в поле подвижных ионов. Динамика и соответствующая ей термодинамика (точечных) классических ионов в поле электронов описывается в рамках хорошо развитой процедуры молекулярной динамики (MD) [63]. Напомним, что оба метода, QMD и WPMD-DFT, не используют для проведения расчетов (подобно квазихимическим методикам SAHA-D и SAHA-He) никакой феноменологической информации об изучаемом веществе, такой как потенциалы ионизации, энергетические спектры связанных комплексов и т. д. [44]. Для расчетов задаются только заряды и массы ядер элементов, составляющих исследуемое вещество. Методика расчетов QMD в настоящей работе является развитием и продолжением методики, реализованной и описанной в работе [58]. Процедура расчетов QMD реализована с использованием известного пакета VASP [64], для обменно-корреляционного функционала использовалось обобщенно-градиентное приближение (GGA) с параметризацией PBE [65].

В сравнении с расчетами, реализованными в работе [58], в настоящей работе было заметно увеличено количество моделируемых частиц (ядер и электронов), что позволило существенно повысить вы-

числительную точность расчетов. Конкретно, в кубическую ячейку моделирования помещалось от 64 до 256 ядер атомов дейтерия или гелия (и соответствующее количество электронов для обеспечения электронейтральности) в зависимости от термодинамических параметров. Проверялась сходимость результатов расчетов от числа частиц. Энергия обреза E_{cut} , определяющая количество плоских волн для представления волновых функции электронов, варьировалась в расчетах в диапазоне от 600 до 1200 эВ. Для аппроксимации зоны Бриллюэна при расчете электронных свойств дейтерия использовалась одна \mathbf{k} -точка: либо особая точка Балдерши $\{1/4, 1/4, 1/4\}$, либо Γ -точка. Все расчеты проводились в каноническом ансамбле. Температура ионов T_i контролировалась с помощью термостата Нозе–Гувера [63]. Температура электронов $T_e = T_i$ задавалась независимо и входила в числа заполнения электронов по энергиям, определяемые с помощью функции Ферми–Дирака. Как и в других методах равновесного атомистического моделирования, в методе QMD задается некоторая начальная конфигурация ионов, а затем в процессе эволюции системы происходит установление термодинамического равновесия. Равновесные термодинамические характеристики вычисляются на равновесном участке моделирования путем усреднения по конфигурациям, что, в том числе, определяет статистическую погрешность моделирования.

Непосредственными термодинамическими величинами, получаемыми в методе QMD в результате описанной выше процедуры атомистического моделирования, являются две главные «сумматорные» величины — давление $P(T, \rho)$ и внутренняя энергия $U(T, \rho)$ как функции плотности и температуры. В соответствии с методом Ферми–Зельдовича [66] это позволяет восстановить, во-первых, ход изэнтропы в P – V -плоскости, а во-вторых, темп изменения температуры вдоль этой изэнтропы. Зная из результатов QMD-моделирования термическое и калорическое уравнения состояния, $P(\rho, T)$ и $U(T, \rho)$, это может быть сделано не единственным образом. В настоящих расчетах использовался широко принятый способ [58, 67], состоящий в интегрировании вдоль построенной в P – V -плоскости изэнтропы известного термодинамического соотношения

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \ln T}{\partial V}\right)_S &= -\left(\frac{\partial U(P, V)}{\partial P}\right)_V^{-1} = \\ &= -\left(\frac{\partial P(V, T)}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial U(V, T)}{\partial T}\right)_V^{-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Соответственно, эта изэнтропа выпускается из начальной точки в P - V -плоскости, где известна величина температуры T_0 .

Для дейтерия были вычислены изотермы и изохоры в диапазоне температур от 0.3 до 100 кК и плотностей от 1 до 15 г/см³, что существенно расширило диапазон, исследованный ранее [58], и позволило выполнить расчеты изэнтропического сжатия дейтерия до давлений около 20000 ГПа. Для гелия область проведенных расчетов также соответствовала диапазону температур от 0.3 до 100 кК и плотностей от 1 до 15 г/см³.

В качестве начальной точки изэнтропы динамического сжатия дейтерия была выбрана экспериментальная точка F (см. табл. 4) с плотностью $\rho = 1.45$ г/см³; температура в этой точке подбиралась из результатов QMD-моделирования для получения экспериментального давления $P = 188$ ГПа. Найденная так температура оказалась равной 6.9, что близко к данным работы [67], методика моделирования в которой в основных моментах совпадает с прежними расчетами [58]. Отличие связано с меньшим числом частиц, учитывавшихся в работе [58] при моделировании в области давлений около 100 ГПа (256 в данной работе по сравнению с 64 в [58]). В качестве начальной точки изэнтропы динамического сжатия гелия была также выбрана экспериментальная точка F из табл. 5. Результаты описанных выше расчетов в плоскостях P - ρ и T - ρ показаны на рис. 12, 15 и 18.

4.4. Расчет параметров изэнтропического сжатия дейтерия методом молекулярной динамики волновых пакетов с применением теории функционала плотности (WPMD-DFT)

В дополнение к методу QMD, расчеты изэнтропы сжатия дейтерия были проведены модифицированным методом WPMD-DFT [59]. В отличие от QMD, в этом методе динамика электронов моделируется одновременно с ионной динамикой. Движение электронов рассчитывается на основе численного решения уравнений Гамильтона, схожих с уравнениями для классической молекулярной динамики и отличающихся лишь дополнительными уравнениями для ширины пакетов.

В исходном методе WPMD гамильтониан системы содержит только члены, описывающие кинетическую энергию и энергию кулоновского взаимодействия частиц (без псевдопотенцилов) [68, 69]. В модифицированном методе WPMD-DFT, использу-

емом в настоящей работе, учтена также энергия обменно-корреляционного взаимодействия в приближении теории функционала плотности

$$E_{XC} = \int_V \epsilon_{XC}[n_{1/2}(\mathbf{r}), n_{-1/2}(\mathbf{r})] \times \\ \times [n_{1/2}(\mathbf{r}) + n_{-1/2}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}, \quad (3) \\ n_\sigma(\mathbf{r}) = \langle \Psi_\sigma(\mathbf{r}) | \Psi_\sigma(\mathbf{r}) \rangle, \\ \sigma = \{-1/2, 1/2\},$$

где ϵ_{XC} — функционал локальной плотности с учетом спина [70], $n_\sigma(\mathbf{r})$ — суммарная плотность электронов с проекцией спина, вычисляемая по мгновенным положениям волновых пакетов на каждом шаге по времени (всем электронам изначально присваивается проекция спина, равная 1/2 или -1/2). Также в данной реализации метода WPMD-DFT вместо периодических граничных условий используются отражающие стенки, что позволяет решить вычислительную проблему с неограниченным распылением волновых пакетов для свободных электронов [71], хотя и требует учета численных эффектов, связанных с размером системы и неоднородностью электронной плотности вблизи границ расчетной ячейки.

Представленная модель плазмы позволяет описывать не только свободные электроны и ионы, но также и их связанные состояния: атомы, молекулы и молекулярные ионы. Однако точность описания их ограничена фиксированной гауссовой формой параметризованной волновой функции электрона. Точность представления связанных состояний можно повысить, например, используя модельную волновую функцию электрона, состоящую из нескольких гауссовых волновых пакетов [72]. Следует отметить, что ионизационное равновесие в моделируемой системе устанавливается автоматически и не требует привлечения дополнительной процедуры.

Для расчета изэнтропы с помощью WPMD-DFT использовался прямой метод, основанный на решении уравнений движения. Изначально система из 256 пар электронов и ионов выводилась на равновесие при плотности $\rho = 1.09$ г/см³ и температуре $T = 6900$ К с помощью термостата Нозе-Гувера. Затем термостат отключался и выполнялось чередование этапов сжатия системы и равновесной динамики. На каждом равновесном этапе длительностью 50 фс проводился расчет средних значений давления и температуры, представленных в виде функций от плотности на рис. 12 и 18. Адиабатичность моделируемого процесса следует из постановки численно-

го эксперимента, а соответствие изэнтропе подтверждается сходимостью результатов при уменьшении скорости сжатия. К настоящему времени получены результаты для минимальной скорости сжатия $6.4 \cdot 10^{-5} \text{ нм}^3/\text{фс}$, при этом аналогичный расчет для $1.2 \cdot 10^{-4} \text{ нм}^3/\text{фс}$ приводит к различию в 44000 К (45%) по температуре и 1700 ГПа (11%) по давлению при максимальной плотности $\rho = 13.4 \text{ г/см}^3$ на конце траектории. Эти величины и следует считать погрешностью полученных результатов для соответствующих величин при максимальной плотности.

Важным преимуществом теоретических методов, используемых в настоящей работе, является наличие в их результатах помимо данных о положении изучаемой изэнтропы в плоскости P - ρ (что является информацией лишь об усеченном калорическом УРС $U(P, \rho)$) информации о температуре в случае QMD и WPMD-DFT, т. е. о термическом УРС $T(P, \rho)$, и, кроме того, о величине энтропии в случае SAHA. Это обстоятельство имеет особую важность, поскольку известно, что теоретическая информация, содержащаяся в калорическом УРС $U(P, \rho)$, существенно неполна [53]. Это означает, в частности, что сколь угодно хорошее соответствие результатов теории с экспериментом в описании формы изэнтропы $S = \text{const}$ в P - ρ -плоскости не гарантирует, строго говоря, никакой точности в описании этой теорией величины температуры на этой изэнтропе. Тем более важно сравнить величины температуры, даваемые тремя теоретическими приближениями, используемыми в настоящей работе, вдоль экспериментальной изэнтропы. Такое сравнение для плазмы дейтерия и гелия представлено на рис. 18.

4.5. Обсуждение результатов сравнения теоретических расчетов с экспериментальными данными

Из представленного на рис. 12 и 18 сравнения следует, что параметры изэнтропы, выпущенной из точки с давлением и плотностью, соответствующими состоянию дейтерия и гелия в момент «фокусировки» ударной волны к центру (точка F в табл. 4 и 5), рассчитанные по УРС SAHA и QMD, находятся в удовлетворительном согласии с результатами настоящего эксперимента как для дейтерия, так и для гелия. Также в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными находятся результаты пилотных расчетов параметров динамического сжатия дейтерия по методу волновых пакетов (WPMD-DFT). Учитывая результаты проведенного ранее аналогичного сравнения с результатами

предыдущих экспериментов по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия и гелия в области более низких давлений и степеней сжатия [3–5, 11, 12], можно заключить, что приближение SAHA и теоретические подходы QMD [58] и WPMD-DFT [59] удовлетворительно воспроизводят в P - ρ -координатах общий ход совокупности экспериментальных данных по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия и гелия до $P \sim 20000 \text{ ГПа}$ (200 Мбар). Вместе с тем проведенное на рис. 18 сравнение результатов расчетов температуры в подходах УРС ВНИИЭФ, УРС SAHA вдоль исследованных траекторий динамического сжатия плазмы дейтерия и гелия в диапазоне $P = 100\text{--}20000 \text{ ГПа}$ с результатами «численного эксперимента» в рамках QMD и WPMD-DFT демонстрируют значительную неопределенность нашего знания температуры и энтропии в интересующей нас области состояний неидеальной плазмы.

Согласно существующим представлениям, основным физическим процессом, определяющим детали поведения плазмы дейтерия и гелия в обсуждаемой области состояний многократного сжатия и повышения температуры, является постепенный или, возможно, скачкообразный распад (делокализация) связанных комплексов – молекул, атомов, молекулярных и атомарных ионов в случае водорода (дейтерия) и одно- и двукратной ионизации в случае гелия. Существенно, что указанные доминирующие процессы протекают в условиях одновременного действия двух возмущающих факторов, существенно искажающих протекание вышеупомянутой делокализации связанных комплексов. Во-первых, интенсивного межчастичного взаимодействия, т. е. сильной неидеальности, причем одновременно по разным каналам взаимодействия — кулоновского взаимодействия заряженных частиц и интенсивного короткодействующего как отталкивания, так и притяжения в первую очередь «тяжелых» частиц (атомов, молекул и т. д.). Во-вторых, это сильное вырождение свободных электронов, также существенно искажающее прежде всего ход «ионизации давлением» [5, 73, 74] и др. В идеологии химической модели плазмы (код SAHA) оба указанные эффекта описываются в рамках условно разделенных механизмов и описываются сложно, но самосогласованно в рамках *ab initio* подходов QMD и WPMD-DFT.

Главное следствие обсуждаемых факторов (неидеальности и вырождения) заключается в том, что упомянутый выше доминирующий физический процесс — распад связанных комплексов — может при определенных условиях стать разрывным с появлением специфического делокализационного фа-

зового перехода первого рода, сопровождающегося скачкообразным изменением равновесного «состава» — степени диссоциации, ионизации и др. Проблема делокализационного фазового перехода — диссоциативного, «плазменного» (ионизационного) и др., является в течение многих лет одной из центральных тем в физике неидеальной плазмы [75]. С этой же проблемой гипотетических делокализационных фазовых переходов в значительной мере связана и мотивация экспериментов настоящей работы, продолжающей и развивающей достаточно давнюю историю экспериментальных поисков таких фазовых переходов методами динамического эксперимента [53, 76]. Еще в начале 70-х годов прошлого века в пионерских экспериментах Кормера с сотрудниками [27–29] в районе $P \sim 300$ ГПа был обнаружен значительный разрыв в P - ρ -траектории квазиизэнтропического сжатия водорода. В дальнейшем в развитие этих экспериментов на базе более совершенной методики генерации и диагностики квазиизэнтропического сжатия существование указанного разрыва было подтверждено и значительно уточнено [1–5] в несколько более низком диапазоне давления ($P \approx 150$ ГПа).

Одновременно в проводимых также во ВНИИЭФ экспериментах по «мягкому» электромагнитному сжатию водорода и дейтерия при температурах, близких к нулевой, была измерена их сжимаемость в области давлений до 500 ГПа [77] и зарегистрирован рост электропроводности плазмы водорода примерно на два порядка в узком диапазоне плотностей $\rho \sim 1.05$ – 1.15 г/см³ и давлений $P \sim 230$ – 300 ГПа [78]. Полученные в работах [77, 78] данные подкрепляются результатами *ab initio* моделирования низкотемпературных свойств водорода [79], согласно которым на изотерме $T = 100$ К молекулярный водород при $P \approx 350$ ГПа испытывает фазовое превращение в метастабильный проводящий «атомарный» кристаллический водород, что помимо скачка электропроводности сопровождается также слабым термодинамическим разрывом. Эти данные, на наш взгляд [80], можно рассматривать как низкотемпературную часть единой [1–5] аномалии термодинамики плотного водорода и дейтерия.

Что касается расчетно-теоретических подходов, то проблема существования в плотном водороде (дейтерии) особого диссоциативно-плазменного фазового перехода также имеет давнюю и богатую историю [53, 73–75]. На рис. 12 приведен один из множества модельных вариантов гипотетического «плазменного» фазового перехода [30] (см. подроб-

нее [73]). Диссоциативно-плазменный фазовый переход при давлении $P \sim 300$ – 400 ГПа присутствует также и в результатах расчетов энтропии сжатия дейтерия настоящей работы в рамках химической модели плазмы (код SAHA), что проиллюстрировано на рис. 12, 15 и 18. В этом же диапазоне давлений обширный фазовый переход присутствует на «холодной кривой» (изотерме $T = 0$) в известном интерполяционном УРС SESAME [81] а также в полумпирических УРС ВНИИЭФ [82, 83]. Это показано на рис. 4 в работе [84].

Еще более непростым является взаимоотношение проблемы гипотетических диссоциативно-плазменных фазовых переходов, фиксируемых в реальном эксперименте [1–5, 27–29], с предсказаниями *ab initio* подходов типа QMD и WPMD-DFT, т. е. «экспериментов численных». Как можно видеть на рис. 12 и 18, на энтропиях QMD и WPMD-DFT нет даже отдаленных признаков ни разрывов, ни каких-либо иных аномалий, подобных зафиксированным в экспериментах [1–5, 27–29]. Вместе с тем в течение уже двух десятков лет подходы QMD и PIMC [85] с нарастающей уверенностью предсказывают существование диссоциативно-плазменного фазового перехода в плотном и горячем водороде (дейтерии) и азоте в мегабарном диапазоне давлений и при температурах в несколько тысяч кельвинов (см., например, расчеты для азота [86] и обсуждение в работе [87]). Как подчеркивалось в работе [80], критическая точка этого фазового перехода, предсказываемого, например, в рамках *ab initio* подхода [88, 89] (с параметрами $P_c = 130$ ГПа, $\rho_c = 1.6$ г/см³, $T_c = 1400$ К) оказывается на P - ρ -плоскости практически в центре аномального разрыва плотности экспериментов [1–5] (см. рис. 12), а зона двухфазной области обсуждаемого фазового перехода [88, 89] на этой плоскости в диапазоне $P = 100$ – 300 ГПа практически совпадает с положением группы энтропий, реализуемых в настоящем и предшествующих [1–5] экспериментах. Детальное обсуждение указанного выше противоречия (см. подробнее [5, 52]) выходит за рамки целей настоящей работы, посвященной термодинамике дейтерия и гелия, прежде всего, в области высоких и сверхвысоких давлений $P = 5000$ – 20000 ГПа. В этом диапазоне давлений и плотностей настоящий и последние из предыдущих [1–5] экспериментов не фиксируют для плазмы дейтерия каких-либо заметных аномалий типа фазовых переходов.

Что касается плотной и горячей плазмы гелия, то для нее также неоднократно предсказывалась высокая вероятность существования резкого или даже скачкообразного сценария ионизации давлени-

ем. Так, в работе [54] предсказана возможность двухстадийного сценария с двумя последовательными «плазменными» фазовыми переходами движимыми (driven) первой и второй ионизацией гелия, что примерно согласуется с пересечением критических изохор $\rho \approx 2.2$ (8.7) г/см³ для первой (второй) стадии плазменного фазового перехода (с критическими параметрами $T_c \approx 35$ (120) кК, $P_c \approx 660$ (10000) ГПа, $n_c \approx 3.3$ (13) · 10²³ ядер/см³).

Для сравнения, другой вариант химической модели плазмы гелия [55] предсказывает одностадийную резкую, но непрерывную версию сразу двукратной ионизации давлением («кроссовер») при сжатии плазмы гелия до плотности 10 г/см³ и давления до 10000–20000 ГПа. Это в точности диапазон параметров, перекрытый в настоящих экспериментах. Приближенное положение обсуждаемых версий разрывного и непрерывного плазменных фазовых переходов отмечены на рис. 15 и 18. Следует подчеркнуть, что, как и в случае дейтерия, в случае гелия результаты *ab initio* QMD-расчетов энтропии гелия (см. рис. 15 и 18) не выявляют никаких аномалий, подтверждающих давние предсказания плазменных фазовых переходов как разрывного типа [54], так и типа кроссовера [55]. Расчеты же, использующие модель УРС и код SANA, также не подтверждают предсказания работ [54, 55].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эксперименты по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия (водорода), представленные в настоящей и серии предыдущих работ, образуют обширную и цельную совокупность данных по УРС сильносжатой и разогретой плазмы дейтерия (водорода) и гелия, покрывающую широкую область фазовой диаграммы от суб- до мультимегабарных давлений и плотностей, в десятки раз превышающих нормальную плотность. Физически исследованная область охватывает состояния дейтерия (водорода) и гелия от плотного молекулярного флюида в случае дейтерия и плотного атомарного флюида в случае гелия до сильнонеидеальной и сильновырожденной плазмы. Для расширения исследуемой области параметров были проведены новые эксперименты с вновь разработанными двукаскадными устройствами сферической геометрии, где дейтериевая и гелиевая плазмы были сжаты до плотности $\rho \approx 14$ г/см³ и давления $P \approx 20000$ ГПа. Были проведены новые эксперименты в сферической геометрии

с использованием специально модифицированной конструкции взрывного генератора.

Таким образом, в лабораторных экспериментах по квазиизэнтропическому сжатию плазмы дейтерия и гелия достигнуты термодинамические параметры, превышающие предполагаемые значения в центре планет-гигантов солнечной системы — Юпитер и Сатурн (с давлением соответственно 60 и 20 млн. атмосфер), а также чрезвычайно многочисленного отряда так называемых внесолнечных планет с еще более высокими параметрами, во множестве открытых и активно изучаемых в последние десятилетия.

Результаты динамических экспериментов наглядно демонстрируют две особенности термодинамического поведения дейтерия (водорода) и гелия при квазиизэнтропическом сжатии в очень широком диапазоне давлений и плотностей: 1) вся совокупность экспериментальных данных в целом образует единую монотонно растущую зависимость; анализ данных, полученных в настоящем эксперименте, показывает, что в области давлений 5000–20000 ГПа не обнаружено существенного различия между квазиизэнтропической сжимаемостью дейтерия и гелия в координатах давление–плотность; 2) настоящие эксперименты не обнаруживают новых разрывных аномалий типа фазовых переходов первого рода в дейтерии, кроме зафиксированной ранее аномалии в области давлений $P \approx 150$ –300 ГПа и никаких разрывных аномалий типа фазовых переходов первого рода в плазме гелия.

В рамках теоретического сопровождения настоящих экспериментов были проведены развернутые расчеты термодинамики изэнтропического сжатия плотной горячей плазмы дейтерия и гелия. Помимо уже проводившихся ранее расчетов в рамках квазихимического представления (модель SANA) и *ab initio* подхода квантовой молекулярной динамики, для осмысления результатов эксперимента на дейтерии были привлечены расчеты в другом *ab initio* подходе — методе молекулярной динамики с волновыми пакетами. Сравнение полученных экспериментальных данных с результатами модельных и *ab initio* теоретических расчетов параметров квазиизэнтропического сжатия показывает удовлетворительное согласие для параметров динамического сжатия (давление–плотность) как для дейтерия, так и для гелия. Теоретические расчеты с использованием модельного УРС SANA предсказывают высокие степени кулоновской неидеальности $\Gamma_D \sim 200$ и вырождения электронов $n_e \lambda_e^3 \sim 150$ в достигнутых состояниях плазмы дейтерия и гелия, что находит свое

выражение в большом суммарном отталкивательном эффекте и превышении фактора сжимаемости плотной плазмы дейтерия и гелия над идеально-газовым значением. При этом расчетные параметры динамического сжатия (давление–плотность) дейтерия и гелия демонстрируют заметную близость, в целом соответствующую главному экспериментальному результату настоящей работы. Вместе с тем специально проведенные теоретические расчеты температуры изэнтропически сжимаемых дейтерия и гелия показывают существенное различие их термических параметров в рамках рассмотренных моделей.

Полученные результаты подчеркивают особую актуальность проведения новых дополнительных экспериментов по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия (водорода) с расширением диапазона достигаемых в эксперименте значений энтропии. Анализ разработанной методологии позволяет надеяться на возможность исследований квазиизэнтропической сжимаемости неидеальной плазмы дейтерия и гелия в РФЯЦ–ВНИИЭФ до давлений 25000 ГПа. В свою очередь, со стороны теории тщательный сравнительный анализ всего вышеуказанного круга вопросов заслуживает отдельного рассмотрения с участием, как модельных представлений, так и *ab initio* квантовых подходов.

Благодарности. Авторы выражают благодарность сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных данных: Р. В. Борисову, С. В. Елфимову, А. С. Пупкову, А. В. Романову, Д. П. Турутину, А. И. Гуркину, М. В. Логинову, Д. А. Линяеву, Г. С. Яндубаеву, В. В. Ерастову, В. В. Ковалдову.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Национального центра физики и математики, Минобрнауки России (в рамках соглашения с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 и программы по созданию молодежных лабораторий (научная тема «Газодинамика и физика взрыва»)), Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 19-32-90193, 20-02-00287), государственного задания (номер гос. регистрации ААА-А19-119071190040-5) и соглашения ФГУП «РФЯЦ–ВНИИЭФ»–ИПХФ РАН № 253/21.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. E. Fortov, R. I. Il'kaev, V. A. Arinin, V. V. Burzhev, V. A. Golubev, L. Iosilevskiy, V. V. Khrustalev, A. L. Mikhailov, M. A. Mochalov, V. Ya. Ternovoi,

and M. V. Zhernokletov, Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).

2. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, С. К. Гришечкин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. К. Грязнов, Письма в ЖЭТФ **92**, 336 (2010).
3. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Е. А. Пронин, А. А. Юхимчук, ЖЭТФ **142**, 696 (2012).
4. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Раевский, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, Н. Б. Давыдов, В. А. Комраков, А. И. Логвинов, С. Ф. Маначкин, А. В. Рыжков, Б. И. Ткаченко, А. В. Федоров, С. А. Финюшин, Д. А. Калашников, Е. А. Чудаков, Е. А. Пронин, Е. А. Бакулина, ЖЭТФ **146**, 169 (2014).
5. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, А. О. Бликов, В. А. Огородников, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, ЖЭТФ **152**, 1113 (2017).
6. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Письма в ЖЭТФ **107**, 173 (2018).
7. М. В. Жерноклетов, В. А. Раевский, С. Ф. Маначкин, Н. Б. Давыдов, К. Н. Панов, А. В. Рыжков, В. А. Аринин, Б. И. Ткаченко, А. И. Логвинов, В. А. Комраков, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, ФГВ **54**(5), 13 (2018).
8. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **96**, 172 (2012).
9. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, А. В. Рыжков, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **101**, 575 (2015).
10. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, С. Е. Елфимов, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, ЖЭТФ **125**, 1113 (2017).

11. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
12. М. В. Жерноклетов, В. К. Грязнов, В. А. Аринин, В. Н. Бузин, Н. Б. Давыдов, Р. И. Илькаев, И. Л. Иосилевский, А. Л. Михайлов, М. Г. Новиков, В. В. Хрусталева, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ **96**, 479 (2012).
13. M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, V. E. Fortov, A. L. Mikhailov, V. A. Arinin, A. O. Blikov, V. A. Komrakov, I. P. Maksimkin, V. A. Ogorodnikov, and A. V. Ryzhkov, *J. Phys. Chem. Biophys.* **8**, (2018).
14. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов, С. В. Ерунов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. А. Комраков, В. Г. Куделькин, И. П. Максимкин, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, П. Р. Левашов, Д. В. Минаков, М. А. Парамонов, ЖЭТФ **159**, 1118 (2021).
15. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov, D. I. Zenkov, and V. F. Tkachenko, in *11th IEEE Pulsed Power Conference/Digest of Technical Papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky (1997), p. 1669.
16. В. Ф. Басманов, В. С. Гордеев, А. В. Гришин, Н. В. Завьялов, Г. А. Мысков, С. Т. Назаренко, Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ **20**, 172 (2015).
17. А. О. Бликов, И. С. Калинин, В. А. Комраков, М. А. Мочалов, В. А. Огородников, А. В. Романов, Патент (RU) 2545289 C1, бюлл. №9, 27.03.2015; А. О. Бликов, А. Ю. Гусев, В. А. Комраков, А. В. Котин, Д. А. Линяев, М. А. Мочалов, В. А. Огородников, С. Н. Шошин, Патент (RU) 168263 U1, бюлл. №3, 25.01.2017.
18. A. N. Golubkov, A. A. Kononenko, and A. A. Yukhimchuk, *Fusion Sci. Techn.* **48**, 527 (2005).
19. A. Michels, W. De Graaff, T. Wassenaar, J. M. H. Levelt, and P. Louwerse, *Physica* **25**, 25 (1959).
20. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, А. Д. Козлов, Г. А. Спиридонов, В. А. Цымарный, *Термодинамические свойства гелия*, Изд-во стандартов, Москва (1984).
21. O. T. Strand, D. R. Goosman, C. Martinez, T. L. Whitworth, and W. W. Kuhlrow, *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 083108 (2006).
22. V. A. Arinin and V. I. Tkachenko, *Pattern Recognition and Image Analysis* **19**, 63 (2009).
23. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ, сер. Методики и программы числ. решения задач матем. физ. Вып. 3, 11 (1982).
24. В. П. Копышев, В. В. Хрусталева, ПМТФ **21**, 122 (1980).
25. В. П. Копышев, ПМТФ **12**, 119 (1971).
26. В. П. Копышев, В. П. Копышев, А. Б. Медведев, Препринт РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (1995), с. 58.
27. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, Письма в ЖЭТФ **16**, 286 (1972).
28. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, ЖЭТФ **69**, 743 (1975).
29. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, ЖЭТФ **75**, 1683 (1978).
30. D. Beule, W. Ebeling, A. Forster, H. Juraneck, R. Redmer, and G. Ropke, *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 21 (1999).
31. V. S. Filinov, P. R. Levashov, A. V. Botsan, M. Bonitz, V. E. Fortov, *J. Phys. A* **42**, 214002 (2009); P. R. Levashov, V. S. Filinov, A. Botan, M. Bonitz, and V. E. Fortov, *J. Phys. Conf. Ser.* **121**, 012012 (2008).
32. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, *J. Phys.* **42**, 214007 (2009).
33. V. Gryaznov, I. Iosilevskiy, and V. Fortov, *Plasma Phys. Control. Fusion* **58**, 014012 (2015).
34. С. Г. Гришечкин, С. К. Груздев, В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, Р. И. Илькаев, И. Л. Иосилевский, Г. Н. Кашинцева, С. И. Киришинов, С. Ф. Маначкин, В. Б. Минцев, А. Л. Михайлов, А. Б. Межевов, М. А. Мочалов, В. Е. Фортов, В. В. Хрусталева, А. Н. Шуйкин, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **80**, 452 (2004).
35. G.V.Boriskov, A.I.Bykov, R. I. Il'kaev, V. D. Selemir, G. V. Simakov, R. F. Trunin, V. D. Urlin, A. N. Shuikin, W. J. Nellis, *Phys. Rev. B* **71**, 092104 (2005).
36. Р. Ф. Трунин, Г. В. Борисков, А. И. Быков, Р. И. Илькаев, Г. В. Симаков, В. Д. Урлин, А. Н. Шуйкин, ЖТФ **76**, 90 (2006).
37. M. D. Knudson, D. L. Hanson, J. E. Bailey, C. A. Hall, J. R. Asay, and A. Deeney, *Phys. Rev. B* **69**, 144209 (2004).
38. P. Loubeyre, S. Brygoo, J. Eggert, R. M. Colliers, D. K. Spaulding, J. R. Rygg, T. R. Boehly, G. W. Collins, and R. Jeanloz, *Phys. Rev. B* **86**, 144115 (2012).

39. V. Gryaznov, S. Ayukov, V. Baturin, I. Iosilevskiy, A. Starostin, and V. Fortov, *J. Phys. A* **39**, 4459 (2006); V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, V. E. Fortov et al., *Contrib. Plasma Phys.* **53**, 392 (2013).
40. B. Militzer, D. Ceperley, J. D. Kress, J. D. Johnson, L. A. Collins, and S. Mazevet, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 275502 (2001).
41. E. S. Yakub, *Physica B* **265**, 31 (1999).
42. E. S. Yakub, *Low Temp. Phys.* **20**, 579 (1994).
43. B. Holst, R. Redmer, V. Gryaznov, V. Fortov, and I. Iosilevskiy, *Eur. Phys. J. D* **66**, 104 (2012).
44. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*. Под общей ред. В. Е. Фортова, том III-1 Физматлит, Москва (2004), с. 111.
45. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Н. И. Кузнецова, В. И. Кучеренко, Г. Б. Лаппо, Б. Н. Ломакин, Г. А. Павлов, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора*, под ред. В. М. Иевлева, Атомиздат, Москва (1980).
46. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, *Contrib. Plasma Phys.* **56**, 352 (2016).
47. P. Loubeyre, R. LeToullec, M. Hanfland, R. J. Hemley, and H. K. Mao, *Nature* **383**, 702 (1996).
48. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, *ПМТФ* **3**, 70 (1973).
49. I. Iosilevskiy, in *Physics of Extreme States of Matter*, ed. by V. Fortov et al. Russia, Chernogolovka; IPCP RAS (2013), p. 136, arXiv:1403.8053v3.
50. И. Л. Иосилевский, в *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, под ред. В. Е. Фортова, том III-1, Физматлит, Москва (2004), с. 349.
51. И. Иосилевский, *Физика неидеальных кулоновских систем: Уравнение состояния и фазовые переходы*, Saarbrücken, Germany, Lambert Acad. Publ. (2011).
52. I. L. Iosilevskiy, *J. Phys. Conf. Ser.* **653**, 012077 (2015).
53. В. Е. Фортов, *Термодинамика динамических воздействий на вещество*, Физматлит, Москва (2019).
54. В. Эбелинг, А. Фёрстер, В. Фортов, В. Грязнов, А. Полищук, *Теплофизические свойства горячей плотной плазмы*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, М.–Ижевск (2007).
55. C. Winisdörffer and G. Chabrier, *Phys. Rev. E* **71**, 026402 (2005).
56. И. Л. Иосилевский, *ТВТ* **18**, 447 (1980).
57. И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме*, Изд-во МФТИ, Москва (2000).
58. A. V. Chentsov and P. R. Levashov, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 33 (2012).
59. Ya. S. Lavrinenko, I. V. Morozov, and I. A. Valuev, *Contrib. Plasma Phys.* **59**, e201800179 (2019).
60. В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, В. Н. Зубарев, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, *ЖЭТФ* **78**, 573 (1980).
61. *Теория неоднородного электронного газа*, под ред. С. Лундквиста, Н. Марча, Мир, Москва (1987).
62. R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge Univ. Press (2020).
63. S. J. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
64. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
65. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
66. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
67. A. Becker, N. Nettelmann, B. Holst, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **88**, 045122 (2013).
68. D. Klakow, C. Töpffer, and P. G. Reinhard, *J. Chem. Phys.* **101**, 10766 (1994).
69. M. Knaup, P. G. Reinhard, C. Töpffer, and G. Zwicknagel, *J. Phys. A* **36**, 6165 (2003).
70. J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
71. Y. S. Lavrinenko, I. V. Morozov, and I. A. Valuev, *Contrib. Plasma Phys.* **56m** 448 (2016).
72. I. V. Morozov and I. A. Valuev, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 140 (2012).
73. В. Е. Фортов, *Физика высоких плотностей энергии*, Физматлит, Москва (2013).
74. В. Е. Фортов, *Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы*, Физматлит, Москва (2012).
75. V. E. Fortov and I. T. Iakubov, *Physics of Non-Ideal Plasma*, World Sci., Singapore–London–Hong Kong (2000).

- 76.** А. В. Бушман, Б. Н. Ломакин, В. А. Сеченов, И. Р. Шарипджанов, О. Е. Щекотов, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **69**, 1524 (1975).
- 77.** Г. В. Борисков, А. И. Быков, Н. И. Егоров, М. В. Жерноклетов, В. Н. Павлов, И. С. Стрелков, О. М. Сурдин, В.И.Тимарева, С. И. Белов, ЖЭТФ **157**, 221 (2020).
- 78.** G. V. Boriskov, S. I. Belov, A. I. Bykov, M. I. Dolotenko, N. I. Egorov, A. S. Korshunov, Yu. B. Kudakov, I. V. Makarov, V. D. Selemir, and A. V. Filippov, J. Low Temp. Phys. **159**, 307 (2010).
- 79.** И. М. Сайтов, Письма в ЖЭТФ **110**, 184 (2019).
- 80.** И. Л. Иосилевский, *Аномальная термодинамика и проблема фазовых переходов в плотном и горячем водороде (дейтерии)*, Межд. конференция «XXI Харитоновские тематические научные чтения», Россия, Саров, 15-19 апреля 2019 г. (пленарный доклад).
- 81.** G. I. Kerley, *Theoretical Equation of State for Deuterium*, LASL Sci. Report LA-4776 (1972).
- 82.** В. П. Копышев, В. Д. Урлин, в сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова, Наука, Москва (2000), с. 297.
- 83.** В. Д. Урлин, ЖЭТФ **144**, 957 (2013).
- 84.** S. I. Blinnikov, R. I. Il'kaev, M. A. Mochalov, A. L. Mikhailov, I. L. Iosilevskiy, A. V. Yudin, S. I. Glazyrin, A. A. Golubev, V. K. Gryaznov, and S. V. Fortova, Phys. Rev. E **99**, 033102 (2019),
- 85.** М. Бониц, И. А. Муленко, Е. Н. Олейникова, В. С. Филинов, В. Е. Фортов, А. Л. Хомкин, Физика плазмы **27**, 1085 (2001).
- 86.** K. P. Driver and B. Militzer, Phys. Rev. B **93**, 064101 (2016).
- 87.** G. Mazzola, R. Helled, and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **120**, 025701 (2018).
- 88.** W. Lorenzen, B. Holst, and R. Redmer, Phys. Rev. B **82**, 195107 (2010).
- 89.** M. A. Morales, C. Pierleoni, E. Schwegler, and D. M. Ceperley, Proc. Nat. Acad. Sci. **107**, 12799 (2010).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);

в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате \LaTeX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
 9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, condmat/0404452.
7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
 9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

Главный редактор *А. Ф. АНДРЕЕВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук *И. Г. ЗУБАРЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *Е. И. КАЦ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук *В. П. КРАЙНОВ*, акад. *М. В. САДОВСКИЙ*, канд. физ.-мат. наук *С. С. СОСИН*,
канд. физ.-мат. наук *Ю. С. БАРАШ*, член-корр. РАН *С. В. ТРОИЦКИЙ* (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН *И. А. ФОМИН* (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук *Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании), акад. *А. М. ЧЕРЕПАЩУК*

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук *В. Т. ДОЛГОПОЛОВ*, член-корр. РАН *В. В. ЛЕБЕДЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *В. С. ПОПОВ*

Зав. редакцией *Н. Г. Церевитинова*
Редакторы: *Л. Б. Кульчицкая*, *Т. Г. Орехова*, *Т. Н. Смирнова*