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

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

том 112

Выпуск 7

10 октября 2020

Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН

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

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

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 7, pp. 435 – 436

Collective nuclear vibrations and initial state shape fluctuations in central Pb + Pb collisions: resolving the v_2 to v_3 puzzle

B. G. Zakharov[1)]

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

Submitted 17 August 2020
Resubmitted 17 August 2020
Accepted 1 September 2020

DOI: 10.31857/S1234567820190015

The results of experiments on the heavy ion collisions at RHIC and LHC give a lot of evidences for formation of the quark-gluon plasma (QGP) in the initial stage of nuclear collisions (at the proper time $\tau_0 \sim 0.5{-}1\,\mathrm{fm}$) which flows as an almost ideal fluid. The most effective constraints on the QGP viscosity come from the hydrodynamic analysis of the azimuthal dependence of the hadron spectra which is characterized by the Fourier coefficients v_n

$$\frac{dN}{d\phi} = \frac{N}{2\pi}\left\{1+\sum_{n=1}^{\infty} 2v_n \cos\left[n\left(\phi-\Psi_n\right)\right]\right\}, \qquad (1)$$

where N is hadron multiplicity in a certain p_T and rapidity bin, Ψ_n are the event reaction plane angles. For smooth initial conditions at midrapidity ($y = 0$) in the Fourier series (1) only the terms with $n = 2k$ survive. And the azimuthal anisotropy appears only for noncentral collisions due to the almond shape of the overlap region of the colliding nuclei in the transverse plane. The event plane (for each n) in this case coincides with the true reaction plane and $\Psi_n = 0$. In the presence of fluctuations of the initial QGP entropy, all the flow coefficients v_n become nonzero. The fluctuations of the initial fireball entropy is a combined effect of the fluctuations of the nucleon positions in the colliding nuclei and fluctuations of the entropy production for a given geometry of the nuclear positions. The most popular method for evaluation of the initial entropy distribution for event-by-event simulation of AA-collisions is the Monte-Carlo (MC) wounded nucleon Glauber model [1 and references therein]. The even-by-event hydrodynamic modeling with the MC Glauber (MCG) model initial conditions has been quite successful in description of a vast body of experimental data on the flow coefficients in AA-collisions obtained at RHIC and LHC. However, in the last years it was found that the hydrodynamical models fail to describe simultaneously v_2 and v_2 flow coefficients in the ultra-central ($b \to 0$) Pb + Pb collisions at the LHC energies. For central collisions, at $b = 0$, the anisotropy of the initial fireball geometry originates completely from the fluctuations. The hydrodynamic calculations show [3, 2] that for small centralities in each event the v_n for $n \le 3$ to good accuracy satisfy the linear response relation

$$v_n \approx k_n \epsilon_n, \qquad (2)$$

where ϵ_n are the Fourier coefficients characterizing the anisotropy of the initial fireball entropy distribution, $\rho_s(\boldsymbol{\rho})$, in the transverse plane defined as [4]

$$\epsilon_n = \frac{\left|\int d\boldsymbol{\rho}\rho^n e^{in\phi}\rho_s(\boldsymbol{\rho})\right|}{\int d\boldsymbol{\rho}\rho^n\rho_s(\boldsymbol{\rho})}. \qquad (3)$$

Here it is assumed that the transverse vector $\boldsymbol{\rho}$ is calculated in the tranverse c.m. frame, i.e., $\int d\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\rho}\rho_s(\boldsymbol{\rho}) = 0$. The hydrodynamic calculations give $k_2/k_3 > 1$, and this ratio grows with increase of the QGP viscosity. On the other hand, the MCG calculations show that at $b = 0$ ϵ_2 and ϵ_3 are close to each other (and are ~ 0.1 for Pb + Pb collisions). This leads to prediction that $v_2/v_3 > 1$. But experimentally it was observed that v_2 is close to v_3 in the ultra-central 2.76 and 5.02 TeV Pb + Pb collisions [5, 6]. Since the hydrodynamic prediction for k_2/k_3 seems to be very reliable, this situation looks very puzzling (it is called in the literature v_2-to-v_2 puzzle). This leads to a serious tension for the hydrodynamic paradigm of heavy ion collisions.

There were several attempts to resolve the v_2-to-v_2 puzzle by modifying: the initial conditions [7, 8], the viscosity coefficients [9], and the QGP equation of state of [10]. However, these attempts have not been successful. The common feature of all previous analyses devoted to the v_2-to-v_2 puzzle is the use of the Woods–Saxon (WS) nuclear distribution for sampling the nucleon positions in the MC simulations of Pb + Pb collisions. In fact, this is an universal choice in the physics of high-energy

1)e-mail: bgz@itp.ac.ru

heavy ion collisions. However, the MC sampling of nucleon positions with the WS distribution completely ignores the collective nature of the long range fluctuations of the nucleon positions. It is well known that the long range 3D fluctuations of the nuclear density have a collective nature and are closely related to the giant nuclear resonances [11] (for more recent reviews see [12, 13]). The major vibration mode of the spherical ^{208}Pb nucleus corresponds to excitation of the isoscalar giant quadrupole resonance [11]. These collective quantum effects are completely lost if one samples the nuclear configurations with the WS distribution. It is clear that an inappropriate description of the 3D long range fluctuation of the nucleon positions in the colliding nuclei will translate into incorrect long range fluctuations of the 2D initial fireball entropy density, which are crucial for $\epsilon_{2,3}$ in the central AA-collisions, when they are driven by fluctuations.

With the help the energy weighted sum rule (EWSR) (for a review, see [14]), we demonstrated that the WS distribution overestimates considerably the mean square nuclear quadrupole moment of the ^{208}Pb nucleus as compared to that obtained in the quantum treatment of the quadrupole vibrations. From EWSR we obtained for the ratio of the classical to the quantum mean square isoscalar L-multipole operator $F_L = \sum_{i=1}^{A} r_i^L Y_{Lm}(\hat{\boldsymbol{\rho}}_i)$ (here $\hat{\boldsymbol{\rho}}_i = \boldsymbol{\rho}/|\boldsymbol{\rho}|$) a simple formula

$$r = \frac{\langle 0|F_L^+ F_L|0\rangle_c}{\langle 0|F_L^+ F_L|0\rangle_q} = \frac{2m_N E_c \langle r^{2L}\rangle}{L(2L+1)\langle r^{2L-2}\rangle}, \qquad (4)$$

where E_c is the centroid excitation energy for the L-mode. For the isoscalar $L = 2$ operator the EWSR is exhausted by the isoscalar giant quadrupole resonance with $\omega_q \approx 10.89\,\mathrm{MeV}$ and $\Gamma_q \approx 3\,\mathrm{MeV}$ [15]. Calculation with the Breit–Wigner parametrization of the quadrupole strength function gives the centroid energy $E_c \approx 11.9\,\mathrm{MeV}$. Using this centroid energy, we obtained for the quadrupole mode $r \approx 2.2$.

We calculated the azimuthal anisotropy coefficients $\epsilon_{2,3}$ in Pb + Pb collisions in the MCG model of [16] by sampling the nuclear configurations for ordinary WS distribution and a modified one which reproduces the quantum mean square nuclear quadrupole moment of the ^{208}Pb nucleus. Our results show that for the quantum version the ratio ϵ_2/ϵ_3 becomes substantially smaller than that for ordinary WS distribution. The magnitude of the obtained ϵ_2/ϵ_3 is small enough to resolve the v_2-to-v_2 puzzle.

This work was partly supported by the Russian Foundation for Basic Research grant 18-02-40069mega.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020190029

1. M. L. Miller, K. Reygers, S. J. Sanders, and P. Steinberg, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **57**, 205 (2007); nucl-ex/0701025.
2. M. Luzum and H. Petersen, J. Phys. G **41**, 063102 (2014); arXiv:1312.5503.
3. H. Niemi, G. S. Denicol, H. Holopainen, and P. Huovinen, Phys. Rev. C **87**, 054901 (2013); arXiv:1212.1008.
4. E. Retinskaya, M. Luzum, and J.-Y. Ollitrault, Nucl. Phys. A **926**, 152 (2014); arXiv:1401.3241.
5. S. Chatrchyan et al. (CMS Collaboration), JHEP **1402**, 088 (2014); arXiv:1312.1845.
6. S. Acharya et al. (ALICE Collaboration), JHEP **1807**, 103 (2018); arXiv:1804.02944.
7. C. Shen, Z. Qiu, and U. Heinz, Phys. Rev. C **92**, 014901 (2015); arXiv:1502.04636.
8. P. Carzon, S. Rao, M. Luzum, M. Sievert, and J. Noronha-Hostler, arXiv:2007.00780.
9. J.-B. Rose, J.-F. Paquet, G. S. Denicol, M. Luzum, B. Schenke, S. Jeon, and C. Gale, Nucl. Phys. A **931**, 926 (2014); arXiv:1408.0024.
10. P. Alba, V. Mantovani Sarti, J. Noronha, J. Noronha-Hostler, P. Parotto, I. Portillo Vazquez, and C. Ratti, Phys. Rev. C **98**, 034909 (2018); arXiv:1711.05207.
11. A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, W. A. Benjamin, Inc., N.Y. (1975).
12. S. Kamerdzhiev, J. Speth, and G. Tertychny, Phys. Rept. **393**, 1 (2004); nucl-th/0311058.
13. X. Roca-Maza and N. Paar, Prog. Part. Nucl. Phys. **101**, 96 (2018); 1804.06256.
14. E. Lipparini and S. Stringari, Phys. Rep. **175**, 103 (1989).
15. D. H. Youngblood, Y. W. Lui, H. L. Clark, B. John, Y. Tokimoto, and X. Chen, Phys. Rev. C **69**, 034315 (2004).
16. B. G. Zakharov, JETP **124**, 860 (2017); arXiv:1611.05825.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 437 – 442

Новый ВРМБ-лазер с индуцированным резонатором

С. М. Першин[1)], А. Ф. Бункин, М. А. Давыдов, А. Н. Федоров, М. Я. Гришин

Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 сентября 2020 г.
После переработки 1 сентября 2020 г.
Принята к публикации 7 сентября 2020 г.

Впервые, насколько нам известно, при перемещении каустики фокусированного лазерного пучка из объема воды в воздух обнаружено парадоксальное снижение порога генерации высших стоксовых и антистоксовых компонент вынужденного рассеяния Мандельштама–Бриллюэна (ВРМБ) в воде. Обсуждается механизм генерации компонент вследствие четырехволнового смешения на встречных пучках при включении поверхности воды как зеркала индуцированного резонатора ВРМБ-лазера. Сделана оценка сверху коэффициента отражения (R) распределенной обратной связи при ВРМБ в воде $R \ll 0.02$.

DOI: 10.31857/S1234567820190027

Недавно [1, 2] было обнаружено, что порог вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) пикосекундных лазерных импульсов в жидкости испытывает аномально большие изменения (снижение до 14 раз в жидком азоте [1] и до 30 раз в воде [2]) при перемещении каустики пучка накачки через поверхность из объема в воздух. Было установлено, что зависимость порога от расстояния между перетяжкой пучка и поверхностью образца имеет характерный N-образный вид с постоянным значением при перемещении в объеме и увеличением в окрестности выхода каустики из жидкости. Рост порога $I_{\rm thr}$ интерпретировали укорачиванием длины усиления l для обеспечения постоянного [3–5] значения (~ 25) инкремента усиления G:

$$G = g \cdot I_{\rm thr} \cdot l, \qquad (1)$$

где g - коэффициент ВКР-усиления. Принято считать [3–5], что длина усиления l – порядка длины каустики пучка или удвоенной длины Рэлея – L_R [6]:

$$l = 2 \cdot L_R = 2 \cdot (\pi \cdot w_0^2)/\lambda, \qquad (2)$$

где w_0 – диаметр пучка в плоскости перетяжки каустики, λ – длина волны накачки. Затем порог достигает максимума и аномально быстро снижается (~ 30 раз в воде) до минимума при совпадении плоскости перетяжки пучка с поверхностью, когда половина каустики перемещается в воздух [2]. Заметим, что порог ВКР в объеме данных жидкостей отличался на порядок из-за физических свойств жидкостей: жидкий азот – простая неполярная жидкость с узкой линией в спектре комбинационного рассеяния и высоким значением g [4, 7]; вода, напротив – сильно ассоциированная полярная жидкость с аномально широкой полосой OH в спектре комбинационного рассеяния. При этом N-образный вид зависимости порога был симбатным. Обнаруженная особенность указывала на новую закономерность развития ВКР в конденсированных средах, в которой поверхность является ключевым фактором, по существу – зеркалом резонатора ВКР-лазера. Осталось неясным, проявляется ли эта особенность при вынужденном рассеянии Мандельштама-Бриллюэна (ВРМБ). Соотношения (1) и (2), описывающие процесс ВКР, для ВРМБ имеют подобный вид [3–5], и это дает основание полагать, что развитие ВРМБ при перемещении каустики пучка накачки через поверхность воды не должно быть отражением тривиального сокращения длины усиления (2).

Целью настоящей работы являлось экспериментальное изучение физики этого явления.

Схема ВРМБ-спектрометра приведена на рис. 1. В качестве накачки использовали излучение второй гармоники импульсного одночастотного лазера на YAG : Nd^{3+} ($\lambda = 0.532$ мкм, TEM$_{00}$, $\tau \sim 10$ нс, $\delta\nu \sim 0.005\,\text{см}^{-1}$, $E \sim 3$ мДж/имп, нестабильность по энергии импульса – 5–7 %, частота повторения импульсов 1 Гц). Поворотным зеркалом пучок накачки направляли вертикально вниз по нормали на свободную поверхность бидистиллированной воды в стеклянной кювете. Высота столба воды составляла ~ 30 мм. Кювета была наклонена относительно вертикали на 3–5°, чтобы исключить влияние блика от дна кюветы. Пучок накачки фокусировали внутрь объема воды с помощью линзы с фокусным расстоянием $f = 30$ мм, которая обеспечивала диаметр пучка $w_0 \sim 4$ мкм в перетяжке каустики (длина каустики $l \sim 200$ мкм). Кювету перемещали вертикально

[1)]e-mail: pershin@kapella.gpi.ru

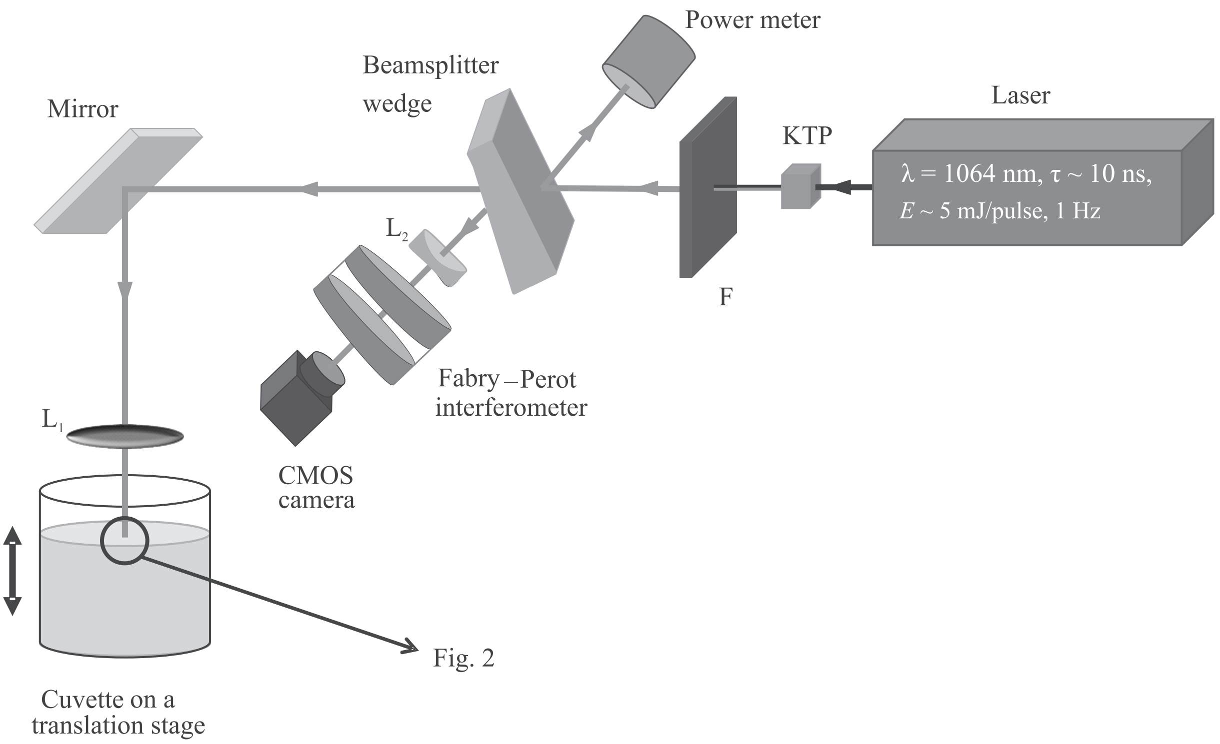


Рис. 1. (Цветной онлайн) Принципиальная схема эксперимента. Здесь: Laser – одночастотный импульсный $YAG:Nd^{3+}$ лазер; KTP – кристалл для удвоения частоты лазерного излучения; F – светофильтр СЗС-22; Power meter – измеритель энергии лазера; Beamsplitter wedge – клиновидная делительная пластина; Fabry–Perot interferometer – интерферометр Фабри–Перо; CMOS camera – КМОП-фотокамера; Mirror – поворотное зеркало; L_1 – фокусирующая линза ($f = 30$ мм); L_2 – рассеивающая линза; Cuvette on a translation stage – кювета с водой на подвижном столике

с помощью микрометрического винта с шагом 5 мкм для изучения зависимости параметров ВРМБ от глубины погружения каустики пучка относительно поверхности.

Спектры ВРМБ анализировали с помощью интерферометров Фабри–Перо с областью дисперсии $\Delta\nu_1 = 0.625\,\text{см}^{-1}$ и $\Delta\nu_2 = 2.5\,\text{см}^{-1}$, регистрировали с помощью КМОП-камеры (Basler, acA1920-40um) за одну вспышку лазера и затем анализировали на компьютере в программной среде LabVIEW. Энергию накачки измеряли с помощью калориметра ИМО-2Н. Все измерения проводили при комнатной температуре.

На рисунке 2 схематично показан разрез каустики пучка накачки в кювете. Отмечены три характерных положения относительно поверхности воды: (a) – в объеме, (b) – граница каустики совпадает с поверхностью, (c) – часть верхней половины каустики в воздухе над поверхностью, при которых наблюдались ожидаемые и парадоксальные вариации параметров процесса ВРМБ.

При фокусировке пучка накачки внутрь объема воды (рис. 2a) порог ВРМБ был достигнут при энергии импульса ~ 0.38 мДж. Порог определяли визуально по появлению кольца стоксовой компоненты на спектрограмме. Образец спектрограммы ВРМБ и денситограммы вдоль сечения по радиусу колец представлены на рис. 3a и b, соответственно.

В этом опыте область дисперсии интерферометра Фабри–Перо была равна $\Delta\nu_1 = 0.625\,\text{см}^{-1}$, величина стоксова сдвига ВРМБ $\Delta\nu_s \sim 0.246\,\text{см}^{-1}$, что соответствует характеристической частоте (~ 7.4 ГГц) акустического фонона в воде [3–5, 8]. Отметим, что порог ВРМБ (~ 0.38 мДж) остается постоянным (с учетом флуктуации энергии накачки) при перемещении каустики пучка накачки в объеме воды. Более того, отсутствие высших компонент в спектре имеет место при почти десятикратном превышении энергии импульса накачки над порогом ВРМБ вплоть до оптического пробоя в воде при энергии импульса ~ 3 мДж. Отметим, что мощность этого импульса (0.3 МВт) существенно меньше критической мощности самофокусировки $P_{cr} = 1.87$ МВт для пучка второй гармоники лазера ($\lambda = 0.532$ мкм) в воде [8].

Далее, порог ВРМБ начинает возрастать при перемещении каустики пучка через поверхность воды

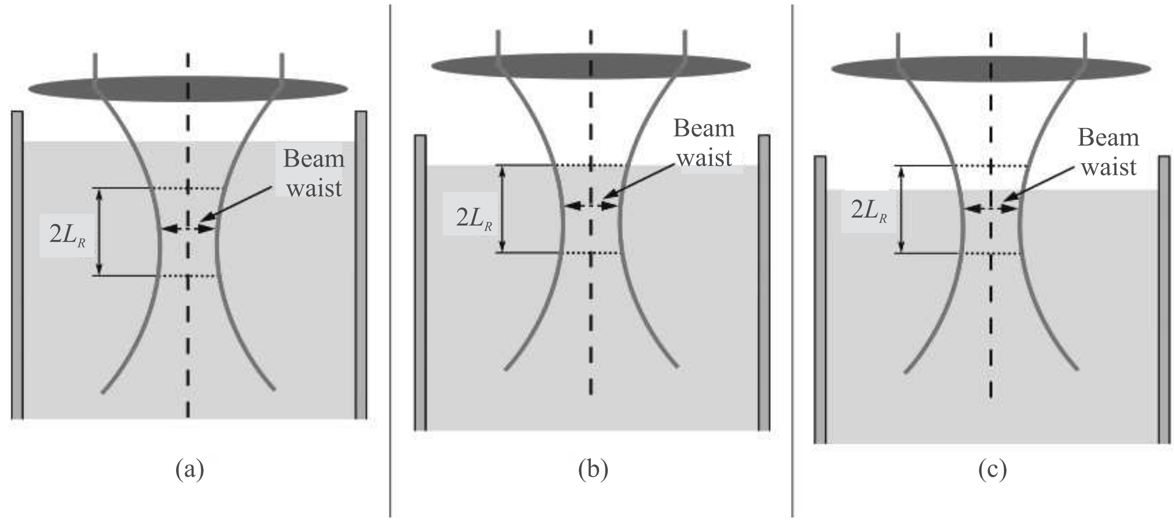


Рис. 2. (Цветной онлайн) Иллюстрация (масштаб не соблюден) положения каустики пучка накачки (длиной $2L_R$ (2)) относительно поверхности воды: (a) – в объеме, (b) – граница каустики у поверхности, (c) – часть верхней половины каустики в воздухе над поверхностью

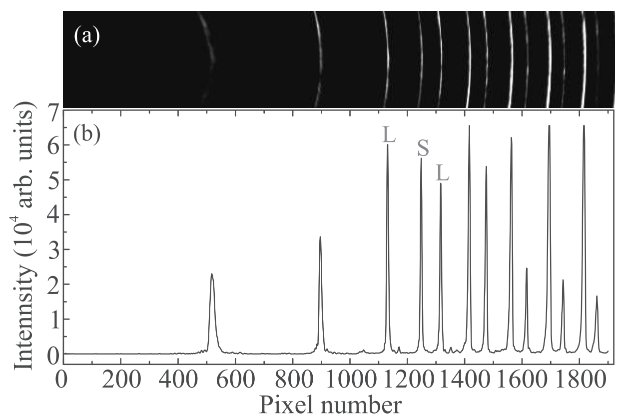


Рис. 3. (Цветной онлайн) Интерферограмма (a) и денситограмма (b) спектральных линий ВРМБ назад из объема воды при расположении перетяжки пучка на глубине ~ 10 мм. Здесь и далее L – линия накачки, s – линия стоксовой компоненты ВРМБ

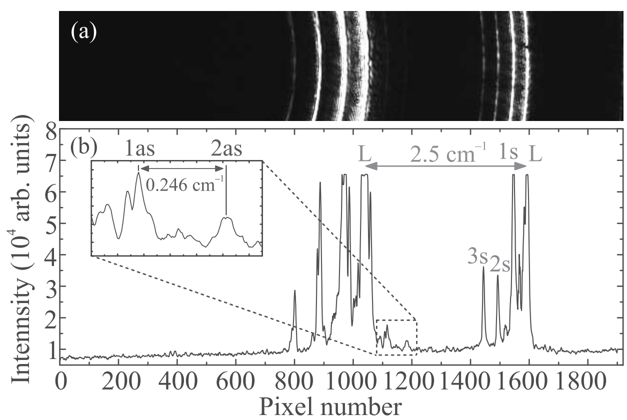


Рис. 4. (Цветной онлайн) Интерферограмма (a) ВРМБ назад при энергии накачки ~ 0.5 мДж; (b) – денситограмма спектральных линий по сечению интерферограммы (a) вдоль радиуса колец. Область дисперсии интерферометра Фабри–Перо $\Delta\nu_2 = 2.5\,\text{см}^{-1}$; величина сдвига между соседними линиями $\Delta\nu_s \sim 0.246\,\text{см}^{-1}$. Здесь 1s, 2s, 3s и 1as, 2as – стоксовы и антистоксовы линии ВРМБ с 3-кратным увеличением на вставке, соответственно.

(рис. 2b) подобно повышению порога ВКР в начале N-образной зависимости [1, 2]. Так, порог ВРМБ (I_{thr}) увеличился до ~ 0.5 мДж, когда около $\sim 30\,\%$ каустики пучка находилось в воздухе. Это ожидаемое тривиальное повышение порога согласуется с необходимостью сохранения постоянной величины произведения ($I_{\text{thr}} \cdot l$) в инкременте усиления (1) при сокращении длины усиления l (2). При этом, однако, неожиданно и нетривиально изменился спектр ВРМБ. Так, несмотря на сохранение величины инкремента $G \approx 25$ (1), спектр ВРМБ 5-кратно размножился до гребенки компонент (см. спектр и денситограмму на рис. 4a и b, соответственно).

Как видно из рис. 4, при фокусировке пучка накачки в приповерхностный слой воды спектр ВРМБ обогащается как высшими стоксовыми компонентами (второй и третьей), так и двумя антистоксовыми компонентами (см. вставку на рис. 4), которых не было при фокусировке в объем воды. Обнаруженное обогащение спектра особенно значимо по сравнению с генерацией только одной стоксовой компоненты ВРМБ в объеме воды (рис. 3) при почти 10-кратном превышении энергии импульса накачки над порогом ВРМБ (также инкремента (1) [1–5]). Это превышение, возможно, было бы бо́льшим, но было ограничено оптическим пробоем при ~ 3 мДж. Отсюда следует, что порог (~ 0.5 мДж) генерации антистоксовых компонент ВРМБ при фокусировке в приповерхностный слой более, чем в 6 раз меньше энергии импульса, при которой высшие компоненты не удалось (как и ранее [9]) возбудить в объеме воды.

Последующее незначительное увеличение энергии импульса накачки до ~ 0.7 мДж подчеркивает обнаруженную особенность обогащения спектра ВРМБ заметным ростом интенсивностей линий высших компонент. Существенно, что интенсивность антистоксовых компонент возрастает нелинейно относительно стоксовых компонент, как видно из рис. 4 и 5. Фактически, мы впервые получили частотную "гребенку" Бриллюэна в воде как источник эквидистантных линий с неограниченным числом повторений импульсов накачки без опасности повреждения образца, поскольку жидкость восстанавливается даже после оптического пробоя.

Известно, что ранее [5, 10] генерацию частотной "гребенки" при ВРМБ получали в высокодобротном внешнем или связанном резонаторе, когда рубиновый лазер накачки служил усилителем компонент ВРМБ [11, 12]. Более того, в пионерских работах В. С. Старунова и И. Л. Фабелинского [12, 13] было обосновано, что антистоксова компонента ВРМБ является характеристическим признаком наличия резонатора. В резонаторе реализуется четырехволновое взаимодействие, поскольку первая стоксова компонента, отраженная зеркалом рубинового лазера, распространяется в кювете попутно накачке и играет ключевую роль: эта компонента создает встречную волну гиперзвука, на которой накачка рассеивается назад как антистоксова компонента с увеличением частоты на величину частоты акустического фонона [12, 13].

В нашем случае использование излучения второй гармоники ($\lambda = 532$ нм) в качестве накачки исключает влияние резонатора неодимового лазера на процесс ВРМБ. Тогда мы предположили, что поверхность воды включается как зеркало внешнего резонатора, где вторым зеркалом является распределенная обратная связь на решетке обращения волнового фронта [3–5]. Экспериментальную проверку сделанного допущения, дополнительно к факту генерации антистоксовых компонент (рис. 4 и 5), проводили выключением фактора "поверхность–зеркало" – отклонением пучка от нормали к поверхности посредством перемещения фокусирующей линзы поперек пучка накачки на 5–10 мкм в любую сторону. Отклонение пучка от нормали к поверхности сопровождалось срывом генерации высших стоксовых и антистоксовых компонент ВРМБ. Косвенным аргументом в поддержку этого предположения является начало 30-кратного снижения порога ВКР в воде вследствие включения поверхности как зеркала внешнего резонатора ВКР-лазера до совмещения плоскости перетяжки каустики пучка с поверхностью воды [1, 2]. При этом в обоих процессах (ВКР и ВРМБ) добротность такого резонатора была невысокой (2 % френелевского отражения зеркала-поверхности) по сравнению с высокодобротным внешним резонатором [5, 10, 11, 14, 15]. Выявленная совокупность признаков однозначно указывает на включение внешнего резонатора в процесс снижения порога генерации частотной "гребенки" ВРМБ с антистоксовыми компонентами при пересечении поверхности воды верхней частью каустики пучка.

Оставалось неясным, каким образом сферический фронт пучка накачки (рис. 5), а также и обращенных волн частотной гребенки ВРМБ [5], уменьшает кривизну и приближается к плоскому фронту, когда перетяжка каустики еще находится под поверхностью (рис. 2c). Подобная ситуация наблюдалась нами в случае ВКР [1, 2]. Физически ясно, что геометрический фактор [6] уменьшения кривизны фронта пучка, отраженного поверхностью при перемещении каустики, усиливается керровской нелинейной линзой, распределенной в воде вдоль каустики. Известно [4, 5, 8], что керровская нелинейная добавка $n_2 \cdot (I_p + I_{sbsc})$ к показателю преломления n_0

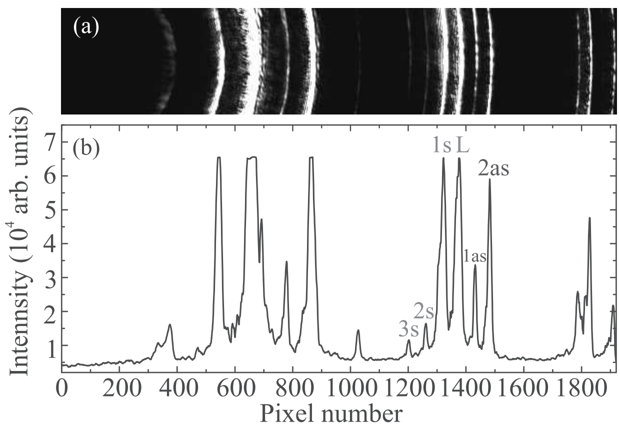


Рис. 5. (Цветной онлайн) Интерферограмма (a) ВРМБ и денситограмма (b) спектральных линий при энергии накачки ~ 0.7 мДж. Область дисперсии интерферометра Фабри–Перо $\Delta\nu_2 = 2.5\,\text{см}^{-1}$; величина сдвига между соседними линиями $\Delta\nu \sim 0.246\,\text{см}^{-1}$

воды аддитивно зависит от интенсивности накачки (I_p) и интенсивности (I_{sbsc}) излучения вынужденного рассеяния назад (ВКР, ВРМБ, вынужденное рассеяние Рэлея, Ми [4, 5, 8]) и модулирует показатель преломления (n) в поперечном сечении пучка вдоль каустики (3):

$$n(z) = n_0 + n_2 \cdot (I_p + I_{sbsc}). \quad (3)$$

Здесь мы не рассматриваем влияние огибающей импульса накачки, принимая во внимание большую длительность (~ 10 нс) по сравнению с длиной каустики-резонатора (~ 200 мкм) в квазистационарном приближении. Заметим также, что индуцированная линза корректирует расходимость пучка в обоих направлениях: из воды к поверхности и после отражения от поверхности в сторону перетяжки. При этом диаметр перетяжки в рассматриваемом резонаторе выполняет роль пространственного фильтра в виде мягкой аподизирующей диафрагмы. Отсюда следует, что многопараметрическая модуляция (3) формирует линзу переменной оптической силы вдоль каустики пучка, оптимальное значение которой подстраивается интенсивностью пучка к положению каустики. Более того, при заданном положении каустики (рис. 2c) незначительное увеличение накачки будет повышать эффективность ВРМБ (1) и значение интенсивности (I_{sbsc}) в (3), а также оптическую силу нелинейной керровской линзы из-за компрессии [4, 5] фронта импульса компонент ВРМБ (см. рис. 5 в [5]) вблизи поверхности, распространяющихся назад.

В нашем эксперименте этот сценарий особенно ярко и отчетливо подчеркивается скачком интенсивности (на порядок) антистоксовых компонент ВРМБ в воде при увеличении энергии импульса накачки на 40 % (с 0.5 до 0.7 мДж, см. рис. 4 и 5). Заметим также, что увеличение интенсивности накачки обеспечивает нелинейный рост добротности резонатора вследствие экспоненциального повышения коэффициента бриллюэновского отражения на решетке обращения волнового фронта до ~ 100 % при 10-кратном превышении порога ВРМБ ([4], стр. 444). В нашем случае ВРМБ в объеме воды такой коэффициент достигался при предпробойной энергии импульса накачки (~ 3 мДж). Однако, внешний резонатор не включался из-за низкого значения распределенной обратной связи (РОС) [4, 16] (другое зеркало резонатора) с коэффициентом отражения менее 2 %, когда наблюдалась генерация антистоксовых компонент. Отсюда следует оценка сверху коэффициента отражения РОС в воде, значение которого $R \ll 0.02$. Интересно отметить, что при повышении накачки до 0.7 мДж более заметной стала модуляция низкочастотного крыла линий в спектре ВРМБ (см. рис. 5) с частотой ~ 1 ГГц неясной пока природы.

Таким образом, впервые, насколько нам известно, обнаружено аномальное снижение порога (~ 0.5 мДж) генерации высших компонент ВРМБ в воде одновременно с сокращением длины каустики (длины усиления (1)) фокусированного пучка накачки при ее частичном перемещении через поверхностность по нормали к ней. Напротив, при отклонении пучка от нормали или при его фокусировке в объем воды, порог генерации высших компонент ВРМБ достигнут не был, вплоть до почти 10-кратного превышения порога ВРМБ (~ 0.38 мДж) до пробоя при энергии ~ 3 мДж. Полученные данные дают основание предположить, что поверхность включается как зеркало внешнего резонатора ВРМБ-лазера [15]. При этом керровская линза в каустике пучка, которая при оптимальном сочетании ряда параметров (сумме интенсивностей накачки и компонент ВРМБ, длины части каустики под поверхностью, длительности импульса накачки и степени компрессии фронта импульса компонент ВРМБ) уменьшает кривизну волнового фронта обращенных компонент ВРМБ и включает индуцированный внешний резонатор и, соответственно, генератор гребенки эквидистантных линий ВРМБ [5, 10]. Генерация антистоксовых компонент ВРМБ-лазера (рис. 4 и 5) однозначно указывает на механизм четырехволнового смешения на встречных пучках [11] внутри резонатора с 2 % отражением френелевского зеркала высокого оптического качества с предельно малой молекулярной шероховатостью плоской поверхности воды и другим зеркалом с обращением волнового фронта. При этом физика обращения волнового фронта [3–5, 8] указывает на нелинейный, экспоненциальный рост добротности резонатора из-за роста коэффициента отражения, еще одного параметра, управляющего обнаруженным явлением. Отсюда следует, что совокупность данных дает оценку сверху коэффициента отражения (R) распределенной обратной связи (РОС) в воде $R \ll 0.02$.

Прикладной аспект обнаруженного явления снижения порога генерации "гребенки" эквидистантных линий ВРМБ в классической схеме более очевиден. Фактически, нам удалось запустить новый ВРМБ-лазер с микрорезонатором (длина < 200 мкм), но без дополнительных элементов, с порогом возбуждения, существенно меньшим порога оптического пробоя, и без необратимого разрушения конденсированной нелинейной среды. Более того, в случае жидкости допустимо использование интенсивности накачки с предпробойными значениями, поскольку жидкость способна к восстановлению оптической однородности. Несомненно, что температурная перестройка частоты бриллюэновского сдвига [17] обеспечивает генерацию фазово-сопряженных би-фотонов [18] в бриллюэновской гребенке эквидистантных линий и допускает бигармоническую накачку ГГц-резонансов в оптически прозрачных средах, например, вирусов в водных растворах и суспензиях [19]. Особый интерес вызывает лидарный мониторинг деформации коры Земли в окрестностях вулкана [20] при бигармоническом зондировании вращательных переходов вулканических газов в видимом диапазоне, например, метана.

Работа была поддержана грантом Российского научного фонда # 19-19-00712 в части создания бигармонического лазера для лидарного мониторинга деформации коры Земли по вариации магматических газов, а также грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для крупных научных проектов в приоритетных областях научного и технологического развития (регистрационный номер 2020-1902-01-222) в части бигармонической накачки ГГц резонансов для изучения дистанционного воздействия на вирус табачной мозаики.

1. С. М. Першин, М. Я. Гришин, В. Н. Леднев, П. А. Чижов, Письма в ЖЭТФ **109**(7), 447 (2019).
2. S. Pershin, M. Grishin, V. Lednev, P. Chizhov, and V. Orlovich, Opt. Lett. **44**(20), 5045 (2019).
3. Б. Я. Зельдович, Н. Ф. Пилипецкий, В. В. Шкунов, *Обращение волнового фронта*, Наука, М. (1985).
4. R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, 3rd edition, Academic Press, N.Y. (2008).
5. Zh. Bai, H. Yuan, Zh. Liu, P. Xu, Q. Gao, R. J. Williams, O. Kitzler, R. P. Mildren, Yu. Wang, and Zh. Lu, Opt. Mater. **75**, 626 (2018).
6. A. E. Siegman, *Lasers*, University Science Books, Mill Valley, California (1986).
7. С. А. Ахманов, Б. В. Жданов, А. И. Ковригин, С. М. Першин, Письма ЖЭТФ **15**, 266 (1972).
8. B. Hafizi, J. P. Palastro, J. R. Penano, T. G. Jones, L. A. Jonson, M. H. Helle, D. Kaganovich, Y. H. Chen, and A. B. Stamm, JOSA **33**(10), 2062 (2016).
9. O. Rahn, M. Maier, and W. Kaiser, Opt. Commun. **1**, 109 (1969).
10. P. Del'Haye, A. Schliesser, O. Arcizet, T. Wilken, R. Holzwarth, and T. J. Kippenberg, Nature **450**, 1214 (2007).
11. Ю. И. Кызыласов, В. С. Старунов, Письма в ЖЭТФ **7**, 160 (1968).
12. В. С. Старунов, ДАН СССР **179**(1), 65 (1968).
13. И. Г. Зайцев, Ю. И. Кызыласов, В. С. Старунов, И. Л. Фабелинский, Письма в ЖЭТФ **6**, 695 (1967).
14. М. А. Давыдов, Г. А. Ляхов, Е. Р. Сатыев, К. Ф. Шипилов, Известия АН СССР, серия физическая **53**(8), 1576 (1989).
15. В. Н. Луговой, В. Н. Стрельцов, ЖЭТФ **62**(4), 1312 (1972).
16. S. A. Akhmanov and G. A. Lyakhov, Sov. Phys. JETP **39**(1), 43 (1974).
17. I. Chaban, H. D. Shin, C. Klieber, R. Busselez, V. Gusev, K. A. Nelson, and T. Pezeril, Rev. Sci. Instrum. **88**, 074904 (2017).
18. V. S. Gorelik, A. V. Skrabatun, V. A. Orlovich, Yu. P. Voinov, A. I. Vodchits, and A. Y. Pyatyshev, Quantum Electron. **49**, 231 (2019).
19. M. V. Arkhipenko, A. F. Bunkin, M. A. Davydov, O. V. Karpova, V. B. Oshurko, S. M. Pershin, V. N. Strel'tsov, and A. N. Fedorov, JETP Lett. **109**(9), 578 (2019).
20. S. M. Pershin, M. Ya. Grishin, V. A. Zavozin, V. N. Lednev, V. A. Lukyanchenko, and V. S. Makarov, Laser Phys. Lett. **17**(2), 026003 (2020).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 443 – 450

Особенности переходных процессов в микроразрядах постоянного тока в молекулярных газах: от тлеющего разряда в дугу с несвободным или свободным режимом катода[1)]

А. И. Сайфутдинов[2)], *Б. А. Тимеркаев*, *А. А. Сайфутдинова*[2)]

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева – КАИ, 420111 Казань, Россия

Поступила в редакцию 10 августа 2020 г.
После переработки 25 августа 2020 г.
Принята к публикации 3 сенятбря 2020 г.

В работе сформулирована единая с точки зрения описания разрядного промежутка и электродов самосогласованная модель, описывающая формирование параметров микроразрядов постоянного тока в молекулярных газах атмосферного давления. Проведены численные исследования в диапазоне плотностей тока от 90 до $2.5 \cdot 10^6$ мА/см^2. В результате численных экспериментов получена зависимость падения напряжения на разряде от плотности тока, которая воспроизводит формирование тлеющего, переходного от тлеющего к дуге и дугового режимов. Показано, что в зависимости от постановки граничных условий на внешних границах электродов, может быть реализован переход от тлеющего разряда к дуге со свободным или несвободным режимом катода.

DOI: 10.31857/S1234567820190039

1. Введение. Неравновесная микроплазма атмосферного давления генерируется в масштабах субмиллиметрового диапазона, по меньшей мере, в одном направлении в постоянном или переменном электрических полях в различном частотном диапазоне. При этом в генераторах плазмы постоянного тока возможна реализация двух основных типов разрядов: тлеющего и дугового [1]. Тлеющие микроразряды и микродуги нашли широкое применение в качестве различных источников излучения, в плазменном синтезе, в миниатюрных ионизационных детекторах для анализа состава вещества, в устройствах для плазменной биомедицины, в аддитивном производстве, микросварке [2–4] и др. Несмотря на столь широкое применение микроразрядов атмосферного давления, стоит отметить, что ввиду малых размеров, их экспериментальная диагностика является чрезвычайно сложной задачей [5–7]. При этом как с практической точки зрения, так и с точки зрения фундаментальных исследований полезно знать как интегральные, так пространственные распределения основных параметров плазмы разряда.

Очевидно, что недостающие экспериментальные данные могут быть восполнены путем применения методов численного моделирования разрядных процессов. Первые работы, направленные на единое самосогласованное описание микроразрядов постоянного тока в атмосфере аргона и процессов, протекающих на границах с электродами, были выполнены в работах [8, 9], соответственно в двумерной и одномерной постановках. В серии новых работ [10, 11] были продолжены численные исследования, направленные на описание разрядов в аргоне в рамках одномерного подхода и с точки зрения различных вариантов гидродинамического приближения: с учетом максвелловской функции распределения электронов и полученной из численного решение уравнения Больцмана [11]. В недавней работе [12] проведен анализ существующих моделей, описывающих взаимодействие дуговых разрядов атмосферного давления с электродами.

Однако, несмотря на серию новых работ, исследования в молекулярных газах остаются до сих пор без внимания, что само по себе является удивительным, поскольку при исследовании плазмы при атмосферном давлении в разрядах неизбежно присутствуют примеси воздуха.

При моделировании микроразрядов постоянного тока в молекулярных газах необходим учет новых дополнительных факторов. В первую очередь, для молекулярных газов характерно распределение энергии между различными степенями свободы молекул [1]. Каждое распределение энергии обычно описывается характерной температурой: температурой электронов (T_e), колебательной температурой (T_v), вращательной температурой (T_r) и поступательной (га-

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

[2)]e-mail: as.uav@bk.ru; aliya_2007@list.ru

зовой) температурой (T_g) [1]. При высоком значении давления газа, в том числе и атмосферном, при увеличении разрядного тока сильное неравновесное состояние плазмы вряд ли будет поддерживаться в широком диапазоне токов из-за термализации разряда, которая приводит к переходу от тлеющего режима к дуговому [1, 8–11]. Термализация разряда обычно возникает из-за так называемой ионизационно-перегревной или тепловой неустойчивости [1], которая приводит к быстрому повышению температуры газа.

Поскольку типичные температуры электронов в молекулярных газах порядка 1 эВ, а энергетический порог сечений возбуждения колебательных уровней молекул 0.2–0.5 эВ молекул, то большая часть энергии электронов (от 80 до 98 %) переходит в колебательные моды, а затем частично в нагрев газа, в основном через механизм колебательно-поступательной (*vibrational-translational relaxation* – VT) релаксации. Очевидно, что молекулярные газы обычно имеют более высокие скорости нагрева и более подвержены термализации, чем атомарные газы.

В представленной работе в рамках единого самосогласованного описания газоразрядной плазмы и электродов проводятся численные исследования особенностей переходных процессов в микроразрядах постоянного тока в молекулярных газах на примере азота.

2. Описание модели. Примем следующие предположения. Поскольку характерное время нагрева электродов θ является значительным и превышает характерные средние времена VV-обменов колебательной энергии τ_{VV} и переходов колебательной энергии в поступательную τ_{VT}, т.е. выполняется следующее соотношение $\tau_{VV} < \tau_{\mathrm{VT}} \ll \theta$, то на временах порядка τ_{VV} устанавливается квастационарное распределение по колебательным уровням, которое сохраняется в процессе нагрева электродов. Другими словами, справедливо приближение многотемпературной неравновесной химической кинетики [13]. В связи с вышесказанным вместо поуровневого приближения удобнее рассматривать трехтемпературную модель, включающую уравнения баланса электронной, поступательной и колебательной энергии. Таким образом, единая с точки зрения описания разрядного промежутка и электродов самосогласованная модель [8], основанная на расширенной гидродинамической модели плазмы, включает k уравнений баланса концентраций для всех сортов рассматриваемых частиц (нейтральных, возбужденных частиц, электронов и ионов) n_k и уравнение баланса плотности энергии электронов n_ε, уравнение Пуассона для электрического потенциала φ:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{\Gamma}_k = \sum_{j=1}^{N_r}(a_{kj}^R - a_{kj}^L)k_j\prod_{k=1}^{N_s} n_k^{v_{kj}^L}, \qquad (1)$$

$$\frac{3}{2}\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{Q}_\varepsilon = e\mathbf{E}\cdot\mathbf{\Gamma}_e - Q_{in} - Q_{eV}, \qquad (2)$$

$$\Delta\varphi] - \frac{q_e}{\varepsilon_0}\left(\sum_{k=1}^{N} z_k n_k - n_e\right), \quad \mathbf{E} = -\nabla\varphi. \qquad (3)$$

Здесь правая часть уравнения (3) описывает изменение числа частиц сорта k вследствие реакции j следующего вида: $\sum\limits_{k=1}^{N_s} a_{kj}^L[A]_k \rightarrow \sum\limits_{k=1}^{N_s} a_{kj}^R[A]_k$, где a_{kj}^L и a_{kj}^R – стехиометрические коэффициенты, и определяется через константу реакции k_j – суммирование проводится по всем реакциям j, протекающим в разряде, а произведение – по всем сортам частиц, участвующим в реакции. $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, распределение которого определяется из связи с потенциалом φ, определяемым из уравнения Пуассона (3), q_e – заряд электрона и ε_0 – диэлектрическая постоянная, z_k – заряд частицы сорта k. Плотность энергии электронов определяется как $n_\varepsilon = n_e\bar{\varepsilon}$, где n_e – концентрация электронов, $\bar{\varepsilon}$ – средняя энергия всего ансамбля электронов. Под температурой электронов $T_e = 2/3\bar{\varepsilon}$ понимается как 2/3 средней энергии всего ансамбля $\bar{\varepsilon}$. Потоки концентраций заряженных, возбужденных и нейтральных частиц $\mathbf{\Gamma}_k$ в уравнении (1), где $k = e, i, n$, а также поток плотности энергии электронов $\mathbf{Q}_\varepsilon$ в уравнении (2), соответственно, записаны в диффузионно-дрейфовом приближении

$$\mathbf{\Gamma}_{e,i} = -D_{e,i}\nabla n_{e,i} + z_{e,i}\mu_{e,i}\mathbf{E}n_{e,i},$$

$$\mathbf{\Gamma}_n = -D_n\nabla n_n,$$

$$\mathbf{Q}_\varepsilon = -D_\varepsilon\nabla n_\varepsilon - \mu_\varepsilon\mathbf{E}n_\varepsilon, \qquad (4)$$

где D_e, D_i – коэффициенты диффузии электронов и ионов, D_n – коэффициенты диффузии возбужденных и нейтральных частиц плазмы, μ_e, μ_i – подвижности заряженных частиц в электрическом поле, μ_ε – "энергетическая" подвижность, D_ε – коэффициент энергетической диффузии электронов.

Слагаемое в (2) Q_{ei} описывает энергообмен при упругих соударениях электронов с нейтральными частицами газа. Третье слагаемое в правой части (2) описывает изменение энергии вследствие неупругих столкновений электронов и тяжелых частиц плазмы и определяется следующим образом $Q_{in} = \sum_j \Delta\varepsilon_j R_j$, где $\Delta\varepsilon_j$ – доля энергии, теряемая (или приобретаемая, если $\Delta\varepsilon_j < 0$) электроном в данной реакции и R_j – скорость реакции, которая определяется константой соответствующего неупругого процесса с участием электрона $R_j = k_j(T_e)n_e n_n$, где n_n – сорт нейтральной частицы. Последнее слагаемое в (2) $Q_{eV} = \sum_v \Delta\varepsilon_v R_v$ описывает энергию, затрачиваемую электронами на возбуждение колебательных уровней.

Для учета нагрева газа были сформулированы уравнение баланса энергии тяжелых частиц плазмы и уравнение баланса колебательной энергии азота:

$$\frac{\partial(\rho h_h)}{\partial t} - \nabla\cdot\mathbf{q} = Q_{\mathrm{el}} + Q_{\mathrm{electronic}} + Q_{\mathrm{rec}} + Q_{\mathrm{VT}}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial(n_{\mathrm{N}_2}\varepsilon_v)}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{q}_v - \varepsilon_v\nabla\cdot(n_{\mathrm{N}_2}\mathbf{V}) = Q_{eV} - Q_{\mathrm{VT}}, \quad (6)$$

$$\mathbf{q} = \lambda\nabla T + \sum_k \lambda_l^{in}\nabla T^{in} + \sum_k h_k\mathbf{J}_k, \quad (7)$$

$$\mathbf{q}_v = -\lambda_v\nabla T_v. \quad (8)$$

Энтальпия h тяжелой компоненты плазмы определяется через сумму энтальпий k сорта частиц. Член $\sum_k h_k\mathbf{v}\mathbf{J}_k$ в уравнении (7) соответствует потоку энтальпии, обусловленному диффузией молекул. Слагаемое в (5) $Q_{\mathrm{rec}} = \sum_r \varepsilon_r R_r$ представляет собой источник энергии, обусловленной реакциями рекомбинации со скоростью R_r и энергией ε_r, величина которого зависит от сорта молекулярных ионов, в частности, для азота $\mathrm{N}_2^+ + \mathrm{e} \to \mathrm{N}+\mathrm{N}+3.7(\mathrm{eV})$. $Q_{\mathrm{electronic}} = = \sum_l \varepsilon_l R_l$ представляет собой долю энергии, которая переходит в нагрев нейтральных частиц в процессах диссоциации молекул N_2 электронным ударом [14]: $\mathrm{N}_2(\mathrm{A}3) + \mathrm{e} \to \mathrm{N} + \mathrm{N} + \mathrm{e} + 0.9(\mathrm{eV})$ и в реакциях самотушения электронно-возбужденных молекул азота [14, 15]: $\mathrm{N}_2(\mathrm{A}3) + \mathrm{N}_2(\mathrm{A}3) \to \mathrm{N}_2(\mathrm{C}3) + \mathrm{N}_2 + 1.31(\mathrm{eV})$ и $\mathrm{N}_2(\mathrm{A}3) + \mathrm{N}_2(\mathrm{A}3) \to \mathrm{N}_2(\mathrm{B}3) + \mathrm{N}_2 + 4.18(\mathrm{eV})$.

Последние слагаемые в (5) и (6) описывают колебательно-поступательную релаксацию и определяются следующим образом $Q_{\mathrm{VT}} = (E_v - E_{v0})/\tau_{\mathrm{VT}}$, где E_{v0} – локально-равновесное значение колебательной энергии E_v, τ_{VT} является характерным временем VT-релаксации, колебательных состояний молекулярного азота $\mathrm{N}_2(v)$ в реакциях $\mathrm{N}_2+\mathrm{N}_2(\mathrm{v}) \to \mathrm{N}_2+\mathrm{N}_2$ и $\mathrm{N}+\mathrm{N}_2(\mathrm{v}) \to \mathrm{N}+\mathrm{N}_2$, с соответствующими константами скоростей [14] и определяется следующим образом [14]

$$\tau_{\mathrm{VT}} = \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar w_0}{kT}\right)\right)(k_{\mathrm{N}_2}^{\mathrm{VT}}n_{\mathrm{N}_2} + k_{\mathrm{N}}^{\mathrm{VT}}n_{\mathrm{N}})^{-1}.$$

Таким образом, основными каналами нагрева нейтрального газа предполагались передача энергии: 1) при упругих столкновениях электронов с нейтральными частицами; 2) в реакциях рекомбинации; 3) в реакциях тушения электронных возбужденных уровней; 4) в реакциях релаксации колебательных степеней свободы.

В нашей работе за основу элементарных процессов в азоте использовался набор [14–17], насчитывающий 59 реакций и включающий следующие сорта частиц: N_2, N, e, N^+, N_2^+, N_3^+, N_4^+, $\mathrm{N}_2(\mathrm{A}3)$, $\mathrm{N}_2(\mathrm{B}3)$, $\mathrm{N}_2(\mathrm{C}3)$, Nd, Np.

Константы реакции с участием электронов: упругие столкновения, возбуждение колебательных и электронных уровней, диссоциация, прямая и ступенчатая ионизации определялись из решения кинетического уравнения Больцмана с использование сечений, взятых из [18].

Рассмотрим постановку граничных условий для системы уравнений (1)–(12). На границе "катод-газоразрядная плазма" происходит большое количество процессов. В первую очередь для поддержания тлеющего разряда – это вторичная электронная эмиссия с катода, возникающей благодаря бомбардировке последнего ионами. С другой стороны увеличение температуры катода до критического значения, за счет потока тепла из газоразрядного промежутка, а именно, из катодного слоя, приводит к появлению термоэлектронной эмиссии с его поверхности. Плотность тока термоэмиссии задается формулой Ричардсона–Дэшмана:

$$\mathbf{\Gamma}_{\mathrm{th}}\cdot\mathbf{n} = AT_c^2\exp(-q_e W_c/kT_c) \quad (10)$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали, A – термоэлектрическая постоянная, зависящая от материала катода, $W_c = W - \Delta W_c$ – работа выхода электрона из Me с учетом поправки Шоттки $\Delta W_c = \sqrt{q_e^3 E_c/4\pi\varepsilon_0}$, E_c – напряженность электрического поля в разрядном промежутке на границе с катодом.

В связи с вышесказанным граничные условия для потока электронов, для плотности потока энергии электронов, для ионов, а также возбужденных и нейтральных частиц плазмы на металлических электродах примут, соответственно, следующий вид:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_e\big|_{x=0,L} = \nu_{\mathrm{th},e}n_e/4 -$$

$$-(1-\alpha)\cdot\left(\sum_i \gamma_i(\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n} + \mathbf{\Gamma}_{\mathrm{th}}\cdot\mathbf{n}\right), \quad (11)$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_e\big|_{x=0,L} = (\nu_{\mathrm{th},e}n_e/4)\cdot 2k_B T_e -$$

$$-(1-\alpha)\cdot\left(\sum_i \gamma_i\bar{\varepsilon}_i(\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n} + \bar{\varepsilon}_{\mathrm{th}}(\mathbf{\Gamma}_{\mathrm{th}}\cdot\mathbf{n}\right), \quad (12)$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_i\big|_{x=0,L} = (\nu_{\text{th},i}n_e/4) + \alpha\mu_i n_i \mathbf{E}\cdot\mathbf{n}, \quad (13)$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_n\big|_{x=0,L} = (\nu_{\text{th},n}n_n/4), \quad (14)$$

где γ – коэффициент вторичной электронной эмиссии от k-го сорта частиц с поверхности катода, $\mathbf{\Gamma}_k$ – поток k-го сорта частиц на электрод, $\bar{\varepsilon}_k = q_e(\varepsilon_{\text{ion},k} - 2W)$ – средняя энергия эмитированного электрона в результате удара k-го сорта частиц, $\varepsilon_{\text{ion},k}$ – энергия ионизации частицы газа, соответствующая k-иону, $\bar{\varepsilon}_{\text{th}} = 2k_B T_c$ – средняя энергия эмитированного электрона в результате термоэмиссии, $\nu_{\text{th},e}$, $\nu_{\text{th},i}$, $\nu_{\text{th},n}$ – средние тепловые скорости электронов, ионов возбужденных и нейтральных частиц плазмы газа, соответственно; $\alpha = 1$ на аноде и 0 на катоде.

Для уравнения Пуассона в качестве граничного условия на катоде предполагалось, что он заземлен, т.е. $\varphi = 0$, а на аноде $\varphi = U_0$, где U_0 определялось из уравнения

$$U_0 = U_{\text{source}} - IR_{\text{bal}}. \quad (15)$$

Здесь $I = \int_{S'} \mathbf{j}\cdot\mathbf{n}dS$ – ток в цепи, $\mathbf{j} = q_e(\mathbf{\Gamma}_e - \sum_i \mathbf{\Gamma}_i)$ – плотность разрядного тока, U_{source} – напряжение на источнике, R_{bal} – балластное сопротивление.

Граничные условия на температуру тяжелых частиц плазмы на катоде и аноде определялись из решения уравнения теплового баланса электродов

$$\rho_{c,a}c_{p,c,a}\frac{\partial T_{c,a}}{\partial t} - \nabla(\lambda_{c,a}(T_{c,a})\nabla T_{c,a}) = 0, \quad (16)$$

где $\rho_{c,a}$ – плотность материала катода и анода, соответственно; $c_{p,c,a}$ – удельная теплоемкость материала катода и анода, соответственно; $\lambda_{c,a}$ – коэффициент теплопроводности катода и анода, соответственно.

Граничное условие для уравнения (16) на поверхности катода со стороны плазменной области ($x = 0$) записывалось следующим образом

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_c = \mathbf{n}\cdot(\mathbf{Q}_i + \mathbf{Q}_g + \mathbf{Q}_{em} + \mathbf{Q}_e + \mathbf{Q}_{\text{rad}}). \quad (17)$$

Здесь первый член справа описывает плотность потока энергии ионов Q_i на катод и включает в себя: 1) плотность кинетической энергии ионов, главным образом, набранной в катодном слое, 2) и плотность потенциальной энергии, при передаче которой катоду ион нейтрализуется:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_i = q_e\sum_i(\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n})(3k_B T_i/2) + $$
$$+ q_e\sum_i(\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n})(\varepsilon_{\text{ion},i} - W). \quad (18)$$

Второе слагаемое в правой части (17) описывает плотность теплового пока со стороны нагретого газа (плазмы) из прикатодной области

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_g = \mathbf{n}\cdot\mathbf{q}. \quad (19)$$

Третье слагаемое справа в (17) описывает охлаждение поверхности катода за счет плотности энергии электронов, вышедших из катода в результате вторичной электронной эмиссии и термоэлектронной эмиссии

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_{em} = -q_e(\mathbf{\Gamma}_{\text{th}}\cdot\mathbf{n})(W + 2k_B T_c/q_e) -$$
$$- q_e\sum_i\gamma_i(\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n})(\varepsilon_{\text{ion},i} - W), \quad (20)$$

где Γ_{TF} – поток электронов, рожденных в результате термоэлектронной эмиссии $q_e\Gamma_{\text{TF}} = \Gamma_c$.

Плотность потока энергии обратных электронов, которые в результате упругих соударений меняют направление движения в сторону катода, задается формулой:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_e = (\nu_{\text{th},e}n_e/4)\cdot(2k_B T_e + eW). \quad (21)$$

Граничное условие для уравнения (11) на поверхности анода со стороны плазменной области ($x = L$) записывалось аналогично (20), при этом учитывались потоки тепла за счет теплопроводности, ухода электронов на анод, а также ухода ионов на анод в случае отрицательного анодного падения потенциала:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_a = \mathbf{n}\cdot(\mathbf{Q}_g + \mathbf{Q}_e + \mathbf{Q}_i). \quad (22)$$

3. Результаты численных исследований. Система уравнений (1)–(5) с граничными условиями (6)–(10) решалась самосогласованно с уравнением (11) и граничными условиями (12), (17) по методике, аналогичной в работе [8]. Предполагалось, что поперечные размеры электродов много больше межэлектродного промежутка, который полагался равным 0.4 мм, поэтому была рассмотрена 1D геометрия. Длина вольфрамовых катода и анода полагалась одинаковой и равной 10 мм. Давление газа составляло 760 Торр. Напряжение на источнике задавалось равным 5 кВ. Варьированием балластного сопротивления R_{bal} от 300 Ом до 500 кОм были получены зависимости падения напряжения разряда $U(j)$ ("ВАХ"), а также зависимости температуры поверхности катода $T_c(j)$ и анода $T_a(j)$ от плотности разрядного тока j (рис. 1a). На рисунке 1b приведены зависимости компонент плотности электронного тока на катоде: под действием термоэмиссии j_{th} и вторичной электронной эмиссии j_γ, а также плотности тока обратных электронов $j_e = \nu_{\text{th},e}n_e/4$ от плотности разрядного тока. Вклады различных механизмов в нагрев поверхности катода и анода представлены на рис. 1c и d, соответственно.

Распределения на рис. 1 в совокупности позволяют описать динамику перехода от тлеющего разряда

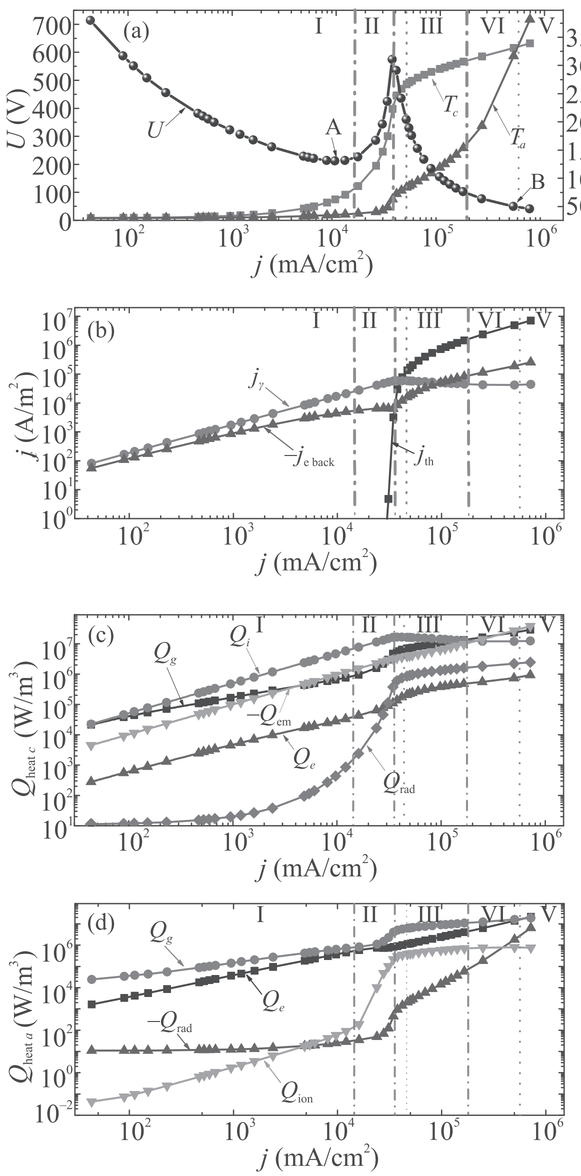


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости (a) – напряжения и температуры поверхностей катода и анода и (b) – компонент плотности электронного тока на катоде (под действием термоэмиссии и вторичной электронной эмиссии, а также плотности тока обратных электронов) от плотности разрядного тока. Зависимости различных механизмов нагрева поверхности катода (c) и анода (d) от плотности разрядного тока

к дуге. Рассмотрим характер "ВАХ", представленный на рис. 1a. Видно, что она имеет классический вид [1]. Наблюдаются области, соответствующие: I) поднормальному тлеющему разряду – падающий участок и нормальному тлеющему разряду – минимум на "ВАХ" [1]; II) аномальному тлеющему разряду – растущий участок с максимумом; III) переходная область от тлеющего разряда к дуге – падающий участок; IV) и V) неравновесный дуговой разряд.

Из рисунке 1c видно, что резкий нагрев поверхности катода начинается для значений плотности разрядного тока, принадлежащих правой границе области I, соответствующей тлеющему разряду и во всей области II (экспоненциальный рост), соответствующей аномальному тлеющему разряду.

При плотности тока $3.7 \cdot 10^4$ мА/см^2 температура поверхности катода достигает 2400 К, при этом характер "ВАХ" меняется: из растущей она становится падающей, т.е. начинается переход от тлеющего разряда к дуге. Плотность тока термоэлектронов достигает значения $2.9 \cdot 10^4$ мА/см^2, что меньше плотности тока электронов, под действием вторичной электронной эмиссии $6 \cdot 10^4$ мА/см^2 более чем в два раза, однако ее влияние оказалось уже значительным, чтобы сменить режим разряда.

На правой границе аномального режима наблюдается резкий рост температуры поверхности анода и достигает значения 735 К при плотности разрядного тока $3.7 \cdot 10^4$ мА/см^2. Область III можно разбить на две подобласти, разделенные пунктирной линией, проходящей через точку, в которой выравниваются плотность тока термоэмиссии и плотность тока от вторичной электронной эмиссии. В первой (левой) подобласти, соответственно, j_{th} еще меньше, чем j_γ. На второй (правой) подобласти плотность тока термоэмиссии уже превосходит плотность тока от вторичной электронной эмиссии.

При плотности разрядного тока $1.68 \cdot 10^4$ мА/см^2 (что соответствует правой границе области III) плотность тока от термоэмиссии более чем в 30 раз превышает плотность тока от вторичной электронной эмиссии.

Отметим, также, что плотность тока от вторичной электронной эмиссии в данной области имеет слабо падающий характер (ее значение уменьшается в полтора раза). В правой подобласти области III наблюдается практически линейно возрастающая зависимость нагрева поверхности катода с увеличением плотности разрядного тока, и на границе между областями III и IV температура достигает значения 3050 К. Здесь же наблюдается интенсивный нагрев поверхности анода – ее температура достигает значения 1530 К.

В области IV j_{th} превышает j_γ уже на два порядка, а падение потенциала на разрядном промежутке составляет менее 100 В. Эти факты свидетельствует о том, что разряд перешел в дуговой режим. Здесь наблюдается интенсивный рост температуры поверхности анода. На границе между IV и V областью при плотности тока $5.5 \cdot 10^5$ мА/см^2, температуры поверхности катода и анода выравниваются $T_c = T_a = 3330$ K, а в области V температура поверхности анода превышает температуру поверхности катода, причем значение первой достигает и превышает температуру плавления вольфрама. Этот режим на практике соответствует сварочной дуге.

Основным механизмом нагрева поверхности анода является плотность теплового потока из разрядной зоны, а также перенос энергии за счет бомбардировки электронами.

Причем в дуговом режиме вклад обоих механизмов является одинаковым. Стоит отметить, что в режиме тлеющего разряда вклад в нагрев поверхности анода ионами мал, однако он резко увеличивается в режиме аномального тлеющего разряда и в переходном режиме от тлеющего разряда к дуге уже оказывает значительное влияние. Это объясняется тем, что в пределах анодной области происходит переход от условий в положительном столбе, в котором положительные ионы движутся к катоду к условиям около анода. Вблизи последнего в режиме тлеющего и аномального тлеющего разряда анодное падение потенциала положительно (более подробно см. рис. 2b), при этом ток к аноду переносится электронами. В переходном режиме от тлеющего разряда к дуге, а также в дуговом режиме анодное падение становится отрицательным (более подробно см. рис. 3b), а, следовательно, к аноду движутся как электроны, так и ионы. Другими словами, ионный поток имеет направление, противоположное к направлению ионов в положительном столбе, и тем самым дает вклад в нагрев поверхности анода.

На рисунке 2 представлены распределения основных параметров плазмы, соответствующих нормальному тлеющему разряду (точка A на рис. 1a), а на рис. 3 – микродуговому разряду (точка B на рис. 1a). Так для нормального тлеющего разряда характерен катодный слой с положительным объемным зарядом и резким градиентом напряженности электрического поля. Далее наблюдается максимум заряженных частиц при минимуме напряженности электрического поля – эта область интерпретируется как область отрицательного свечения и фарадеево темное пространство. Затем следует положительный столб с однородным распределением параметров плазмы. Вблизи анода расположен анодный слой.

В дуговом режиме (точка B на рис. 1a) наблюдается узкий катодный слой, в котором также преобладает объемный положительный заряд. При этом падение напряжения в катодном слое составляет ~ 50 В. Реализуется микродуга с несвободным режимом катода, при котором разрядный ток превышает эмиссионный. Далее следует практически однородный столб квазинейтральной плазмы, а вблизи анода – анодный слой.

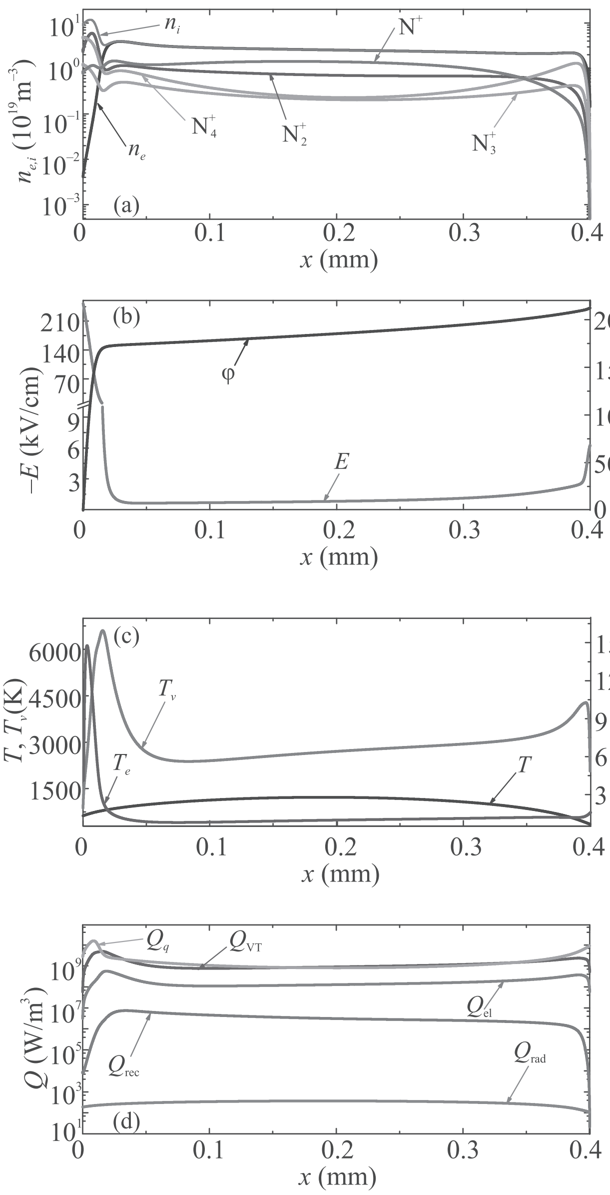


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределение (a) – концентрации электронов; суммы всех типов ионов, различных сортов ионов, (b) – напряженности и потенциала электрического поля; (c) – поступательной и колебательной температуры и температуры электронов, а также (d) – различных механизмов нагрева газа для точки A на рис. 1a

Представляет интерес проведение исследований параметров разрядов, в случае, когда отсутствует принудительное охлаждение электродов (наиболее часто встречающееся условие для микрокразрядов

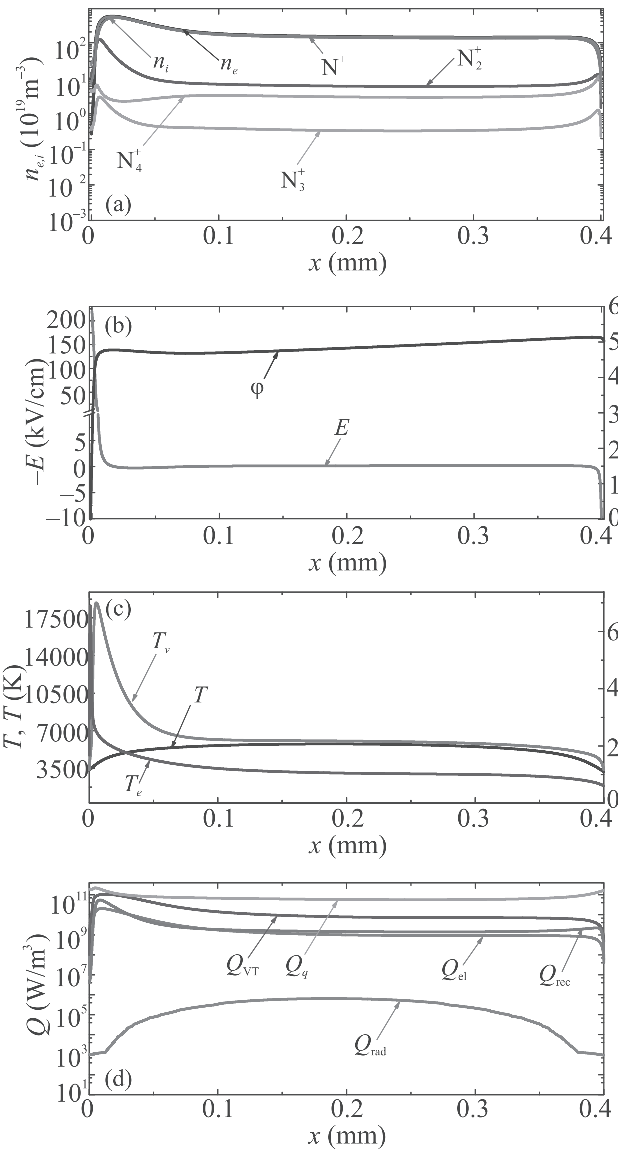


Рис. 3. (Цветной онлайн) То же что и рис. 2, только для точки B на рис. 1a

атмосферного давления). В этом случае при расчетах на внешние границы электродов необходимо накладывать граничные условия третьего рода:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_{c,a}\big|_{\text{ex}} = h(T_{c,a} - T_0), \tag{21}$$

Остановимся лишь на наиболее значимых результатах. Так, на рис. 4 представлены распределения основных параметров плазмы свободной микродуги при тех же условиях, что и на рис. 3, полученных с использованием граничного условия (21) на внешних границах электродов.

Наблюдается катодный слой, в котором преобладает отрицательный объемный заряд. При этом в распределении потенциала электрического поля на-

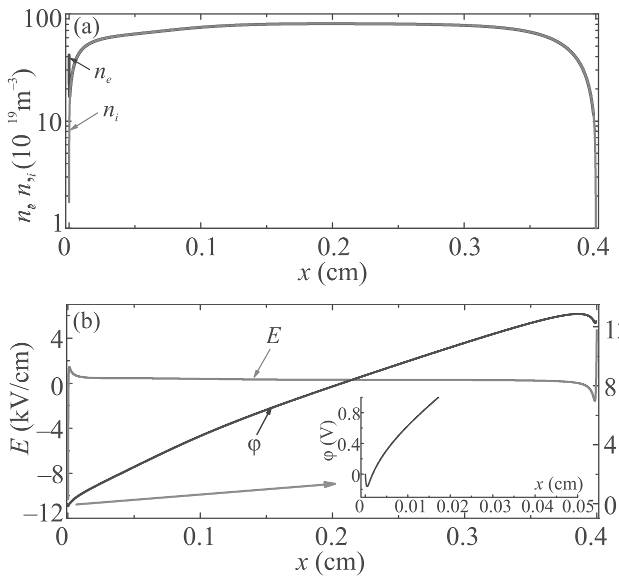


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение: (a) – концентрации электронов и суммы всех типов ионов; (b) – напряженности и потенциала электрического в микродуге со свободным режимом катода. Во вставке в увеличенном масштабе приведено распределение потенциала в катодном слое

блюдается минимум. Тем самым реализуется микродуга со свободным режимом катода, при котором эмиссионный ток превышает разрядный.

На рисунке 5 представлен сравнительный анализ динамики формирования падения потенциала и нагрева поверхности электродов для двух случаев граничных условий на внешних стенках электродов: постоянства температуры, условия (21).

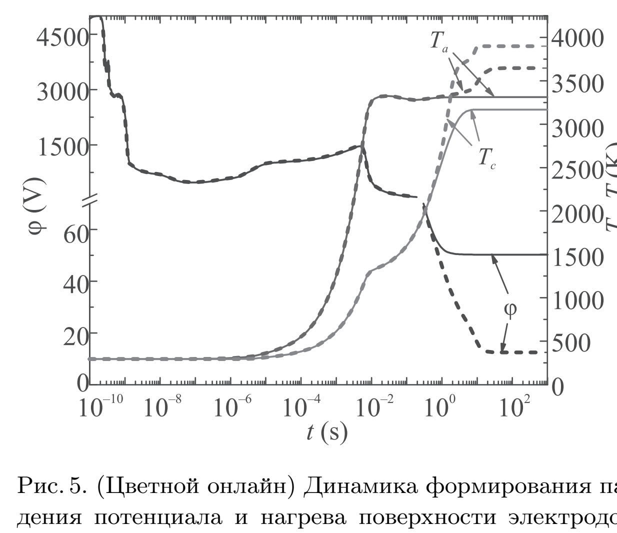


Рис. 5. (Цветной онлайн) Динамика формирования падения потенциала и нагрева поверхности электродов для двух случаев граничных условий на внешних стенках электродов: постоянства температуры (слошные линии), условия (21) (штриховые линии)

Видно, что для обоих случаев постановки граничных условий на внешних границах электродов в достаточно большом диапазоне времен наблюдается количественное совпадение представленных характеристик разряда. Пробой газа происходит в течение нескольких наносекунд, а до 10^{-7} с наблюдается слабо меняющееся падение потенциала.

Далее наблюдается увеличение падения потенциала и температур поверхностей электродов. Происходит изменение структуры разряда: в результате нагрева газа, происходит изменение приэлектродных областей, разряд переходит в аномальный режим, в результате которого продолжается нагрев поверхностей электродов и в промежутке от $5 \cdot 10^{-2}$ до нескольких единиц или десятков секунд происходит срыв в режим микродуги с несвободным (сплошная линия) или свободным (штриховая линия) режимом катода, соответственно.

Заключение. Таким образом, в работе описаны особенности перехода от тлеющего микроразряда в в микродугу в молекулярном азоте. Впервые представлены численные результаты, демонстрирующие формирование микродуги со свободным (эмиссионный ток превышает разрядный и наблюдается катодный слой с отрицательным объемным зарядов) и несвободным (разрядный ток превышает эмиссионный и в катодном слое преобладает положительный объемный заряд) режимом катода в зависимости от постановки граничных условий на внешних границах электродов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 19-31-90101 и частичной поддержке гранта президента МК-272.2019.1.

1. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, Интеллект, М. (2009).
2. L. Lin and Q. Wang, Plasma Chemistry and Plasma Processing **35**, 925 (2015).
3. C. Yuan, A. A. Kudryavtsev, A. I. Saifutdinov, S. S. Sysoev, M. S. Stefanova, P. M. Pramatarov, and Z. Zhou, Phys. of Plasmas **25**, 104501 (2018).
4. S. Jhavar, N. K. Jain, and C. P. Paul, Journal of Materials Processing Technology **214**(5), 1102 (2014).
5. V. I. Arkhipenko, A. A. Kirillov, Y. A. Safronau, and L. V. Simonchik, Eur. Phys. J. D **60**, 455 (2010).
6. Yu. Akishev, V. Karalnik, I. Kochetov, A. Napartovich, and N. Trushkin, Plasma Sources Sci. Technol. **23**, 054013 (2014).
7. A. A. Kudryavtsev, A. I. Saifutdinov, M. S. Stefanova, P. M. Pramatarov, and S. S. Sysoev, Phys. Plasmas **24**, 054507 (2017).
8. A. I. Saifutdinov, I. I. Fairushin, and N. F. Kashapov, JETP Lett. **104**, 180 (2016).
9. S. I. Eliseev, A. A. Kudryavtsev, H. Liu, Z. Ning, D. Yu, and A. S. Chirtsov, IEEE Trans. Plasma Sci. **44**, 2536 (2016).
10. M. Baeva, D. Loffhagen, and D. Uhrlandt, Plasma Chemistry and Plasma Processing **39**, 1359 (2019).
11. M. Baeva, D. Loffhagen, M. M. Becker, and D. Uhrlandt, Plasma Chemistry and Plasma Processing **39**, 949 (2019).
12. M. S. Benilov, J. Phys. D: Appl. Phys. **53**(1), 013002 (2020).
13. Е. А. Нагнибеда, Е. В. Кустова, *Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов*, Издательство Санкт-Петербургского университета, СПб. (2003).
14. L. Prevosto, H. Kelly, and B. Mancinelli, Plasma Chemistry and Plasma Processing **36**, 973 (2016).
15. N. A. Popov, J. Phys. D: Appl. Phys. **44**(28), 285201 (2011).
16. Y. Akishev, M. Grushin, V. Karalnik, A. Petryakov, and N. Trushkin, J. Phys. D: Appl. Phys. **43**(21), 215202 (2010).
17. Yu. A. Lebedev, A. V. Tatarinov, and I. L. Epstein, Plasma Sources Sci. Technol. **16**, 726 (2007).
18. Phelps database, private communication, www.lxcat.net, retrieved on October 15, 2017.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 451 – 457

Нарушение кубической симметрии в редкоземельных додекаборидах с динамическими зарядовыми страйпами[1)]

К. М. Красиков[+2)], *А. Н. Азаревич*[+], *В. В. Глушков*[+], *С. В. Демишев*[+*], *А. Л. Хорошилов*[+], *А. В. Богач*[+], *Н. Ю. Шицевалова*[×], *В. Б. Филиппов*[×], *Н. Е. Случанко*[+]

[+]*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия*

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

[×]*Институт проблем материаловедения им. И. М. Францевича Национальной академии наук Украины, 03142 Киев, Украина*

Поступила в редакцию 25 августа 2020 г.
После переработки 5 сентября 2020 г.
Принята к публикации 5 сентября 2020 г.

При температурах $T \leq 150$ K обнаружен эффект понижения симметрии для параметров электронного транспорта в редкоземельных додекаборидах RB_{12} (R = Ho, Er, Tm, Lu) с гцк структурой кристаллической решетки. Показано, что при переходе в разупорядоченную фазу каркасного стекла ниже $T^* \sim 60$ K резко усиливается анизотропия магнетосопротивления, причем этот эффект наблюдается в магнитных и немагнитных редкоземельных додекаборидах, включая твердые растворы $R_xLu_{1-x}B_{12}$ с сильным беспорядком замещения. Обсуждается роль электронного фазового расслоения (зарядовые страйпы вдоль направления $\langle 110 \rangle$) в этих металлах с открытыми траекториями на поверхности Ферми.

DOI: 10.31857/S1234567820190040

1. Введение. Сильно коррелированные электронные системы (СКЭС) представляются перспективными как для практических применений, так и с точки зрения исследований фундаментальных аспектов физики конденсированного состояния [1–3]. В частности, наличие в СКЭС электронной и структурной неустойчивостей, возникающих вследствие конкуренции между различными активными степенями свободы, часто приводит к появлению сложных фазовых диаграмм, аномалиям свойств и анизотропии характеристик [1]. Анализ природы аномалий в СКЭС, таких, как электронный нематический эффект, зарядовые страйпы и др. (см., например, [1–4]), часто оказывается затруднен вследствие сложного химического состава и низкой симметрии кристаллической структуры. В то же время, среди различных СКЭС выделяется семейство редкоземельных (РЗ) додекаборидов RB_{12}, в которых электронная и структурная неустойчивости наблюдаются в соединениях со сравнительно простой гцк решеткой.

РЗ додекабориды кристаллизуются в структуре типа NaCl, в узлах первого типа находятся кластеры B_{12}, в узлах второго типа – атомы металла. Среди РЗ додекаборидов LuB_{12} является редким немагнитным соединением с полностью заполненной $4f$ оболочкой (конфигурация $4f^{14}$), тогда как HoB_{12} ($4f^{10}$), ErB_{12} ($4f^{11}$) и TmB_{12} ($4f^{12}$) являются антиферромагнитными (АФ) металлами с температурами Нееля $T_N = 7.3$, 6.7 и 3.3 K соответственно [5]. Недавние исследования особенностей кристаллической структуры и анизотропии магнетосопротивления (МС) в LuB_{12} [6–8] позволили обнаружить формирование динамических зарядовых страйпов вдоль направлений $\langle 110 \rangle$, что обусловлено динамическим кооперативным эффектом Яна–Теллера на кластерах $[B_{12}]^{2-}$ и связанной с этим модуляцией степени гибридизации зонных $5d{-}2p$ состояний. Анизотропия МС, предположительно обусловленная зарядовыми страйпами, также была обнаружена в АФ и парамагнитной фазах твердых растворов замещения $Ho_xLu_{1-x}B_{12}$ различных составов [9–11] и $Tm_{1-x}Yb_xB_{12}$ [12]. Подчеркнем, что филаментарное распределение электронной плотности вследствие неустойчивости борного каркаса является общим для всех РЗ додекаборидов (см., например, [13] для TmB_{12}).

Классический сценарий возникновения анизотропии МС в металлах при низких температурах связан с наличием открытых траекторий на поверхности Ферми (ПФ) [14, 15]. При этом в пределе сильного поля ($\omega_c\tau \gg 1$, ω_c – циклотронная частота, τ – время релаксации) наличие открытых траекторий на

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

[2)]e-mail: krasikokirill@yandex.ru

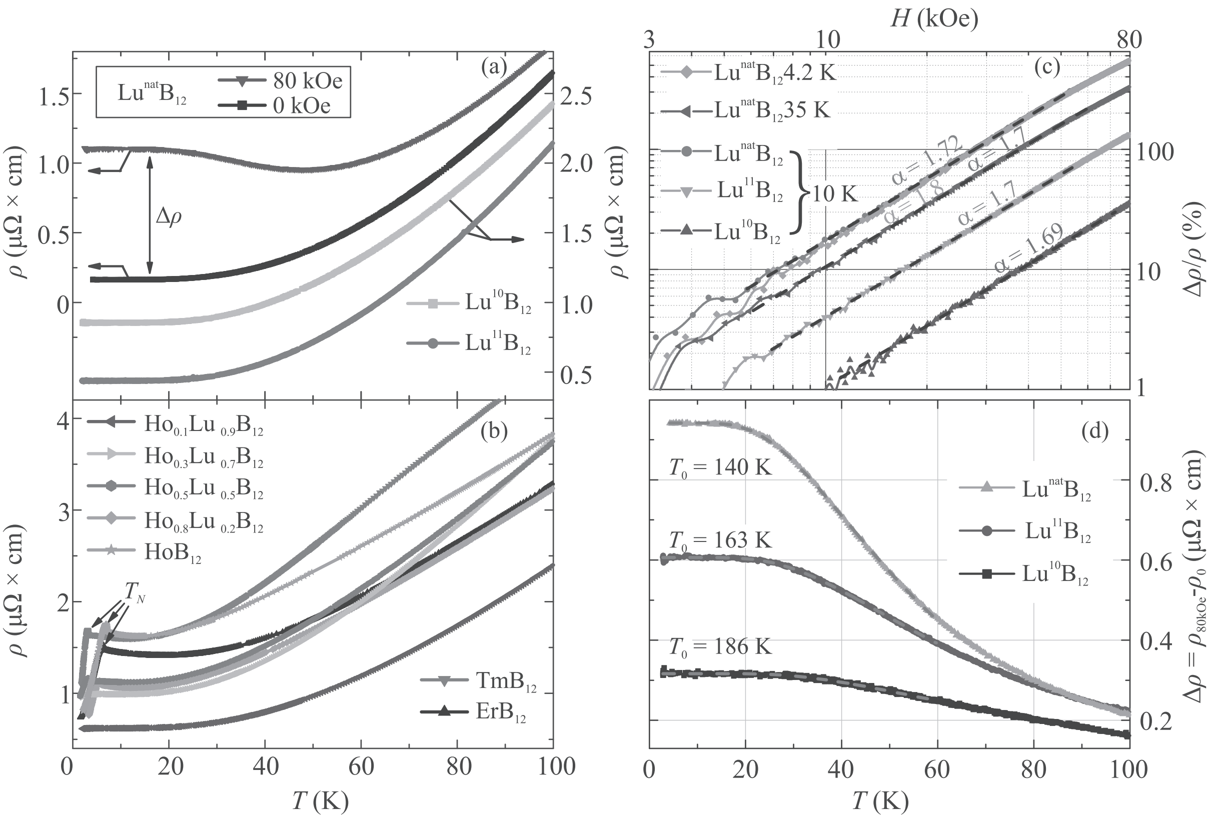


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a), (b) – Температурные зависимости удельного сопротивления для ряда додекаборидов RB_{12}. На панели (a) дополнительно показана зависимость для $Lu^{nat}B_{12}$ в магнитном поле $\mathbf{H} = 80$ кЭ с ориентацией $\mathbf{H}\|[001]$ (синяя кривая). (c) – Полевые зависимости МС при ориентацией $\mathbf{H}\|[001]$ для LuB_{12} с различными изотопами бора, пунктиром показаны линейные в двойном логарифмическом масштабе участки кривых (степенная зависимость вида $\Delta\rho/\rho \sim H^{\alpha}$). (d) – Температурные зависимости магнитного вклада в удельное сопротивление в поле $H = 80$ кЭ с ориентацией $\mathbf{H}\|[001]$ для кристаллов LuB_{12} с различным изотоп-составом по бору. Пунктирными кривыми показана аппроксимация соотношением (2)

ПФ может приводить к огромной анизотропии МС при изменении ориентации магнитного поля с переходом от замкнутых к открытым орбитам электронов [14, 15]. Поскольку в RB_{12} дырочный лист ПФ в форме "монстра" [16] имеет несколько групп открытых траекторий [17–19], представляет интерес выяснить природу анизотропии МС в RB_{12} и провести сравнение с аномалиями МС, обнаруженными ранее для меди с аналогичной топологией ПФ.

С этой целью в работе представлены результаты измерений температурных, полевых и угловых зависимостей МС и выполнен анализ вкладов в магнитных и немагнитных додекаборидах RB_{12} (R = Ho, Er, Tm, Lu) и в твердых растворах замещения на их основе. Мы покажем, что обнаруженное понижение симметрии электронного транспорта при низких и промежуточных температурах не может быть связано исключительно с топологией ПФ в этих металлах со структурной и электронной неустойчивостями. Взаимосвязь между флуктуациями электронной плотности и топологией ПФ предположительно является фактором, определяющим широкий температурный диапазон и значительную амплитуду наблюдаемой анизотропии.

2. Образцы и экспериментальная установка. Монокристаллические образцы RB_{12} были выращены методом бестигельной индукционной зонной плавки в инертной атмосфере в ИПМ НАН Украины, методика получения кристаллов детально описана в [20]. Измерения удельного сопротивления в магнитном поле до 80 кЭ при гелиевых и промежуточных температурах были выполнены на установке для гальваномагнитных измерений в ИОФ РАН. Для измерений на постоянном токе использовалась стандартная 4-х контактная схема с коммутацией тока через образец. Предварительно ориентированные образцы монтировались на столик с возможностью вращения вокруг токового направления. Эксперимент с вращением образцов вокруг оси $\mathbf{I}\|[1\bar{1}0]$ позволяет в пошаговом режиме изменять ориентацию магнитного поля в плоскости $(1\bar{1}0)$, проходя основные направления $\mathbf{H}\|[001]$, [110] и [111] в гцк решетке.

3. Результаты и обсуждение. На рисунке 1a, b приведены температурные зависимости удельного сопротивления для ряда РЗ додекаборидов. Остаточное сопротивление оказывается минимальным в LuB_{12} (~ 0.15 мкОм $\cdot$ см) и возрастает на порядок величины в антиферромагнетиках HoB_{12}, ErB_{12} и TmB_{12} вследствие магнитного рассеяния носителей заряда на РЗ ионах (см. рис. 1b). Во внешнем магнитном поле в LuB_{12} наблюдается значительный рост сопротивления при температурах ниже $T^* \sim 60$ K, причем амплитуда положительного МС в поле 80 кЭ достигает значений $\Delta\rho/\rho \sim 5.5$ (рис. 1a). На рисунке 1c приведены полевые кривые МС при температурах 4.2, 10 и 35 K, полученные для LuB_{12} с различным изотоп-составом по бору для $\mathbf{H}\|[001]$. Как видно из рис. 1c, кривые хорошо спрямляются в двойных логарифмических координатах и характеризуются степенной зависимостью вида $\frac{\Delta\rho}{\rho} \sim H^{\alpha}$ с $\alpha = 1.7{-}1.8$. Отметим, что столь сильный рост МС без насыщения во внешнем магнитном поле в рамках классической физики металлов (см. [14, 15, 21]) должен свидетельствовать об открытых траекториях вдоль $\langle 110\rangle$ для направления $\mathbf{H}\|[001]$.

Для уточнения направлений внешнего магнитного поля, отвечающих открытым и замкнутым траекториям на поверхности Ферми в LuB_{12}, в работе было проведено моделирование ПФ и анализ траекторий в обратном пространстве, возникающих для различных направлений $\mathbf{H}$. По данным измерений эффекта де Гааза –ван Альфена [18, 19] в LuB_{12} нами были скорректированы сечения многосвязной дырочной ПФ и восстановлена модельная ПФ. При этом использовалась классическая формула [15]

$$E(\mathbf{p}) = \alpha\left\{3 - \cos\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{ap_y}{\hbar}\right) - \right.$$
$$- \cos\left(\frac{ap_y}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{ap_z}{\hbar}\right) - \cos\left(\frac{ap_z}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right) +$$
$$+ \beta\left[3 - \cos\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right) - \cos\left(\frac{ap_y}{\hbar}\right) - \cos\left(\frac{ap_z}{\hbar}\right)\right] +$$
$$\left. + \delta\left[1 - \cos\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{ap_y}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{ap_z}{\hbar}\right)\right]\right\} = \zeta_0 \quad (1)$$

с уточненными значениями параметров $\frac{\zeta_0}{\alpha} = 4.1$; $\beta = 0.1$; $\delta = 0.28$ (p_x, p_y, p_z – компоненты импульса, a – постоянная решетки, $\hbar$ – постоянная Планка). Результаты разделения на открытые и замкнутые траектории при различных направлениях $\mathbf{H}$ и значениях p_z (ось $z\|\mathbf{H}$) приведены на рис. 2. Как видно из рис. 2, в окрестности направлений $\langle 001\rangle$ и $\langle 110\rangle$ в широком слое p_z наблюдаются открытые и замкнутые траектории, тогда как строго вдоль $\langle 001\rangle$ в соответствии с предсказаниями [15] имеются лишь замкнутые траектории (детали представлены в дополнительном материале на рис. S1). Суммируя результаты расчетов, отметим, что траектории при $\mathbf{H}\|\langle 110\rangle$ оказываются замкнутыми практически во всем диапазоне значений p_z (орбиты типа "собачья кость" [12]) и не дают вклада в тензор проводимости. Отметим также, что аналогичный эффект был обнаружен ранее для меди [22], где при $\mathbf{H}\|[110]$ наблюдается огромный провал на кривых МС (см. в дополнительном материале данные моделирования для меди (рис. S2 и S3) в сравнении с экспериментальными результатами [22]). Причем такая особенность наблюдается несмотря на наличие открытых траекторий в узком слое при больших p_z (так называемые лимонные орбиты). В широкой окрестности $\langle 111\rangle$, включая и сами эти направления, в LuB_{12} регистрируются только замкнутые траектории. Подчеркнем, что выводы, сделанные по результатам моделирования (рис. 2), применимы ко всем РЗ додекаборидам в силу сходства их ПФ, учитывая общие направления и близкие размеры перемычек "монстра" вдоль $\langle 111\rangle$.

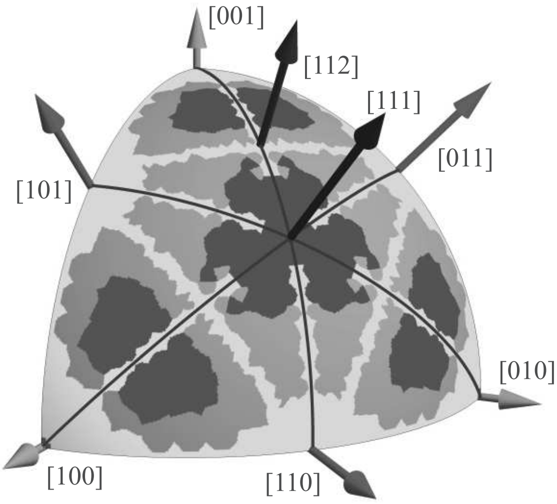


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схематичное изображение направлений вектора $\mathbf{H}$ магнитного поля для ПФ LuB_{12}, приводящих к открытым траекториям (желтые области), только замкнутым траекториям (красные области) и замкнутым, но распространяющимся на 10 и более зон Бриллюэна в обратном пространстве траекториям (оранжевые области). Стрелками обозначены основные направления в гцк решетке

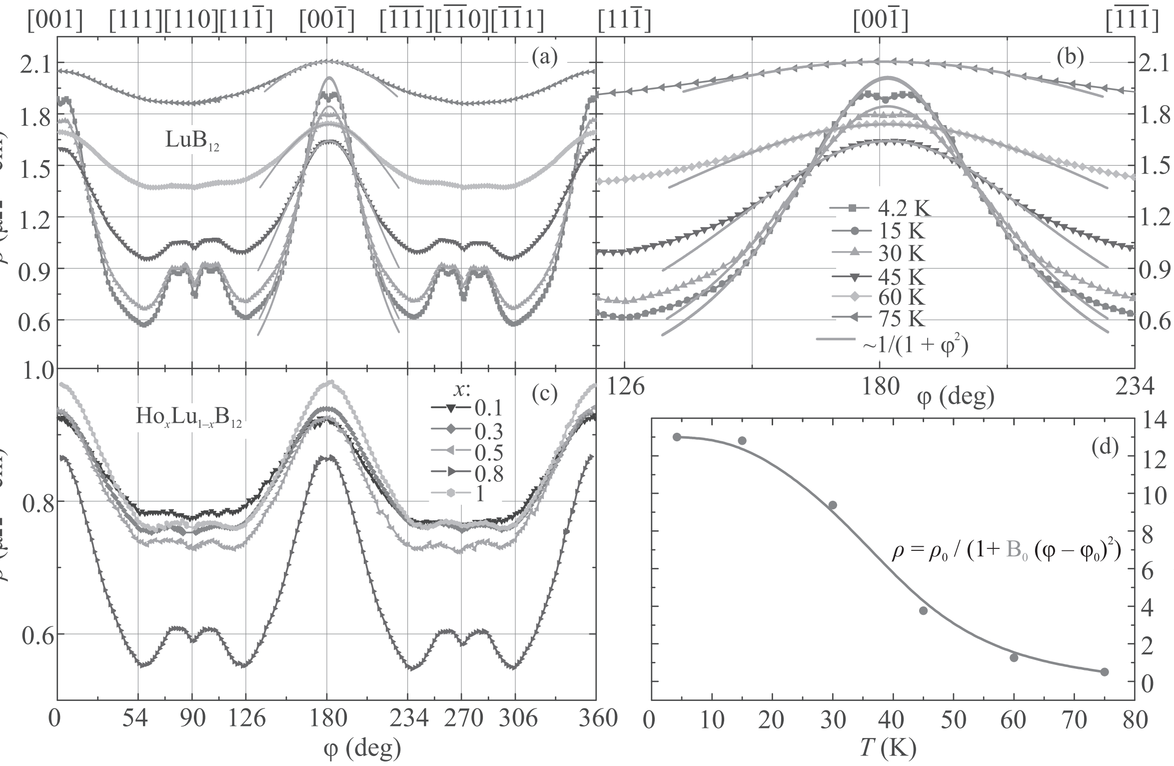


Рис. 3. (Цветной онлайн) Угловые зависимости удельного сопротивления LuB_{12} (a), (b) и $Ho_xLu_{1-x}B_{12}$ (c) в магнитном поле $H = 80$ кЭ. Сплошными линиями на панелях (a), (b) показана аппроксимация пика МС в окрестности $\mathbf{H}\|[00\bar{1}]$ формулой (3) (оранжевые кривые). (d) – Температурная зависимость параметра B_0 в соотношении (3), определенного из аппроксимации на панелях (a), (b)

Основываясь на приведенных выше результатах моделирования, при измерениях МС наиболее важными представляются эксперименты с вращением кристаллов RB_{12} вокруг оси $\mathbf{I}\|[1\bar{1}0]$, в которых вектор $\mathbf{H}$ проходит все три основных направления в гцк решетке (см. рис. 2). Такие угловые измерения сопротивления были выполнены нами в магнитном поле 80 кЭ для LuB_{12} в широком диапазоне температур 4.2–100 K (см. рис. 3a, b), для составов $Ho_xLu_{1-x}B_{12}$ с $0 < x \leq 1$ (рис. 3c, см. также рис. S4 в дополнительном материале), и при температурах выше T_N для АФ соединений TmB_{12} (рис. 4a, b) и ErB_{12} (рис. 4c, d). Отметим, что проведенные нами исследования эффекта Холла позволяют также оценить параметр $\omega_c\tau$, который для лучших кристаллов LuB_{12} в магнитном поле 100 кЭ достигает значений $\omega_c\tau \sim 1$ (см. рис. S5 в дополнительном материале) и, таким образом, режим слабого поля $\omega_c\tau < 1$ реализуется в поле до 80 кЭ для всех исследованных нами кристаллов магнитных и немагнитных додекаборидов. Это хорошо согласуется с оценками характерных длин для лучшего кристалла LuB_{12}: длина свободного пробега $l \sim 350$ Å при $T = 4.2$ K оказывается заметно меньше ларморовского радиуса $r_L = 780$ Å в поле 80 кЭ, и существенно меньше связанной с переходом в соседнюю зону Бриллюэна длины траектории $L \sim 6800$ Å (изменение волнового вектора на $2\pi/a$).

Как видно из рис. 3, 4, угловые зависимости характеризуются значительной анизотропией сопротивления как для немагнитного LuB_{12}, так и для магнитных додекаборидов, причем в окрестности $\mathbf{H}\|[00\bar{1}]$ на кривых $\rho(\varphi)$ для всех RB_{12} наблюдается широкий пик ($\Delta\varphi \sim 100°$, рис. 3, 4), что противоречит предсказаниям [14, 15]. В случае LuB_{12}, характеризующегося максимальными среди RB_{12} значениями $\omega_c\tau \leq 1$, в окрестности $\mathbf{H}\|[00\bar{1}]$ и $\mathbf{H}\|[110]$ при низких температурах в сильном магнитном поле регистрируются также узкие провалы малой амплитуды, которые, напротив, соответствуют результатам расчетов [14, 15], и могут быть связаны с замкнутыми траекториями на ПФ вдоль этих направлений (см. рис. 2). Отметим, что угловые зависимости с похожими особенностями огромной амплитуды ($\Delta\rho/\rho \sim 500$) наблюдались ранее для меди [22], где также реализуется ПФ в виде "монстра" (см. сравнение кривых на рис. S2 в дополнительном материале). С ростом температуры до $T^* \sim 60$ K указанные

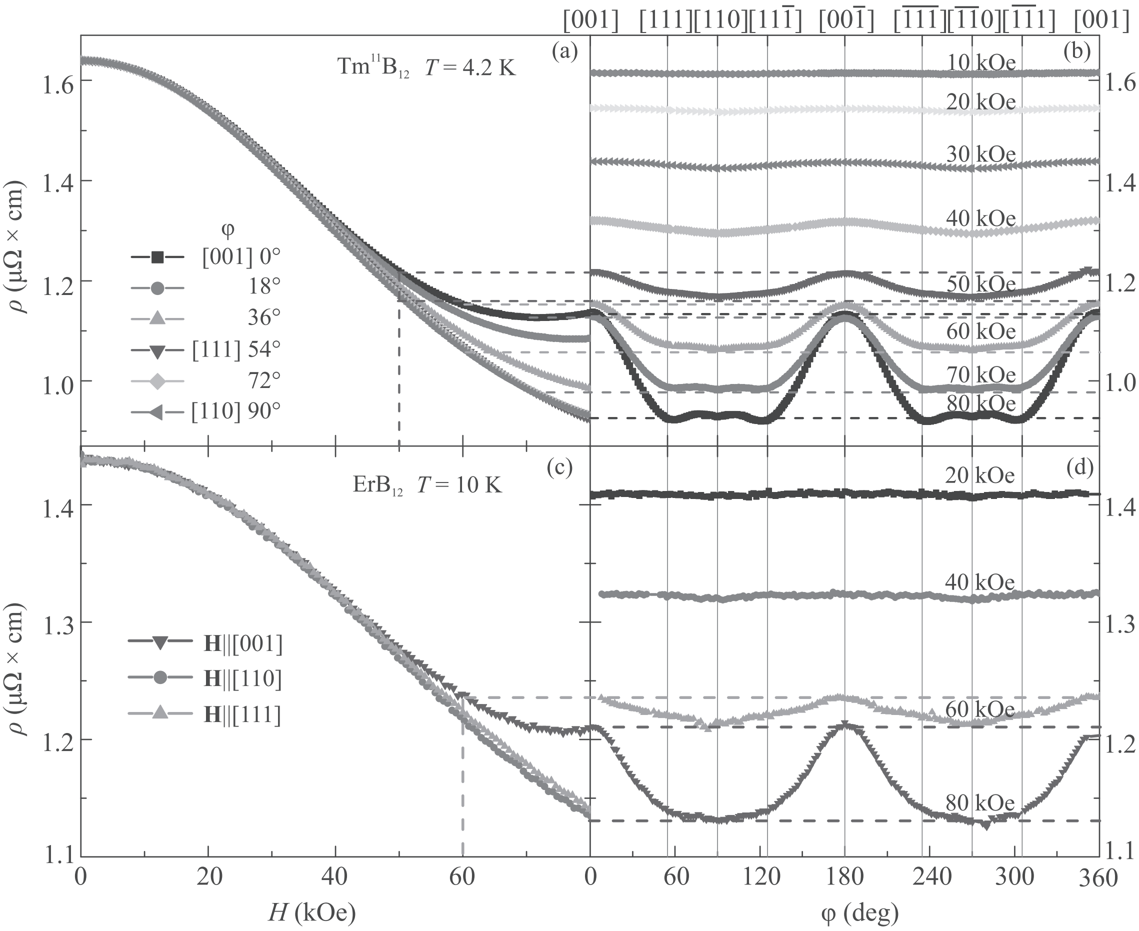


Рис. 4. (Цветной онлайн) Полевые (a), (c) и угловые (b), (d) зависимости удельного сопротивления для додекаборидов TmB_{12} при $T = 4.2$ K (панели (a) и (b)) и ErB_{12} при $T = 10$ K (панели (c) и (d))

провалы, связанные с топологией ПФ в LuB_{12}, практически пропадают, однако максимум в окрестности $\mathbf{H}||[00\bar{1}]$ на кривых $\rho(\varphi)$ сохраняется (см. рис. 3a).

Для оценки температурного интервала, в котором наблюдается анизотропия МС, достигающая максимальных значений для $\mathbf{H}||[00\bar{1}]$, положительный магнитный вклад $\Delta\rho = \rho_{80\,\mathrm{kOe}} - \rho_0$ (см. рис. 1a), найденный для кристаллов LuB_{12} различного изотопсостава, аппроксимировался в работе эмпирическим соотношением

$$\Delta\rho = \Delta\rho_0 - A/T \cdot e^{-T_0/T} \tag{2}$$

(на рис. 1d фиты показаны пунктиром). Как видно из рис. 1d, $\Delta\rho$ в LuB_{12} наиболее резко растет ниже $T^* \sim 60$ K, причем этот магнитный вклад сохраняется вплоть до высоких температур. Соотношение (2) с параметром $T_0 \sim 140-180$ K, близким к эйнштейновской температуре $\theta_E \sim 150-170$ K, найденной из структурных и тепловых измерений [8], по-видимому, характеризует усиление рассеяния носителей заряда на квазилокальных колебаниях ионов Lu^{3+} с ростом температуры. Для анализа параметров максимума на угловых кривых $\rho(\varphi)$ в окрестности $[00\bar{1}]$ нами использовалось полученное в [13, 14] соотношение вида

$$\rho = \rho_0/(1 + B_0(\varphi - \varphi_0)^2) \tag{3}$$

(результаты аппроксимации показаны сплошными линиями на рис. 3a, b для LuB_{12} и на рис. S4 в дополнительном материале для $Ho_{0.5}Lu_{0.5}B_{12}$). Как видно из рис. 3d, амплитуда пика резко увеличивается, а ширина уменьшается при переходе в разупорядоченную фазу каркасного стекла ниже $T^* \sim 60$ K [23].

При обсуждении характера аномалий на угловых кривых в додекаборидах с магнитными ионами Ho, Er и Tm отметим, что в парамагнитном состоянии этих металлов доминирующим является практически изотропный отрицательный вклад в МС (см. рис. 4a–c, а также [9, 10, 24]. Отрицательная спин-поляронная компонента МС в магнитных RB_{12} была обнаружена ранее в [25] и связана с рассеянием носителей с переворотом спина на локализованных магнитных моментах РЗ ионов. Таким образом, уменьшение анизотропии МС в RB_{12} с магнитными ионами объясняется значительным уменьшением длины свободного пробега и, соответственно, параметра $\omega_c\tau$ вследствие сильного магнитного рассеяния. Очевидно, что как магнитное рассеяние и рассеяние, связанное с беспорядком замещения в $Ho_xLu_{1-x}B_{12}$ (рис. 3c) и в $Tm_{1-x}Yb_xB_{12}$ [12], так и электрон-фононное рассеяние при промежуточных температурах резко уменьшают длину пробега носителей. В результате этого в режиме слабого поля ($\omega_c\tau \ll 1$) эффекты, обусловленные топологией ПФ, не могут приводить к возникновению анизотропного вклада в МС в этих металлах. Напротив, взаимодействие внешнего магнитного поля с динамическими зарядовыми страйпами [6–12] представляется наиболее вероятным механизмом, обусловливающим наблюдаемое нами нарушение симметрии при низких и промежуточных температурах в РЗ додекаборидах. В то же время, поскольку картина анизотропии МС в RB_{12} оказывается подобной той, которая ожидается для данной ПФ в классической теории [14, 15] при $\omega_c\tau \gg 1$, по-видимому, следует предположить, что формирование динамических страйпов также связано с топологией ПФ. Действительно, поскольку обусловленное динамическим эффектом Яна–Теллера периодическое изменение $5d$–$2p$ гибридизации зонных состояний должно приводить к модуляции размера зоны проводимости и ПФ, можно ожидать, что именно вдоль открытых траекторий на ПФ будут происходить наиболее заметные изменения электронной плотности. Однако в настоящее время теория подобного эффекта отсутствует, что затрудняет количественное описание механизма возникновения анизотропии МС в металлах с динамическими страйпами.

4. Заключение. Проведенные исследования удельного сопротивления семейства магнитных и немагнитных РЗ додекаборидов RB_{12} установили понижение симметрии электронного транспорта при низких и промежуточных температурах, которое не может быть связано исключительно с топологией ПФ в этих металлах со структурной (эффект Яна–Теллера) и электронной (зарядовые страйпы вдоль [110]) неустойчивостью. Предложено объяснение анизотропии МС в терминах взаимодействия динамических зарядовых страйпов с сильным магнитным полем. В то же время, полученные в работе результаты моделирования ПФ LuB_{12} и выполненный анализ открытых и замкнутых траекторий на ПФ, позволяет предположить, что взаимосвязь между флуктуациями электронной плотности и топологией ПФ является фактором, определяющим широкий температурный диапазон и значительную амплитуду наблюдаемой анизотропии.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского научного фонда (# 17-12-01426) и Российского фонда фундаментальных исследований (# 18-02-01152).

Авторы признательны В. Н. Красноруcскому за помощь в эксперименте и полезные обсуждения.

1. E. Dagotto, Science **309**, 257 (2005).
2. B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, Nature **518**, 179 (2015).
3. S. Sachdev and B. Keimer, Phys. Today **64**(2), 29 (2011).
4. S. V. Demishev, V. N. Krasnorussky, A. V. Bogach, V. V. Voronov, N. Y. Shitsevalova, V. B. Filipov, V. V. Glushkov, and N. E. Sluchanko, Sci. Rep. **7**(1), 1 (2017).
5. K. Flachbart, P. Alekseev, G. Grechnev, N. Shitsevalova, K. Siemensmeyer, N. Sluchanko, and O. Zogal, *Rare earth dodecaborides-magnetism, superconductivity and other properties*, Nova Science Publishers, N.Y. (2008).
6. N. Sluchanko, A. Bogach, N. Bolotina, V. Glushkov, S. Demishev, A. Dudka, V. Krasnorussky, O. Khrykina, K. Krasikov, V. Mironov, V. B. Filipov, and N. Shitsevalova, Phys. Rev. B **97**(3), 1 (2018).
7. N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, V. N. Krasnorussky, N. Y. Shitsevalova, V. B. Filipov, and N. E. Sluchanko, J. Phys. Condens. Matter **30**(26), 265402 (2018).
8. N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, V. V. Glushkov, A. N. Azarevich, V. N. Krasnorussky, S. Gabani, N. Y. Shitsevalova, A. V. Dukhnenko, V. B. Filipov, and N. E. Sluchanko, J. Phys. Chem. Solids **129**, 434 (2019).
9. N. Sluchanko, A. Khoroshilov, V. Krasnorussky, and K. Krasikov, Acta Phys. Pol. A **137**(5), 756 (2020).
10. A. L. Khoroshilov, V. N. Krasnorussky, K. M. Krasikov, A. V. Bogach, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, N. A. Samarin, V. V. Voronov, N. Y. Shitsevalova, V. B. Filipov, S. Gabani, K. Flachbart, K. Siemensmeyer, S. Y. Gavrilkin, and N. E. Sluchanko, Phys. Rev. B **99**(17), 1 (2019).
11. K. M. Krasikov, A. V. Bogach, A. D. Bozhko, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, A. L. Khoroshilov, N. Y. Shitsevalova, V. Filipov, S. Gabáni, K. Flachbart, and N. E. Sluchanko, Solid State Sciences **104**, 106253 (2020).
12. A. Azarevich, A. Bogach, S. Demishev, V. Glushkov, and N. Shitsevalova, Acta Phys. Pol. A **137**(5), 788 (2020).

13. A. P. Dudka, O. N. Khrykina, N. B. Bolotina, and N. Y. Shitsevalova, Crystallography Reports **64**(5), 737 (2019).
14. I. M. Lifshitz and V. G. Peschansky, Sov. Phys. JETP **8**(5), 875 (1959).
15. I. M. Lifshitz and V. G. Peschansky, Sov. Phys. JETP **11**(1), 137 (1960).
16. D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals*, Cambridge University Press, Cambridge (2009).
17. V. A. Gasparov, I. Sheikin, F. Levy, J. Teyssier, and G. Santi, Phys. Rev. Lett. **101**(9), 1 (2008).
18. M. Heinecke, K. Winzer, J. Noffke, H. Kranefeld, H. Grieb, K. Flachbart, and Y. B. Paderno, Zeitschrift fur Phys. B Condens. Matter **98**(2), 231 (1995).
19. H. Liu, M. Hartstein, G. J. Wallace, A. J. Davies, M. C. Hatnean, M. D. Johannes, N. Shitsevalova, G. Balakrishnan, and S. E. Sebastian, J. Phys. Condens. Matter **30**(16), 1 (2018).
20. H. Werheit, V. Filipov, K. Shirai, H. Dekura, N. Shitsevalova, U. Schwarz, and M. Armbrüster, J. Phys. Condens. Matter **23**(6), 065403 (2011).
21. S. Zhang, Q. Wu, Y. Liu, and O. V. Yazyev, Phys. Rev. B **99**(3), 1 (2019).
22. J. R. Klauder, W. A. Reed, G. F. Brennert, and J. E. Kunzler, Phys. Rev. **141**(2), 592 (1966).
23. N. E. Sluchanko, A. N. Azarevich, A. V. Bogach, I. I. Vlasov, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, A. A. Maksimov, I. I. Tartakovskii, E. V. Filatov, K. Flachbart, S. Gabani, V. B. Filippov, N. Y. Shitsevalova, and V. V. Moshchalkov, JETP **113**(3), 468 (2011).
24. N. E. Sluchanko, A. L. Khoroshilov, A. V. Bogach, V. V. Voronov, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, V. N. Krasnorussky, K. M. Krasikov, N. Y. Shitsevalova, and V. B. Filipov, JETP Lett. **107**(1), 30 (2018).
25. N. E. Sluchanko, A. V. Bogach, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, N. A. Samarin, D. N. Sluchanko, A. V. Dukhnenko, and A. V. Levchenko, JETP **108**(4), 668 (2009).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 458 – 465

Эласто-дипольный механизм формирования и коллапса резонансов Фано при прохождении поперечных фононов через слоистые магнитные гетероструктуры

О. С. Сухорукова[+], *А. С. Тарасенко*[+], *С. В. Тарасенко*[+1)], *В. Г. Шавров*[*]

[+]*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, 283048 Донецк, Украина*

[*]*Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 19 августа 2020 г.
После переработки 7 сентября 2020 г.
Принята к публикации 7 сентября 2020 г.

При резонансном прохождении сдвиговой плоской упругой волной акустически сплошной гетероструктуры из магнитных и немагнитных слоев в симметричном немагнитном окружении возбуждение распространяющихся как безобменных, так и обменных спиновых волн может приводить к формированию эласто-дипольного аналога не только резонанса Фано, но и сопутствующих динамических эффектов, включая коллапс резонанса Фано и возникновение связанных магнонных состояний в континууме поперечных фононов.

DOI: 10.31857/S1234567820190052

Одним из магистральных направлений в современной физике композитных упругих сред является поиск акустических аналогов резонансных поляритонных эффектов, характерных для динамики электромагнитных метаматериалов [1, 2]. При этом в последние годы значительное внимание исследователей привлекло изучение как поляритонного механизма формирования самого резонанса Фано, так и связанных с ним динамических эффектов (в частности, таких как коллапс резонансов Фано, темные моды, суперрезонанс, сверхизлучение) [3, 4]. Естественно, что это нашло свое отражение и в развитии современной физики упругих метаматериалов, а интенсификация исследовательских работ в области гибридизации спинтроники и стрейнтроники привела к тому, что особое внимание стало уделяться изучению возможностей использования магнитных гетероструктур (в том числе и слоистых) как новой элементной базы для создания эффективно управляемых акустических метаматериалов [5, 6]. В частности, значительный исследовательский интерес вызывает поиск магнитоакустических аналогов указанных выше динамических поляритонных эффектов. Как пример, можно указать на появившуюся в последние годы серию статей [7–10], в которых для касательно намагниченного ферромагнитного (ФМ) слоя, акустически жестко связанного с неограниченным упругоизотропным немагнитным диэлектриком, теоретически рассматривалась возможность существования магнитоупругого (МУ) варианта резонанса Фано в условиях наклонного падения на слой плоской сдвиговой объемной упругой волны (акустический аналог геометрии Фогта). Однако с точки зрения вопросов, обсуждаемых в нашей статье, указанный цикл работ основан на существенном ограничении: выбранная авторами [7–10] для анализа теоретическая модель не учитывала вклад в МУ динамику магнитного слоя распространяющихся ни магнитостатических, ни обменных спиновых волн.

В связи с этим в данной работе для случая туннелирования плоской сдвиговой объемной упругой волны через акустически сплошные гетероструктуры с участием сверхпроводящих, а также магнитных и немагнитных диэлектрических слоев изучен магнонный вклад в эласто-дипольный механизм формирования как резонанса Фано, так и связанных с ним динамических эффектов, включая коллапс резонанса Фано, формирование связанных состояний в континууме, сверхизлучение.

Пусть имеются два полупространства, занятые идентичным упруго изотропным диэлектриком (соответствующие величины будем обозначать знаком тильда), плотность энергии которого имеет вид ($\tilde{\lambda}, \tilde{\mu}$ – коэффициенты Ламэ, u_{ik} – тензор упругих деформаций) [11]:

$$F = \frac{\tilde{\lambda}}{2}\tilde{u}_{ii}^2 + \tilde{\mu}\tilde{u}_{ik}^2, \quad (1)$$

1)e-mail: s.v.tarasenko@mail.ru

а на границе между эти полупространствами расположен слой толщиной $2d$ и вектором нормали к поверхности $\mathbf{q}\|OY$ одноосного гиротропного магнетика, легкая магнитная ось которого OZ коллинеарна нормали к плоскости падения $\mathbf{a}$. Без учета неоднородного обменного взаимодействия упругая динамика подобной магнитной среды с плотностью ρ может быть описана следующей системой динамических уравнений

$$\rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}=\frac{\partial\sigma_{ik}}{\partial x_k};\quad \operatorname{div}\mathbf{B}=0,\quad \operatorname{rot}\mathbf{H}=0, \qquad (2)$$

где $\bar{\bar{\sigma}}$ – тензор упругих напряжений, $\mathbf{B}$ – вектор магнитной индукции, $\mathbf{u}$ – вектор упругих смещений, $\mathbf{H}$ – вектор магнитного поля. Пусть у распространяющейся в магнетике акустической волне вектор упругих смещений $\mathbf{u}\|OZ$, а волновой вектор $\mathbf{k}\in XY$ (акустический аналог геометрии Фогта). В результате уже для модели легкоосного (ось OZ) ФМ, обладающего изотропным не только упругим (λ,μ – коэффициенты Ламэ), но также МУ и магнитострикционным взаимодействиями материальные соотношения согласно [12, 13] могут быть представлены в виде:

$$\begin{cases}\sigma_{zx}=\bar{c}_{55}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}+i\bar{c}_{54}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}+\beta_{15}H_x-i\beta_*H_y,\\ \sigma_{zy}=\bar{c}_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}-i\bar{c}_{45}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}+\beta_{15}H_y+i\beta_*H_x,\end{cases} \qquad (3)$$

$$\begin{cases}B_x=\mu_\perp H_x-i\mu_*H_y-4\pi\beta_{15}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}+4\pi i\beta_*\dfrac{\partial u_z}{\partial y},\\ B_y=\mu_\perp H_y+i\mu_*H_x-4\pi\beta_{15}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}-4\pi i\beta_*\dfrac{\partial u_z}{\partial x},\end{cases}$$

где $\mu_\perp$ и μ_* – соответственно диагональная и недиагональные компоненты тензора магнитной проницаемости, $c_{44}=c_{55}=\mu c_\perp$, $c_{45}=c_{54}=\mu c_*$ и β_{15}, β_* – соответственно динамические упругие и магнитоупругие модули, рассматриваемой ФМ среды. Таким образом в рамках пьезомагнитного подхода среду со структурой уравнений связи подобной (3) можно рассматривать как обладающую не только “нормальным” [14], но и динамическим [15] пьезомагнитным взаимодействием. Будем полагать, что на границе раздела магнитной ($y<0$) и немагнитной ($y>0$) сред с нормалью вдоль $\mathbf{q}$ выполнена следующая система граничных условий

$$\begin{gathered}\sigma_{zy}=\tilde{\sigma}_{zy},\ u_z=\tilde{u}_z,\ B_y=\mp\tilde{\mu}_\perp h\varphi,\\ y=\pm d,\ \tilde{\varphi}(y\to\pm\infty)\to 0,\end{gathered} \qquad (4)$$

где $\varphi(\tilde{\varphi})$ – магнитостатический потенциал магнитной (немагнитной) среды. Согласно [16, 17] в частном случае $\tilde{\mu}_\perp=0$ (4) отвечает акустически бесконечно тонкому слою идеально сверхпроводящего металла на границе типа жесткой склейки между магнитной и немагнитной средой. Пусть из немагнитной упругоизотропной среды (1) на поверхность рассматриваемого магнитного слоя среды (2)–(3) падает плоская сдвиговая объемная упругая волна с $\mathbf{u}\|\mathbf{a}$, единичной амплитудой и заданными значениями частоты ω и угла падения. В результате в верхнем и нижнем полупространствах, занятых средой (1), пространственная структура поля упругих смещений в такой волне может быть соответственно представлена в виде (h – продольное волновое число)

$$\begin{gathered}\tilde{u}_z(y>d)=\\ =\left[\exp(-i\tilde{k}_{SH}y)+V_{SH}\exp(i\tilde{k}_{SH}y)\right]\exp(i\psi_x),\\ \tilde{k}^2_{SH}\equiv\omega^2/\tilde{s}^2_t-h^2,\\ \tilde{u}_z(y<-d)=W_{SH}\exp(-i\tilde{k}_{SH}y)\exp(i\psi_x),\\ \psi_x\equiv hx-\omega t,\end{gathered} \qquad (5)$$

где $V_{SH}(W_{SH})$ – амплитудные коэффициенты отражения и прохождения для слоя в случае сдвиговой упругой волны, обладающей скоростью $\tilde{s}_t$ в среде (1), ($V^2_{SH}+W^2_{SH}=1$). Пространственную структуру полей u_z и φ в слое ФМ (2)–(3) можно представить как

$$\begin{gathered}u_z=[A\operatorname{ch}(\eta_{SH}y)+B\operatorname{sh}(\eta_{SH}y)]\exp(i\psi_x),\\ \varphi=[C\operatorname{ch}(hy)+D\operatorname{sh}(hy)]\exp(i\psi_x)-\frac{4\pi\beta_{15}}{\mu_\perp}u_z,\end{gathered} \qquad (6)$$

где A,B,C,D – подлежащие определению амплитуды, $\eta^2_{SH}=h^2-\omega^2/(s^2_t c'_\perp)>0$, $c'_\perp\equiv c_\perp+4\pi\beta^2_{15}/(\mu\mu_\perp)$. По аналогии с методикой расчета из [18, 19] можно с помощью магнитостатических граничных условий (4) исключить из дальнейшего рассмотрения две из четырех амплитуд парциальных волн. Если C, D, то

$$\begin{pmatrix}C\\ D\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Phi_{CA} & \Phi_{CB}\\ \Phi_{DA} & \Phi_{DB}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\ B\end{pmatrix}. \qquad (7)$$

При этом для $\eta^2_{SH}<0$ в (6) $\Phi_{CA}=\Phi_{DA}=0$ в случае $\operatorname{ch}(\eta_{SH}d)=0$, а если $\operatorname{sh}(\eta_{SH}d)=0$, то в (7) $\Phi_{CB}=\Phi_{DB}=0$. Кроме того, если в (7) $C=D=0$, то для $A,B\neq 0$ необходимо выполнение условия

$$\Delta=0,\ \Delta\equiv\mu^2_\perp-\mu^2_*+\tilde{\mu}^2_\perp+2\tilde{\mu}_\perp\mu_\perp\operatorname{cth}(2hd), \qquad (8)$$

что с учетом (2)–(4) отвечает спектру поверхностных магнитостатических волн (ПМСВ) гиротропного слоя в геометрии Фогта при симметричном диэлектрическом (для $\tilde{\mu}_\perp\neq 0$) или идеальном сверхпроводящем (для $\tilde{\mu}_\perp = 0$) окружении. В результате для сдвиговой упругой волны пространственную структура компонента вектора упругих смещений $\mathbf{u}\|\mathbf{a}$ и тензора упругих напряжений $\mathbf{q}\bar{\bar{\sigma}}\mathbf{a}$ в ФМ среде (2)–(3), (6), (7) можно представить как

$$\begin{pmatrix} \mathbf{ua} \\ \mathbf{q}\sigma\mathbf{a} \end{pmatrix}_{y=d} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$Q_{11} = c_\eta,\ Q_{21} = \bar{c}'_\perp \eta_{SH} s_\eta + \bar{c}_* \sigma h c_\eta +$$
$$+\Phi_{CA} h(-\beta_{15} s_h + \beta_* c_h) + \Phi_{DA} h(-\beta_{15} c_h + \beta_* s_h), \quad (10)$$
$$Q_{12} = s_\eta,\ Q_{22} = \bar{c}'_\perp \eta_{SH} c_\eta + c_* \sigma h s_\eta +$$
$$+\Phi_{CB} h(-\beta_{15} s_h + \beta_* c_h) + \Phi_{DB} h(-\beta_{15} c_h + \beta_* s_h),$$

где $\bar{c}_* \equiv c_* - 4\pi\beta_{15}\beta_*/\mu_\perp$, $c_\eta \equiv \mathrm{ch}(\eta_{SH} d)$, $s_\eta \equiv \equiv \mathrm{sh}(\eta_{SH} d)$, $c_h \equiv \mathrm{ch}(hd)$, $s_h \equiv \mathrm{sh}(hd)$, а значит для рассматриваемого ФМ слоя толщиной имеет место следующая матрица перехода

$$\begin{pmatrix} \mathbf{ua} \\ \mathbf{q}\bar{\bar{\sigma}}\mathbf{a} \end{pmatrix}_{y=d} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{ua} \\ \mathbf{q}\bar{\bar{\sigma}}\mathbf{a} \end{pmatrix},$$
$$\bar{\bar{T}} = \bar{\bar{Q}}(d)\bar{\bar{Q}}^{-1}(d \to -d). \quad (11)$$

Так как для обсуждаемой слоистой магнитной гетероструктуры в (9)–(11) $T_{11} \neq T_{22}$, то для падающей извне на поверхность ФМ слоя сдвиговой плоской упругой волны SH-типа ($\mathbf{k} \in XY, \mathbf{q}\|OY, \mathbf{m}_0\|\mathbf{u}\|OZ$) структуру амплитудного коэффициента прохождения $W_{SH}(\omega, h)$, можно представить как

$$W_{SH} = \frac{i2\tilde{Z}_{SH}}{i\tilde{Z}_{SH}(T_{11} + T_{22}) - T_{21} + \tilde{Z}^2_{SH} T_{12}}. \quad (12)$$

В этом случае, как показывает расчет, становится принципиально возможным формирование акустического аналога асимметричного резонанса (резонанса Фано). В частности, условию полной акустической непроницаемости рассматриваемого магнитного слоя для сдвиговой объемной волны ($W_{SH} = 0$) отвечают сочетания частоты и продольного волнового числа удовлетворяющие $Q_{11}Q_{22} = Q_{12}Q_{21}$. Акустический аналог эффекта коллапса резонанса Фано реализуются при таких сочетаниях ω и h, для которых одновременно обращаются в нуль и числитель W_{SH} (в частности, возможно если при $\eta^2_{SH} < 0$ одновременно с (8) выполнено также условие $\mathrm{sh}(2\eta_{SH} d) = 0$). Согласно [4, 20] такие точки на плоскости внешних параметров ω и h называют также связанными состояниями в континууме (ССК) , а в (12) при этом $0 < |W_{SH}| < 1$. Как показывает расчет, условия $\mathrm{sh}(2\eta_{SH} d) = \Delta = 0$ определяют с учетом магнитодипольного и МУ взаимодействия точки вырождения спектра сдвиговых объемных МУ волн, распространяющихся вдоль слоя ФМ среды (2)–(3), обе поверхности которого жестко закреплены, т.е. в (4) $\tilde{u}_z = 0$ [11].

Если же соотношение между частотой и углом падения сдвиговой упругой волны в среде (1) таково, что при $\eta^2_{SH} < 0$ в (8)–(9) $Q_{11} = 0$ или $Q_{12} = 0$, то (12) принимает вид

$$W_{SH}(\mathrm{sh}(2\eta_{SH} d) = 0) \approx \frac{\Delta}{\Delta + i\Gamma};$$
$$\Gamma = \begin{cases} \Gamma_c, & \mathrm{ch}(\eta_{SH} d) = 0, \\ \Gamma_s, & \mathrm{sh}(\eta_{SH} d) = 0, \end{cases} \quad (13)$$

где Γ ($\mathrm{Im}\{\Gamma\} = 0$) характеризует радиационное затухание ПМСВ с законом дисперсии Δ (8) за счет излучения сдвиговой объемной упругой волны в немагнитную среду (1), окружающую ФМ слой (9)–(11). Таким образом, в данном частном случае возможно $W_{SH} = 0$ при $W^{-1}_{SH} \neq 0$. Подчеркнем, что для рассматриваемой магнитной слоистой гетероструктуры отмеченные выше эффекты, связанные с формированием и коллапсом резонансов Фано (формированием ССК) для падающей извне плоской сдвиговой объемной волны, в принципе сохраняются и в случае, когда на акустически сплошной границе раздела немагнитной и ФМ сред имеется бесконечно тонкое покрытие из идеального сверхпроводника (в (4) $\tilde{\mu} = 0$).

Ряд дополнительных резонансных аномалий в изучаемой магнитоакустической конфигурации возникает и в случае, когда ФМ слой с двухсторонним покрытием из бесконечно тонкого идеального сверхпроводника является элементарным периодом для одномерного акустически сплошного магнитного фононного кристалла (МФК). Будем полагать, что такой конечный МФК, состоящий из N элементарных периодов с толщиной $2d$ помещен в неограниченную упругоизотропную среду (1), в целом указанная магнитная гетероструктура является акустически сплошной [11]. Соответствующая система граничных условий и матрица перехода в этом случае с учетом (9)–(11) может быть представлена в виде [19]

$$\sigma_{zy} = \tilde{\sigma}_{zy},\ u_z = \tilde{u},\ B_y = 0,\ y = \pm Nd, \quad (14)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{ua} \\ \mathbf{q}\bar{\bar{\sigma}}\mathbf{a} \end{pmatrix}_{y=Nd} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} \mathbf{ua} \\ \mathbf{q}\bar{\bar{\sigma}}\mathbf{a} \end{pmatrix}_{y=-Nd}.$$

Таким образом, в рассматриваемой сверхструктуре с периодом $2d$ и выбранной магнитоакустической конфигурации роль квазиблоховского волнового вектора выполняет $k_{SH}(k_{SH}^2 \equiv -\eta_{SH}^2)$. В результате если $k_{SH}^2 > 0$, с учетом (9)–(11) для рассматриваемого конечного 1D МФК (см. также [3, 18, 21]):

$$W_N(\omega, h) = \frac{W_{SH}}{U_{N-1} - W_{SH}U_{N-2}};$$
$$U_{N-1} \equiv \frac{\sin(2Nk_{SH}d)}{\sin(2k_{SH}d)}; \qquad (15)$$
$$\cos(2k_{SH}d) = \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}).$$

Из (15) следует, что эффекты отражения и полного прохождения сдвиговой упругой волны через подобную рассматриваемую слоистую структуру существенно зависят от коэффициентов отражения $V_{SH}(\omega, h)$ и прохождения $W_{SH}(\omega, h)$ волны SH-типа через элементарный период 1D МФК с матрицей перехода $\bar{\bar{T}}(D)$ (9)–(11). Это, в частности, означает, что найденные выше для ФМ слоя в симметричном окружении эффекты формирования дискретного магнонфононного состояния на фоне сплошного спектра, полного отражения волны с $\alpha = p, s$ от ФМ слоя (9)–(11) останутся в силе и для N-слойного 1D МФК (14), (15), независимо от числа элементарных периодов N. Вместе с тем возможны и дополнительные эффекты. В частности, расчет показывает, что если толщина элементарного периода рассматриваемого фотонного кристалла (магнитного слоя) такова, что $2k_{SH}d = \pi$, то с учетом (13) получаем для сдвиговой упругой волны магнитоакустический аналог резонансного 1D брэгговского фотонного кристалла с участием экситонных поляритонов [3, 21], поскольку, если $\eta_{SH}^2 < 0$, то

$$W_N(\text{sh}(2\eta_{SH}d) = 0) \cong \frac{\Delta(\tilde{\mu} = 0)}{\Delta(\tilde{\mu} = 0) + iN\Gamma(\tilde{\mu} = 0)}, \quad (16)$$

а значит, согласно (12), (13), (16), радиационное затухание ПМСВ слоя, входящего в состав конечного ФК из N слоев в немагнитном окружении, может быть в N раз больше, чем в случае изолированного ФМ слоя с двухсторонней металлизацией. Таким образом, если воспользоваться сходством с динамикой экситонных поляритонов в резонансных брэгговских гетероструктурах с периодически расположенными квантовыми ямами [3, 21], то на основании (9)–(11), (14)–(16) можно утверждать, что для ПМСВ в ФМ слое с двухсторонним бесконечно тонким покрытием идеальным сверхпроводником ($\Delta(\tilde{\mu}_\perp = 0) \equiv \Delta_0$) становится возможным также и магнитоакустический аналог эффекта сверхизлучения. В частности, если $k_{SH} = k'_{SH} + ik''_{SH}$ и одновременно $2k'_{SH}d = \pi$, то при $2k''_{SH}Nd \ll 1$ в спектре сдвиговых магнитоупругих волн обсуждаемого 1D МФК с N ультратонкими металлизированными ФМ слоями имеет место одновременное наличие $N-1$ нерадиационных ("темных" [3]) эласто-дипольных мод ($|W_N| = 0$) и одной сверхизлучающей ("светлой" [3]) моды, спектр которой отвечает в (16) полюсу W_N. Согласно (16) ее время жизни в такой магнитной гетероструктуре в N раз меньше, чем у эласто-дипольной волны с $\mathbf{u}\|\mathbf{a}$ в уединенном в среде (1) ФМ слое с двухсторонней металлизацией (13).

Вместе с тем анализ показывает, что ни магнитная ($\mu_* \neq 0$), ни акустическая ($c_* \neq 0$) гиротропия магнитной среды (в рассмотренном примере ЛО ФМ) не являются необходимыми условиями для формирования выше перечисленных резонансных эффектов. В частности, из (1)–(16) следует, что все выше перечисленные для сдвиговой волны SH-типа эффекты, относящиеся к формированию и коллапсу резонанса Фано, а также эффекту акустического сверхизлучения, остаются в силе, даже если для коэффициентов в уравнениях связи (3) магнитной среды выполнены условия

$$\beta_{15} = c_* = \mu_* = 0, \qquad (17)$$

вследствие чего в (7) $\Phi_{CA} = \Phi_{DB} = 0$. Расчет показывает, что для слоя негиротропной среды (2)–(3), (17), в симметричном немагнитном окружении (1) и при выполнении граничных условий (4) спектр распространяющихся в плоскости XY вдоль рассматриваемого магнитного слоя вытекающих (или собственных) сдвиговых эластодипольных волн с $\mathbf{u}\|OZ$ факторизуется (независимое распространение симметричных и антисимметричных относительно срединной плоскости магнитного слоя упругих волн SH-типа). Если в случае (17) обозначить в (9) $\bar{\bar{Q}} \equiv \bar{\bar{Q}}^0$, то, используя (9)–(11), структуру амплитудных коэффициентов прохождения и отражения теперь можно представить как

$$W_{SH} = \frac{P_+ - P_-}{2}; \quad V_{SH} = \frac{P_+ + P_-}{2};$$
$$P_- \equiv \frac{Q_{22}^0 + i\tilde{Z}_{SH}Q_{12}^0}{Q_{22}^0 - i\tilde{Z}_{SH}Q_{12}^0}; \quad P_+ \equiv \frac{Q_{21}^0 + i\tilde{Z}_{SH}Q_{11}^0}{Q_{21}^0 - i\tilde{Z}_{SH}Q_{11}^0}. \quad (18)$$

Таким образом, поскольку для (12), (18) имеют место соотношения

$$Q_{22}^0 Q_{11}^0 = Q_{12}^0 Q_{21}^0, \quad (W_{SH} = 0),$$
$$Q_{22}^0 Q_{21}^0 + \tilde{Z}_{SH}^2 Q_{11}^0 Q_{12}^0 = 0, \quad (|W_{SH}| = 1), \qquad (19)$$
$$(Q_{22}^0 - i\tilde{Z}_{SH}Q_{12}^0)(Q_{21}^0 - i\tilde{Z}_{SH}Q_{11}^0) = 0, \quad (W_{SH}^{-1} = 0),$$

то при

$$Q^0_{21} = Q^0_{11} = 0 \quad \text{или} \quad Q^0_{22} = Q^0_{12} = 0 \tag{20}$$

формально все три равенства в (19) выполнены одновременно. Однако поскольку в этом случае совпадают полюс и ноль коэффициента прохождения W_{SH} (так же, как полюс и ноль коэффициента отражения V_{SH}), то из (12), (18) следует что, при выполнении (20) $0 < |W_{SH}| < 1$, и это, по аналогии с [22], отвечает коллапсу акустического резонанса Фано для рассматриваемой слоистой акустически сплошной магнитной гетероструктуры. Для соответствующей (17) структуре уравнений связи (3) это возможно в случае $\eta^2_{SH} < 0$ и для таких сочетаний ω и h одновременно отвечают $\mathrm{ch}(\eta_{SH}d) = 0$; $\Delta_s \equiv \mu_\perp \mathrm{ch}(hd) + \tilde{\mu}\,\mathrm{sh}(hd) = 0$ или $\Delta_c \equiv \mu_\perp \mathrm{sh}(hd) + \tilde{\mu}\,\mathrm{ch}(hd) = 0$, $\mathrm{sh}(\eta_{SH}d) = 0$. Эти точки на плоскости внешних параметров ω и h согласно [4, 21, 22] могут рассматриваться как ССК (в данном случае ПМСВ негиротропного АФМ слоя в континууме сдвиговых упругих волн немагнитной среды, окружающей магнетик). Так как в случае (17) в (12), (18) – одновременно обращаются в ноль и действительная, и мнимая часть W, то сочетания ω и h, одновременно отвечающие ССК (20) могут, следуя аналогии с динамикой экситонных поляритонов изложенной в [3, 21, 22] рассматриваться и как темные эласто-дипольные моды с $\mathbf{u}\|\mathbf{a}$. Если

$$\begin{gathered} Q^0_{21}Q^0_{11} = 0, \quad |Q^0_{12}| + |Q^0_{22}| \neq 0 \\ \text{или} \\ Q^0_{12}Q^0_{22} = 0, \quad |Q^0_{11}| + |Q^0_{21}| \neq 0, \end{gathered} \tag{21}$$

то уже при выполнении (3), (17) структурно сохраняются как соотношения (13), (16), так и связанные с ними отмеченные выше динамические магнитоакустические эффекты.

Как пример среды с уравнениями связи (3), (17) можно рассмотреть двухподрешеточную модель ($|\mathbf{M}_1| = |\mathbf{M}_2| = M_0$, M_0 – намагниченность насыщения подрешеток $\mathbf{M}_{1,2}$) обменно-коллинеарного, центросимметричного, легкоосного (OZ) АФМ, плотность термодинамического потенциала которого в терминах векторов ферро- ($\mathbf{m}$) и антиферромагнетизма ($\mathbf{l}$) можно представить как [23]:

$$F_{AF} = M_0^2\left(\frac{\delta}{2}\mathbf{m}^2 - \frac{b}{2}l_z^2 + \gamma l_i l_k u_{ik} - 2\mathbf{mh}\right) + \frac{\lambda}{2}u_{ii}^2 + \mu u_{ik}^2,$$

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2}{2M_0}, \quad \mathbf{l} = \frac{\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2}{2M_0}, \tag{22}$$

где δ, b – соответственно константы однородного обмена и одноосной магнитной анизотропии, γ – константа магнитострикции.

До сих пор все выше перечисленные примеры реализации в слоистых магнитных гетероструктурах эффекта коллапса акустического резонанса Фано и сопутствующих динамических явлений были рассмотрены только для: 1) условий упругой и магнитной изотропии в плоскости падения, 2) возможности формирования в ферро- и антиферромагнитном слое поверхностной безобменной магнитодипольной спиновой волны. Однако, анализ показывает, что для слоистой магнитной гетероструктуры формирование акустических аналогов резонанса Фано и его коллапса, ССК и сверхизлучения вследствие влияния эласто-дипольного механизма возможно также и для других магнитоакустических конфигураций. Как пример, рассмотрим слой легкоосного (OZ) АФМ, свободная энергия которого с учетом (22) и неоднородного обменного взаимодействия может быть представлена как

$$F = F_{AF} + \frac{\alpha}{2}M_0^2(\nabla \mathbf{l})^2, \tag{23}$$

где α – константа неоднородного обмена [23]. Будем теперь полагать, что $\mathbf{k} \in YZ$, $\mathbf{l}_0\|\mathbf{q}\|OZ$, $\mathbf{u}\|OX$, а система граничных условий на обеих поверхностях АФМ слоя имеет вид

$$\sigma_{zx} = \tilde{\sigma}_{zx}, \quad u_x = \tilde{u}_x, \quad \frac{\partial l_x}{\partial z} = 0, \quad B_z = 0, \quad z = \pm d \tag{24}$$

(т.е. рассматриваемый АФМ слой по прежнему имеет двухстороннее ультратонкое покрытие бесконечным слоем идеального сверхпроводника (при $\tilde{\mu}_\perp = 0$), но при этом спины на обеих поверхностях АФМ слоя полностью свободны). При этом в неограниченном АФМ (22)–(23) спектр сдвиговой упругой волны с $\mathbf{k} \in YZ$ в этом случае можно представить как ($k^2 = k_y^2 + k_z^2$):

$$\omega^2 \frac{k^2}{k^2 + \kappa k_y^2} = \omega_0^2 + \omega_{me}^2 \frac{k_y^2 - \omega^2/s_t^2}{k^2 - \omega^2/s_t^2} + c^2k^2. \tag{25}$$

Здесь $\kappa \equiv 16\pi/\delta$, ω_0 – частота однородного АФМ резонанса. ω_{me} – магнитоупругая щель, $\omega_s \equiv gM_0$, g – магнитомеханическое отношение [17, 23]. Для $\mathbf{u}\|\mathbf{a}$ решение граничной задачи (24)–(25) можно искать в виде:

$$u_x = \sum_{i=1}^{3}(A_i c_i + B_i s_i)\exp(i\psi_y), \quad \psi_y \equiv hy - \omega t, \tag{26}$$

где A_{1-3}, B_{1-3} – константы, подлежащие определению $c_i \equiv \mathrm{ch}(\eta_i z)$, $s_i \equiv \mathrm{sh}(\eta_i z)$, η_{1-3} – корни характеристического кубического относительно k_z^2 уравнения (25) при условии, что $\eta^2 \equiv -k_z^2$. Расчет показывает, что при выполнении граничных условий

(24) для слоя обсуждаемой АФМ среды (3), (17), (22), (23), (25) в симметричном немагнитном окружении (1) спектр распространяющихся в сагиттальной плоскости YZ вытекающих (или собственных) сдвиговых эласто-дипольных волн с $\mathbf{u}\|OX$ факторизуется и при одновременном учете МУ, магнитодипольного и неоднородного обменного взаимодействий. В этом случае структура матрицы перехода по-прежнему может быть представлена как (9)–(11). Одновременно сохраняется также и структура соотношений (13)–(16), (18)–(20). Это означает, что и для рассматриваемой магнитоакустической конфигурации все выше отмеченные для сдвиговой волны SH-типа эффекты, относящиеся как к формированию и коллапсу резонанса Фано, так и к эффекту акустического сверхизлучения при выполнении (21) остаются в силе. Дополнительные механизмы формирования ССК (как и точек коллапса резонанса Фано) в спектре сдвиговой трехпарциальной МУ волны (25)–(26), распространяющейся вдоль слоя рассматриваемой АФМ среды (22)–(23), возникают для тех сочетаний ω, h, при которых в (26) как минимум два корня характеристического кубического относительно $k_z^2 > 0$ уравнения (25) являются действительными. Однако теперь для сдвиговых объемных волн SH-типа, распространяющихся вдоль АФМ слоя (22)–(25) на плоскости внешних параметров $\omega - h$, соотношение (20) для точек коллапса резонанса Фано (а также частот ССК), индуцированных МУ взаимодействием объемных сдвиговых упругих и дипольно-обменных спиновых волн (симметричных или антисимметричных), имеет вид ($p_\nu^2 \equiv (\pi\nu/2d)^2 + h^2$, $\bar{\omega}_0^2 \equiv \omega_0^2 + \omega_{me}^2$):

$$D_\nu(\omega, h) = D_\rho(\omega, h), \quad \nu \neq \rho, \quad \nu, \rho = 1, 2, \ldots \tag{27}$$

$$D_\nu(\omega, h) = \omega^2 \frac{p_\nu^2}{p_\nu^2 + \kappa h^2} - \bar{\omega}_0^2 - c^2 p_\nu^2 + \\ + \omega_{me}^2 \frac{p_\nu^2 - h^2}{p_\nu^2 - \omega^2/s_t^2}. \tag{28}$$

Как показывает расчет, условия (27), (28) определяют с учетом гибридизации магнито-дипольного, МУ и неоднородного обменного взаимодействия точки вырождения спектра сдвиговых объемных МУ волн, распространяющихся вдоль АФМ слоя, на обеих поверхностях которого выполнены граничные условия (24) с $\tilde{u}_x = 0$. Следует отметить. что уже в безобменном пределе ($c^2 \to 0$) условия (27), (28) определяют с учетом магнито-дипольного и МУ взаимодействия точки вырождения спектра сдвиговых объемных МУ волн распространяющихся вдоль АФМ слоя, на обеих поверхностях которого выполнены граничные условия (25), если $\tilde{u}_x = 0$ (жесткое закрепление [11]). При снятии такого вырождения спектров объемных упругих и магнитостатических спиновых волн для сочетаний частоты и продольного волнового числа в окрестности (27)–(28) вдоль рассматриваемого АФМ слоя распространяются быстрые МУ волны [24].

Из анализа (27)–(28) следует, что для рассматриваемой магнитоакустической конфигурации включение в рассмотрение в (22)–(23) неоднородного обмена ($\alpha \neq 0$) делает возможным реализацию ряда новых механизмов формирования на плоскости параметров "$\omega - h$" точек, отвечающих ССК (20). В частности, для $\omega^2/s_t^2 > p_\nu^2$, $\omega^2 f_\nu(\kappa, h) > \bar{\omega}_0^2 + c^2 p_\nu^2$ уже при переходе к формальному пределу $\kappa \to 0$ (пренебрежение магнитодипольным взаимодействием) в спектре распространяющихся вдоль АФМ слоя (22)–(28) объемных МУ волн SH-типа имеются дополнительные точки формирования эффекта коллапса резонанса Фано (а также ССК). Они являются результатом вырождения спектров объемных обменных спиновых и объемных сдвиговых упругих волн распространяющихся вдоль АФМ слоя. При снятии вырождения в окрестности этих дополнительных точек ССК для объемных МУ волн, распространяющихся вдоль рассматриваемого АФМ слоя, реализуются условия антирезонанса (магнитоакустического резонанса [25]).

Ряд дополнительных механизмов формирования ССК (точек коллапса резонанса Фано) на плоскости внешних параметров $\omega{-}h$ имеет место даже если $\omega^2 \ll s_t^2/(2d)^2$. В частности, как показывает расчет, уже при формальном предельном переходе $\gamma \to 0$, $4\pi c \neq 0$, возможен дипольно-обменный механизм. Его можно рассматривать как вырождение спектров магнитостатических и обменных объемных спиновых волн. При снятии указанного вырождения для сочетаний частоты и продольного волнового числа в окрестности (27)–(28) вдоль рассматриваемого АФМ слоя формируются распространяющиеся дипольно-обменные спиновые волны (дипольно-обменный неоднородный спин-спиновый резонанс [17]).

Если же рассматриваемый АФМ (22)–(23) является низкотемпературным (т.е. для него $c < s_t$ [23]), то на плоскости внешних параметров $\omega{-}h$ (уже при $\omega^2 \ll s_t^2/(2d)^2$) становится возможным также и формирование в спектре МУ волн точек ССК другого типа. В частности, их реализация возможна, даже если в (27), (28) выполнить формальный предельный переход $\kappa \to 0$, $\gamma c \neq 0$. Физически их появление является следствием вырождения спектров распространяющихся вдоль АФМ слоя эластостатических и обменных объемных спиновых волн. При снятии указанного вырождения для соответствующих сочетаний частоты и продольного волнового числа в окрестности (27), (28) вдоль рассматриваемого АФМ слоя распространяются эласто-обменные спиновые волны (эласто-обменный неоднородный спин-спиновый резонанс [26]).

Следует отметить, что для всех рассмотренных выше магнитоакустических конфигураций для падающей из (1) плоской объемной сдвиговой волны $W_{SH}(h) = W_{SH}(-h)$, $V_{SH}(h) = V_{SH}(-h)$. Вместе с тем расчет показывает, что эти соотношения могут нарушаться. В частности, если у распространяющейся сдвиговой акустической волны вектор упругих смещений $\mathbf{u}\|OZ$, а волновой вектор $\mathbf{k} \in XY$, то это возможно уже для акустически сплошной сэндвич-структуры, состоящей из слоя ($-d < y < d$) среды (2)–(10), обе поверхности которого имеют сплошной акустически контакт через упруго изотропные слои сред A (толщина слоя d_A) и B (толщина слоя d_B) с неограниченной средой (1). Например, если магнитный слой имеет акустически бесконечно тонкое сверхпроводящее покрытие, то вместо граничных условий (4) получаем

$$\begin{gathered}\sigma_{zy}^A = \tilde{\sigma}_{zy}, \quad u_z^A = \tilde{u}_z, \quad y = d + d_A, \\ \sigma_{zy}^A = \sigma_{zy}, \quad u_z^A = u_z, \quad B_y = 0, \quad y = d, \\ \sigma_{zy}^B = \sigma_{zy}, \quad u_z^B = u_z, \quad B_y = 0, \quad y = -d, \qquad (29) \\ \sigma_{zy}^B = \tilde{\sigma}_{zy}, \quad u_z^B = \tilde{u}_z, \quad y = -d - d_B,\end{gathered}$$

где $\sigma_{zy}^A(\sigma_{zy}^B)$ и $u_z^A(u_z^B)$ – соответственно компоненты тензора упругих деформаций σ_{ik} и вектора упругих смещений $\mathbf{u}$ в упруго изотропной среде $A(B)$.

В результате $W_{SH}(h) \neq W_{SH}(-h)$, $V_{SH}(h) \neq \neq V_{SH}(-h)$, возможно уже тогда, когда среды A и B идентичны по своим упругим параметрам, но $d_A \neq d_B$, или когда $d_A = d_B$, но параметры сред A и B не эквивалентны между собой. Это означает, что в подобной магнитоакустической конфигурации (геометрия Фогта) будут не взаимны относительно $h \to -h$ и найденные выше для (2)–(10) условия формирования и коллапса резонанса Фано, связанных состояний в континууме сдвиговых упругих волн, темных и светлых мод, а если в (29) вместо магнитного слоя – N-слойная магнитная гетероструктура (14), то невзаимным будет также и эффект сверхизлучения. Отметим, что если падающая из среды (1) SH-волна не является плоской, то в условиях (2)–(10), (29) и рассматриваемой магнитоакустической конфигурации эффект невзаимности при инверсии $h \to -h$ характерен так же, как для пространственного (Δ_V, Δ_W), так и для углового (s_V, s_W) эффектов Шоха, возникающих для обсуждаемой магнитной гетероструктуры (29) не только при наклонном, но и при нормальном падении как для отраженной (Δ_V, s_V), так и для прошедшей (Δ_W, s_W) объемной сдвиговой волны. Это связано с тем, что если случае (2)–(10), (29) из среды (1) на внешнюю поверхность рассматриваемого асимметричной сэндвич-структуры падает квазиплоская объемная SH-волна, то $-i\Delta_V + s_V = \partial \ln V_{SH}/\partial h$, $-i\Delta_W + s_W = = \partial \ln W_{SH}/\partial h$.

Таким образом влияние эласто-дипольного взаимодействия на прохождение сдвиговых упругих фононов через магнитные сэндвич-структуры типа диэлектрик–сверхпроводник сформированных с участием ФМ или АФМ слоев, делает возможным реализацию магнитоакустических аналогов, хорошо известных в физике полупроводниковых гетероструктур поляритонных эффектов [3, 21], включая формирование и коллапс резонанса Фано, связанные состояния в континууме поперечных фононов, темные и светлые моды, сверхизлучение. Для асимметричных слоистых магнитных гетероструктур указанные эффекты могут быть невзаимными относительно инверсии знака продольного волнового числа (угла наклона для падающей извне плоской SH-волны). Отметим также, что в окрестности указанных точек ССК (20), (27), (28) в рамках рассматриваемой бездиссипативной модели ширина линии связанной с радиационным затуханием вытекающей сдвиговой МУ волны в соответствии с теорией [27] может быть сколь угодно малой (т.е. подобно [4], такие магнитоакустические моды можно охарактеризовать как суперрезонансное состояние).

Работа выполнена в рамках государственного задания.

1. F. Zangeneh-Nejad and R. Fleury, Rev. Phys. **4**, 100031 (2019).
2. D. Zhao, Y.-T. Wang, K.-H. Fung, Z.-Q. Zhang, and C. T. Chan, Phys. Rev. B **101**, 054107 (2020).
3. A. V. Kavokin, J. J. Baumberg, G. Malpuech, and F. P. Laussy, *Microcavities*, 2-nd ed., Oxford University Press, N.Y. (2017).
4. M. В. Рыбин, M. Ф. Лимонов, УФН **189**, 881 (2019).
5. K. Yu, N. X. Fang, G. Huang, and Q. Wang, Adv. Mater **30**, 1706348 (2018).
6. A. A. Бухараев, A. K. Звездин, A.П. Пятаков, Ю. К. Фетисов, УФН **188**, 1288 (2018).

7. O. S. Latcham, Y. I. Gusieva, A. V. Shytov, O. Y. Gorobets, and V. V. Kruglyak, APL **115**, 082403 (2019).
8. O. S. Latcham, Y. I. Gusieva, A. V. Shytov, O. Y. Gorobets, and V. V. Kruglyak, arXiv preprint arXiv:1911.06774 (2019).
9. O. S. Latcham, Y. I. Gusieva, A. V. Shytov, O. Y. Gorobets, and V. V. Kruglyak, APL **116**, 209902 (2020).
10. O. S. Latcham, Y. I. Gusieva, A. V. Shytov, O. Y. Gorobets, and V. V. Kruglyak, arXiv:1906.07297v2 [physics.app-ph] (2020).
11. М. А. Исакович, *Общая акустика*, Наука, М. (1973).
12. J. P. Parekh, Electron. Lett. **6**, 322 (1969).
13. О. В. Приходько, О. С. Сухорукова, С. В. Тарасенко, В. Г. Шавров, Письма в ЖЭТФ **95**, 733 (2012).
14. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **33**, 807 (1957).
15. Т. В. Лаптева, С. В. Тарасенко, В. Г. Шавров, Письма в ЖЭТФ **85**, 751 (2007).
16. М. В. Балакирев, И. А. Гилинский, *Волны в пьезокристаллах*, Наука, Новосибирск (1982).
17. А. Г. Гуревич, Г. А. Мелков, *Магнитные колебания и волны*, Физматлит, М. (1994).
18. Л. М. Бреховских, *Волны в слоистых средах*, изд-во АН СССР, М. (1957).
19. В. И. Альшиц, А. Л. Шувалов, ЖЭТФ **103**, 1356 (1993).
20. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, Nat. Rev. Mater. **1**, 16048 (2016).
21. Е. Л. Ивченко, А. Н. Поддубный, ФТТ **55**, 833 (2013).
22. Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, Ю. С. Джое, Р. М. Косби, ЖЭТФ **116**, 263 (1999).
23. В. И. Ожогин, В. Л. Преображенский, УФН **155**, 593 (1988).
24. Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, Изв. вузов. Физика **31**, 6 (1988).
25. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука, М. (1967).
26. Ю. В. Гуляев, С. В. Тарасенко, В. Г. Шавров, УФН **181**, 595 (2011).
27. H. Friedrich and D. Wintgen, Phys. Rev. A **32**, 3231 (1985).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 466 – 474

Подавление сверхпроводимости в неупорядоченных пленках: конкуренция двумерной диффузии и трехмерной баллистики[1)]

Д. С. Антоненко[+*× 2)], *М. А. Скворцов*[+* 2)]

[+] *Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия*

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

[×] *Московский физико-технический институт, 141700 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 3 сентября 2020 г.
После переработки 8 сентября 2020 г.
Принята к публикации 8 сентября 2020 г.

Подавление критической температуры в однородно разупорядоченных сверхпроводящих пленках является следствием усиления кулоновского отталкивания в присутствии беспорядка. Мы показываем, что для большинства изучаемых в настоящее время тонких пленок эффект подавления не может быть полностью объяснен в предположении о двумерном диффузионном характере движения электронов. Основной вклад в подавление T_c возникает из-за поправки к константе электрон-электронного взаимодействия, обусловленной областью расстояний порядка фермиевской длины волны, что приводит к сдвигу критической температуры $\delta T_c/T_{c0} \sim -1/k_F l$, где k_F – импульс Ферми, а l – длина свободного пробега. Таким образом, для большинства сверхпроводящих пленок, где подавление T_c по мере уменьшения толщины происходит по фермионному сценарию, оно обусловлено приближением к порогу трехмерной андерсоновской локализации и контролируется параметром $k_F l$, а не сопротивлением пленки на квадрат.

DOI: 10.31857/S1234567820190064

1. Введение. Важнейшей характеристикой сверхпроводника является его критическая температура, T_c. Обычно считается, что T_c является свойством материала и не зависит от размеров образца. Однако многочисленные эксперименты свидетельствуют о том, что критическая температура широкого класса неупорядоченных сверхпроводников (V [1], NbN [2–9], TiN [10], MoGe [11, 12], MoSi [13, 14], MoC [15], WRe [16], InO [17] и др. [18]) систематически падает с уменьшением толщины пленки d. Как правило, подавление T_c становится заметным при $d \sim 10$ нм, а для самых тонких пленок T_c может уйти в нуль, что соответствует квантовому фазовому переходу сверхпроводник-металл или сверхпроводник-изолятор [19–24].

Принято выделять два сценария подавления T_c в неупорядоченных материалах: бозонный и фермионный; их актуальность определяется структурой рассматриваемого материала. Бозонный механизм типичен для гранулированных и/или сильно разупорядоченных сверхпроводников (поликристаллический TiN, аморфный InO), в которых происходит преформирование локализованных куперовских пар [25–28]; температура сверхпроводящего перехода в таком случае определяется распространением сверхпроводящей когерентности с микро- на макромасштабы. При фермионном сценарии, который реализуется для равномерно разупорядоченных пленок без дополнительной структуры (NbN, MoGe и др.), подавление сверхпроводимости связано с усилением электрон-электронного отталкивания в присутствии беспорядка [29, 30], что приводит к уменьшению эффективной константы куперовского притяжения. Несмотря на одинаковый физический принцип подавления T_c беспорядком, способ описания фермионного механизма в трехмерных и двумерных системах существенно отличается.

В трехмерной (3D) геометрии за усиление отталкивания при движении в потенциале дефектов отвечают малые расстояния, не превосходящие длины пробега l. В результате весь эффект может быть описан изменением константы куперовского взаимодействия. В работе Андерсона, Мутталиба и Рамакришнана [31] изучался фермионный механизм для сильно неупорядоченного 3D сверхпроводника вблизи порога андерсоновской локализации ($k_F l \sim 1$, где k_F – импульс Ферми). Там же была дана оценка поправки к голой константе электрон-

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

[2)] e-mail: antonenko@itp.ac.ru; skvor@itp.ac.ru

электронного взаимодействия λ в случае слабого беспорядка ($k_F l \gg 1$): $\delta\lambda/\lambda \sim 1/(k_F l)^2$. Аналогичное выражение было получено в работах [32, 33]. Приведенную оценку легко получить, обрезав 3D диффузионный вклад на ультрафиолетовом пределе $r \sim l$. Однако, как показали Белитц и Киркпатрик на примере слаболокализационной поправки к проводимости [34, 35], в 3D геометрии диффузионные вклады протягиваются в баллистическую область вплоть до расстояний порядка длины волны и имеют относительный порядок $1/(k_F l)$, а не $1/(k_F l)^2$. Аналогичное явление с продолжением поправки от взаимодействия из диффузионной в баллистическую область известно и для туннельной плотности состояний, как в двумерной [36], так и в трехмерной [37, 38] геометрии.

Перенормировка электрон-фононного взаимодействия, вызванная беспорядком, и ее влияние на сверхпроводимость изучались в работе Кека и Шмида [39]. Они показали, что смещение примесей вслед за колебаниями решетки приводит к подавлению взаимодействия с продольными фононами и возникновению взаимодействия с поперечными фононами. Белитц предпринял попытку одновременно учесть примесные поправки как к кулоновскому, так и к электрон-фононному взаимодействию и их влияние на T_c с помощью техники точных собственных функций [40], а также путем решения полных уравнений Горькова в режиме сильной связи [41–43].

Часть его результатов может быть интерпретирована как поправка к голой константе электрон-электронного взаимодействия $\delta\lambda/\lambda \sim 1/k_F l$. Однако достоверность выводов Белитца была поставлена под сомнение Финкельштейном [44], который указал, что упругие диаграммы, связанные с поправкой к туннельной плотности состояний [45, 46], на важности которых настаивал Белитц, не дают вклада в ведущую поправку к сдвигу T_c.

Главное отличие *двумерной (2D) геометрии* от 3D случая заключается в том, что эффект перенормировок не может быть сведен к независящему от энергии сдвигу константы λ, а требует суммирования главных логарифмов. Общепринятое описание эффекта подавления T_c в тонких сверхпроводящих пленках существенно использует представление о *2D диффузионном* характере движения электронов, что основывается на следующей экспериментально значимой иерархии масштабов длин: $\lambda_F \ll l \ll d \ll \xi_0$, см. рис. 1. (Здесь λ_F – фермиевская длина волны, $\xi_0 = \sqrt{\hbar D/T_c}$ – сверхпроводящая длина когерентности в грязном пределе, D – коэффициент диффузии.) В таком подходе усиление беспорядка с уменьшением d связано с увеличением сопротивления на квадрат $R_\square$.

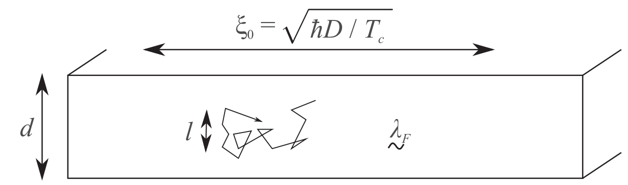


Рис. 1. Актуальная для эксперимента иерархия масштабов длин в разупорядоченных сверхпроводящих пленках

На пертурбативном уровне эффект взаимовлияния беспорядка и взаимодействия на T_c тонких сверхпроводящих пленок изучался в работах [45–49], где был вычислен вклад в сдвиг T_c от области 2D диффузии:

$$\frac{\delta T_c}{T_{c0}} = -\frac{\lambda}{3\pi g} \log^3 \frac{\hbar}{T_{c0}\tau_*}, \tag{1}$$

где T_{c0} – критическая температура объемного сверхпроводника, $g = h/e^2 R_\square = (2/3\pi)(k_F l)(k_F d) \gg \gg 1$ – безразмерный кондактанс пленки, а λ – безразмерная константа электрон-электронного взаимодействия (для экранированного кулоновского взаимодействия $\lambda = 1/2$). Параметр τ_* определяет время, на котором диффузия становится двумерной: $\tau_* = \max\{\tau, \tau_d\}$, где τ – время упругого рассеяния, а $\tau_d = d^2/4D$ – время диффузии через толщину пленки [44, 47]. В реальном пространстве логарифм в уравнении (1) набирается за счет двумерной диффузии от масштаба $\max(l, d)$ до длины когерентности ξ_0. Поправка (1), обратно пропорциональная кондактансу пленки, концептуально подобна слаболокализационной [50, 51] и связанной со взаимодействием [30] поправкам к двумерной проводимости, при этом две из трех степеней логарифма связаны с экспоненциальной чувствительностью T_c к константе взаимодействия $\lambda_{\rm BCS}$.

Выражение (1), полученное в первом порядке теории возмущений, было позже обобщено Финкельштейном на случай произвольно сильного подавления T_c с помощью ренорм-группового суммирования ведущих логарифмов [44, 52]. Аналогичный результат можно получить, решая уравнение самосогласования с зависящей от энергии вершиной куперовского притяжения $\lambda_{E,E'} = \lambda_{\rm BCS} - \gamma_g^2 \log[1/\max(E,E')\tau_*]$ [53]. В случае экранированного кулоновского взаимодействия ($\lambda = 1/2$) непертурбативное выражение для критической температуры как функции безразмерного кондактанса пленки, описывающее сверхпроводимость вплоть до ее полного подавления, имеет вид:

$$\log\frac{T_c}{T_{c0}} = \frac{1}{\gamma} - \frac{1}{2\gamma_g}\log\frac{\gamma+\gamma_g}{\gamma-\gamma_g}, \qquad (2)$$

где $\gamma_g = 1/\sqrt{2\pi g}$ и $\gamma = 1/\log(\hbar/T_{c0}\tau_*)$. Выражение (2), *где параметр γ рассматривается как подгоночный*, было использовано Финкельштейном [44] для описания экспериментальных данных по зависимости T_c пленок MoGe от толщины, напрямую связанной с безразмерным кондактансом g [11]. С тех пор такой способ объяснения экспериментальных данных по подавлению сверхпроводимости в неупорядоченных пленках стал фактически общепринятым [14, 15, 54].

Согласно уравнениям (1) и (2), подавление T_c в тонких ($d \ll \xi_0$) сверхпроводящих пленках определяется исключительно безразмерным кондактансом на квадрат g. Это утверждение прекрасно вписывается в общую парадигму скейлинга [50], подтверждаемую ренорм-групповым анализом нелинейной сигма-модели в 2D пространстве [55–57].

Однако интерпретация экспериментальных данных по зависимости $T_c(d)$ с помощью формулы (2) сталкивается с рядом принципиальных трудностей. Первая связана с внутренней противоречивостью подхода, в котором γ рассматривается как свободный подгоночный параметр. Как следует из таблицы 1, где собраны данные по различным сверхпроводящим пленкам, типичные значения γ_{fit}^{-1}, полученные из подгонки зависимости $T_c(d)$ под выражение (2), находятся в интервале $7\div 9$. Проблема заключается в том, что данные значения значительно превосходят теоретическую оценку $\gamma^{-1} = \mathcal{L}_d = \ln(\hbar/T\tau_d)$ (последняя колонка в таблице 1), а в половине случаев превосходят также и величину $\mathcal{L} = \ln(\hbar/T\tau)$ (предпоследняя колонка в таблице 1). С учетом того, что пертурбативный сдвиг T_c, согласно уравнению (1), пропорционален кубу этого логарифма, расхождение между микроскопической теорией и результатом фита по формуле (2) оказывается очень большим. Можно попытаться спасти положение, сказав, что γ_{fit}^{-1} содержит также вклад 3D диффузии, но в таком случае остается непонятным статус уравнений (1) и (2), полученных в предположении 2D диффузии.

Другая проблема, связанная с интерпретацией экспериментальных данных в терминах формулы (2), заключается в неявном постулировании того, что эффект подавления T_c определяется только безразмерным кондактансом пленки. Однако в реальных тонких пленках в силу технологических причин при изменении толщины меняется и концентрация при-

Таблица 1. Параметры сверхпроводящих пленок*: объемная критическая температура T_{c0}, толщина d, длина свободного пробега l, величина параметра γ при подгонке зависимости $T_c(g)$ формулой (2), а также значения двух логарифмов: $\mathcal{L} = \log(\hbar/T_{c0}\tau)$ и $\mathcal{L}_d = \log(\hbar/T_{c0}\tau_d)$

Состав	Ссылка	T_{c0}, К	d, нм	l, Å	γ_{fit}^{-1}	$\mathcal{L}$	$\mathcal{L}_d$
NbN	[4]	15	$2\div 15$	~ 5	5.0	5.7	$5.6\div 3.4$
NbN	[5]	15	$1\div 26$	2	8.3	7.2	$6.2\div 2.1$
NbN	[8]	17	>50	<7	–	4.8	3D
TiN	[10]	5	$3.6\div 5$	3	6.2	8.9	$6.4\div 2.4$
MoGe	[11, 52]	7	$1.5\div 100$	~ 4	8.2	6	<4.0
MoSi	[13]	7	$1\div 20$	5	7.0	5.6	<4.7
MoC	[15]	8	$3\div 30$	<4	7.5	5.5	$3.2\div 0.9$
WRe	[16]	6	$3\div 120$	4	7.4	6.1	<2.7
Nb	[58]	7	$2.5\div 26$	18	11.7	5.2	<4.8

*Для пленок WRe и TiN мы положили $1/k_F \sim l \sim a$, где a – межатомное расстояние. При расчетах для MoC в качестве эффективной массы взята масса свободного электрона.

месей, а с ней и длина свободного пробега l. Большой массив экспериментальных данных по критической температуре тонких пленок был проанализирован в работе [59], где было показано, что T_c зависит в первую очередь от трехмерной объемной проводимости $\sigma \propto k_F^2 l$, а не от двумерного кондактанса $g \propto k_F^2 ld$.

Фактически неприменимость формулы (2) для описания подавления T_c в тонких пленках связана со слишком узким интервалом для 2D диффузии (от d до ξ_0), которого оказывается недостаточно для объяснения наблюдаемой величины эффекта, и малостью префактора $1/g \sim (k_F l)^{-1}(k_F d)^{-1}$. Следовательно, для количественного описания экспериментальных данных необходимо указать другой механизм усиления кулоновского взаимодействия беспорядком, не связанный с двумерной диффузией.

В настоящей работе мы показываем, что имеющиеся экспериментальные данные по подавлению T_c в тонких пленках могут быть удовлетворительно объяснены в предположении, что основной вклад происходит от процессов *трехмерного баллистического* движения электронов с типичным расстоянием между точкой взаимодействия и местом примесного рассеяния в несколько длин волн. Наш основной результат состоит в корректировке пертурбативной формулы (1) для сдвига T_c:

$$\frac{\delta T_c}{T_{c0}} = -\frac{\alpha}{k_F l} - \frac{\lambda}{3\pi g}\log^3\frac{\hbar}{T_{c0}\tau_d}, \qquad (3)$$

где добавленный первый член отвечает вкладу трехмерной баллистической области. При этом нужно отдавать отчет, что в подавление T_c вносят вклад все масштабы, начиная от фермиевской длины волны, так что удержание последнего члена, происходящего из области двумерной диффузии, на фоне первого может быть оправдано только для материалов с исключительно низкой T_{c0} или достаточно тонких (в частности, атомных [60]) пленок.

Коэффициент α в формуле (3) является неуниверсальным, он зависит от деталей взаимодействия и структуры случайного потенциала. В модели слабого короткодействующего отталкивания между электронами с амплитудой λ и гауссового белого случайного потенциала он имеет вид

$$\alpha = \frac{\pi\lambda \log^2 \omega_D/T_c}{2(1+\lambda \log E_F/\omega_D)^2}. \qquad (4)$$

Для реальных сверхпроводящих пленок с кулоновским взаимодействием следует ожидать зависящее от конкретного материала значение параметра $\alpha \sim 1$.

2. Модель. Мы рассматриваем модель s-волновой сверхпроводимости, предполагая притяжение электронов по фононному механизму, которое описывается потенциалом $V_{\rm ph}(\mathbf{r}) = -(\lambda_{\rm ph}/\nu)\delta(\mathbf{r})$, действующим в полосе энергий ω_D вблизи энергии Ферми, а также короткодействующее отталкивание с потенциалом $V(\mathbf{r}) = (\lambda/\nu)\delta(\mathbf{r})$ с обрезкой по энергии на величине E_F. Мы будем работать в приближении слабой связи, $\lambda_{\rm ph}$, $\lambda \ll 1$, и пренебрегать перенормировкой фононной вершины беспорядком за рамками лестничного приближения [39]. Беспорядок моделируется случайным потенциалом с гауссовым белым шумом, задаваемом коррелятором $\langle U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}')\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/2\pi\nu\tau$, где ν – плотность состояний на уровне Ферми в расчете на одну проекцию спина, а τ – время примесного рассеяния.

Без учета примесных перенормировок вершин взаимодействия, T_c дается стандартным выражением теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ):

$$T_{c0} = \omega_D \exp\left(-1/\lambda_{\rm BCS}\right), \qquad (5)$$

где эффективная константа связи имеет вид

$$\lambda_{\rm BCS} = \lambda_{\rm ph} - \frac{\lambda}{1+\lambda \log E_F/\omega_D}. \qquad (6)$$

Второе слагаемое (в российской литературе известное, как толмачевский логарифм, а в западной – как кулоновский псевдопотенциал) описывает вклад электрон-электронного отталкивания в куперовский канал, которое подвержено логарифмической перенормировке в области энергий от ω_D до E_F [61–63], см. также дополнительный материал.

Критическая температура определяется полюсом куперовской лестницы на нулевом импульсе и нулевой частоте в мацубаровской диаграммной технике. В присутствии случайного потенциала диаграммный ряд необходимо усреднить по беспорядку всеми возможными способами. В ведущем порядке (приближение непересекающихся пунктиров) этот процесс сводится к независимому усреднению произведения двух функций Грина, $G_E G_{-E}$, соединяющих вершины взаимодействия ($\lambda_{\rm ph}$ или λ), что достигается вставкой куперона. В согласии с теоремой Андерсона [64–66], результат не зависит от силы беспорядка и приводит к выражениям (5) и (6) для критической температуры.

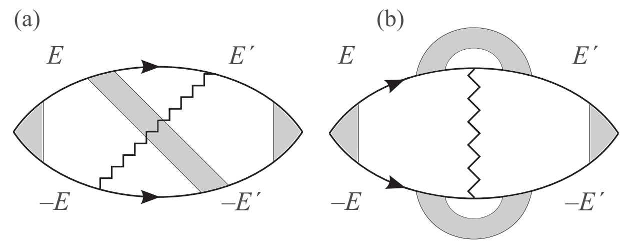


Рис. 2. Неупругие диаграммы для диффузионного вклада ($q \ll 1/l$ и $E, E' \ll 1/\tau$, где q – импульс, переносимый линией взаимодействия) в куперовскую восприимчивость, определяющие сдвиг T_c. Затененные блоки в середине диаграмм обозначают диффузоны и купероны, соединяющие функции Грина с разными знаками мацубаровских энергий. Затененные треугольники в углах диаграмм обозначают переномировку фононной вершины примесными лестницами и лестницами электронного взаимодействия с константой λ

3. Диффузионный вклад. Для вычисления сдвига T_c необходимо учесть процессы, описывающие совместный эффект взаимодействия и беспорядка в следующем порядке по отношению к диаграммам без пересечений [44–46, 48, 49, 52]. Диаграммы, дающие ведущий вклад в диффузионной области, показаны на рис. 2, где взаимодействие (зигзагообразная линия) пересекается примесными лестницами – диффузонами и куперонами – обозначенными серыми блоками. Диаграмма (a) имеет симметричный аналог, а диаграмма (b) содержит два дополнительных вклада, содержащих примесную линию, соединяющую функции Грина с энергией одного знака (Hikami box) [67]. Аналитическое выражение для сдвига T_c содержит суммирование по двум мацубаровским энергиям E и E' (см. дополнительный материал):

$$\frac{\delta T_c}{T_{c0}} = -\frac{2\pi\lambda}{\nu}\left(\frac{\lambda_{\rm ph}}{\lambda_{\rm BCS}}\right)^2 T^2 \sum_{E,E'>0}^{E_F} \frac{u(E)u(E')I_{E,E'}}{EE'}, \qquad (7)$$

где множитель $\lambda_{\text{ph}}/\lambda_{\text{BCS}}$ и логарифмическая функция $u(E) = \theta(\omega_D - E) - (\lambda \log \omega_D/T)/(1 + \lambda \log E_F/T)$ отвечают за эффекты перенормировок, которые можно описать путем включения в левую и правую вершину диаграммы лестниц из линий взаимодействия λ (см. дополнительный материал). В диффузионной области величина $I_{E,E'}$ определяется интегралом по двумерному импульсу в плоскости пленки $q_\parallel$ и суммой по поперечным модам оператора Лапласа с граничными условиями Неймана ($q_z = 2\pi m/d$, где $m = 0, 1, \ldots$), переносимыми линией взаимодействия (см. дополнительный материал):

$$I_{E,E'} = \frac{\tau}{d} \sum_{q_z} \int \frac{d\mathbf{q}_\parallel}{(2\pi)^2} \frac{f_q(E+E')^2 \left[3 - f_q(E+E')\right]}{1 - f_q(E+E')}. \tag{8}$$

Имея цель проследить за кроссовером в баллистическую область, мы написали купероны и диффузоны за рамками диффузионного приближения, выразив их через величину $f_q(\omega) = (ql)^{-1} \arctan[ql/(1+|\omega|\tau)]$, которая описывает одну ступень примесной лестницы при произвольных значениях ql и $\omega\tau$ и условиях $q \ll k_F$, $\omega \ll E_F$. Аналогичный подход был использован в работе [68] для вычисления флуктуационной проводимости при произвольной силе беспорядка.

Ведущий 2D диффузионный вклад возникает от моды с $q_z = 0$. Обрезая интеграл по q на импульсе $1/d$, а суммирование по энергиям – на ω_D, и принимая во внимание, что в реальных пленках, изучаемых в эксперименте, энергия Дебая ω_D по порядку величины совпадает с $\hbar/\tau_d$ [9], приходим к стандартному ответу (1) с $\tau_* \sim \tau_d$. При этом выделение 2D диффузионнного вклада из выражений (7) и (8) осложняется тем, что вклад других областей, вообще говоря, оказывается больше. Действительно, на масштабе $q \sim 1/d$ двумерное логарифмическое поведение сменяется линейно расходящимся за счет включения высших поперечных мод, делающих импульсный интеграл трехмерным. При желании можно оценить вклад 3D диффузионной области, введя искусственную обрезку при $q \sim 1/l$, что дает

$$\frac{\delta T_c^{(\text{diff, 3D})}}{T_{c0}} \sim -\frac{\lambda}{(k_F l)^2} \log^2 \frac{\omega_D}{T_{c0}}. \tag{9}$$

Этот вклад, содержащий на одну степень логарифма меньше, оказывается больше выражения (1) по параметру $d/l \gg 1$. Однако оказывается, что ничто не мешает в интеграле (8) уйти на еще большие импульсы, в баллистическую область $q \gg 1/l$. Примечательно, что в этой области подынтегральное выражение в уравнении (8) по-прежнему ведет себя как

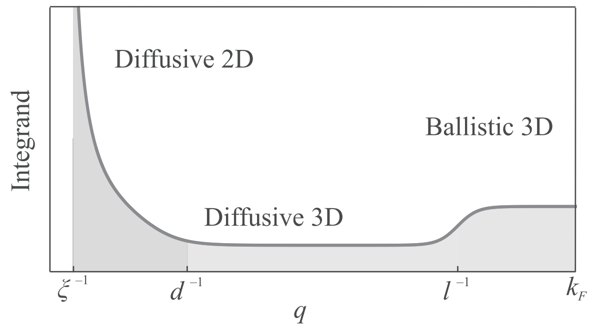


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематическое изображение зависимости подынтегрального выражения в уравнении (8) от q (при не очень больших $E + E'$). В области $q > 1/d$ оно слабо зависит от q, меняясь в $\pi^2/8$ раз при переходе от диффузионного к баллистическому характеру движения при $q \sim 1/l$

$1/q^2$, но с другим численным коэффициентом. Данное обстоятельство указывает на то, что основной вклад в интеграл происходит от импульсов порядка фермиевского: $q \sim k_F$. Эта область требует особого рассмотрения, которое будет проведено ниже. Схематически роль различных областей импульса проиллюстрирована на рис. 3. С точностью до логарифмических факторов, возникающих от суммирования по энергии, интеграл от показанной кривой определяет вклад соответствующих областей в сдвиг T_c.

4. Баллистический вклад. В этом разделе мы изучим баллистический вклад в сдвиг T_c, возникающий от процессов с передачей импульса больше $1/l$. В силу неравенства $l \ll d$ движение электронов можно считать трехмерным. Этот вклад описывается диаграммами, изображенными на рис. 2, где в диффузионных лестницах следует оставить единственную примесную линию, описывающую рассеяние на одной примеси. Для его аккуратного вычисления требуется уточнить выражение (8), отказавшись от использованного при его выводе приближении $q \ll k_F$.

Баллистический вклад может быть описан как поправка к голой (неперенормированной) константе электронного отталкивания в куперовском канале λ^c, в низшем приближении совпадающей с λ (рис. 4a). Ведущие поправки даются диаграммами, показанными на рис. 4b и c. В рассматриваемой модели точечного взаимодействия и дельта-коррелированного беспорядка вычисление этих диаграмм может быть проделано аналитически и приводит к, вообще говоря, зависящей от энергий поправке $\delta\lambda^c_{EE'}$ к константе взаимодействия в куперовском канале:

$$\frac{\delta\lambda^c_{E,E'}}{\lambda} = 2\frac{(\text{b}) + (\text{c})}{(\text{a})} = \frac{2[P(E,E') + P(E,-E')]}{(2\pi\nu\tau)^2 f_0(2E) f_0(2E')\lambda}, \tag{10}$$

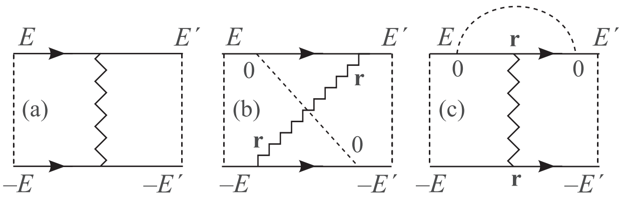


Рис. 4. (a) – Вершина электрон-электронного взаимодействия λ в куперовском канале и примесные линии, с которых начинаются купероны. (b), (c) – Диаграммы, описывающие ведущую поправку к вершине λ^c от баллистической области. Обе диаграммы имеют зеркальные аналоги

где слагаемые в скобках отвечают диаграммам (b) и (c), соответственно, а общий коэффициент 2 возник из-за наличия симметричных диаграмм. Множители $f_0(\omega) = 1/(1 + |\omega|\tau)$ в знаменателе возникают от интегрирования пары функций Грина на рис. 4a по импульсу (ступень диффузионной лестницы).

Вычисление блока $P(E, E')$ удобно проводить в координатном представлении [38]. Так как и электрон-электронное взаимодействие, и коррелятор беспорядка предполагаются точечными, аналитическое выражение содержит только одно интегрирование по расстоянию $\mathbf{r}$ между примесью и точкой взаимодействия, и мы получаем:

$$P(E, E') = \frac{\lambda}{2\pi\nu\tau} \int d\mathbf{r}\, G_+ G'_- [G_+ G_-][G'_+ G'_-], \quad (11)$$

где $G_\pm = G_{\pm E}(\mathbf{r})$ – усредненные по беспорядку функции Грина, а штрих относится к аргументу энергии E'. Квадратные скобки обозначают свертку в реальном пространстве: $[G_+ G_-] = \int G_+(\boldsymbol{\rho}) G_-(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho})\, d\boldsymbol{\rho}$. Как мы увидим ниже, интеграл по $\mathbf{r}$ в уравнении (11) сходится на масштабе $1/k_F$, что позволяет заменить функции Грина их значениями без беспорядка:

$$G_\pm = -\pi\nu \frac{e^{\pm i k_F r}}{k_F r}, \quad [G_+ G_-] = \frac{2\pi\nu\tau}{1 + 2|E|\tau} \frac{\sin k_F r}{k_F r}, \quad (12)$$

где при вычислении свертки использовано приближение $E, E' \ll E_F$.

Легко убедиться, что интеграл в уравнении (11) обращается в нуль для различных знаков энергий E и E', так что $P(E, E') \propto \theta(EE')$. Таким образом, в рамках рассматриваемой модели баллистические диаграммы на рис. 4b и c отличны от нуля при том же соотношении между знаками энергий E и E', что и диффузионные диаграммы на рис. 2a и b соответственно. Данное обстоятельство является *a priori* неочевидным, поскольку одиночный пунктир может соединять две функции Грина с одинаковым знаком энергии. Однако, как мы видим, в случае точечного взаимодействия и дельта-коррелированного беспорядка такие диаграммы зануляются и в баллистическом пределе.

Подставляя выражения (12) в уравнение (11) и далее в (10), обнаруживаем, что множители $(1 + 2|E|\tau)$ и $(1 + 2|E'|\tau)$ в знаменателях $[G_+ G_-]$ и $[G'_+ G'_-]$ сокращают такие же множители в $f_0(E)$ и $f_0(E')$ в уравнении (10). Единственная остающаяся зависимость $\delta\lambda^c_{E,E'}$ от энергий содержится в факторе $\theta(EE')$, которому пропорционален блок $P(E, E')$. Однако благодаря структуре выражения (10), она также пропадает. В итоге, поправка $\delta\lambda^c_{E,E'}$ оказывается не зависящей от энергий E и E':

$$\delta\lambda^c = \frac{\pi\nu\lambda}{2\tau} \int \frac{d\mathbf{r}}{(k_F r)^2} \left(\frac{\sin k_F r}{k_F r}\right)^2 = \frac{\pi\lambda}{2k_F l}. \quad (13)$$

Как и предполагалось, интеграл набирается с масштабов порядка длины волны электрона, что характерно для 3D мезоскопических эффектов [34, 69, 70].

Найденную поправку можно по аналогии с работой [36] рассматривать, как перенормировку вклада электрон-электронного взаимодействия в куперовский канал за счет рассеяния на фриделевских осцилляциях, вызванных примесями. Эта поправка описывает усиление электронного отталкивания, приводящее к увеличению кулоновского псевдопотенциала и, как следствие, к подавлению эффективной константы связи λ_{BCS}. Понижение T_c можно найти, заменяя λ на $\lambda + \delta\lambda^c$ и раскладывая уравнение (6) по $\delta\lambda^c$:

$$\frac{\delta T_c^{(\text{ball, 3D})}}{T_{c0}} = -\frac{\pi}{2} \frac{\lambda}{k_F l} \left(\frac{\log \omega_D / T_{c0}}{1 + \lambda \log E_F/\omega_D}\right)^2. \quad (14)$$

5. Роль упругих диаграмм. Помимо *неупругих* диаграмм, показанных на рис. 2 и 4, в которых линия взаимодействия соединяет верхнюю и нижнюю функции Грина, имеется также несколько так называемых *упругих* диаграмм, связанных с поправкой от взаимодействия в одноэлектронную функцию Грина. Как показал Финкельштейн [44], в случае 2D диффузии вклад в подавление T_c от этого класса диаграмм всегда мал: в случае $Dq^2 > \omega$ они содержат меньшую степень логарифма, а в случае $Dq^2 < \omega$ их вклад вместе со вкладом неупругих диаграмм сокращается при учете дополнительного семейства диаграмм, восстанавливающих калибровочную инвариантность теории. Последнее семейство диаграмм становится сублидирующим уже в диффузионной области при $Dq^2 > \omega$ и по этой причине не рассматривается в настоящей работе.

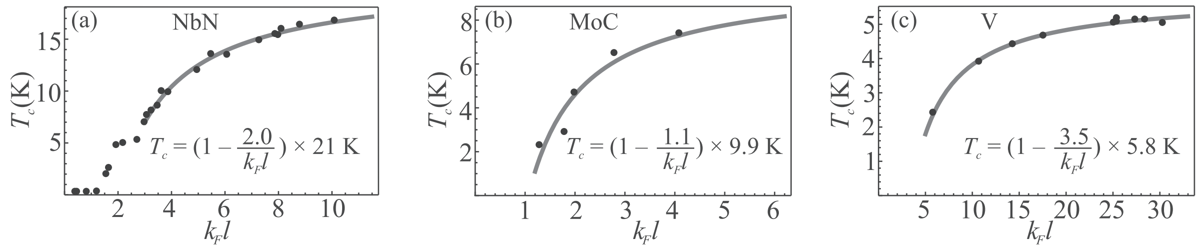


Рис. 5. (Цветной онлайн) Экспериментальные данные по зависимости T_c от $k_F l$ (точки) и их подгонка с помощью формулы (17) (сплошная линия) для сверхпроводящих пленок различной толщины и разного состава: (a) – NbN [8]; (b) – MoC [15]; (c) – V [1]

В случае электрон-электронного взаимодействия без запаздывания существует точное соотношение [40, 45, 46], связывающее вклад упругих диаграмм в подавление T_c и поправку к туннельной плотности состояний $\delta\nu(\varepsilon)$, которое для наших целей удобно представить (см. дополнительный материал) по аналогии с формулой (7) в виде

$$\frac{\delta T_c^{(\mathrm{elast})}}{T_c} = \left(\frac{\lambda_{\mathrm{ph}}}{\lambda_{\mathrm{BCS}}}\right)^2 T \sum_E \int d\varepsilon \, \frac{u^2(E)}{E^2+\varepsilon^2} \frac{\delta\nu(\varepsilon)}{\nu_0}. \quad (15)$$

Воспользуемся известными результатами для $\delta\nu(\epsilon)$, чтобы оценить поправку (15) от упругих диаграмм.

Поправка к туннельной плотности состояний 3D металла в диффузионной области ($|\varepsilon| < 1/\tau$) имеет вид $\delta\nu_{\mathrm{diff}}(\varepsilon)/\nu_0 \sim \lambda\sqrt{|\varepsilon|\tau}/(k_F l)^2$ [71]. Элементарное вычисление показывает, что соответствующий вклад в сдвиг T_c от этой области содержит префактор $1/(k_F l)^2$, что параметрически меньше, чем вклад баллистической области, описанный ниже.

Поправка к туннельной плотности состояний в 3D баллистической области ($|\varepsilon| > 1/\tau$) изучалась в работах [37, 38], где было показано, что она носит линейный характер и может быть несимметрична относительно энергии Ферми. В случае контактного взаимодействия и дельта-коррелированного беспорядка, а также при параболической дисперсии электронов она отлична от нуля только для энергий, лежащих ниже энергии Ферми, и имеет вид $\delta\nu_{\mathrm{ball}}(\varepsilon)/\nu_0 \sim \sim \lambda|\varepsilon|\theta(-\varepsilon)/(k_F l)$ [38]. Вычисление по формуле (15) приводит к результату

$$\frac{\delta T_c^{(\mathrm{ball,\ 3D,\ elast})}}{T_{c0}} \sim \frac{\lambda^3}{k_F l} \left(\frac{\log \omega_D/T_{c0}}{1+\lambda \log E_F/\omega_D}\right)^2, \quad (16)$$

что параметрически меньше ведущего вклада (14) при сделанном предположении $\lambda \ll 1$. Отсутствие вклада упругих процессов в первом порядке по λ связано с тем, что в отличие от выражения (7), содержащего две логарифмические суммы по E и E', интеграл (15) в 3D баллистической области не является логарифмическим. Утверждение о том, что упругие диаграммы не вносят вклад в ведущую поправку к сдвигу T_c, носит, по-видимому, общий характер и связано с тем, что туннельная плотность состояний не является термодинамической величиной.

6. Заключение. В настоящей работе мы исследовали влияние области трехмерного баллистического движения электронов на подавление критической температуры умеренно разупорядоченных сверхпроводящих пленок ($k_F l \gg 1$). Работая в модели точечного отталкивания и дельта-коррелированного беспорядка, мы вычислили пертурбативный вклад соответствующей области в подавление T_c, даваемый первым членом в уравнении (3). При сравнении с экспериментальными данными следует принимать во внимание, как то, что в реальных образцах $\lambda \sim 1/2$ за счет кулоновского взаимодействия, так и то, что численный множитель в уравнении (4) является специфическим для выбранной модели. В общем случае, следует ожидать, что баллистическая поправка к сдвигу T_c имеет вид $\delta T_c/T_{c0} = -\alpha/k_F l$ с числом $\alpha \sim 1$.

Второй член в формуле (3) описывает стандартный вклад в подавление T_c, происходящий из области двумерного диффузионного движения электронов, в котором логарифм набирается от масштабов толщины пленки d до масштабов ξ_0. Малость этого интервала для реальных пленок и относительно большое значение безразмерного кондактанса $g \sim (k_F l)(k_F d)$ делает его практически незаметным на фоне трехмерного баллистического вклада.

На рисунке 5 показаны результаты фитирования данных (T_c, $k_F l$) для сверхпроводящих пленок различной толщины из трех материалов с фермионным механизмом подавления зависимостью

$$T_c = (1 - \alpha/k_F l) T_{c0} \quad (17)$$

с подгоночными параметрами α и T_{c0}. Мы видим довольно неплохое соответствие, причем зависящее от материала значение α ожидаемо оказывается порядка единицы. Важно отметить, что представленные на рис. 5a данные для NbN получены на толстых пленках [8], для которых область двумерной диффузии вообще отсутствует (см. таблицу 1).

Основываясь на (i) наблюдаемом согласии экспериментальных данных с зависимостью (17), (ii) упомянутых выше внутренних противоречиях теории, приводящей к формуле (2) со свободным параметром γ, а также на (iii) выводах работы [59], свидетельствующих о преимущественной зависимости T_c от трехмерной проводимости, а не от двумерного кондактанса на квадрат, мы можем сделать следующий практически важный вывод:

В значительной части не очень тонких умеренно разупорядоченных сверхпроводящих пленок, где подавление сверхпроводимости происходит по фермионному сценарию, оно обусловлено приближением к порогу трехмерной андерсоновской локализации и контролируется параметром k_Fl. Эффекты двумерной диффузии, определяемые безразмерным кондактансом g, также присутствуют, но они дают лишь малую поправку на фоне трехмерных баллистических эффектов.

Авторы признательны И. С. Бурмистрову, М. В. Фейгельману, А. М. Финкельштейну, П. Сабо, П. Самюэли, К. С. Тихонову и П. М. Островскому за плодотворные обсуждения. Данная работа поддержана грантом Российского научного фонда # 20-12-00361.

---

1. A. A. Teplov, ZhETF **71**, 802 (1976) [Sov. Phys. JETP **44**, 422 (1976)].
2. Z. Wang, A. Kawakami, Y. Uzawa, and B. Komiyama, J. Appl. Phys. **79**, 7837 (1996).
3. A. Semenov, B. Günther, U. Böttger, H.-W. Hübers, H. Bartolf, A. Engel, A. Schilling, K. Ilin, M. Siegel, R. Schneider, D. Gerthsen, and N. A. Gippius, Phys. Rev. B **80**, 054510 (2009).
4. Y. Noat, V. Cherkez, C. Brun, T. Cren, C. Carbillet, F. Debontridder, K. Ilin, M. Siegel, A. Semenov, H.-W. Hübers, and D. Roditchev, Phys. Rev. B **88**, 014503 (2013).
5. K. Makise, T. Odou, S. Ezaki, T. Asano, and B. Shinozaki, Materials Research Express **2**, 106001 (2015).
6. L. Kang, B. B. Jin, X. Y. Liu, X. Q. Jia, J. Chen, Z. M. Ji, W. W. Xu, P. H. Wu, S. B. Mi, A. Pimenov, Y. J. Wu, and B. G. Wang, J. Appl. Phys. **109**, 033908 (2011).
7. S. Ezaki, K. Makise, B. Shinozaki, T. Odo, T. Asano, H. Terai, T. Yamashita, S. Miki, and Z. Wang, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 475702 (2012).
8. M. Chand, G. Saraswat, A. Kamlapure, M. Mondal, S. Kumar, J. Jesudasan, V. Bagwe, L. Benfatto, V. Tripathi, and P. Raychaudhuri, Phys. Rev. B **85**, 014508 (2012).
9. C. Carbillet, V. Cherkez, M. A. Skvortsov, M. V. Feigel'man, F. Debontridder, L. B. Ioffe, V. S. Stolyarov, K. Ilin, M. Siegel, C. Noûs, D. Roditchev, T. Cren, and C. Brun, Phys. Rev. B **102**, 024504 (2020).
10. B. Sacépé, C. Chapelier, T. I. Baturina, V. M. Vinokur, M. R. Baklanov, and M. Sanquer, Phys. Rev. Lett. **101**, 157006 (2008).
11. J. M. Graybeal and M. R. Beasley, Phys. Rev. B **29**, 4167 (1984).
12. D. Lotnyk, O. Onufriienko, T. Samuely, O. Shylenko, V. Komanický, P. Szabó, A. Feher, and P. Samuely, Low Temp. Phys. **43**, 919 (2017).
13. N. Ya. Fogel, E. I. Buchstab, A. S. Pokhila, A. I. Erenburg, and V. Langer, Phys. Rev. B **53**, 71 (1996).
14. A. Banerjee, L. J. Baker, A. Doye, M. Nord, R. M. Heath, K. Erotokritou, D. Bosworth, Z. H. Barber, I. MacLaren, and R. H. Hadfield, Supercond. Sci. Tech. **30**, 084010 (2017).
15. P. Szabó, T. Samuely, V. Hašková, J. Kačmarčík, M. Žemlička, M. Grajcar, J. G. Rodrigo, and P. Samuely, Phys. Rev. B **93**, 014505 (2016).
16. H. Raffy, R. B. Laibowitz, P. Chaudhari, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **28**, 6607 (1983).
17. D. Shahar and Z. Ovadyahu, Phys. Rev. B **46**, 10917 (1992).
18. M. Strongin, R. S. Thompson, O. F. Kammerer, and J. E. Crow, Phys. Rev. B **1**, 1078 (1970).
19. D. B. Haviland, Y. Liu, and A. M. Goldman, Phys. Rev. Lett. **62**, 2180 (1989).
20. M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **65**, 923 (1990).
21. V. F. Gantmakher and V. T. Dolgopolov, Usp. Fiz. Nauk **180**, 3 (2010) [Physics-Uspekhi **53**, 1 (2010)].
22. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **92**, 014506 (2015).
23. A. Kapitulnik, S. A. Kivelson, and B. Spivak, Rev. Mod. Phys. **91**, 011002 (2019).
24. B. Sacépé, M. Feigel'man, and T. M. Klapwijk, Nat. Phys. **16**, 734 (2020).
25. M. V. Feigel'man, A. I. Larkin, and M. A. Skvortsov, Phys. Rev. Lett. **86**, 1869 (2001).
26. M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, V. E. Kravtsov, and E. A. Yuzbashyan, Phys. Rev. Lett. **98**, 027001 (2007).
27. M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, V. E. Kravtsov, and E. Cuevas, Ann. Phys. **325**, 1390 (2010).
28. B. Sacépé, T. Dubouchet, C. Chapelier, M. Sanquer, M. Ovadia, D. Shahar, M. V. Feigel'man, and L. B. Ioffe, Nat. Phys. **7**, 239 (2011).

29. B. L. Al'tshuler and A. G. Aronov, ZhETF **50**, 968 (1979) [Sov. Phys. JETP **50**, 968 (1979)].
30. B. L. Altshuler and A. G. Aronov, *Electron-electron interaction in disordered systems*, ed. by A. L. Efros and M. Pollak, North-Holland, Amsterdam (1985).
31. P. W. Anderson, K. A. Muttalib, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. B **28**, 117 (1983).
32. H. Fukuyama, H. Ebisawa, and S. Maekawa, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 3560 (1984).
33. B. Rabatin and R. Hlubina, Phys. Rev. B **98**, 184519 (2018).
34. T. R. Kirkpatrick and D. Belitz, Phys. Rev. B **34**, 2168 (1986).
35. P. W. Adams, D. A. Browne, and M. A. Paalanen, Phys. Rev. B **45**, 8837 (1992).
36. A. M. Rudin, I. L. Aleiner, and L. I. Glazman, Phys. Rev. B **55**, 9322 (1997).
37. A. A. Koulakov, Phys. Rev. B **62**, 6858 (2000).
38. D. S. Antonenko and M. A. Skvortsov, Phys. Rev. B **101**, 064204 (2020).
39. B. Keck and A. Schmid, J. Low Temp. Phys. **24**, 611 (1976).
40. D. Belitz, J. Phys. F: Metal Physics **15**, 2315 (1985).
41. D. Belitz, Phys. Rev. B **35**, 1636 (1987).
42. D. Belitz, Phys. Rev. B **35**, 1651 (1987).
43. D. Belitz, Phys. Rev. B **36**, 47 (1987).
44. A. M. Finkel'stein, Physica B: Condensed Matter **197**, 636 (1994).
45. S. Maekawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 1380 (1982).
46. S. Maekawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 1352 (1983).
47. Yu. N. Ovchinnikov, ZhETF **64**, 719 (1973) [Sov. Phys. JETP **37**, 366 (1973)].
48. H. Takagi and Y. Kuroda, Solid State Commun. **41**, 643 (1982).
49. H. Ebisawa, H. Fukuyama, and S. Maekawa, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 2257 (1985).
50. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
51. L. P. Gorkov, and A. I. Larkin, and D. E. Khmelnitsky, Pis'ma ZhETF **30**, 248 (1979) [Sov. Phys. JETP Lett. **30**, 228 (1979)].
52. A. M. Finkel'stein, Pis'ma ZhETF **45**, 37 (1987) [JETP Lett. **45**, 46 (1987)].
53. M. V. Feigel'man and M. A. Skvortsov, Phys. Rev. Lett. **109**, 147002 (2012).
54. H. Kim, A. Ghimire, S. Jamali, T. K. Djidjou, J. M. Gerton, and A. Rogachev, Phys. Rev. B **86**, 024518 (2012).
55. K. B. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos*, Cambridge University Press, Cambridge, England (1996).
56. A. M. Finkelstein, *Electron Liquid in Disordered Conductors*, in *Soviet scientific reviews*, ed. by I. M. Khalatnikov, Harwood Academic Publishers, Glasgow (1990), v. 14.
57. I. S. Burmistrov, ZhETF **156**, 724 (2019) [JETP **129**, 669 (2019)].
58. F. Couedo, O. Crauste, L. Bergé, Y. Dolgorouky, C. Marrache-Kikuchi, and L. Dumoulin, J. Phys.: Conf. Ser. **400**, 022011 (2012).
59. Y. Ivry, C.-S. Kim, A. E. Dane, D. De Fazio, A. N. McCaughan, K. A. Sunter, Q. Zhao, and K. K. Berggren, Phys. Rev. B **90**, 214515 (2014).
60. C. Brun, T. Cren, V. Cherkez, F. Debontridder, S. Pons, D. Fokin, M. C. Tringides, S. Bozhko, L. B. Ioffe, B. L. Altshuler, and D. Roditchev, Nat. Phys. **10**, 444 (2014).
61. N. N. Bogoliubov, V. V. Tolmachev, and D. V. Shirkov, *A New Method in the Theory of Superconductivity*, Consultants Bureau, N.Y. (1959).
62. P. Morel and P. W. Anderson, Phys. Rev. **125**, 1263 (1962).
63. W. L. McMillan, Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
64. P. W. Anderson, Phys. Chem. Sol. **11**, 26 (1959).
65. A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, ZhETF **35**, 1558 (1958) [Sov. Phys. JETP **8**, 1090 (1959)].
66. A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, ZhETF **36**, 319 (1959) [Sov. Phys. JETP **9**, 220 (1959)].
67. S. Hikami, Phys. Rev. B **24**, 2671 (1981).
68. N. A. Stepanov and M. A. Skvortsov, Phys. Rev. B **97**, 144517 (2018).
69. B. A. van Tiggelen and S. E. Skipetrov, Phys. Rev. E **73**, 045601 (2006).
70. I. E. Smolyarenko and B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **55**, 10451 (1997).
71. B. L. Altshuler and A. G. Aronov, Solid State Commun. **30**, 115 (1979).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 475 – 481

Зависимости транспортного времени рассеяния и квантового времени жизни от концентрации 2D электронного газа в селективно-легированных одиночных GaAs квантовых ямах с короткопериодными AlAs/GaAs сверхрешеточными барьерами

А. А. Быков[+*1)], *И. С. Стрыгин*[+], *А. В. Горан*[+], *Д. В. Номоконов*[+], *А. К. Бакаров*[+]

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

[*]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 26 августа 2020 г.
После переработки 10 сентября 2020 г.
Принята к публикации 10 сентября 2020 г.

Исследованы зависимости транспортного времени рассеяния (τ_t), квантового времени жизни (τ_q) и их отношения (τ_t/τ_q) от концентрации 2D электронного газа (n_e) в селективно-легированных одиночных GaAs квантовых ямах с короткопериодными AlAs/GaAs сверхрешеточными барьерами. Экспериментальные зависимости объясняются рассеянием электронов на удаленных ионизированных донорах с эффективной 2D концентрацией n_R^* и фоновых примесях с 3D концентрацией n_B. Получено выражение для $n_R^*(n_e)$, учитывающее роль локализованных в AlAs слоях X-электронов в подавлении рассеяния на случайном потенциале удаленных доноров. Показано, что наблюдаемое в эксперименте резкое возрастание τ_t и τ_q с увеличением n_e выше некоторого критического значения n_{ec} обусловлено уменьшением n_R^*. Установлено, что падение τ_t/τ_q в области $n_e > n_{ec}$ обусловлено тем, что в исследуемой 2D системе с уменьшением n_R^* рассеяние на случайном потенциале фоновой примеси более существенно ограничивает рост τ_t, чем τ_q.

DOI: 10.31857/S1234567820190076

Высокоподвижные гетероструктуры GaAs/AlGaAs со времени их создания и до настоящего времени остаются объектом всестороннего изучения и дальнейшего совершенствования [1–3]. Высокая подвижность (μ) 2D электронного газа в таких гетероструктурах достигается методом селективного легирования, суть которого заключается в пространственном разделении областей транспорта носителей заряда и легирования. В традиционном гетеропереходе GaAs/AlGaAs области транспорта заряда и легирования разделяются слоем нелегированного AlGaAs толщиной d_S, который называют спейсером. Чем больше d_S, тем меньше рассеяние на случайном потенциале удаленной легирующей примеси, и, соответственно, выше μ в GaAs квантовой яме. Однако увеличение d_S неизбежно ведет к уменьшению концентрации 2D электронного газа (n_e). Для получения низкотемпературной подвижности $\mu > 1000\,\text{м}^2/\text{Вс}$ в селективно-легированных гетеропереходах GaAs/AlGaAs оптимальными являются $d_S \sim 100\,\text{нм}$ и $n_e \sim 3 \cdot 10^{15}\,\text{м}^{-2}$ [2].

Увеличение концентрации n_e в высокоподвижных гетеропереходах GaAs/AlGaAs за счет уменьшения d_S ведет к уменьшению μ, что не позволяет получать одновременно высокие n_e и μ в таких гетероструктурах. Для реализации высокоподвижных 2D систем с "тонким" спейсером ($d_S < 100$ нм) и высокой концентрацией ($n_e > 3 \cdot 10^{15}\,\text{м}^{-2}$) было предложено использовать в качестве барьеров к одиночной GaAs квантовой яме (SQW – *single quantum well*) короткопериодные AlAs/GaAs сверхрешетки (SPSL – *short-period superlattices*) [4]. Схематическое изображение такой гетероструктуры представлено на рис. 1. Подавление рассеяния электронов на случайном потенциале легирующей примеси достигается в этом случае не только пространственным разделением областей легирования и транспорта, но еще и экранирующим действием X-электронов, локализованных в AlAs слоях [4–7]. Такой способ подавления рассеяния на случайном потенциале позволяет получать в SQW с SPSL барьерами высокоподвижный 2D электронный газ с высокой концентрацией, что расширяет экспериментальные возможности для

1)e-mail: bykov@isp.nsc.ru

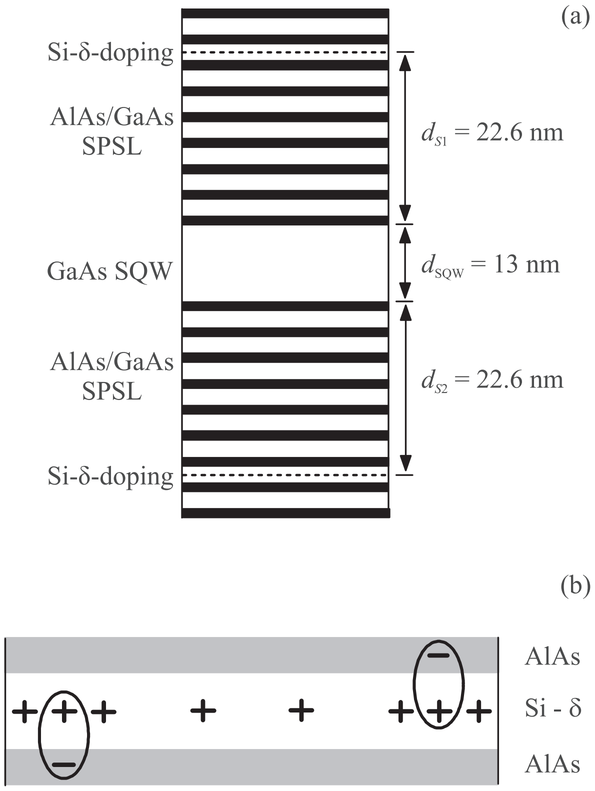


Рис. 1. (a) – Схематический вид одиночной GaAs квантовой ямы с боковыми барьерами из короткопериодных AlAs/GaAs сверхрешеток. (b) – Увеличенный вид участка Si-δ-легированного слоя в узкой GaAs квантовой яме с прилегающими к ней AlAs слоями. Эллипсами изображены компактные диполи, образованные положительно заряженными донорами в Si-δ-легированном слое и X-электронами в AlAs слоях [6, 7]

изучения фундаментальных свойств полупроводниковых систем пониженной размерности [8–11].

Актуальность исследования механизмов рассеяния электронов в GaAs SQW с AlAs/GaAs SPSL барьерами обусловлена тем, что такие гетероструктуры позволяют получать 2D электронный газ с уникальным сочетанием таких параметров, как n_e, μ и квантовое время жизни τ_q. В таких структурах n_e существенно выше, а μ существенно ниже, чем в современных гетероструктурах с ультравысокой μ [3, 6, 7]. При этом, несмотря на не ультравысокую μ, величина τ_q в SQW с SPSL барьерами имеет высокое значение, что в сочетании с высокой n_e позволяет получать на таких 2D системах общезначимые фундаментальные результаты [8–11]. К настоящему времени показано, что примесное рассеяние в селективно-легированной GaAs SQW эффективно подавляется X-электронами, локализованными в SPSL барьерах вблизи Si-δ-легированных слоев [4]. Также установлено, что в SQW с SPSL барьерами не возникает шунтирующая проводимость легированных слоев. В таких гетероструктурах была обнаружена весьма необычная зависимость $\mu(n_e)$: подвижность резко возрастает при увеличении n_e выше некоторой критической величины [4]. Зависимость $\mu(n_e)$ была качественно объяснена экранирующей ролью X-электронов, но количественная интерпретация этого яркого экспериментального результата до сих пор отсутствует.

Роль X-электронов в подавлении рассеяния на случайном потенциале заряженных примесей в современных селективно-легированных GaAs/AlGaAs гетероструктурах с "толстым" спейсером и ультравысокой подвижностью была недавно проанализирована аналитически и численно в работах [6, 7]. В таких структурах в качестве спейсера, как и в традиционных гетеропереходах, используется слой нелегированного AlGaAs, а источником свободных электронов является δ-легированная узкая GaAs квантовая яма с прилегающими к ней слоями AlAs [3, 6, 7]. Схематическое изображение участка Si-δ-легированного слоя в узкой GaAs квантовой яме с прилегающими к ней слоями AlAs представлено на рис. 1b. В рамках предложенной модели X-электроны образуют с ионизированными донорами компактные диполи и тем самым уменьшают концентрацию положительно заряженных примесей, что приводит к подавлению случайного рассеивающего потенциала. Базируясь на результатах работ [6, 7], мы предложили способ аналитического описания зависимости концентрации ионизированных доноров от n_e с помощью модельной функции, которая позволяет довольно точно описывать экспериментальные зависимости $\mu(n_e)$, первоначально полученные в работах [4, 5].

Рассеяние электронов в неидеальных 2D системах Ферми приводит не только к ограничению подвижности $\mu = e\tau_t/m^*$, но еще и к квантово-механическому уширению одночастичных электронных состояний $\Gamma = \hbar/2\tau_q$, где τ_t – транспортное время рассеяния, m^* – эффективная масса электрона, а τ_q – квантовое время жизни. В общем случае τ_q и τ_t не являются эквивалентными и определяются следующими соотношениями:

$$1/\tau_q = \int_0^{\pi} P(\theta)d\theta, \tag{1}$$

$$1/\tau_t = \int_0^{\pi} P(\theta)(1-\cos\theta)d\theta, \tag{2}$$

где θ – угол между волновыми векторами Ферми до акта рассеяния электрона и после него, $P(\theta)$ – величина, пропорциональная вероятности рассеяния на угол θ. Из (1) и (2) следует, что τ_q определяется процессами рассеяния на все углы θ, а τ_t, за счет множителя $(1 - \cos\theta)$, определяется преимущественно процессами рассеяния на большие углы.

В высокоподвижных гетероструктурах τ_t определяется несколькими механизмами рассеяния [12–17]. Для 2D электронного газа с высокими μ и n_e транспортное время рассеяния при низких температурах можно выразить как:

$$\tau_t = 1/(1/\tau_{tR} + 1/\tau_{tB}), \tag{3}$$

где τ_{tR} – транспортное время рассеяния на удаленных ионизированных донорах, а τ_{tB} – транспортное время рассеяния на заряженных фоновых примесях. Величины τ_{tR} и τ_{tB} задаются следующими теоретическими соотношениями [13, 15, 16]:

$$\tau_{tR} = (8m^*/\pi\hbar)(k_F d_R)^3/n_R^*, \tag{4}$$

$$\tau_{tB} \cong (2\pi\hbar^3/m^*)(2\epsilon_0\epsilon/e^2)^2 k_F^3/n_B, \tag{5}$$

где $k_F = (2\pi n_e)^{1/2}$, $d_R = (d_S + d_{\mathrm{SQW}}/2)$, d_{SQW} – толщина SQW, n_R^* – эффективная 2D концентрация удаленных ионизированных доноров, ϵ_0 – электрическая постоянная, ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость SQW и SPSL барьеров, n_B – 3D концентрация заряженных фоновых примесей.

Величина τ_q в SQW с SPSL барьерами определяется преимущественно малоугловым рассеянием [4, 5]. В этом случае τ_q можно выразить соотношением [13, 16]:

$$\tau_q \cong \tau_{qR} = (2m^*/\pi\hbar)(k_F d_R)/n_R^*, \tag{6}$$

где τ_{qR} – квантовое время жизни при рассеянии на случайном потенциале удаленной примеси. В выражениях (4) и (6) мы используем в качестве 2D концентрации заряженных доноров n_R их эффективную концентрацию n_R^*, которая учитывает изменение концентрации удаленных ионизованных доноров при их связывании с X-электронами с образованием компактных диполей. Таким образом, мы учитываем в формулах для τ_{tR} и τ_{qR} роль экранировки случайного потенциала удаленных доноров X-электронами, локализованными в AlAs слоях. Такой подход обусловлен тем, что к настоящему времени отсутствует теория, описывающая зависимости $\tau_{tR}(n_e)$ и $\tau_{qR}(n_e)$ во всем диапазоне изменения f – доли заполнения удаленных положительно заряженных доноров X-электронами [6, 7].

Изучаемые гетероструктуры выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на (100) GaAs подложках и представляли собой GaAs SQW шириной $d_{\mathrm{SQW}} = 13$ нм. В качестве барьеров к SQW использовались AlAs/GaAs SPSL [4]. Поставщиками свободных электронов служили два Si-δ-легированных слоя, которые располагались в узких GaAs квантовых ямах в SPSL барьерах на расстоянии $d_S = 22.6$ нм от краев SQW. Холловская концентрация и подвижность в изучаемых образцах при температуре $T = 4.2$ К составляли $n_H \approx 9.3 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$ и $\mu \approx 109$ м^2/Вс соответственно. Исследования проводились при $T = 4.2$ К в магнитных полях $B < 2$ Тл на мостиках шириной $W = 50$ мкм и длиной $L = 250$ мкм (вставка к рис. 2a). Для изучения зависимостей $\rho_{xy}(n_e)$ и $\rho_{xx}(n_e)$ холловские мостики снабжались TiAu затворами Шоттки. Сопротивление ρ_{xy} и ρ_{xx} измерялось на переменном токе I_{ac} частотой менее 1 кГц и амплитудой менее 1 мкА.

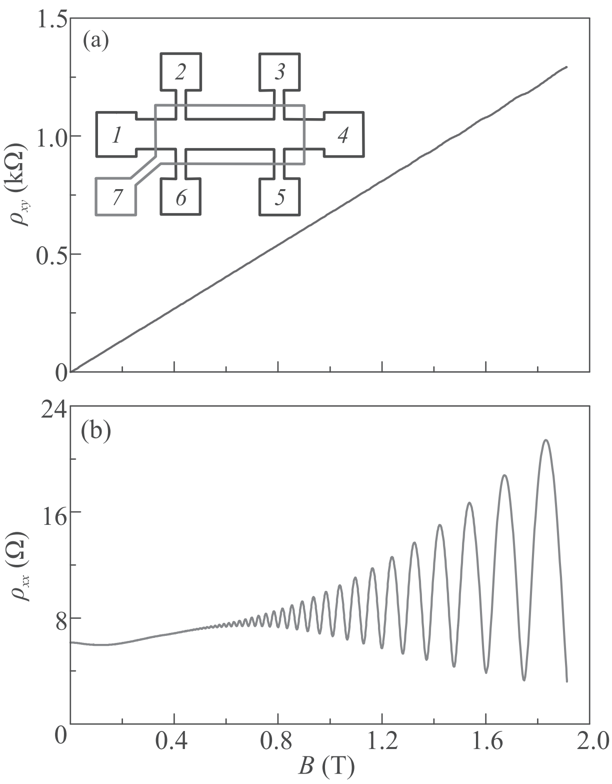


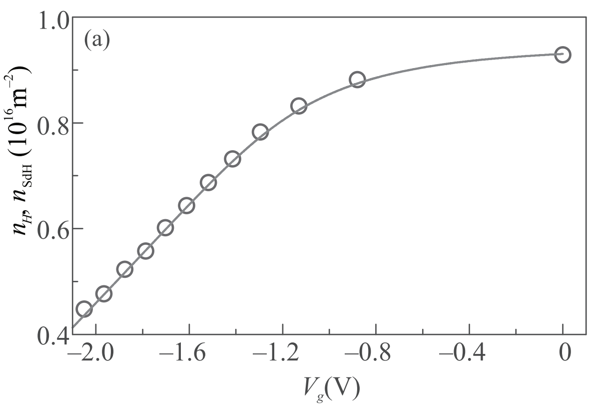
Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Экспериментальная зависимость $\rho_{xy}(B)$ при $T = 4.2$ К для $V_g = 0$. На вставке схематически изображен мостик Холла. *1–6* – омические контакты к 2D электронному газу; *7* – полевой затвор Шоттки. (b) – Экспериментальная зависимость $\rho_{xx}(B)$ при $T = 4.2$ К для $V_g = 0$

На рисунке 2 представлены экспериментальные зависимости $\rho_{xy}(B)$ и $\rho_{xx}(B)$. Зависимость $\rho_{xy}(B)$ в диапазоне $B < 1.5$ Тл является линейной. Наклон этой зависимости определяется холловской концентрацией, что позволяет определять ее величину: $n_H = B/e\rho_{xy}$. Отклонение $\rho_{xy}(B)$ от линейной зависимости в области полей $B > 1.5$ Тл обусловлено квантованием Ландау, которое в зависимости $\rho_{xx}(B)$ приводит к осцилляциям Шубникова–де Гааза (ШдГ). Период осцилляций ШдГ в обратном магнитном поле определяется концентрацией 2D электронного газа в GaAs квантовой яме: $n_{\text{SdH}} = 2(e/h)f_{\text{SdH}}$, где f_{SdH} – частота осцилляций ШдГ. Амплитуда осцилляций ШдГ определяется соотношением [14]: $\Delta\rho_{xx} = 4\rho_0 X(T)\exp(-\pi/\omega_c\tau_q)$, где $\rho_0 = \rho_{xx}(B = 0)$, $X(T) = (2\pi^2 k_B T/\hbar\omega_c)/\sinh(2\pi^2 k_B T/\hbar\omega_c)$ – температурный фактор, а $\omega_c = eB/m^*$ – циклотронная частота. Это соотношение мы использовали для определения τ_q из экспериментальных зависимостей $\Delta\rho_{xx}(1/B)$.

На рисунке 3a представлены зависимости n_H и n_{SdH} от затворного напряжения V_g. Концентрация n_H вычислялась из ρ_{xy} в магнитном поле $B = 0.5$ Тл, а n_{SdH} – из периода осцилляций ШдГ. При наличии проводящего шунта ρ_{xy} будет определяться суммарной концентрацией свободных носителей заряда в GaAs SQW и δ-легированных слоях в SPSL (шунте). В этом случае n_H будет равна сумме концентраций в GaAs SQW и в селективно-легированной AlAs/GaAs SPSL. Она должна быть больше n_{SdH}, однако величины n_H и n_{SdH} равны с точностью $\sim 1\,\%$ во всем исследуемом диапазоне V_g. Таким образом, можно принять, что $n_H \approx n_{\text{SdH}} \equiv n_e$. Это означает, что шунтирующая проводимость в исследуемых образцах много меньше проводимости 2D электронного газа в GaAs SQW, и ее ролью в наших исследованиях можно пренебречь [18]. На рисунке 3b окружностями изображена экспериментальная зависимость $\mu(n_e)$, а сплошной линией – теоретическая зависимость $\mu \propto n_e^{3/2}$. Отклонение экспериментальной зависимости от $\mu \propto n_e^{3/2}$ качественно объясняется экранирующей ролью X-электронов, локализованных в AlAs слоях [4, 5]. Однако количественный анализ экспериментальной зависимости подвижности от n_e в области отклонения от $\mu \propto n_e^{3/2}$ к настоящему времени отсутствует [4–7].

Исследуемая GaAs SQW с AlAs/GaAs SPSL барьерами является симметрично легированной. Концентрация Si доноров в каждом из δ-легированных слоев, расположенных на расстоянии $d_S \equiv d_{S1} = d_{S2}$ от краев SQW, составляла $\sim 2 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$. Это означает, что общая концентрация положительно заряженных Si доноров $n_R \leqslant 4 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$. При $V_g = 0$ концентрация $n_{\text{SdH}} \sim 9.3 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$. Из этого следует, что при $V_g = 0$ концентрация электронов в AlAs слоях, прилегающих к δ-слоям, составляет порядка $3 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$. Так как $n_{\text{SdH}} \approx n_H$, то все эти электроны локализованы, и их вкладом в проводимость можно пренебречь. Модель такой локализации была недавно предложена в работах [6, 7]. При подаче V_g на затвор мы изменяем не только n_{SdH}, но еще и концентрацию X-электронов, локализованных в AlAs слоях, расположенных вблизи верхнего δ-слоя. При этом ситуация в AlAs слоях, прилегающих к нижнему δ-слою, остается неизменной.

Зависимость $n_e(V_g)$, приведенная на рис. 3a, имеет два характерных участка. В диапазоне V_g от 0 до -1.5 В она является нелинейной. Такое поведение обусловлено тем, что в этом диапазоне напряжений под действием V_g изменяется не только n_e в SQW, но еще и концентрация X-электронов, локализованных в SPSL барьерах. Это означает, что на нелинейном участке зависимости $n_e(V_g)$ экранировка случайного потенциала легирующей примеси изменяется, и его нельзя считать фиксированным. В этом случае зависимость $\mu(n_e)$ определяется не только измене-



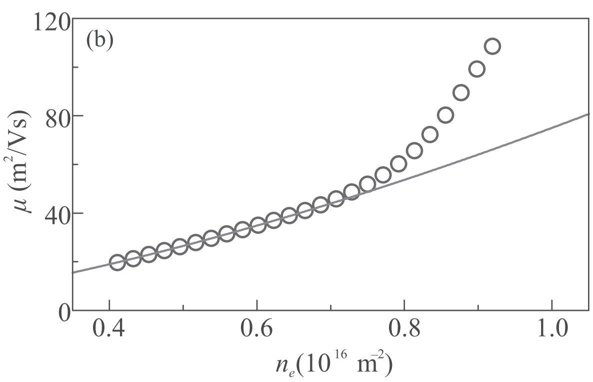


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Экспериментальные зависимости $n_H(V_g)$ и $n_{\text{SdH}}(V_g)$ при $T = 4.2$ К: непрерывная линия – n_H; окружности – n_{SdH}. (b) – Зависимости $\mu(n_e)$: окружности – экспериментальные данные при $T = 4.2$ К; непрерывная линия – расчетная зависимость по формуле: $\mu \propto n_e^{3/2}$

нием $k_F = (2\pi n_e)^{1/2}$, но еще и изменением концентрации рассеивающих центров, а также корреляций в их пространственном расположении и в событиях малоуглового рассеяния. Это одна из причин того, что $\mu(n_e)$ в диапазоне n_e от 0.65 до $0.93 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$ не описывается функцией $\mu \propto n_e^{3/2}$.

В диапазоне V_g от -1.5 до -2.1 В зависимость $n_e(V_g)$ является линейной. Линейная зависимость $n_e(V_g)$ позволяет считать, что емкость C_{17} между затвором Шоттки и омическим контактом к проводящим слоям гетероструктуры (емкость между контактами *1* и *7* на вставке к рис. 2a) в области $V_g < -1.5$ В не зависит от V_g, что полностью согласуется с результатами и выводами работы [4]. Мы, как и авторы этой работы, считаем, что это отражает неизменность концентрации ионизированных доноров в этой области затворных напряжений. Сравнение величины емкости, измеренной из наклона зависимости $n_e(V_g)$ на линейном участке, с величиной геометрической емкости показало, что они отличаются в исследуемых образцах приблизительно на 4 %, что соответствует экспериментальной погрешности. Таким образом, мы можем сделать вывод, что на линейном участке зависимости $n_e(V_g)$ рассеивающий потенциал не изменяется. В этом случае $\mu(n_e)$ определяется только лишь изменением k_F и хорошо описывается функцией $\mu \propto n_e^{3/2}$. Экспериментальная зависимость $\mu(n_e)$ в интервале n_e от 0.4 до $0.65 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$ полностью согласуется с теоретическими соотношениями (4) и (5). В этом случае можно считать, что τ_t определяется рассеянием на двух типах случайного потенциала – удаленной легирующей примеси и фоновой примеси. Однако из сравнения экспериментальных данных с теорией разделить вклады в τ_t от каждого из двух типов случайного рассеивающего потенциала и вычислить величины n_R^* и n_B не удается, так как оба типа рассеивающего потенциала дают одинаковую зависимость от n_e.

Другим параметром, характеризующим процессы рассеяния в вырожденных электронных системах, является τ_q. В исследуемой 2D системе τ_q определяется в основном малоугловым рассеянием [4, 5]. В этом случае $\tau_q \approx \tau_{qR}$, и для анализа экспериментальной зависимости $\tau_q(n_e)$ можно использовать соотношение (6). Экспериментальная зависимость $\tau_q(n_e)$ представлена на рис. 4a окружностями. Она описывается формулой (6) для параметра $n_R^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$ лишь в интервале концентраций $n_e < n_{ec} \approx 6.5 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$. В этом случае концентрация X-электронов (n_{XR}), локализованных вблизи верхнего δ-легированного слоя, равна нулю. Величина n_R^* в интервале $n_e < n_{ec}$ принимает максимально возможное (и фиксированное в этом интервале) значение $n_R^* = n_{RI}^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$. В области $n_e > n_{ec}$ затворное напряжение изменяет не только n_e, но еще и n_{XR}. В этом случае величина $n_R^* = n_{RI}^* - n_{XR}$ и ее нельзя считать фиксированной, т.е. каждому значению n_e соответствует свое значение n_R^*. Используя формулу (6), мы вычислили для каждого экспериментального значения τ_q величину n_R^*, и таким образом получили зависимость отношения n_R^*/n_{RI}^* от n_e. Эта зависимость представлена на рис. 4b окружностями.

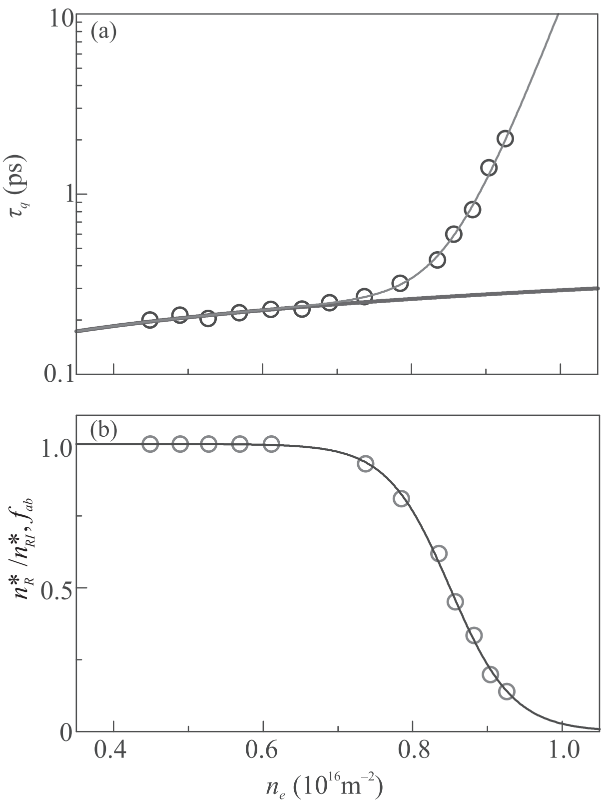


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости $\tau_q(n_e)$: окружности – экспериментальные данные при $T = 4.2$ К; толстая непрерывная линия – расчет по формуле (6) для $n_R^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$; тонкая непрерывная линия – расчет по формуле (6) для $n_R^* = n_{RI}^* \cdot f_{ab}$, где $n_{RI}^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$. (b) – Зависимости n_R^*/n_{RI}^* и f_{ab} от n_e: окружности – значения n_R^*/n_{RI}^*, вычисленные из экспериментальной зависимости $\tau_q(n_e)$ по формуле (6); непрерывная линия – расчет по формуле (7) для $a = 8.5 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$ и $b = 4.2 \cdot 10^{14}$ м$^{-2}$

Сплошной линией на рис. 4b представлена зависимость отношения n_R^*/n_{RI}^* от n_e, рассчитанная по следующей формуле:

$$n_R^*/n_{RI}^* = 1/\{\exp[(n_e - a)/b] + 1\} \equiv f_{ab}(n_e), \qquad (7)$$

где a и b – подгоночные параметры. По своей сути f_{ab} – это доля ионизованных доноров, не заполненных X-электронами. При этом функция $f_{ab}(n_e = a) = 0.5$, $f_{ab}(n_e = a-2b) \sim 1$, а $f_{ab}(n_e = a+2b) \sim 0$, т.е. $f_{ab}(n_e)$ спадает от 1 до 0 на интервале концентраций $\Delta n_e \sim 4b$. На рисунке 4а сплошной линией представлена зависимость $\tau_q(n_e)$, рассчитанная по формуле (6), в которой $n_R^* = n_{RI}^* f_{ab}(n_e)$. Наблюдается очень хорошее согласие экспериментальных данных с расчетной зависимостью. Следует отметить, что $f_{ab} = (1 - f)$, где $f = n_{XR}/n_{RI}^*$ – доля Si доноров, образовавших компактные диполи с X-электронами [6, 7].

На рисунке 5а представлены экспериментальная и расчетная зависимости $\tau_t(n_e)$. Расчет проводился в предположении, что $\tau_t = 1/(1/\tau_{tR} + 1/\tau_{tB})$. Величина τ_{tR} рассчитывалась по формуле (4), в которой $n_R^* = n_{RI}^* f_{ab}(n_e)$, а τ_{tB} – по формуле (5), в которой $n_B = 2.83 \cdot 10^{21}$ м$^{-3}$. Сопоставление экспериментальной зависимости $\tau_t(n_e)$ с расчетной кривой демонстрирует полное согласие. Видно, что при приближении $f_{ab}(n_e)$ к нулю с ростом n_e величина τ_t определяется в основном рассеянием 2D электронного газа на случайном потенциале фоновой примеси. На рисунке 5b представлены экспериментальная и расчетная зависимости τ_t/τ_q от n_e. Наблюдается хорошее согласие между экспериментальной и расчетной зависимостями. Участок линейной зависимости полностью согласуется с теорией [13]. Падение отношения τ_t/τ_q в области $n_e > n_{ec}$ обусловлено тем, что в исследуемых образцах рассеяние на случайном потенциале фоновой примеси более существенно ограничивает рост τ_t с увеличением n_e, чем τ_q.

Обсуждение полученных результатов начнем с области линейной зависимости $n_e(V_g)$. В этой области рассеяние на случайном потенциале удаленной примеси мы учитываем эффективной концентрацией положительно заряженных доноров $n_R^* = n_{RI}^*$. Так как для $V_g < -1.5$ В отношение $\tau_t/\tau_q \gg 1$, то мы можем пренебречь вкладом процессов рассеяния на фоновой примеси в τ_q и принять, что $\tau_q \cong \tau_{qR}$ определяется преимущественно малоугловым рассеянием на ионах удаленной примеси [14]. Сопоставление экспериментальной зависимости $\tau_q(n_e)$ в области $n_e < n_{ec}$ с зависимостью, рассчитанной по формуле (6), дает величину $n_{RI}^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$. Концентрация Si в верхнем δ-слое $\sim 2 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$. Так как в области линейной зависимости $n_e(V_g)$ концентрация $n_{RX} = 0$, то n_{RI}^* должна быть порядка $\sim 2 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$, что не согласуется с полученной ранее оценкой $n_{RI}^* \sim 10^{16}$ м$^{-2}$. Возможной причиной такого различия является корреляция многократных событий малоуглового рассеяния, которые нельзя рассматривать независимыми [14].

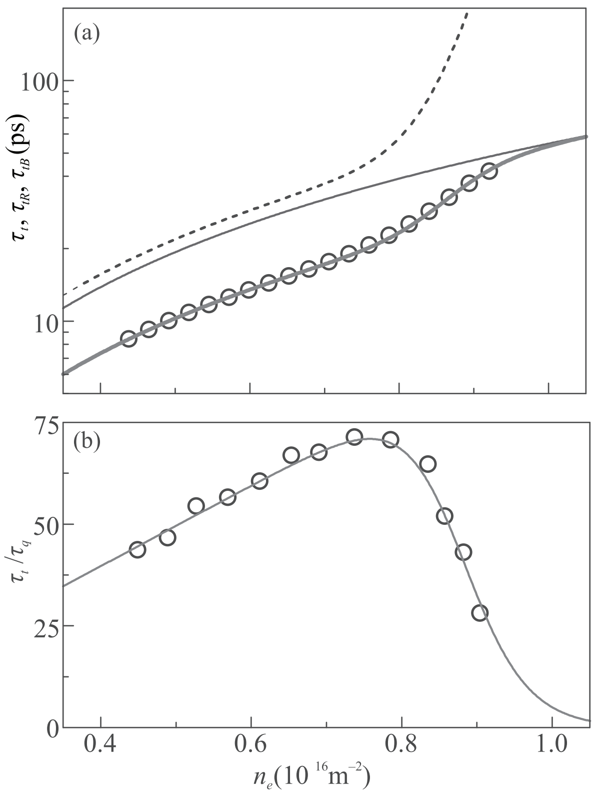


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости τ_t, τ_{tR} и τ_{tB} от n_e: окружности – экспериментальные данные при $T = 4.2$ К; пунктирная линия – расчет по формуле (4) для $n_R^* = n_{RI}^* \times f_{ab}$, где $n_{RI}^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$; тонкая непрерывная линия – расчет по формуле (5) для $n_B = 2.83 \cdot 10^{21}$ м$^{-3}$; толстая непрерывная линия – расчет по формуле (3). (b) – Зависимости τ_{tr}/τ_q от n_e: окружности – экспериментальные данные при $T = 4.2$ К; непрерывная линия – расчет по формулам (3)–(7) для $n_R^* = n_{RI}^* \times f_{ab}$, где $n_{RI}^* = 9.28 \cdot 10^{15}$ м$^{-2}$ и $n_B = 2.83 \cdot 10^{21}$ м$^{-3}$

При $V_g = 0$ концентрация $n_{\mathrm{SdH}} \sim 10^{16}$ м$^{-2}$, а суммарная концентрация Si доноров в верхнем и нижнем δ-слоях $\sim 4 \cdot 10^{16}$ м$^{-2}$. В этом случае $f_{ab} = 0.25$. Однако для $V_g = 0$ из экспериментальной зависимости $\tau_q(n_e)$ следует, что $f_{ab} = 0.14$. Это различие мы также связываем с корреляцией многократных событий малоуглового рассеяния. Полученная величина $n_B \sim 3 \cdot 10^{21}$ м$^{-3}$ существенно выше, чем в образцах с $\mu > 1000$ м^2/Вс, для которых $n_B \leq 10^{20}$ м$^{-3}$, что указывает на "среднее качество" исследуемых образцов. Тем не менее, фоновая примесь в GaAs SQW с AlAs/GaAs SPSL барьерами практически не понижает τ_q 2D электронного газа с высокой n_e, что обусловлено подавлением случайного рассеивающего потенциала удаленных доноров X-электронами. Поэтому, несмотря на "среднюю" μ, селективно-легированные SQW с SPSL барьерами широко используются для изучения фундаментальных квантовых явлений в 2D системах с высокой n_e, в том числе и с несколькими заполненными энергетическими подзонами [19–22].

Таким образом, исследованы зависимости транспортного времени рассеяния τ_t, квантового времени жизни τ_q и их отношения τ_t/τ_q от концентрации 2D электронного газа n_e в селективно-легированных одиночных GaAs квантовых ямах с короткопериодными AlAs/GaAs сверхрешеточными барьерами. Экспериментальные данные анализировались в предположении, что τ_t в изучаемой 2D системе определяется рассеянием на удаленных ионизированных донорах с эффективной 2D концентрацией n_R^* и фоновых примесях с 3D концентрацией n_B, а τ_q определяется рассеянием лишь на удаленных ионизированных донорах. Предложено выражение для $n_R^*(n_e)$, учитывающее роль X-электронов в подавлении рассеяния на случайном потенциале удаленных ионизированных доноров. Используя выражение для $n_R^*(n_e)$, нам удалось разделить вклады в τ_t, обусловленные рассеянием на удаленных ионизированных донорах и фоновых примесях. Установлена роль фоновой примеси в процессах рассеяния 2D электронного газа в исследуемой селективно легированной GaAs SQW с AlAs/GaAs SPSL барьерами и получена ее оценочная величина. Предложенный подход анализа экспериментальных зависимостей τ_t, τ_q и их отношения τ_t/τ_q от концентрации 2D электронного газа позволяет также качественно объяснить падение τ_t/τ_q с ростом n_e, наблюдавшееся в работах [23, 24].

Авторы выражают благодарность Г. М. Минькову и В. А. Ткаченко за полезные обсуждения.

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, проекты # 18-02-00603 и 20-02-00309.

1. H. Stormer, R. Dingle, A. Gossard, W. Wiegmann, and M. Sturge, Solid State Commun. **29**, 705 (1979).
2. E. H. Hwang and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **77**, 235437 (2008).
3. Y. J. Chung, K. A. Villegas Rosales, K. W. Baldwin, K. W. West, M. Shayegan, and L. N. Pfeiffer, Phys. Rev. Materials **4**, 044003 (2020).
4. K.-J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, R. Klann, and K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **77**, 4616 (1996).
5. D. V. Dmitriev, I. S. Strygin, A. A. Bykov, S. Dietrich, and S. A. Vitkalov, JETP Lett. **95**, 420 (2012).
6. M. Sammon, M. A. Zudov, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. Materials **2**, 064604 (2018).
7. M. Sammon, T. Chen, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. Materials **2**, 104001 (2018).
8. A. J. L. Poulter, J. Zeman, D. K. Maude, M. Potemski, G. Martinez, A. Riedel, R. Hey, and K. J. Friedland, Phys. Rev. Lett. **86**, 336 (2001).
9. A. A. Bykov, A. K. Bakarov, D. R. Islamov, and A. I. Toropov, JETP Lett. **84**, 391 (2006).
10. A. A. Bykov, I. S. Strygin, E. E. Rodyakina, and S. A. Vitkalov, JETP Lett. **108**, 121 (2018).
11. M. L. Savchenko, A. Shuvaev, I. A. Dmitriev, A. A. Bykov, A. K. Bakarov, Z. D. Kvon, and A. Pimenov, arXiv:2008.11114 (2020).
12. S. Das Sarma and Frank Stern, Phys. Rev. B **32**, 8442(R) (1985).
13. A. Gold, Phys. Rev. B **38**, 10798 (1988).
14. P. T. Coleridge, Phys. Rev. B **44**, 3793 (1991).
15. J. H. Davies, *The Physics of Low Dimensional Semiconductors*, Cambridge University Press, N.Y. (1997).
16. I. A. Dmitriev, A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, and M. A. Zudov, Rev. Mod. Phys. **84**, 1709 (2012).
17. S. Das Sarma and E. H. Hwang, Phys. Rev. B **90**, 035425 (2014).
18. S. Peters, L. Tiemann, C. Reichl, S. Falt, W. Dietsche, and W. Wegscheider, Appl. Phys. Lett. **110**, 042106 (2017).
19. A. A. Bykov, I. S. Strygin, A. V. Goran, I. V. Marchishin, D. V. Nomokonov, A. K. Bakarov, S. Abedi, and S. A. Vitkalov, JETP Lett. **109**, 400 (2019).
20. A. A. Dmitriev, I. L. Drichko, I. Yu. Smirnov, A. K. Bakarov, and A. A. Bykov, JETP Lett. **110**, 68 (2019).
21. A. A. Bykov, I. S. Strygin, A. V. Goran, E. E. Rodyakina, D. V. Nomokonov, I. V. Marchishin, S. Abedi, and S. A. Vitkalov, JETP Lett. **110**, 672 (2019).
22. И. Л. Дричко, И. Ю. Смирнов, А. К. Бакаров, А. А. Быков, А. А. Дмитриев, Ю. М. Гальперин, Письма в ЖЭТФ **112**, 54 (2020).
23. R. G. Mani and J. R. Anderson, Phys. Rev. B **37**, 4299(R) (1988).
24. T.-M. Chen, C.-T. Liang, M. Y. Simmons, G.-H. Kim, and D. A. Ritchie, Physica E **22**, 312 (2004).

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 7, pp. 482 – 483

Delocalization of longitudinal acoustic-like excitations in DNA due to structural effects

V. E. Zakhvataev[+*1)], *L. A. Kompaniets*[×]

[+]*Federal Research Center "Krasnoyarsk Scientific Center of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences", 660036 Krasnoyarsk, Russia*

[*]*Siberian Federal University, 660041 Krasnoyarsk, Russia*

[×]*Institute of Computational Modelling of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 660036 Krasnoyarsk, Russia*

Submitted 14 August 2020
Resubmitted 9 September 2020
Accepted 10 September 2020

DOI: 10.31857/S1234567820190088

Terahertz-frequency phonon-like modes in DNA have been widely studied in recent years [1–3]. However, current theoretical models turn out to fail to reproduce some basic properties of these modes [2, 3]. In the present work, we consider the dynamics of longitudinal acoustic-like modes in DNA on a length scale corresponding to a wave number region between $\sim q_{\max}/2$ and $\sim q_{\max}$, where $q_{\max}$ is the position of the major peak of the static structure factor $S(q)$. This region corresponds to the wave number region where structural effects due to wave number-dependence of the static structure factor become especially important. The dynamics of terahertz longitudinal acoustic-like modes in DNA can be described by a hydrodynamic theory generalized to high wave numbers (up to $\sim 30\,\mathrm{nm}^{-1}$) [1]. Generalized hydrodynamic models are typically based on retaining the formal structure of the classical hydrodynamic theory and replacing macroscopic thermodynamic and transport coefficients with appropriate wave number-dependent memory functions. We approximately consider the heat mode to be decoupled from the sound mode for the parameters under study.

Using a generalized hydrodynamic approach [4, 5] and the results of inelastic X-ray scattering measurements [1], we propose a model to describe structural effects due to wave number-dependence of the static structure factor in the dynamics of longitudinal acoustic-like excitations in DNA. In the linear approximation, the generalized hydrodynamic equations are reduced to the following dynamic structure factor [4–6]

$$S(q,\omega) \propto \frac{\Gamma(q)\omega_0^2(q)}{(\omega^2-\omega_0^2(q))^2+4\Gamma^2(q)\omega^2}.$$

Here, $\Gamma(q)$ is the damping factor and

$$\omega_0^2(q) = \frac{k_B T q^2}{m S(q)}$$

is the excitation frequency squared, with $S(q)$, k_B, T, and being the static structure factor, the Boltzmann constant, the absolute temperature, and the mass of the particle, respectively. The dispersion relation for the excitation frequency $\omega_0(q)$ for longitudinal acoustic-like modes shows a typical behavior for liquids at mesoscopic scales: $\omega_0(q)$ is linear for small wave numbers q, reaches a maximum near $q_{\max}/2$, then decreases to a sharp minimum at $q \sim q_{\max}$, and again increases ($q_{\max} \approx 18.6\,\mathrm{nm}^{-1}$) [1]. Accordingly, we use the following approximation for $\omega_0^2(q)$ up to wave numbers corresponding to $\sim q_{\max}$:

$$\omega_0^2(q) \approx k_1 q^2 - k_2 q^4 + k_3 q^6, \qquad (1)$$

with the coefficients k_1, k_2, and k_3 being positive constants (the approximation given by Eq. (1) is valid only for wave numbers less than $\sim q_{\max}$). We estimate the values of k_1, k_2, and k_3 from a least-squares fit to the dispersion curve for ω_0 obtained in [1] for samples in the B conformation of DNA at ambient temperature. Accordingly, in the framework of generalized hydrodynamic approach, we consider the following free energy of the system

$$F = \frac{1}{2\rho_0}\int\Big[k_1\delta\rho^2 - k_2(\nabla\delta\rho)^2 + k_3(\nabla^2\delta\rho)^2 + \\ + \frac{\alpha}{3}\delta\rho^3 + \frac{\gamma}{6}\delta\rho^4\Big]d\mathbf{r},$$

where $\delta\rho$ is the fluctuation of the mass density, ρ_0 is the average mass density, α and γ are constants, and obtain

$$\frac{\partial^2\delta\rho}{\partial t^2} = k_1\frac{\partial^2\delta\rho}{\partial x^2} + k_2\frac{\partial^4\delta\rho}{\partial x^4} + k_1\frac{\partial^6\delta\rho}{\partial x^6} + \alpha\frac{\partial}{\partial x}\left(\delta\rho\frac{\partial\delta\rho}{\partial x}\right) +$$

[1)]e-mail: zakhvataev.ve@ksc.krasn.ru

$$+\gamma\frac{\partial}{\partial x}\left(\delta\rho^2\frac{\partial\delta\rho}{\partial x}\right)+\nu_L\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\partial\delta\rho}{\partial t}-\frac{\partial\delta S}{\partial x^2}, \qquad (2)$$

where ν_L is a constant reflecting viscous dissipation and δS satisfies the following relations

$$\langle\delta S(x,t)\rangle=0,\quad \langle\delta S(x_1,t_1)^*\delta S(x_2,t_2)\rangle=$$

$$=2k_BT\rho_0\nu_L\delta(x_1-x_2)\delta(t_1-t_2)$$

(the bracket $\langle\ \rangle$ implies a thermal ensemble average).

Structural effects, reflected by the q-dependence of the static structure factor, are represented in our model by the terms with fourth- and sixth-order spatial derivatives in Eq. (2). The form of the dispersion relation (1) is essentially different from that typically used for modeling of longitudinal acoustic-like excitations in DNA in the low-wave number region [7],

$$\omega_0^2(q)\approx k_1q^2-k_2q^4. \qquad (3)$$

For the dispersion relation (3), a non-linear acoustic mode model with longitudinal waves along DNA molecule based on the well-known Boussinesq equation, was proposed. The fourth-order Boussinesq equation possesses solutions corresponding to monotone (sech-like) shapes which can be interpreted as non-linear localized excitations in DNA [7]. As for the sixth-order equation (2), when the dispersion coefficients k_2 and k_3 are positive, as in our case, two dispersions act in opposition to each other which causes the occurrence of spatially non-local regimes, while the soliton-like regimes disappear [8]. Thus the sixth-order derivative term qualitatively changes the behavior of the solutions. Our numerical simulations confirmed that a tendency of delocalization for DNA acoustic-like excitations may occur, at least in the case of large-amplitude density variations and for sufficiently short time scales. It should be emphasized that the dynamics on subpicosecond time scale are potentially important for biological function of DNA since, for example, initial steps of base pair opening can be associated with delocalized phonon-like modes on the time scale $1/\Gamma\sim0.1{-}0.2$ ps, as has been experimentally shown in [1]. We showed also that the nonlinearity in Eq. (2) influences amplitude limiting but can preserve the tendency of delocalization. Thus, our analysis qualitatively suggests that on a length scale corresponding to a wave number region between the positions of the maximum and the minimum of the dispersion relation for the excitation frequency, structural effects could induce a tendency of delocalization of the dynamics of acoustic-like excitations in DNA.

We are grateful to the anonymous referees for their critical comments and suggestions. We also thank O. S. Volodko for help in numerical simulations.

The reported study was funded by Russian Foundation for Basic Research, Government of Krasnoyarsk Territory, Krasnoyarsk Regional Fund of Science, to the research project 19-41-240003 "Mathematical modeling of collective atomic dynamics of biomacromolecules in non-equilibrium conditions on a picosecond time scale".

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020190030

1. M. Krisch, A. Mermet, H. Grimm, V. T. Forsyth, and A. Rupprecht, Phys. Rev. E **73**, 061909 (2006).
2. M. Gonzalez-Jimenez, G. Ramakrishnan, T. Harwood, A. J. Lapthorn, S. M. Kelly, E. M. Ellis, and K. Wynne, Nat. Commun. **7**, 11799 (2016).
3. M. González-Jiménez, G. Ramakrishnan, and K. Wynne, bioRxiv preprint (March 18, 2020) (doi:https://doi.org/10.1101/2020.03.16.993873).
4. N. K. Ailawadi, A. Rahman, and R. Zwanzig, Phys. Rev. A **4**, 1616 (1971).
5. S. P. Das, Rev. Mod. Phys. **76**, 785 (2004).
6. A. Cunsolo, International Reviews in Physical Chemistry **36**, 433 (2017).
7. L. V. Yakushevich, *Nonlinear Physics of DNA*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2004).
8. C. I. Christov, G. A. Maugin, and M. G. Velarde, Phys. Rev. E **54**, 3621 (1996).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 484 – 486 © 2020 г. 10 октября

Комментарий к статье “Анализ результатов эксперимента Нейтрино-4 по поиску стерильного нейтрино и сравнение с результатами других экспериментов” (Письма в ЖЭТФ 112(4), 211 (2020))

М. В. Данилов+1), *Н. А. Скробова*+*

+*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 ГСП-1 Москва, Россия*

**Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова, Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 117218 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 августа 2020 г.
После переработки 31 августа 2020 г.
Принята к публикации 2 сентября 2020 г.

DOI: 10.31857/S123456782019009X

В работе [1] делается утверждение о наблюдении в эксперименте “Нейтрино-4” осцилляций реакторных антинейтрино в стерильные нейтрино с очень большой разностью квадратов масс ($\Delta m^2_{41} = 7.25\,эВ^2$) и угла смешивания ($\sin^2 2\theta_{ee} = 0.26$). Обнаружение стерильного нейтрино означало бы выход за рамки Стандартной Модели. Поэтому важно обсудить обоснованность всех шагов при анализе данных и моделировании детектора.

1. Энергетическое разрешение детектора составляет около 19 % при 1 МэВ [2]. Эта оценка получена из приведенных в работе разрешений для сигналов от ^{22}Na ($E = 1.274\,МэВ$) и от захватов нейтронов на протонах ($E = 2.233\,МэВ$). Авторы не учитывают в анализе энергетическое разрешение, ссылаясь на значительную ширину шага по энергии (500 кэВ) в анализируемом энергетическом спектре. Однако для больших энергий позитрона, которые наиболее важны для изучения осцилляций с большим значением разности квадратов масс нейтрино, эта ширина совершенно недостаточна. Например, для энергии позитрона, равной 5 МэВ, ширина на полувысоте энергетического разрешения равна 1 МэВ, что в два раза превышает размер шага в спектре. Вне интервала в 500 кэВ попадает более половины сигнала (56 % для положения в середине интервала). Эта оценка сделана в предположении, что относительное энергетическое разрешение детектора пропорционально $1/\sqrt{E}$. Наличие постоянного члена в относительном энергетическом разрешении только увеличит эту оценку. Надо отметить, что проведенное в [2] упрощенное моделирование отклика детектора на позитроны с заданой энергией, которое не учитывает толщину стенок между секциями, дает много лучшее разрешение (ширина на полувысоте, оцененная из рис. 25 [2], составляет около 700 кэВ для энергии позитрона, равной 5 МэВ), которое слабо зависит от энергии позитрона. Это плохо согласуется с измеренной в [2] шириной сигнала от захвата нейтрона протоном. Но даже в этом случае ширина сигнала больше шага по энергии. Кроме того, энергетический отклик детектора не симметричен. При малых энергиях имеется хвост из-за потерь энергии в пассивных слоях детектора. Его также необходимо учитывать при анализе. Естественно ожидать, что такое большое различие между разрешением детектора и шириной используемых интервалов в анализируемых спектрах должно привести к существенному размытию осцилляционной картины, и, как следствие, к существенному изменению результатов. Например, ширина (FWHM) первого минимума в Монте-Карло (МК) предсказаниях для зависимости от L/E на рис. 41 [2] составляет около 0.11. При типичной $L = 7\,м$ этот минимум соответствует энергии антинейтрино около 5.8 МэВ, т.е. полной (включая аннигиляционные фотоны) энергии позитрона около 5 МэВ. Ошибка в измерении энергии должна составлять $19\,\%\sqrt{E} = 0.42\,МэВ$. Это соответствует относительной ошибке в E_ν, равной 7.3 %, и ширине первого минимума, равной 0.21, что много больше 0.11. Приведенная оценка не учитывает систематические эффекты, которые должны привести к еще большему размытию осцилляционной кривой. Таким образом, учет энергетического разрешения кардинально изменяет МК предсказания для ос-

1)e-mail: danilov@lebedev.ru

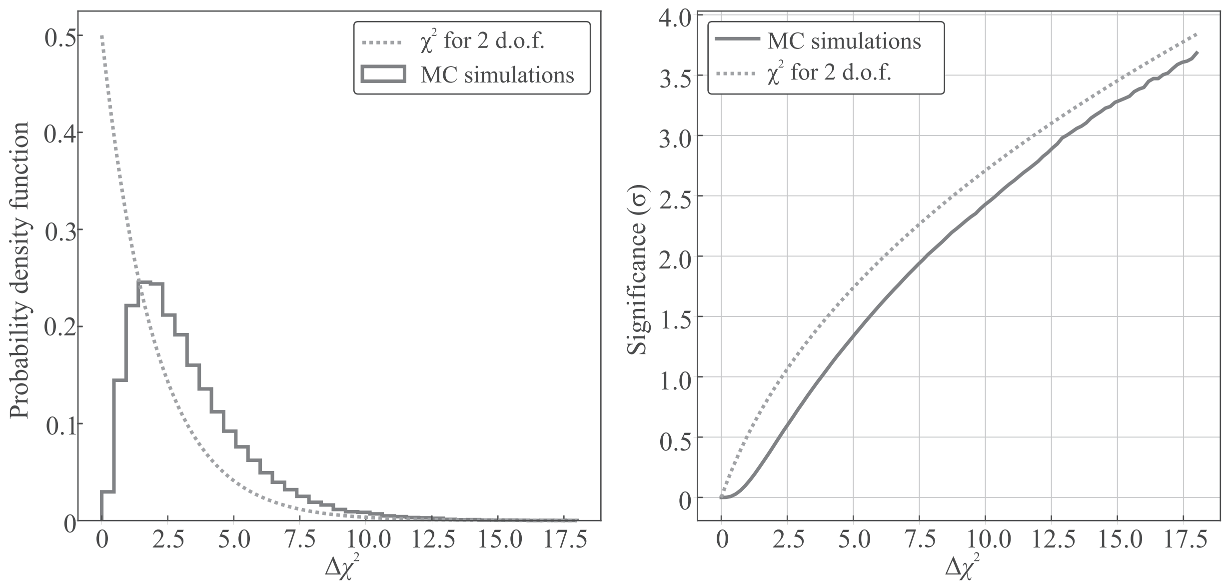


Рис. 1. (Цветной онлайн) Слева: распределение $\chi^2 = \chi^2_{3\nu} - \chi^2_{4\nu\,\min}$, полученные для эксперимента DANSS с помощью численных экспериментов (сплошная линия), и согласно теореме Вилкса, т.е. χ^2 с двумя степенями свободы (пунктирная линия); справа: значимость лучшей точки в зависимости от $\Delta\chi^2$

цилляционной кривой и должен сильно повлиять на результаты и их значимость.

2. Использование в анализе спектров с еще меньшим шагом (250 и 125 кэВ) совершенно не оправдано и практически эквивалентно полному отсутствию учета разрешения детектора. Усреднение результатов, полученных с различной шириной шага гистограмм, совершенно не понятно с точки зрения статистики. Усредняются одни и те же экспериментальные данные. Совершенно не ясно, как интерпретировать результаты такого усреднения.

3. Поток антинейтрино в эксперименте измеряется одним и тем же детектором на разных расстояниях от реактора. Это очень эффективный метод для уменьшения систематических ошибок, связанных с различной эффективностью секций детектора и различным фоном. В результате измерения при фиксированных значениях L/E проводятся с помощью разных секций детектора и усредняются, что приводит к уменьшению ошибок. Однако для крайних позиций детектора усреднения не происходит. Для этих позиций в качестве оценки снизу неопределенности в относительной эффективности различных секций детектора можно было бы взять разброс счета коррелированного фона в разных секциях относительно аппроксимирующей кривой (рис. 47 из [2]). Он равен примерно $\pm 8\,\%$ и уже сравним с амплитудой наблюдаемых осцилляций. А мы даже не затрагиваем вопрос о различии откликов ячеек внутри одной секции и вопрос о точности и методе получения аппроксимирующей кривой. Авторы обращают внимание на эту проблему и приводят результаты без использования крайних позиций. Это приводит к уменьшению значимости наблюдаемого эффекта до примерно 2σ. Естественно именно это значение и использовать для оценки значимости эффекта осцилляций.

4. Оценка значимости эффекта осцилляций на основе распределения χ^2 с двумя степенями свободы приводит к ее переоценке. Например, в эксперименте DANSS значимость, оцененная таким способом и с помощью численных экспериментов, отличается примерно на 0.5σ при значении значимости около 1.5σ, и на 0.2σ при значимости 3.2σ, заявленной в обсуждаемой работе (см. рис. 1). При проведении численных экспериментов предполагалась гипотеза без стерильного нейтрино, а разброс точек соответствовал экспериментально полученным ошибкам. Видно, что в численных экспериментах гипотеза со стерильным нейтрино чаще дает существенно лучшее значение χ^2 по сравнению с исходно моделировавшейся гипотезой без стерильного нейтрино, чем в случае распеределения χ^2 с двумя степенями свободы.

5. Странно звучит утверждение, что увеличение ширины интервала в гистограммах по энергии позитрона не влияет на амплитуду осцилляций, а только сокращает число наблюдаемых периодов. Увеличение ширины интервала в каком-то смысле соответствует ухудшению энергетического разрешения детектора, что должно приводить к размытию осцилляционной картины. Например, в эксперименте

DANSS учет энергетического разрешения, эквивалентный ухудшению в 1.4 раза разрешения в L/E при энергии позитронов в районе 4 МэВ, приводит к уменьшению амплитуды осцилляций в зависимости от энергии примерно в 2 раза [3].

6. Использование в анализе нормировки на усредненные значения спектра приводит к корреляциям между различными точками по энергии и расстоянию от реактора. Однако скорее всего, учет этих корреляций мало изменит результаты.

7. Фон от космических мюонов примерно в 2 раза превышает сигнал. Поэтому его вариации даже на несколько процентов весьма существенны. К сожалению, из статьи трудно понять, как это было учтено.

Нам кажется, что рано говорить об обнаружении стерильного нейтрино до прояснения вопросов, поднятых в данном комментарии. Поэтому мы не обсуждаем часть статьи, посвященную интерпретации результатов. Проблемы, упомянутые в пунктах 1, 3 и 4, уже обсуждались в работах [4] и [5, 6], соответственно.

Данная работа поддержана грантом Российского научного фонда # 17-12-01145П.

1. A. P. Serebrov and R. M. Samoilov, JETP Lett. **112**, 211 (2020).
2. A. P. Serebrov, V. G. Ivochkin, R. M. Samoilov et al. (Neutrino-4 collaboration), arXiv:2005.05301.
3. N. A. Skrobova, Bull. Lebedev Phys. Inst. **47**, 101 (2020).
4. M. Danilov, J. Phys.: Conf. Ser. **1390**, 012049 (2019).
5. M. Andriamirado, A. B. Balantekin, H. R. Band et al. (PROSPECT Collaboration) and H. Almazan, A. Bonhomme, C. Buck et al. (STEREO Collaboration), arXiv:2006.13147v1.
6. A. P. Serebrov and R. M. Samoilov, arXiv:2006.13639.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 7, с. 487 – 489

Ответ на комментарий к статье “Анализ результатов эксперимента Нейтрино-4 по поиску стерильного нейтрино и сравнение с результатами других экспериментов” (Письма в ЖЭТФ 112(4), 211 (2020))

А. П. Серебров[1)], *Р. М. Самойлов*

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт” Петербургский институт ядерной физики, 188300 Гатчина, Россия

Поступила в редакцию 25 августа 2020 г.
После переработки 31 августа 2020 г.
Принята к публикации 2 сентября 2020 г.

DOI: 10.31857/S1234567820190106

Ниже представлены ответы по пунктам комментария.

1. Текст этого раздела свидетельствует о неправильном понимании сути нашего метода. Дело в том, что энергетическое разрешение детектора не используется при построении экспериментальной зависимости $R_{ik}(L_i/E_k)$. Затухание осцилляционной кривой определяется конечным размером зоны реактора, размером секции детектора и в нашем случае, прежде всего энергетическим разрешением детектора. Процесс затухания осцилляционной кривой является характеристикой установки. Энергетическое разрешение требуется для построения расчетной Монте-Карло зависимости (красные точки). Частота и амплитуда осцилляций определяется на плоскости Δm_{14}^2 и $\sin^2 2\theta_{14}$, где энергетическое разрешение также не используется. При сравнении экспериментальной $R(L/E)$ зависимости и расчетной Монте-Карло зависимости (красные точки) уже используется энергетическое разрешение детектора. Оно входит в расчетную Монте-Карло зависимость (красные точки). Однако, требования на точность знания энергетического разрешения невысоки. Энергетическое разрешение влияет только на затухающий хвост кривой, где вклад этих точек не является значительным. Ниже приводится подгонка экспериментальной и расчетной кривой с энергетическим разрешением расчетной кривой 750 кэВ вместо 500 кэВ, которое даже несколько улучшает качество подгонки.

Можно видеть, что подгонка экспериментальной и расчетной кривой с энергетическим разрешением 750 кэВ вместо 500 кэВ даже несколько улучшает качество подгонки, так как $\chi^2/\mathrm{DoF} = 19.86/17$ для энергетического разрешения 500 кэВ становится $\chi^2/\mathrm{DoF} = 19.32/17$ для энергетического разрешения 750 кэВ. Таким образом, беспокойство авторов комментария не подтверждается нашими конкретными расчетами.

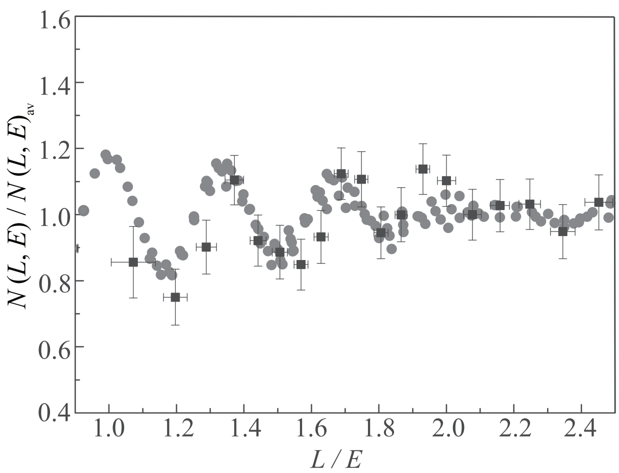


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вариант подгонки экспериментальной и расчетной кривой с энергетическим распределением 750 кэВ

Во-первых, период осцилляций не определяется энергетическим разрешением детектора (это уже отмечено выше). Период осцилляций определяется природой процесса осцилляций, а не свойствами экспериментальной установки! Нельзя не заметить, что даже в своей неправильной оценке авторы допускают ошибку, так как полупериод осцилляций составляет 0.17, а не 0.11, см. рис. 41 из [2].

2. Как было показано ранее, энергетическое разрешение здесь ни при чем. Здесь все тоже заблуждение, что энергетическое разрешение детектора нужно использовать при построении экспериментальной осцилляционной кривой $R(L/E)$. Усреднение проис-

[1)]e-mail: serebrov_ap@pnpi.nrcki.ru

ходит с одинаковым интервалом по L/E, а не с "разным шагом гистограмм". Как уже было сказано, задача состоит в том, чтобы избежать случайной флуктуации при фиксированной выборке. Все эти операции равноправны, они используют один и тот же экспериментальный материал, но выборки несколько отличаются. Равноправность операций является очевидной.

3. Авторы комментария правильно описывают преимущества схемы измерений с передвижным детектором, но в своей критике не используют преимуществ схемы передвижения. Почему-то авторы комментария ограничились рис. 47 из [2]. Это промежуточная стадия анализа до использования преимущества схемы передвижения. Ведь следующий рис. 48 (вверху) из [2] показывает, что среднеквадратичный разброс эффективности регистрации по расстояниям благодаря эффекту передвижения составляет 2.5 %. "Наконец, рис. 48 (внизу) дает полный ответ, что проблемы нет. Разброс эффективности различных рядов детектора практически не влияет на форму осцилляционной кривой. Достаточно сравнить положения красных и синих точек на рис. 48. Разброс синих точек по отношению к красным заметен, но это не изменяет формы кривой".

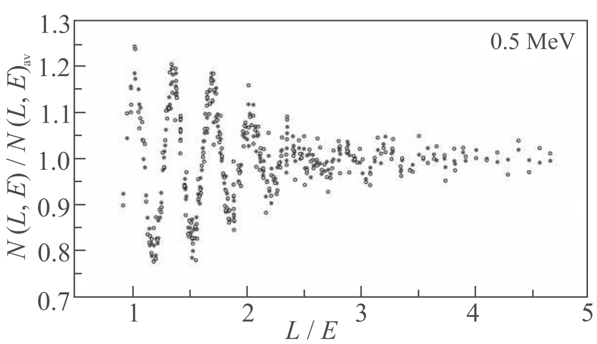


Рис. 48 из работы [2]. Монте-Карло моделирование эффекта осцилляций с учетом отклонений в эффективности регистрации коррелированных событий на разных расстояниях. Красные точки – осцилляционный эффект без учета влияния отклонений эффективности регистрации коррелированный событий на разных расстояниях; голубые точки – осцилляционный эффект с учетом этого влияния

Действительно, схема передвижного детектора решает проблему разброса эффективности различных секций детектора. Почему авторы комментария останавливаются на промежуточной стадии нашего анализа и пренебрегают окончательным выводом, трудно понять.

4. В нашей работе [1] этот вопрос обсуждается. Ваш анализ значимости результата только подтверждает правомерность наших действий, так как уменьшение значимости с 3.2σ до 3.0σ не является критичным.

5. Прежде всего не надо путать ширину энергетического интервала и энергетическое разрешение детектора, мы не утверждали того, что авторы комментария нам приписывают. В нашей статье сказано, "что энергетическое *разрешение* детектора определяет число наблюдаемых осцилляций, но не амплитуду наблюдаемых осцилляций". В эксперименте DANSS совсем другая ситуация из-за большого размера активной зоны реактора – 3.7 м.

6. Отсутствие влияния обсуждаемой корреляции демонстрируется в расчете методом Монте-Карло, рис. 4 из [1]. Дело в том, что при диапазоне измерений 6 м и периоде осцилляций 1.4 м (для $E_\nu = 4$ МэВ) знаменатель в уравнении (2) является практически константой. В нашей работе [2] сделано замечание, что знаменатель в уравнении (2) является практически константой.

7. Здесь имеет место быть непонимание изложенного в наших статьях или недостаточно внимательное прочтение. Складывается впечатление, что эти части нашей статьи не изучались авторами комментария подробно, поэтому приводим необходимые пояснения.

Нами подробно изучалось поведение космического фона. Результаты этих исследований представлены на рис. 8 из работы [2]. Причиной тому являются колебания атмосферного давления. Вывод из этих исследований состоит в следующим. Статистическая точность измерения нейтринного сигнала при 5-ти суточных сериях измерений (с учетом того, что отношение сигнал-фон 0.5) составляет 6 %. Колебания фона по отношению к нейтринному сигналу составляют 2 %. Квадратичное сложение этих флуктуаций приводит к точности измерений 6.32 %, т.е. распределение результатов измерений уширяется на 5 % по отношению к статистическому распределению. Это означает, что RMS ошибки на кривой осцилляций будут на 5 % больше по отношению к статистическим усам. Эти предсказания из изучения поведения космического фона могут быть проверены по результатам всех измерений. "Стабильность результатов измерений характеризуется распределением нормированных на свои статистические ошибки флуктуаций разности ON-OFF для измерений в течение одного периода. Данное распределение имеет гауссову форму, но ширина его на (7 ± 4) % больше единицы, что говорит о дополнительном разбросе за счет колебаний космического фона. Этот результат согласуется с оценкой уширения статистического распределения на 5 %, приведенной в разделе VI о временных вариациях космического фона". Такие разъяснения представлены в наших работах [1, 2]. Итак, колебания космического фона уже учтены на осцилляционной кривой и повторного учета не требуется, как предлагают авторы комментария. Таким образом, все комментарии оказались несостоятельными.

В конце статьи авторы отмечают, что в работе [5] схожие вопросы обсуждались. Ответы на эти вопросы даны в нашей работе [6]. Повышенное внимание к результатам нашей работы вполне понятно, потому что обнаружение стерильного нейтрино означает выход далеко за пределы Стандартной Модели. В таких случаях обычная реакция – этого не может быть, у Вас ошибка. Надеюсь, нам удалось развеять сомнения авторов комментария в правильности нашего эксперимента.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект # 20-12-00079).

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

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

том 112

Выпуск 8

25 октября 2020

Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН

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

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

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 493 – 498 © 2020 г. 25 октября

Процессы $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ и $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ в киральной модели НИЛ с учетом взаимодействия пионов в конечном состоянии

М. К. Волков[1)], *А. Б. Арбузов*, *А. А. Пивоваров*

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 2 сентября 2020 г.
После переработки 2 сентября 2020 г.
Принята к публикации 13 сентября 2020 г.

Рассмотрены процессы $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ и $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ в киральной модели Намбу–Иона-Лазинио с учетом взаимодействия пионов в конечном состоянии с выходом за рамки $1/N_c$ приближения. Учтен вклад петлевой поправки за счет обмена пионов ρ-мезоном, которая дает основной вклад в P-волновом канале. В результате получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для обоих процессов.

DOI: 10.31857/S123456782020001X

1. Введение. Киральная модель Намбу–Иона-Лазинио (НИЛ) [1–4], а также ее расширенный вариант [5–7], учитывающий первые радиально возбужденные состояния мезонов, позволили описать многие распады τ-лептонов и процессы рождения мезонов на встречных электрон-позитронных пучках при низких энергиях в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными [8–14]. Однако оказалось, что описание в рамках модели НИЛ таких важных процессов, как распад $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ и рождение пары пионов в электрон-позитронной аннигиляции при низких энергиях не удается согласовать с известными экспериментальными данными с достаточной точностью. Мы считаем, это является следствием большого влияния взаимодействия пионов в конечном состоянии в данных процессах. Описать основной вклад взаимодействия пионов в конечном состоянии в P-волне можно за счет обмена вылетающих пионов ρ-мезоном. Данные диаграммы соответствуют более высокому порядку по $1/N_c$, чем тот порядок $(1/\sqrt{N_c})$, в котором сформулирована модель НИЛ. Целью данной работы является исследование возможности рассмотреть такие вклады дополнительно к результатам, получаемым в стандартной модели НИЛ.

Процесс $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ является наиболее вероятной модой распада τ-лептона, и его парциальная ширина измерена с высокой точностью: $\mathrm{Br}(\tau \to \pi\pi\nu_\tau) = (25.49\pm0.09)\%$ [15]. В теоретических работах согласие с экспериментом достигается обычно за счет использования феноменологической параметризации формфактора пиона, которая фитируется по экспериментальным данным [16–19] без анализа соответствующей физической картины. Подобная ситуация имеет место и для процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$, адронный ток которого связан с тем, что присутствует в распаде τ-лептона, преобразованием изоспина в рамках гипотезы сохранения векторного тока. Поэтому принципиально важно иметь согласованное теоретическое описание обоих процессов. Также в литературе обсуждается проблема согласования низкоэнергетических процессов электрон-позитронной аннигиляции в адроны и соответствующих мод распада τ-лептонов, см. работу [20] и ссылки в ней. С другой стороны, точность экспериментальных результатов по изучению данных процессов постоянно повышается [21–23]. Важность детального понимания этих процессов обусловлена и тем, что они дают существенный вклад в определение адронной поляризации вакуума [24]. Отметим, что в процессе электрон-позитронной аннигиляции в пионы также важно адекватно описать смешивание ρ- и ω-мезонов, которое чувствительно к разнице токовых масс u- и d-кварков.

Взаимодействие пионов в конечном состоянии исследовалось теоретически в целом ряде подходов. Наиболее общим является метод дисперсионных соотношений, в рамках которого успешно описаны взаимодействия в конечном состоянии легких пар мезонов $\pi\pi$, πK и KK с учетом фазовых сдвигов [25]. Учет таких взаимодействий особенно важен для описания $\pi\pi$- и KK-рассеяния при малых энергиях. Рассматриваемый нами диапазон энергий также находится в области применимости киральной пертурба-

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

тивной теории (ChPT – *Chiral Perturbation Theory*) [26, 27]. В частности, в рамках унитаризованной ChPT взаимодействия в конечном состоянии рассматривались с помощью метода инверсии амплитуд [28, 29]. Непосредственное использование названных методов в сочетании с моделью НИЛ невозможно в силу несогласованности соответствующих подходов. С другой стороны, учет мезонных петлевых поправок в рамках модели НИЛ уже применялся при описании ряда процессов [30, 31], где однако рассмотренные мезонные петли не выходили за рамки ведущего по $1/N_c$ приближения модели.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 приводится используемый нами лагранжиан стандартной модели НИЛ. В следующих двух разделах 3 и 4 рассматриваются процессы электрон-позитронной аннигиляции в два пиона и распад τ-лептона, соответственно. Раздел 5 посвящен обсуждению результатов.

2. Лагранжиан стандартной модели НИЛ. Фрагмент кварк-мезонного лагранжиана взаимодействия модели НИЛ, содержащего нужные нам вершины, имеет вид [3]:

$$\Delta\mathcal{L}_{int} = \bar{q}\Bigg[\frac{g_\rho}{2}\gamma^\mu\left(\tau_3\rho^0_\mu + \tau_0\omega_\mu\right) + ig_\pi\gamma^5\tau_3\pi^0 + + \frac{g_\rho}{2}\gamma^\mu\sum_{j=\pm}\tau_j\rho^j_\mu + ig_\pi\gamma^5\sum_{j=\pm}\tau_j\pi^j\Bigg]q, \tag{1}$$

где q и $\bar{q}$ – $SU(2)$ дублеты u- и d-кварковых полей с составляющими массами $m_u \approx m_d = m = 280$ МэВ; τ_3 – матрица Паули; $\tau_\pm$ – линейные комбинации матриц Паули; τ_0 – единичная матрица. Константы взаимодействия:

$$g_\rho = \left(\frac{2}{3}I_2\right)^{-1/2}, \quad g_\pi = \left(\frac{4}{Z_\pi}I_2\right)^{-1/2}, \tag{2}$$

где

$$Z_\pi = \left[1 - 6\frac{m^2}{M^2_{a_1}}\right]^{-1} \tag{3}$$

константа дополнительной перенормировки, возникающая при учете $\pi - a_1$ переходов, $M_{a_1} = 1230 \pm \pm 40$ МэВ [15] – масса аксиально векторного мезона. Интегралы, возникающие в результате перенормировки лагранжиана:

$$I_2 = -i\frac{N_c}{(2\pi)^4}\int\frac{\Theta(\Lambda^2 + k^2)}{(m^2 - k^2)^2}\mathrm{d}^4k = = \frac{N_c}{(4\pi)^2}\left[\ln\left(\frac{\Lambda^2}{m^2} + 1\right) - \left(1 + \frac{m^2}{\Lambda^2}\right)^{-1}\right], \tag{4}$$

где $\Lambda = 1250$ МэВ – параметр обрезания по импульсу кварков в петле, $N_c = 3$ – число цветов.

3. Процесс $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$. Диаграммы процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ без учета взаимодействия в конечном состоянии приведены на рис. 1–3.

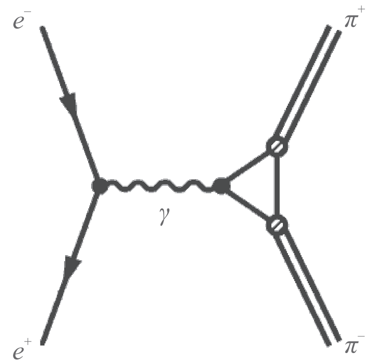


Рис. 1. Контактная диаграмма процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$

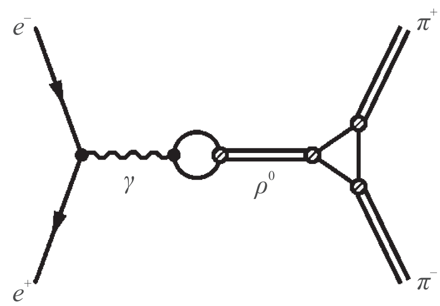


Рис. 2. Диаграмма процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ с промежуточным ρ-мезоном

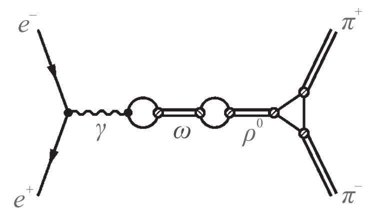


Рис. 3. Диаграмма процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ с промежуточным ω-мезоном

В данном процессе играет роль только P-волна, а контактное взаимодействие четырех пионов через кварковый четырехугольник, а также взаимодействие пионов через скалярный мезон, относящиеся к S-волне, здесь вклада не дают. Взаимодействие пионов путем аннигиляции в ρ-мезон учтено в ширине распада в знаменателе пропагатора Брейта–Вигнера промежуточного ρ-мезона. Поэтому для учета взаимодействия пионов в конечном состоянии в данном процессе достаточно учесть обмен ρ-мезоном. В результате возникает мезонный треугольник, см. рис. 4.

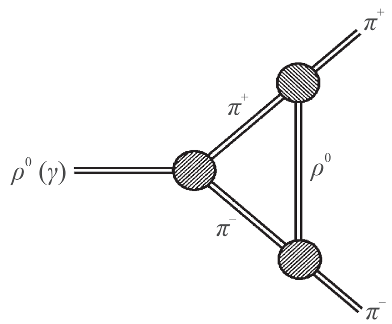


Рис. 4. Взаимодействие пионов во конечном состоянии в случае электрон-позитронной аннигиляции

Каждая вершина этого треугольника выражается через амплитуду распада $\rho^0 \to \pi^+\pi^-$, которую можно получить с помощью лагранжиана (1):

$$M(\rho^0 \to \pi^+\pi^-) = g_\rho e_\mu(q)\,(p_+ - p_-)^\mu\,, \qquad (5)$$

где q – импульс распадающегося ρ-мезона, p_+, p_- – импульсы пионов, $e_\mu(q)$ – поляризационный вектор распадающегося ρ-мезона.

Из данной амплитуды можно получить вершину мезонного лагранжиана, описывающую взаимодействие ρ-мезона с пионами:

$$\mathcal{L} = -ig_\rho\rho^0_\mu\left(\pi^+\partial^\mu\pi^- - \pi^-\partial^\mu\pi^+\right). \qquad (6)$$

С помощью этих вершин можно описать треугольную мезонную петлю, приводящую к интегралу:

$$g^3_\rho\int\frac{(k-2p_-)^\lambda(k+2p_+)^\nu(2k+p_+-p_-)^\mu\left(g_{\nu\lambda}-\frac{k_\nu k_\lambda}{M^2_\rho}\right)}{\left[k^2-M^2_\rho\right]\left[(k-p_-)^2-M^2_\pi\right]\left[(k+p_+)^2-M^2_\pi\right]}\times \times\frac{d^4k}{(2\pi)^4}. \qquad (7)$$

Если разложить этот интеграл по внешним импульсам и удержать только расходящиеся члены (по аналогии с методом, используемым в модели НИЛ), то получится выражение

$$ig^3_\rho\left[\frac{I_{1M}}{M^2_\rho}+\left(1+\frac{4M^2_\pi-q^2}{2M^2_\rho}\right)I_{2M}\right](p_+-p_-)^\mu\,, \qquad (8)$$

где $q = p_+ + p_-$; I_{1M} и I_{2M} — квадратично и логарифмически расходящиеся интегралы, соответственно:

$$\begin{aligned} I_{2M} &= \frac{-i}{(2\pi)^4}\int\frac{\Theta(\Lambda^2_M+k^2)}{(M^2_\rho-k^2)(M^2_\pi-k^2)}\mathrm{d}^4k = \\ &= \frac{1}{(4\pi)^2}\frac{1}{M^2_\rho-M^2_\pi}\times \\ &\times\left[M^2_\rho\ln\left(\frac{\Lambda^2_M}{M^2_\rho}+1\right)-M^2_\pi\ln\left(\frac{\Lambda^2_M}{M^2_\pi}+1\right)\right], \\ I_{1M} &= \frac{-i}{(2\pi)^4}\int\frac{\Theta(\Lambda^2_M+k^2)}{(M^2_\rho-k^2)}\mathrm{d}^4k = \\ &= \frac{1}{(4\pi)^2}\left[\Lambda^2_M - M^2_\rho\ln\left(\frac{\Lambda^2_M}{M^2_\rho}+1\right)\right], \end{aligned} \qquad (9)$$

где Λ_M – параметр обрезания по импульсу мезонной петли.

Тогда амплитуда рассматриваемого процесса электрон-позитронной аннигиляции принимает вид:

$$\begin{aligned} M(e^+e^-\to\pi\pi) &= -\frac{4\pi\alpha_{em}}{s}\left[1+\frac{s}{M^2_\rho-s-i\sqrt{s}\Gamma_\rho}+\right. \\ &\left.+\frac{s^2}{9}\frac{g^2_\rho\left[I_2(u)-I_2(d)\right]}{\left[M^2_\rho-s-i\sqrt{s}\Gamma_\rho\right]\left[M^2_\omega-s-i\sqrt{s}\Gamma_\omega\right]}\right]\times \\ &\times\left\{1+g^2_\rho\left[\frac{I_{1M}}{M^2_\rho}+\left(1+\frac{4M^2_\pi-s}{2M^2_\rho}\right)I_{2M}\right]\right\}\times \\ &\times L^{em}_\mu(p_+-p_-)^\mu, \end{aligned} \qquad (10)$$

где $\alpha_{em} \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры, $s = (p_+ + p_-)^2$, $L^{em}_\mu = \bar{e}^-\gamma_\mu e^-$ – электромагнитный лептонный ток.

Третье слагаемое в первых квадратных скобках соответствует вкладу от промежуточного ω-мезона, переходящего в ρ-мезон через кварковую петлю. Здесь в амплитуде возникает разность $I_2(u) - I_2(d)$, где $I_2(u)$ и $I_2(d)$ – интегралы вида (4) с u- и d-кварковыми массами, соответственно. В данном случае разницей масс этих кварков пренебрегать нельзя, и при вычислениях использовалось значение $m_d - m_u = 4$ МэВ, полученное в рамках модели НИЛ при описании распада $\omega \to \pi\pi$ и разницы масс заряженных и нейтральных пионов [3].

По экспериментально известной зависимости сечения данного процесса от энергии сталкивающихся лептонов можно зафиксировать параметр обрезания по импульсу мезонной петли $\Lambda_M = 860$ МэВ. Зависимость, полученная при данном значении параметра обрезания, показана на рис. 5 в сравнении с экспериментальными данными [21]. Видно, что учет взаимодействий в конечном состоянии оказался количественно очень важным именно вблизи пика, соответствующего резонансу ρ-мезона.

4. Процесс $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$. Диаграммы Фейнмана процесса $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ без учета взаимодействия в конечном состоянии приведены на рис. 6, 7.

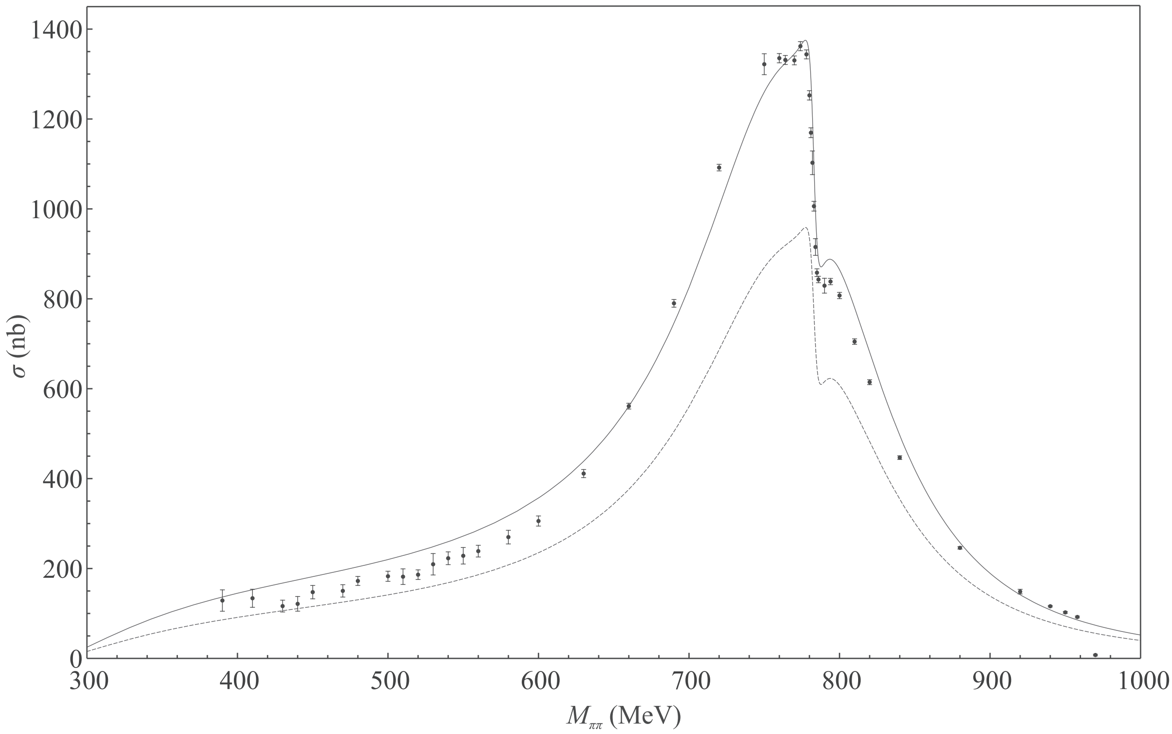


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сечение процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ в зависимости от энергии в системе центра масс. Экспериментальные точки взяты из работы [21]. Пунктирная кривая получена без вклада взаимодействий в конечном состоянии, а сплошная с его учетом

Мезонный треугольник, необходимый для учета взаимодействия пионов в конечном состоянии, приведен на рис. 8.

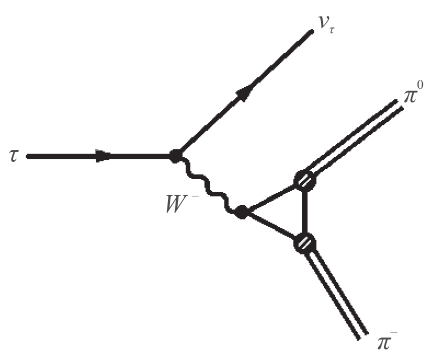


Рис. 6. Контактная диаграмма процесса $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$

Этот треугольник приводит к интегралу того же вида, что и в случае процесса e^+e^--аннигиляции, рассмотренного выше. Амплитуда рассматриваемого процесса распада τ-лептона принимает вид:

$$M(\tau \to \pi\pi\nu) = -G_F V_{ud}\left[1 + \frac{s}{M_\rho^2 - s - i\sqrt{s}\Gamma_\rho}\right] \times \\ \times \left\{1 + g_\rho^2\left[\frac{I_{1M}}{M_\rho^2} + \left(1 + \frac{4M_\pi^2 - s}{2M_\rho^2}\right) I_{2M}\right]\right\} \times \\ \times L_\mu^{\mathrm{weak}} \left(p_- - p_0\right)^\mu, \qquad (11)$$

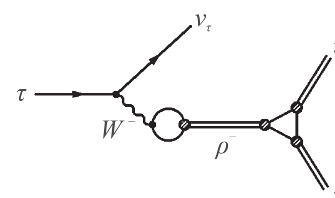


Рис. 7. Диаграмма процесса $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ с промежуточным ρ-мезоном

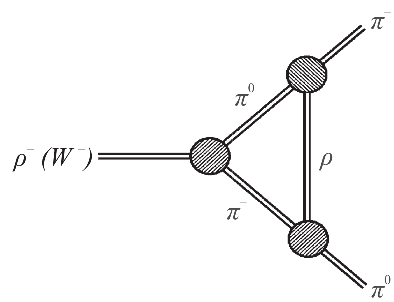


Рис. 8. Взаимодействие пионов во конечном состоянии в случае распада τ-лептона

где G_F– константа Ферми, V_{ud} – элемент матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскавы, $L_\mu^{\mathrm{weak}} = \bar{\nu}_\tau\gamma_\mu\left(1 - \gamma^5\right)\tau^-$ – слабый лептонный ток. Первое слагаемое в первых квадратных скобках соответствует контактному вкладу, т.е. вкладу диаграмм без перехода W-бозона в промежуточные мезоны. Второе слагаемое — вкладу с промежуточным ρ-мезоном. Первое слагаемое в фигурных скобках соответствует диаграмме без взаимодействия пионов в конечном состоянии.

В итоге для определенного в предыдущем разделе параметра обрезания мезонной петли находим парциальную ширину данного распада:

$$\mathrm{Br}(\tau \to \pi\pi\nu) = (25.0 \pm 1.2)\,\%, \tag{12}$$

где теоретическая неопределенность $\sim 5\,\%$ оценена по результатам сравнения предсказаний киральной $U(2)\times U(2)$ модели НИЛ с экспериментальными данными по взаимодействию мезонов, состоящих только из легких кварков [3]. Теоретическая неопределенность связана с эффектами, нарушающими киральную симметрию, и ограниченностью ведущего по $1/N_c$ приближения модели. Экспериментальное значение ширины этого распада [15]

$$\mathrm{Br}(\tau \to \pi\pi\nu)_{\mathrm{exp}} = (25.49 \pm 0.09)\,\%. \tag{13}$$

Без учета взаимодействия в конечном состоянии стандартная модель НИЛ предсказывала для этого распада парциальную ширину приблизительно 17 %. Видно, что как и в случае электрон-позитронной аннигиляции в два пиона, учет обмена пионов ρ-мезоном позволил получить удовлетворительное согласие с экспериментальными данными и для рассматриваемого распада.

5. Заключение. Таким образом, мы показали, что в рассмотренных процессах учет взаимодействия в конечном состоянии играет очень важную роль. Последнее обусловлено тем, что в данных процессах пионы рождаются в P-волне, что дает им возможность обменяться ρ-мезоном, константы взаимодействия с которым велики. Также большой вклад взаимодействия в конечном состоянии обусловлен относительной малостью энергии и близостью к порогу рождения пионов. Удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для обоих случаев подтверждает применимость гипотезы сохранения векторного тока.

Адекватное описание взаимодействий мезонов в конечном состоянии невозможно в рамках стандартной модели НИЛ, так как она сформулирована в низшем порядке по $1/N_c$. Тогда как учет взаимодействия пионов в конечном состоянии требует выхода за рамки этого приближения, что и было сделано в настоящей работе. По известным экспериментальным данным для процесса $e^+e^- \to \pi^+\pi^-$ было получено значение параметра обрезания мезонной петли, описывающей взаимодействие пионов в конечном состоянии. В результате удалось описать распад $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ в удовлетворительном согласии с экспериментом.

В данной работе мы ограничились рассмотрением области относительно малых инвариантных масс пары пионов вблизи пика ρ-мезона, в которой вклад взаимодействий в конечном состоянии оказался существенным. Понятно, что в процессе электрон-позитронной аннигиляции в два пиона при энергиях выше 1 ГэВ будет необходимо учесть и вклады возбужденных состояний мезонов, в первую очередь, $\rho(1450)$-мезона, что можно сделать в рамках расширенной модели НИЛ [5–7]. Однако в рассмотренной здесь области энергий мы эффективно включаем эти вклады в обсуждавшуюся выше оценку теоретической неопределенности стандартной модели НИЛ.

1. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
2. D. Ebert and M. K. Volkov, Z. Phys. C **16**, 205 (1983).
3. M. K. Volkov, Sov. J. Part. Nucl. **17**, 186 (1986).
4. D. Ebert and H. Reinhardt, Nucl. Phys. B **271**, 188 (1986).
5. M. K. Volkov and C. Weiss, Phys. Rev. D **56**, 221 (1997).
6. M. K. Volkov, Phys. Atom. Nucl. **60**, 1920 (1997).
7. M. K. Volkov, D. Ebert, and M. Nagy, Int. J. Mod. Phys. A **13**, 5443 (1998).
8. M. K. Volkov and A. B. Arbuzov, Phys. Part. Nucl. **47**, 489 (2016).
9. M. K. Volkov and A. B. Arbuzov, Phys.-Uspekhi **60**, 643 (2017).
10. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, JETP Lett. **108**, 347 (2018).
11. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Eur. Phys. J. A **55**, 165 (2019).
12. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, JETP Lett. **110**, 237 (2019).
13. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Nucl. Phys. A **1000**, 121810 (2020).
14. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Int. J. Mod. Phys. A **35**, 2050035 (2020).
15. M. Tanabashi, K. Hagiwara, K. Hikasa et al. (Particle Data Group), Phys. Rev. D **98**, 030001 (2018).
16. J. H. Kuhn and A. Santamaria, Z. Phys. C **48**, 445 (1990).
17. E. Bartos, S. Dubnicka, A. Z. Dubnickova, and H. Hayashii, Int. J. Mod. Phys. A **32**, 1750154 (2017).
18. J. A. Miranda and P. Roig, JHEP **11**, 038 (2018).

19. L. R. Dai, R. Pavao, S. Sakai, and E. Oset, Eur. Phys. J. A **55**, 20 (2019).
20. M. Benayoun, EPJ Web Conf. **118**, 01001 (2016).
21. M. N. Achasov, K. I. Beloborodov, A. V. Berdyugin et al. (Collaboration), JETP **101**(6), 1053 (2005).
22. S. Schael, R. Barate, R. Bruneliere et al. (ALEPH), Phys. Rep. **421**, 191 (2005).
23. M. Fujikawa, H. Hayashii, S. Eidelman et al. (Belle), Phys. Rev. D **78**, 072006 (2008).
24. S. Actis, A. Arbuzov, G. Balossini et al. (Working Group on Radiative Corrections and Monte Carlo Generators for Low Energies), Eur. Phys. J. C **66**, 585 (2010).
25. M. Dax, T. Isken, and B. Kubis, Eur. Phys. J. C **78**, 859 (2018).
26. S. Weinberg, Physica A **96**, 327 (1979).
27. J. Gasser and H. Leutwyler, Annals Phys. **158**, 142 (1984).
28. T. N. Truong, Phys. Rev. Lett. **67**, 2260 (1991).
29. A. G. Nicola, J. R. Pelaez, and G. Rios, Phys. Rev. D **77**, 056006 (2008).
30. D. Ebert, T. Feldmann, and M. K. Volkov, Int. J. Mod. Phys. A **12**, 4399 (1997).
31. M. K. Volkov, E. A. Kuraev, and Y. M. Bystritskiy, Central Eur. J. Phys. **8**, 580 (2010).

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 8, pp. 499 – 500

Search for signs of neutron and proton halos in the isobaric analog excited states of A = 14 nuclei

A. S. Demyanova[+1)], *A. N. Danilov*[+], *A. A. Ogloblin*[+], *S. A. Goncharov*[*], *T. L. Belyaeva*[×], *W. H. Trzaska*[°], *V. I. Starastsin*[+]

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

[*]*Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia*

[×]*Universidad Autónoma del Estado de México, 50000 Toluca, México*

[°]*Department of Physics, University of Jyväskylä, FI-40014 Jyväskylä, Finland*

Submitted 4 September 2020
Resubmitted 4 September 2020
Accepted 16 September 2020

DOI: 10.31857/S1234567820200021

One of the most striking discoveries in nuclear physics made at the end of the past century was the finding the neutron halo in the ground states of some light nuclei [1] located near the neutron stability boundary. The halo manifests itself in the presence of a diffuse surface region surrounding a core with a normal nuclear density and containing only neutrons. The result is a long "tail" of their wave function and, correspondingly, an increase in the radius of the entire nucleus in a given state.

Until recently, it was believed that the halo can be formed only in the ground states of radioactive nuclei located near stability boundaries. It turned out that the region of existence of the halo is much wider than previously thought: the halo was found in nuclei not only located near the stability boundaries, but also far from it; not only in the ground states [2], but also in the excited states [3, 4]. Of particular interest is the accumulation of information that states possessing halo properties can be located not only in the discrete spectrum, but also in the continuum [5], and the problem of their unified description is formulated as one of the most important [2]. Besides the neutron halo, the proton halos in ^{8}B [6], ^{17}F [7], and ^{13}N [8] were observed.

The purpose of this article is to search and study nucleonic halo in the isobaric analog states (IASs) of the $A = 14$ nuclei. This allows one to investigate the manifestation of isotopic invariance at new objects and to relate the properties of the neutron and proton halos. The data on the radii can give new information for solving the long-standing problem of a unified description of the halo phenomenon in both parts of the spectrum, discrete and continuous. Our group is one of the first who started works in this area.

The IASs with isospin $T = 1$ in triplet of the $A = 14$ nuclei: ^{14}C, ^{14}N, and ^{14}O, are of particular interest from the point of view of one-nucleon halo formation.

In [9], Liu carried out the ANC analysis of the ^{13}C(d, p)^{14}C data at $E(d) = 17.7$ MeV [10] and revealed that the 6.09-MeV 1^- and 6.90-MeV 0^- states of ^{14}C satisfy the neutron halo criteria. It was shown that the radius of the valence neutron separation is approximately two times larger (4.57 and 5.78 fm, respectively) than the size of the core (2.48 fm). The probability of the valence neutron to be outside the nuclear force range (D_1) and the contribution of the asymptotic part of the wave function to the *rms* radius (D_2) are, respectively, greater than 50 and 90 % for the 6.09-MeV 1^- and 6.90-MeV 0^- states in ^{14}C. So, a strict definition of neutron halo is fulfilled.

The observation of neutron halo in the 1^- state of ^{14}C can be used as an argument in favor of a possibility of a proton halo in the 1^- IASs of ^{14}N and ^{14}O. We can expect the formation of a proton halo in the 8.06-MeV 1^- state of ^{14}N and the 5.17-MeV 1^- state of ^{14}O located in the vicinity of the proton emission threshold.

The proposed approach of determining exotic structure is based on measuring the nuclear radii. In our group, several methods are developed to be used for measuring radii of nuclei in the short-lived excited states: the MDM [11], the ANC method [3, 4], and the nuclear rainbow method (NRM) [12]. The ANC method is the most appropriate to measure halo radii.

Our preliminary MDM analysis of the elastic and inelastic $\alpha + {}^{14}$C scattering data at $E(\alpha) = 35$ MeV [13] shows that the 6.09-MeV 1^- state has an increased ra-

1)e-mail: a.s.demyanova@bk.ru

dius. Extrema positions for the 6.09-MeV 1^- state are shifted towards smaller angles as compared to the curve extracted from the elastic scattering data. This result is a consequence of an increased radius. We have found that the *rms* radius of ^{14}C in the 6.09-MeV 1^- state is equal to 2.7 ± 0.1 fm. We determined the radius of valence neutron to be equal ≈ 6 fm, slightly larger than the result of the ANC calculations [9].

In order to study the 1^-, 8.06-MeV state of ^{14}N, we use the literature data of the $^{13}\mathrm{C}(^3\mathrm{He}, \mathrm{d})^{14}\mathrm{N}$ reaction [13] and analyze them by the coupled-reaction-channels (CRC) method, implying a finite-range one-neutron direct transfer mechanism in the post representation by using the code FRESCO [14].

The 1^-, 8.06-MeV excited states of ^{14}N is localized only 0.51 MeV above the proton emission threshold and belongs to the continuum spectrum. In order to determine the radius of ^{14}N in this state, we carry out the ANC calculation with a small positive proton binding energy ($\varepsilon = -0.1$ MeV). Thus, we can determine the *rms* radius of the last proton by determining the *rms* radius of the *sp* wave function. It is found to be $R_p = 5.9 \pm 0.3$ fm (the channel radius R_N is taken as 5.0 fm). The D_2 coefficient achieves 90 %. The proton transfer reaction to this state is definitely peripheral, though the D_1 coefficient is lower than 50 %.

The corresponding *rms* matter radii of ^{14}N in the state is found equal to R_{rms} (1^-, 8.06 MeV) $= 2.67 \pm$ ± 0.07 fm and is increased relatively to the radius of ^{14}N in its ground state (g.s.), R_{rms} (g.s.) $= 2.47$ fm [15]. The great values of D_1 and D_2 coefficients and the increased *rms* radius indicate the presence of proton halo in the 8.06-MeV 1^- state of ^{14}N. This result is obtained for the first time. It should be also mentioned that the *rms* radius of the 8.06-MeV 1^- state of ^{14}N is very close to the value obtained by the MDM for the 6.09-MeV 1^- state of ^{14}C.

We carry out the MDM analysis of the differential cross sections of the $^{14}\mathrm{N}(^3\mathrm{He}, \mathrm{t})^{14}\mathrm{O}$ reaction leading to the 0^+ g.s. and the excited 5.17-MeV 1^- states of ^{14}O at $E_{\mathrm{lab}} = 44.6$ [16] and 420 MeV [17] and estimated its value as 2.6 ± 0.2 fm.

Two independent methods, the ANC and the MDM, were used for analysis of the isobaric analog states with isospin $T = 1$ in triplet of the $A = 14$ nuclei: ^{14}C, ^{14}N, and ^{14}O. All calculations gave the similar enhanced *rms* matter radii (within the error bars) for all three nuclei in these states: 2.7 ± 0.1 fm for ^{14}C, 2.67 ± 0.07 fm for ^{14}N, and 2.6 ± 0.2 fm for ^{14}O. Moreover, the ANC analysis showed the signs of a proton halo in the 8.06-MeV 1^- state of ^{14}N. This result was obtained for the first time. Previously neutron halo was confirmed for the 6.09-MeV 1^- state of ^{14}C. In order to answer the question whether a proton halo exists in the corresponding state of ^{14}O, one requires a more complete theoretical analysis, which is still in progress.

This work was supported by Russian Science Foundation 18-12-00312.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020200011

1. I. Tanihata, H. Hamagaki, O. Hashimoto, S. Nagamiya, Y. Shida, N. Yoshikawa, O. Yamakawa, K. Sugimoto, T. Kobayashi, D. E. Greiner, N. Takahashi, and Y. Nojiri, Phys. Lett. B **160**, 380 (1985).
2. I. Tanihata, H. Savajols, and R. Kanungo, Prog. Part. Nucl. Phys. **68**, 215 (2013).
3. Z. H. Liu, C. J. Lin, H. Q. Zhang, Z. C. Li, J. S. Zhang, Y. W. Wu, F. Yang, M. Ruan, J. C. Liu, S. Y. Li, and Z. H. Peng, Phys. Rev. C **64**, 034312 (2001).
4. T. L. Belyaeva, R. Perez-Torres, A. A. Ogloblin, A. S. Demyanova, S. N. Ershov, and S. A. Goncharov, Phys. Rev. C **90**, 064610 (2014).
5. A. A. Ogloblin, A. N. Danilov, A. S. Demyanova, S. A. Goncharov, T. L. Belyaeva, and W. Trzaska, in *Nuclear Particle Correlations and Cluster Physics*, World Scientific, Singapore (2017), p. 311.
6. R. E. Warner, J. H. Kelley, P. Zecher, F. D. Becchetti, J. A. Brown, C. L. Carpenter, A. Galonsky, J. Kruse, A. Muthukrishnan, A. Nadasen, R. M. Ronningen, P. Schwandt, B. M. Sherrill, J. Wang, and J. S. Winfield, Phys. Rev. C **52**, R1166 (1995).
7. Zh. Dongmei, Zh. Yongnan, Yu. Daqing, Zh. Xizhen, Z. Yi, T. Minamisono, M. Matsuta, M. Fukuda, M. Mihara, Zh. Chunlei, W. Zhiqiang, Du. Enpeng, L. Hailong, X. Guoji, and Zh. Shengyun, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **34**, 523 (2007).
8. A. S. Demyanova, A. A. Ogloblin, S. A. Goncharov, A. N. Danilov, T. L. Belyaeva, and W. Trzaska, Phys. Atom. Nucl. **80**, 831 (2017).
9. Z. H. Liu, Chin. Phys. Lett. **19**, 1071 (2002).
10. R. J. Peterson, H. C. Bhang, J. J. Hamill, and T. G. Masterson, Nucl. Phys. A **425**, 469 (1984).
11. A. N. Danilov, T. L. Belyaeva, A. S. Demyanova, S. A. Goncharov, and A. A. Ogloblin, Phys. Rev. C **80**, 054603 (2009).
12. A. S. Demyanova, A. A. Ogloblin, S. A. Goncharov, and T. L. Belyaeva, Int. J. Mod. Phys. E **17**, 2118 (2008).
13. R. J. Peterson and J. J. Hamill, Nucl. Phys. A **362**, 163 (1981).
14. FRESCO user's manual and code, available from the author.
15. A. Ozawa, T. Suzuki, and I. Tanihata, Nucl. Phys. A **693**, 32 (2001).
16. G. C. Ball and J. Cerny, Phys. Rev. **155**, 1170 (1967).
17. A. Negret, T. Adachi, B. R. Barrett et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **97**, 062502 (2006).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 501 – 507

Нестандартная кинетика низкотемпературной люминесценции микро- и нанопорошков антазной фазы диоксида титана

В. С. Кривобок[+1)], *А. В. Колобов*[+], *С. Е. Димитриева*[+*], *Д. Ф. Аминев*[+], *С. И. Ченцов*[+], *С. Н. Николаев*[+], *В. П. Мартовицкий*[+], *Е. Е. Онищенко*[+]

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

[*]*Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского, 109004 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 22 августа 2020 г.
После переработки 8 сентября 2020 г.
Принята к публикации 11 сентября 2020 г.

Показано, что известная полоса люминесценции диоксида титана (анатаз), наблюдаемая в диапазоне 2.0–2.5 эВ, при низких (5 К) температурах демонстрирует степенной характер затухания, который для микрокристаллов регистрируется в широком диапазоне времен задержки ~ 20 нс–1 мс. При этом характерное время гашения сигнала люминесценции достигает ~ 100 мкс. Предложена простая модель, которая, в случае степенного спада, позволяет восстановить статистику распределения излучающих состояний по их временам жизни. На основе данной модели обнаруженные степенные спады отождествлены с механизмами излучательной рекомбинации, при которых электрон, связанный на доноре, рекомбинирует с дыркой, связанной на акцепторе. При переходе к кристаллам с размером ~ 10 нм степенные спады сигнала, характерные для данного механизма, также регистрируются, но наблюдается перестройка кинетики люминесценции, связанная с безызлучательной рекомбинацией электронно-дырочных пар через поверхностные состояния.

DOI: 10.31857/S1234567820200033

1. Введение. В современной литературе активно обсуждаются механизмы излучательной рекомбинации анатазной фазы диоксида титана (TiO_2), формирующие интенсивные линии излучения в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах [1–10]. Помимо фундаментального интереса, связанного с изучением люминесцентных центров, понимание природы механизмов рекомбинации представляет интерес для ряда приложений TiO_2, имеющих отношение к восстановлению окружающей среды [11, 12], производству солнечных батарей, сенсибилизированных красителем [13], производству газовых датчиков [14, 15], разработке самоочищающихся поверхностей [16] и др. [17, 18].

В ранних работах [19, 20] люминесценция TiO_2 в видимом диапазоне связывалась с автолокализованными экситонами. Позднее появились работы, в которых полосы люминесценции в видимом и ближнем ИК диапазонах приписывались рекомбинации с участием носителей, связанных на химических дефектах [1–3], комбинациям автолокализованных экситонов и рекомбинации с участием структурных дефектов [4, 5], механизму излучательной рекомбинации, при котором электрон, связанный на доноре, рекомбинирует с дыркой, связанной на акцепторе (так называемая люминесценция донорно-акцепторных пар) [6]. В последнем случае акцептор отождествляется с гидроксильной группой, а донор – с вакансией кислорода [6]. Также до конца остаются не ясными роль поляронных эффектов [9, 10] и влияние расположения излучающих дефектов по отношению к поверхности [1, 2, 7, 8].

В данной работе обсуждается природа одной из основных полос люминесценции анатазной фазы TiO_2, расположенной в районе 2.3 эВ (“Green luminescence band” в англоязычной литературе). Установлено, что при гелиевых температурах данная полоса демонстрирует степенной характер затухания люминесценции как для микро-, так и для нанопорошков TiO_2. Зарегистрированные спады сигнала люминесценции не могут быть описаны в рамках представлений о влиянии эффектов локального поля на радиационное время жизни излучающих центров в неоднородных средах [21, 22]. В случае микропорошка TiO_2 спектрально-кинетические свойства полосы позволяют приписать ее излучению объемных донорно-акцепторных пар. При переходе к нанопорошкам наблюдается перестройка степенного спада, которая объяснена влиянием на люминесценцию донорно-акцепторных пар безыз-

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

лучательной рекомбинации через поверхностные состояния.

2. Описание эксперимента. Исследуемые материалы представляли собой порошки анатазной фазы TiO_2, полученные с помощью жидкофазного метода и отличающиеся средним размером частиц. Измерения, выполненные с помощью электронной микроскопии показали, что первый порошок, в основном, состоит из частиц TiO_2 размером ~ 1–20 мкм. Для большинства частиц наблюдались признаки огранки. Второй порошок состоял из наночастиц анатазной фазы размером ~ 6–12 нм [23]. Данная величина была подтверждена измерениями динамического рассеяния (прямые измерения статистики распределения размеров с помощью электронного микроскопа затруднены из-за склонности частиц к слипанию). При проведении оптических исследований порошки были впрессованы в индиевые пластины.

Для оценки кристалличности изучаемых порошковых материалов мы использовали спектроскопию комбинационного рассеяния света и рентгеноструктурый анализ. Рентгеноструктурые исследования проводились на рентгеновском дифрактометре Panalytical Expert Pro MRD. Порошки помещались на малошумящую подложку монокристаллического кремния и параметры прописанных дифрактограмм уточнялись методом Ритвельда в программе Panalytical Highscore. Для измерений спектров комбинационного рассеяния света (КРС) использовался портативный раман-спектрометр "Инспектр" R532 в составе микроскопа "Olympus CX-41". Лазерный пучок (длина волны 532 нм) заводился в конфокальный оптический микроскоп ("Olympus CX-41") и фокусировался с помощью объективов на образец, помещенный на регулируемом столике. Рамановское излучение регистрировалось матрицей на основе прибора с зарядовой связью. Спектрограф обеспечивал запись спектров КРС в диапазоне 150–4000 $см^{-1}$ при спектральном разрешении 4 $см^{-1}$.

Для измерения спектров фотолюминесценции (ФЛ) образцы помещали в проточный гелиевый криостат, работающий в диапазоне температур 5–300 K. Источником возбуждения являлся импульсный лазер, работающий на длине волны 355 нм. Длительность импульса возбуждения составляла 5 нс, энергия импульса – 10 мкДж. Диаметр пятна возбуждения на образце составлял 6 мм. Сигнал люминесценции анализировали с помощью решеточного монохроматора, оснащенного фотоэлектронным умножителем с мультищелочным фотокатодом. Сигнал с фотоумножителя регистрировался в режиме счета фотонов с временным разрешением. Временное разрешение регистрирующей системы составляло ~ 1 нс при спектральном разрешении не хуже 0.5 мэВ.

3. Структурные свойства выбранных порошков. На рисунке 1a приведены спектры КРС для микро- (синяя кривая) и нано- (черная кривая)

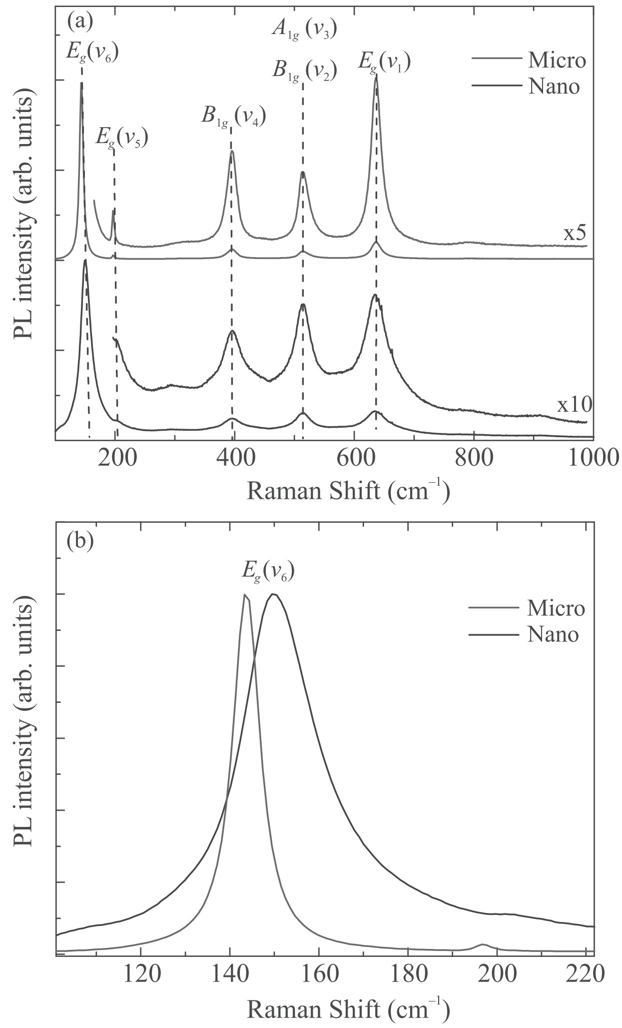


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Спектры КРС для микропорошков (синяя кривая) и нанопорошков (черная кривая). (b) – Фрагменты спектров КРС, демонстрирующие изменение пика $E_g(\nu_6)$ при переходе от микропорошков (синяя кривая) к нанопорошкам (черная кривая)

порошков TiO_2, нормированные на максимум интенсивности. В спектрах как микро, так и нанофракции доминирует линия, соответствующая моде $E_g(\nu_6)$, которая включает в себя растяжение O-Ti-O связи вдоль оси a решетки анатаза. Положение линии $E_g(\nu_6)$ для микро-фракции составляет

$143\,\text{см}^{-1}$, в то время как для нано-фракции линия $E_g(\nu_6)$ сдвинута в длинноволновую область, за счет размерных эффектов [24, 25]. Линия $E_g(\nu_5)$ в районе $196\,\text{см}^{-1}$, расположенная на длинноволновом плече $E_g(\nu_6)$, принадлежит к изгибным колебаниям O-Ti-O связей. Данная линия почти не видна в спектре нанофракции за счет заметного уширения. Далее следует триплет $395\,\text{см}^{-1}$, $514\,\text{см}^{-1}$ и $637\,\text{см}^{-1}$, отвечающий модам $B_{1g}(\nu_4)$, смеси мод $A_{1g}(\nu_3)$, $B_{1g}(\nu_2)$ и моде $E_g(\nu_1)$, соответственно. Все описанные линии являются характерными для спектров КРС анатазной фазы TiO_2 [26, 27]. Признаков других фаз TiO_2 не регистрируется, как для нано-, так и для микропорошков. На рисунке 1b более подробно показана линия $E_g(\nu_6)$ для микро- (синяя кривая) и нано- (черная кривая) фракций. Сдвиг и уширение этой линии на $\sim 5\,\text{см}^{-1}$ позволяют оценить средний размер кристаллических зерен в нанопорошке TiO_2, который составляет $\sim$6–10 нм [24, 25].

Рисунок 2 иллюстрирует полученные рентгеновские дифрактограммы для микропорошка (синяя

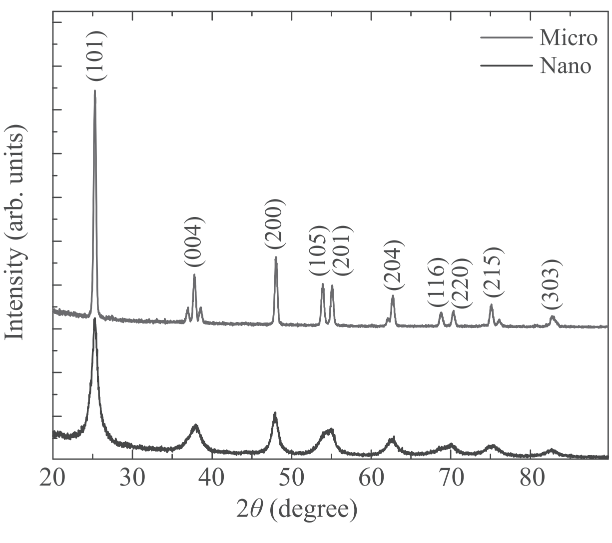


Рис. 2. (Цветной онлайн) Рентгеновские дифрактограммы для микропорошка (верхняя кривая) и нанопорошка (нижняя кривая)

кривая) и нанопорошка (черная кривая). Для каждого из порошков регистрируются рефлексы только тетрагональной фазы анатаза. В случае микропорошка параметры решетки $a = b = 3.7781 \pm 0.0003$ Å, $c = 9.4944 \pm 0.0003$ Å, для нанопорошка – $a = b = 3.7990 \pm 0.0003$ Å, $c = 9.4535 \pm 0.0003$ Å. Для микропорошка уширения рефлексов не регистрируется, в то время как для нанопорошка рефлексы заметно уширены. Измерения полуширины отдельных рефлексов и аппроксимация рентгеновских кривых позволили оценить средний размер нанокристаллов, который составил $\sim 10 \pm 1$ нм.

Таким образом, отобранные для исследований порошки представляют собой TiO_2 в форме анатаза и не содержат заметных включений рутила или брукита. Основное отличие порошков состоит в размере кристаллических зерен, который составляет $\sim$6–12 нм для нанопорошка и 1–20 мкм для микропорошка.

4. Люминесцентные свойства. На рисунке 3 показаны проинтегрированные по времени спектры ФЛ для микро- и нанопорошка TiO_2, записанные при

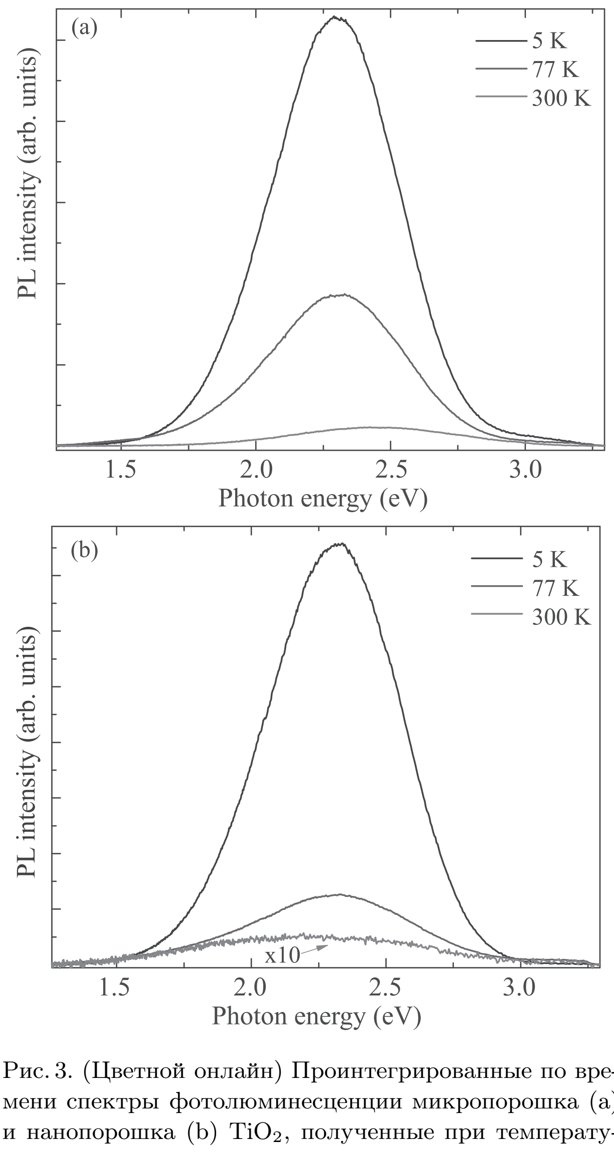


Рис. 3. (Цветной онлайн) Проинтегрированные по времени спектры фотолюминесценции микропорошка (a) и нанопорошка (b) TiO_2, полученные при температурах 5 K (черная кривая), 77 K (синяя кривая) и 300 K (красная кривая)

температурах 5, 77 и 300 K. Видно, что в спектрах ФЛ как микро-, так и нанопорошков доминирует широкая полоса с максимумом в районе ~ 2.3 эВ. Данная полоса совпадает по спектральному положению с неоднократно описывавшейся в литературе "зеленой полосой" ФЛ анатазной фазы TiO_2 [1–6, 19, 20, 28]. Стоит отметить, что отождествление "зеленой полосы" с определенным механизмом излучательной рекомбинации до сих пор является предметом оживленной дискуссии. В качестве источника излучения предлагаются рекомбинация носителей, связанных на химических дефектах [1–3], комбинации автолокализованных экситонов и рекомбинации с участием структурных дефектов [4, 5], рекомбинации донорно-акцепторных пар [6].

Как видно из рис. 3, при увеличении температуры, как для микро-, так и для нанопорошка TiO_2 происходит уширение полосы, тушение сигнала ФЛ, и смещение максимума линии в коротковолновую область. Это находится в согласии с литературными данными о температурной зависимости ФЛ TiO_2 при возбуждении выше края фундаментального поглощения [20, 28]. Характер тушения сигнала ФЛ с температурой указывает на то, что состояние образовано с участием неглубокого уровня, энергия активации которого (~ 50 мэВ) сопоставима с тепловой энергией при комнатной температуре [20]. В случае нанофракции тушение происходит быстрее, что указывает на увеличение роли безызлучательных процессов в нанопорошке.

На рисунке 4 показаны разрешенные по времени спектры ФЛ, демонстрирующие поведение "зеленой полосы" со временем для микро- (рис. 4a) и нано- (рис. 4b) порошков TiO_2. Видно, что по мере увеличения времени задержки линия не меняет своей формы и максимум линии не смещается, однако происходит затухание линии, причем для нанофракции затухание происходит быстрее, вероятно, из-за большей роли безызлучательных процессов. Данные, представленные на рис. 3, 4, подтверждают, что и в микро-, и в нанопорошках за "зеленую полосу" ответственен один и тот же механизм излучательной рекомбинации. Наличие медленного затухания указывает на то, что уменьшение температуры до ~ 5 K позволяет подавить тепловую диссоциацию мелких состояний, ответственных за линию в районе 2.3 эВ. Следует отметить, что о сравнительно медленном затухании сигнала ФЛ, наблюдаемом для "зеленой полосы" при низких температурах, насколько нам известно, ранее не сообщалось.

На рисунке 5 показана кинетика ФЛ в районе 2.3 эВ, измеренная для микро- (рис. 5a) и нано- (рис. 5b) порошка TiO_2 при температуре 5 K. Для микропорошка спад в диапазоне времен задержки

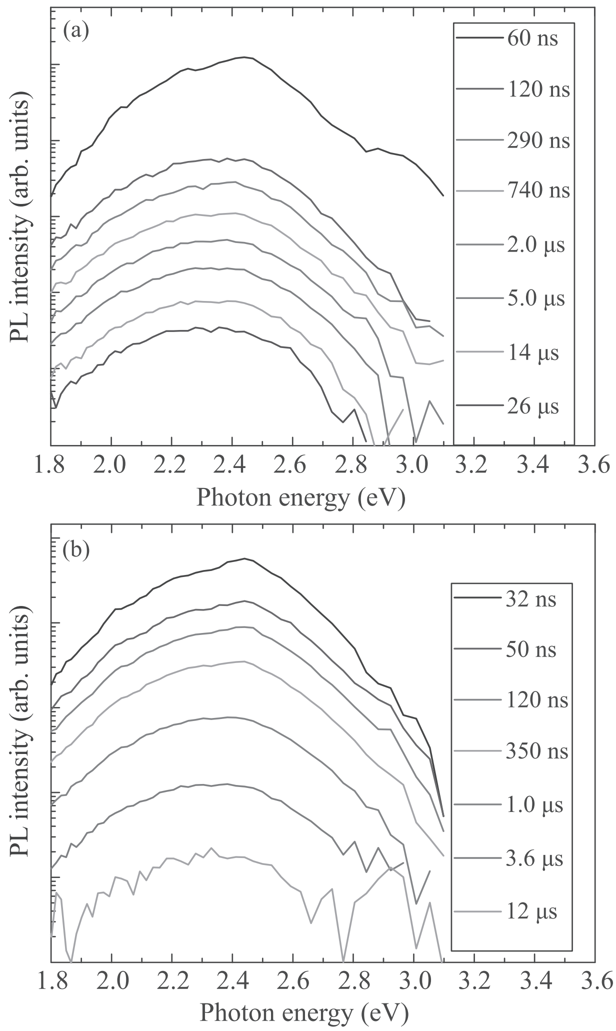


Рис. 4. (Цветной онлайн) Разрешенные по времени спектры ФЛ для микропорошка (a) и нанопорошка (b) TiO_2, записанные при температуре 5 K

$t = 2 \cdot 10^1$–10^6 нс неэкспоненциален и описывается степенной функцией t^{-x} с показателем $x = 0.8$. Схожая ситуация наблюдается для нанопорошков в диапазоне времен задержки $t = 4 \cdot 10^2$–$8 \cdot 10^4$ нс. Соответствующий спад аппроксимируется степенной функцией с показателем $x = 1.44$. При этом затухание сигнала ФЛ в диапазоне $t = 30$–300 нс аппроксимируется степенным спадом с $x = 0.5$.

Для каждого из двух типов порошков кинетики ФЛ, представленные на рис. 5, содержат выраженный пик при временах отстройки $t = 10 - 20$ нс. Данный пик связан с влиянием экситонов на кинетику люминесценции TiO_2. Это, в частности, подтверждается анализом спектров и кинетики ФЛ вблизи непрямого края фундаментального поглощения TiO_2. В условиях эксперимента экситонная люминесценция TiO_2 не наблюдалась при временах отстрой-

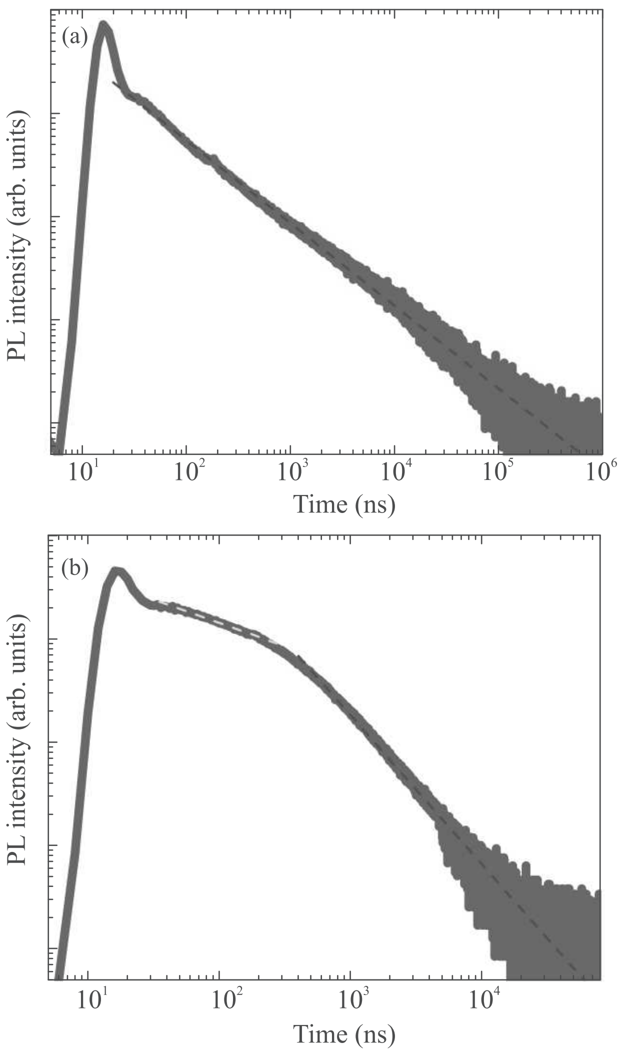


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Затухание сигнала люминесценции в районе 2.3 эВ, измеренное для микропорошка (серая кривая) и его аппроксимация степенной t^{-x} зависимостью с показателем $x = 0.8$ (красный штрих). (b) – Затухание сигнала люминесценции в районе 2.3 эВ, измеренное для нанопорошка (серая кривая) и аппроксимация его фрагментов степенными зависимостями с показателем $x = 0.5$ (желтый штрих) и $x = 1.44$ (красный штрих)

ки, превышающих ~ 20 нс, поэтому при рассмотрении упомянутых выше степенных спадов, наблюдаемых при $t > 20$ нс, мы не учитывали процессы передачи возбуждения от экситонной подсистемы.

5. Связь степенных спадов с распределением излучающих объектов. Рассмотрим экспоненциальный спад сигнала от эффективного излучателя

$$f(t,\alpha) = \alpha \exp(-\alpha t), \tag{1}$$

нормированный на "один фотон":

$$\int_0^\infty f(t,\alpha)dt = 1. \tag{2}$$

Наблюдаемый в эксперименте спад сигнала люминесценции можно представить в виде ансамбля излучателей, описываемых (1). Параметр α, позволяющий классифицировать излучатели в ансамбле, определяет время затухания сигнала для объектов заданного типа. Для ансамбля излучателей, характеризующегося функцией распределения $g(\alpha)$, спад сигнала имеет вид:

$$F(t) = \int_0^\infty f(t,\alpha)g(\alpha)d\alpha. \tag{3}$$

При наличии безызлучательной рекомбинации будет наблюдаться уменьшение количества эффективных излучателей, которое скажется на функции $g(\alpha)$. Функцию $g(\alpha)$ удобно нормировать на полное число эффективных излучателей N (интегральный сигнал ФЛ):

$$\int_0^\infty g(\alpha)d\alpha = N. \tag{4}$$

Так как обсуждается степенной спад сигнала, то функцию $g(\alpha)$ надо искать в виде

$$g(\alpha) = B\alpha^n. \tag{5}$$

Это связано с тем, что

$$\int_0^\infty \exp(-\alpha t)\alpha^m d\alpha = \frac{\Gamma(m+1)}{t^{m+1}}, \tag{6}$$

где $\Gamma(m)$ – гамма-функция Эйлера. В этом случае предел больших α необходимо обрезать неким (большим) конечным значением $\alpha = A$. Эта величина приблизительно соответствует обратному времени, при котором в экспериментально измеренном спаде начинается степенная зависимость. Тогда нормировка на количество излучателей

$$\int_0^A g(\alpha)d\alpha = \frac{BA^{n+1}}{n+1} = N \tag{7}$$

позволяет рассчитать масштабирующий множитель

$$B = \frac{N(n+1)}{A^{n+1}}. \tag{8}$$

Подставив (1), (5), (8) в выражение (3), получаем

$$F(t) = \int_0^\infty \alpha \exp(-\alpha t) B\alpha^n d\alpha = \frac{N(n+1)\Gamma(n+2)}{A^{n+1}t^{n+2}}. \quad (9)$$

Выражение (9) позволяет оценить статистику распределения отдельных излучающих объектов по скорости рекомбинации (времени жизни) исходя из степенного спада сигнала. Следует отметить, что сочетание целого ряда неопределенных факторов, таких как неизвестная концентрация излучающих дефектов, влияние встроенных электрических полей на силы осциллятора переходов, эффекты локального поля, различные каналы безызлучательной рекомбинации и др. не позволяют применять (9) для количественных расчетов. Тем не менее, данное выражение вполне пригодно для качественной оценки свойств ансамбля излучающих дефектов.

Следует отметить, что к разбросу излучательных времен жизни для одиночных объектов могут приводить эффекты локального поля [21, 22]. В случае порошков TiO_2 роль таких эффектов можно оценить исходя из возможных флуктуаций показателя преломления от 2.55 (объемный анатаз, 530 нм) до ~ 1 (пустоты между кристаллами). Согласно [21, 22], это означает, что за счет эффекта локального поля, время спада для одиночных объектов может меняться в несколько раз. Данные изменения не достаточны для описания степенных спадов на рис. 5а, так как для этого необходимо допустить изменение излучательного времени жизни на ~ 3 порядка. Поэтому ниже будет приведен качественный анализ обнаруженных степенных спадов, в которых мы пренебрегли возможными эффектами локального поля.

В эксперименте с микрокристаллами $n+2=0.8$, т.е. $n=-1.2$. Это означает, что количество эффективных излучателей возрастает с увеличением их времени затухания. Такая ситуация не характерна для подавляющего большинства механизмов рекомбинации с участием свободных носителей, а также свободных и связанных на примесях экситонов. Тем не менее, она типична для люминесценции донорно-акцепторных пар в нелегированных (или умеренно легированных) материалах. Составная структура излучающего состояния приводит в этом случае к нестандартному распределению излучателей по их временам затухания: вероятность обнаружить донор и акцептор на заданном расстоянии r_{DA} монотонно увеличивается с ростом r_{DA} [29, 30]. Так как большие времена спада сигнала люминесценции донорно-акцепторных пар соответствуют большим r_{DA} [30], следует ожидать увеличения количества эффективных излучателей с ростом параметра α. Именно такая ситуация соответствует $n=-1.2$ в уравнении (5).

При переходе к нанокристаллам наблюдаются два степенных участка: (1) соответствующих малым временам задержки $n+2=0.5$, т.е. $n=-1.5$ и (2) большим временам задержки $n+2=1.44$, т.е. $n=-0.56$. При этом основные спектральные свойства полосы в районе 2.3 эВ полностью сохраняются, см. рис. 4. С одной стороны, отрицательные значения n для нанопорошка указывают на возрастание количества эффективных излучателей с увеличением их времени жизни. Это означает, что, как и в микропорошке, наблюдаемая кинетика люминесценции соответствует донорно-акцепторным парам. С другой стороны, при временах задержки $t \sim 300$ нс регистрируется перестройка степенного спада, которая вызвана изменением статистики распределения излучающих объектов по временам затухания. Данное поведение ожидаемо при наличии существенной безызлучательной рекомбинации через поверхностные состояния. Такая рекомбинация не должна быть существенна для донорно-акцепторных пар с малым r_{DA}, для которых излучательное время достаточно мало [30]. В то же время, по мере увеличения r_{DA} до величин, сопоставимых с размером нанокристаллов, следует ожидать неизбежного увеличения роли безызлучательной рекомбинации за счет захвата носителей на поверхностные состояния. Данный канал рекомбинации приведет к уменьшению количества эффективных излучателей, характеризующихся большими временами затухания, и, следовательно, увеличению параметра n.

Следует также отметить, что заметных изменений для функции $g(\alpha)$ при переходе от микро- к нанокристаллам не должно наблюдаться, если донорно-акцепторные пары формируются на поверхности или в непосредственной близости к ней. Этот аргумент независимо подтверждает объемный характер излучения донорно-акцепторных пар в микропорошке TiO_2.

6. Заключение. Таким образом, исследована кинетика низкотемпературной люминесценции нано- и микропорошков анатазной фазы диоксида титана в условиях импульсного возбуждения с энергией квантов, превышающей край фундаментального поглощения.

Показано, что одна из основных полос люминесценции, расположенная в районе 2.3 эВ ("Green band"), демонстрирует близкий к степенному характер затухания. При этом форма и положение данной линии слабо меняются при изменении времени задержки t по отношению к приходу импульса возбуждения. Затухание сигнала для микрокристаллов описывается степенным законом с показателем 0.8 в диапазоне времен задержки $t = 2\cdot10^1$–10^6 нс. Для нанокристаллов со средним размером ~ 10 нм наблюдаются степенные спады с $n = 1.44$ в диапазоне времен задержки $t = 4 \cdot 10^2$–$8 \cdot 10^4$ нс и с $n = 0.5$ в диапазоне времен задержки $t = 30$–300 нс. На границе измеренных спадов характерное время гашения сигнала люминесценции достигает ~ 100 мкс и ~ 10 мкс для микро- и нанокристаллов соответственно. Зарегистрированная неэкспоненциальная кинетика люминесценции не может быть вызвана только лишь эффектами локального поля, приводящим к сравнительно небольшим изменениям радиационного времени жизни излучающих центров в неоднородных средах [21, 22].

Для описания обнаруженных степенных спадов предложена простая модель, позволяющая восстановить статистику распределения излучающих состояний по их временам жизни. Данная модель позволила отождествить степенное затухание с показателем 0.5–1.44, наблюдаемое в микропорошках, с люминесценцией составных дефектов, таких как донорно-акцепторные пары. Обнаруженная в нанопорошках перестройка степенного спада сигнала люминесценции объяснена влиянием на излучение донорно-акцепторных пар безызлучательной рекомбинации через поверхностные состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант “Микромир” # 19-05-50145).

1. C. C. Mercado, F. J. Knorr, J. L. McHale, S. M. Usmani, A. S. Ichimura, and L. V. Saraf, J. Phys. Chem. C **116**, 10796 (2012).
2. D. K. Pallotti, L. Passoni, P. Maddalena, F. Di Fonzo, and S. Lettieri, J. Phys. Chem. C **121**, 9011 (2017).
3. C. Mercado, Z. Seeley, A. Bandyopadhyay, S. Bose, and J. L. McHale, ACS Appl. Mater. & Interfaces **3**, 2281 (2011).
4. L. Cavigli, F. Bogani, A. Vinattieri, V. Faso, and G. Baldi, J. Appl. Phys. **106**, 053516 (2009).
5. D. K. Pallotti, E. Orabona, S. Amoruso, C. Aruta, R. Bruzzese, F. Chiarella, S. Tuzi, P. Maddalena, and S. Lettieri, J. Appl. Phys. **114**, 043503 (2013).
6. X. Wang, Z. Feng, J. Shi, G. Jia, S. Shen, J. Zhou, and C. Li, Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 7083 (2010).
7. F. J. Knorr, C. C. Mercado, and J. L. McHale, J. Phys. Chem. C **112**, 12786 (2008).
8. C. Di Valentin and A. Selloni, J. Phys. Chem. Lett. **2**, 2223 (2011).
9. N. A. Deskins and M. Dupuis, Phys. Revi. B **75**, 195212 (2007).
10. J. R. De Lile, S. G. Kang, Y.-A. Son, and S. G. Lee, ACS Omega **4**, 8056 (2019).
11. A. Fujishima, X. Zhang, and D. A. Tryk, Surf. Sci. Rep. **63**(12), 515 (2008).
12. K. Rajeshwar, C. R. Chenthamarakshan, S. Goeringer, and M. Djukic, Pure Appl. Chem. **73**(12), 1849 (2001).
13. A. Hagfeldt and M. Graetzel, Chem. Rev. **95**(1), 49 (1995).
14. M. M. Arafat, B. Dinan, S. A. Akbar, and A. S. M. A. Haseeb, Sensors **12**(12), 7207 (2012).
15. D. K. Pallotti, L. Passoni, F. Gesuele, P. Maddalena, F. Di Fonzo, and S. Lettieri, ACS Sensors **2**(1), 61 (2017).
16. V. A. Ganesh, H. K. Raut, A. S. Nair, and S. A. Ramakrishna, J. Mater. Chem. **21**(41), 16304 (2011).
17. Д. А. Зимняков, С. А. Ювченко, Дж. С. Сина, О. В. Ушакова, Письма в ЖЭТФ **98**(6), 366 (2013).
18. *EFSA Panel on Food Additives and Nutrient Sources added to Food (ANS)*, EFSA Journal **14**(9), 4545 (2016).
19. H. Tang, H. Berger, P. E. Schmid, and F. Levy, Solid State Commun. **87**(9), 847 (1993).
20. H. Najafov, S. Tokita, S. Ohshio, A. Kato, and H. Saitoh, Jpn. J. Appl. Phys. **44**(1A), 245 (2005).
21. A. V. Naumov, A. A. Gorshelev, M. G. Gladush, T. A. Anikushina, A. V. Golovanova, J. Köhler, and L. Kador, Nano Lett. **18**, 6129 (2018).
22. М. Г. Гладуш, Т. А. Аникушина, А. А. Горшелев, Т. В. Плахотник, А. В. Наумов, ЖЭТФ **155**(5), 771 (2019).
23. http://www.xuzhounano.com/products/show-53.html.
24. W. F. Zhang, Y. L. He, M. S. Zhang, Z. Yin, and Q. Chen, J. Phys. D: Appl. Phys. **33**, 912 (2000).
25. K. R. Zhu, M. S. Zhang, Q. Chen, and Z. Yin, Phys. Lett. A **340**, 220 (2005).
26. T. Ohasaka, F. Izumi, and Y. Fujiki, J. Raman Spectrosc. **7**, 321 (1978).
27. S. K. Mukherjee and D. Mergel, J. Appl. Phys. **114**, 013501 (2013).
28. J. Preclíková, P. Galař, F. Trojánek, S. Daniš, B. Rezek, I. Gregora, Y. Němcová, and P. Malý, J. Appl. Phys. **108**, 113502 (2010).
29. А. А. Пручкина, В. С. Кривобок, С. Н. Николаев, Е. Е. Онищенко, А. Г. Белов, Н. А. Денисов, В. Н. Меринов, Письма в ЖЭТФ **98**(8), 508 (2013).
30. M. Ohishi, Jpn. J. Appl. Phys. **25**, 1546 (1986).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 508 – 515 © 2020 г. 25 октября

Мегаваттный импульсно-периодический эрбиевый 3-мкм лазер с компенсацией сильной тепловой линзы

А. В. Пушкин[1)], И. А. Словинский, Ф. В. Потемкин

Физический факультет и Международный учебно-научный лазерный центр, МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 сентября 2020 г.
После переработки 21 сентября 2020 г.
Принята к публикации 22 сентября 2020 г.

В работе продемонстрировано увеличение средней мощности импульсно-периодического (10 Гц) наносекундного 3-мкм лазера за счет компенсации сильной тепловой линзы в резонаторе лазера Cr:Er:YSGG с сохранением пиковой мощности мегаваттного уровня. Измерены теплонаведенные искажения пучка в семействе 3-мкм эрбиевых кристаллов (Er:YAG, Er:YSGG, Cr:Er:YSGG), предложена и экспериментально реализована схема компенсации тепловой линзы в лазере Cr:Er:YSGG с модуляцией добротности с энергией импульсов 23 мДж на частоте следования 10 Гц в маломодовом режиме. Разработанный подход позволяет управлять модой резонатора в мощных наносекундных 3-мкм лазерах с ламповой или диодной накачкой, использующихся для множества научных и технологических приложений, включая накачку лазерных кристаллов в среднем инфракрасном диапазоне, а также имеющих потенциал в областях лазерно-индуцированного микроструктурирования и тканевой инженерии.

DOI: 10.31857/S1234567820200045

1. Введение. В настоящее время мощные лазерные источники среднего инфракрасного диапазона вызывают большой интерес [1]. В частности, наносекундные лазеры с длиной волны около 3-мкм являются удобным инструментом для оптической накачки параметрических генераторов света [2], фемтосекундных усилителей на основе кристаллов Fe:ZnSe [3, 4], а также пикосекундных CO_2-усилителей [5]. Уникальной особенностью 3-мкм излучения является также его чрезвычайно высокое поглощение в воде и биологических тканях (коэффициент поглощения $\alpha \sim 10^4$ см$^{-1}$), что обуславливает большое количество технологических, научных и медицинских приложений таких источников и развитие новых лазерных сред в этом спектральном диапазоне [6].

Захватывающим применением таких лазеров может стать микроструктурирование прозрачных материалов с помощью лазерно-индуцированного жидкостного травления (*Laser-Induced Backside Wet Etching* – LIBWE) [7]. Обработка данным методом характеризуется аккуратными контурами и высокой гладкостью поверхностей (до 1 нм) [8]. Скорость травления позволяет точно регулировать рельеф формируемых структур и довольно быстро создавать глубокие кратеры. Микроструктурирование различных материалов может быть произведено при помощи стандартных методов обработки, например, жидкостным, сухим и плазменным травлением. Однако эти методы требуют использования специальных масок, создаваемых с помощью фотолитографии, и поэтому обладают малой гибкостью. Также для обработки материалов можно использовать абляционные методы, однако структуры, формируемые стандартными методами, характеризуются низкой гладкостью и неаккуратными контурами (особенно при обработке стекла), высокой скоростью травления (что свидетельствует о грубой степени обработки) [9, 10]. Как правило, для LIBWE используются наносекундные лазеры в сочетании с сильно поглощающей жидкостью (органическими красителями или даже жидким металлом [11]). Использование дистиллированной воды в качестве сильно поглощающей жидкости имеет потенциал сделать эту технологию безопасной, экологически чистой и дешевой.

Резонансное поглощение 3-мкм излучения в воде сопровождается сложными физическими процессами, такими как кавитация и генерация ударных волн. Благодаря интенсивным гидродинамическим процессам вблизи области воздействия реализуется высокое давление, вызывающее формирование кавитационных пузырей, их схлопывание и образование струй [12, 13]. Эти явления делают 3-мкм источники перспективными для ряда медицинских приложений, где они уже занимают значимую нишу, осо-

1)e-mail: av.pushkin@physics.msu.ru

бенно в стоматологии. Эрбиевые 3-мкм лазеры востребованы в хирургии полости рта и пародонтологии благодаря их способности лечить воспаленные мягкие ткани, а также очищать и резать костную ткань. Активная кавитация и генерация ударных волн используется в методике SSP/SWEEPS (Super Short Pulse/Shock Wave Enhanced Emission Photoacoustic Streaming) [14], значительно улучшая механизмы ирригации сложной системы корневых каналов. Таким образом, наличие стабильных и надежных 3-мкм источников с хорошо контролируемыми параметрами позволит разработать медицинские протоколы для более эффективной и безболезненной терапии.

Кроме того, по той же причине высокого поглощения в воде, 3-мкм лазеры могут быть эффективно использованы в приложениях тканевой инженерии, в частности, для трехмерной лазерной биопечати с помощью лазерно-индуцированного прямого переноса (*Laser-induced Forward Transfer* – LIFT) [15, 16]. Лазерный импульс используется для формирования капли биочернил для печати двухмерных или трехмерных клеточных структур. Благодаря высокому коэффициенту поглощения энергия импульса передается в механическое движение капли, что исключает необходимость в дополнительных поглощающих агентах.

Во многих приложениях требуется импульсный лазер с высокой энергией, высоким качеством пучка и достаточной частотой повторения (10–100 Гц). Однако термически индуцированные эффекты в активных средах, такие как тепловая линза и двулучепреломление, ограничивают выходную энергию лазера и вызывают деградацию, а иногда и пробой оптических элементов. Наиболее распространенными активными 3-мкм средами являются Er:YAG, Er:YSGG и Cr:Er:YSGG. Фокусное расстояние в них при рабочих мощностях накачки может достигать всего лишь нескольких десятков сантиметров [17]. Эти эффекты особенно сильно проявляются из-за большого квантового дефекта ($\lambda_{\text{pump}}/\lambda_{\text{out}} = 1/3$), в результате чего большая часть энергии накачки преобразуется в безызлучательные переходы, нагревающие кристалл. В 3-мкм лазерах с ламповой накачкой применялись различные схемы компенсации тепловой линзы. Moulton et al. [17] использовали пару выпуклых зеркал, помещенных по обе стороны от кристалла Cr:Er:YSGG. Это позволило авторам компенсировать не только тепловую линзу, но и астигматизм. Skorzhakovsky et al. [18] наблюдали деградацию модулятора добротности на основе ниобата лития и вскоре обратились к концепции вращающегося зеркала, а эффект тепловой линзы компенсировался с помощью внутрирезонаторного выпуклого зеркала. Проблема тепловой линзы не теряет своей актуальности и в лазерах с диодной накачкой. Методы компенсации основаны на формировании отрицательной кривизны на торцах активных элементов [19–21], использовании выпуклых зеркал в резонаторе [22], а также приклеивании к торцам активного элемента нелегированных участков [23] для лучшего управления температурой.

Режим модуляции добротности также накладывает ограничения на используемые материалы. Для активной модуляции добротности эффективно используются электрооптические ($LiNbO_3$ [24], LGS [25], KTP [26]) и акустооптические (TeO_2 [27], Si [28], KGW [29]) модуляторы. Однако в связи с низкой лучевой прочностью большинства из них в последнее время все чаще используются оптико-механические методы, в частности, вращающееся зеркало [30].

В 1980-1990-х гг. 3-мкм лазерные источники привлекали большое внимание, так как казались многообещающими для специальных приложений, что привело к активному изучению новых лазерных сред и режимов их работы. Тем не менее, такие системы не были разработаны должным образом и недостаточно использовались в качестве независимых источников, не говоря уже об использовании в качестве лазеров накачки для фемтосекундных систем. Таким образом, технологии создания оптических элементов и покрытий в этом спектральном диапазоне не вышли на высокий уровень.

В настоящей работе представлен 3-мкм лазер с модуляцией добротности с ламповой накачкой и компенсацией тепловой линзы. Измерены фокусные расстояния тепловой линзы в нескольких лазерных 3-мкм активных элементах (Er:YAG, Er:YSGG, Cr:Er:YSGG) и предложена схема их компенсации с помощью рассеивающих линз. В результате экспериментальной реализации этой схемы в лазере Cr:Er:YSGG получены импульсы с энергией 23 мДж на частоте повторения 10 Гц.

2. Характеризация тепловой линзы. Существует несколько методов измерения оптической силы тепловой линзы. Один из них основан на измерении профиля пробного пучка, проходящего через активный элемент при его накачке [31]. Другой подход заключается в измерении выходной энергии лазера в зависимости от длины резонатора, что позволяет анализировать области устойчивости резонатора и определить оптическую силу тепловой линзы [32]. Мы обратились к первому способу, так как он позволяет более наглядно наблюдать искажения пучка, в

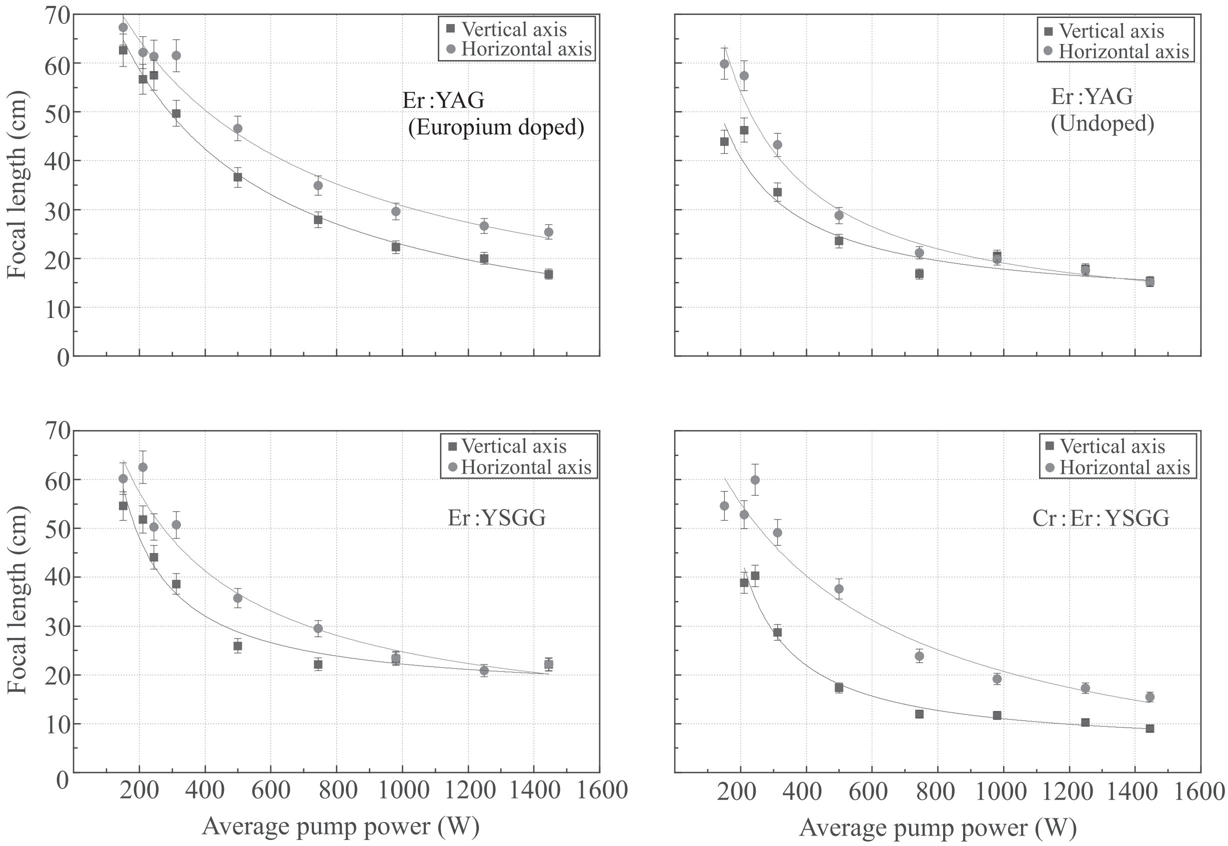


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость фокусного расстояния тепловой линзы в кристаллах Er:YAG, Er:YSGG и Cr:Er:YSGG с ламповой накачкой в двух ортогональных направлениях от средней мощности накачки. Самая сильная тепловая линза формируется в кристалле Cr:Er:YSGG за счет ионов хрома, которые активно поглощают излучение лампы накачки в видимой части спектра

то время как второй реализует его фильтрацию в резонаторе и определяется составом поперечных мод.

Была проведена серия экспериментов по измерению профиля лазерного пучка в зависимости от средней мощности накачки для различных активных элементов. Исследовались следующие кристаллы: Er:YSGG ∅5 × 90 мм, Cr:Er:YSGG ∅5 × 100 мм, Er:YAG ∅4 × 100 мм. Кристаллы помещались в эллиптический кварцевый отражатель, легированный европием, который используется для фильтрации ультрафиолетового излучения лампы накачки и предотвращения повреждения матрицы YSGG. Дополнительно были проведены измерения с кристаллом Er:YAG в нелегированном отражателе для изучения вклада УФ-излучения в силу тепловой линзы. Кристаллы охлаждались дистиллированной водой при температуре 19 °C и потоком 12 л/мин. В качестве пробного использовался пучок непрерывного Nd:YAG-лазера (1.06 мкм)с диаметром 2 мм, что соответствует размеру основной моды резонатора длиной 40 см. Для накачки использовалась импульсная криптоновая лампа с длительностью импульса 200 мкс. Измерения проводились при частоте следования импульсов накачки 10 Гц и средней мощности накачки до 1.5 кВт. ПЗС-камера перемещалась вдоль оптической оси и регистрировала профиль пучка на разном расстоянии от кристалла.

На рисунке 1 показаны зависимости фокусного расстояния тепловой линзы от средней мощности накачки для исследуемых кристаллов. Поскольку кристалл с тепловой линзой можно рассматривать как толстую линзу, расчетные фокусные расстояния отсчитывались от главной плоскости такой оптической системы. Наиболее сильная фокусировка наблюдалась в кристалле Cr:Er:YSGG, где фокусное расстояние тепловой линзы составило 9 см при средней мощности накачки до 1.5 кВт. Этот кристалл поглощает больше энергии накачки из-за сильного поглощения ионами хрома в диапазоне длин волн от 400 до 700 нм [33]. В одноламповом отражателе наблюдался сильный астигматизм. На рисунке 2 показан профиль пучка на фиксированном расстоянии (20 см)

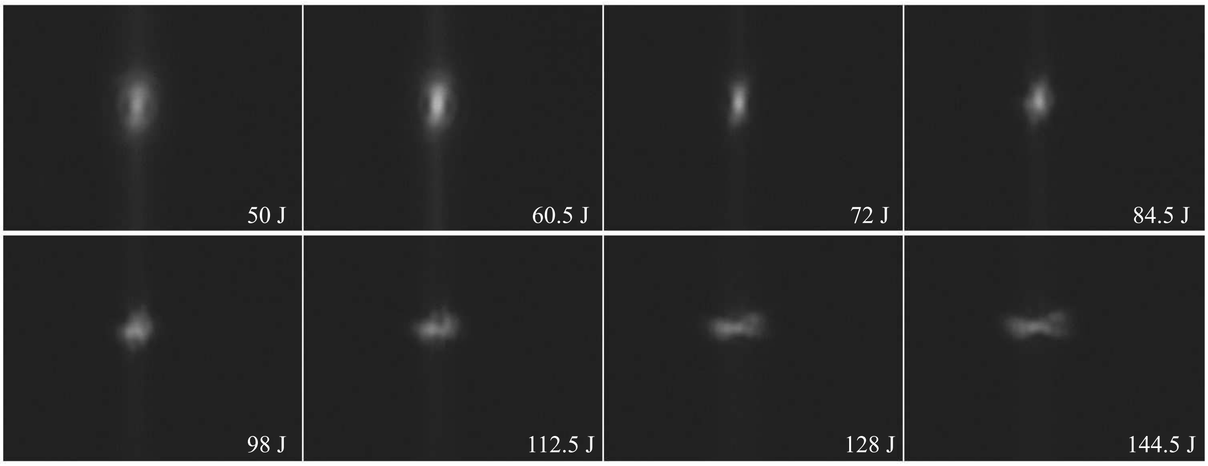


Рис. 2. Преобразование пробного пучка, проходящего через кристалл Cr:Er:YSGG, при различной энергии лампы накачки на расстоянии 20 см от грани кристалла

при изменении мощности накачки. В вертикальном направлении сила тепловой линзы больше (кристалл установлен над лампой в отражателе).

Хотя Cr:Er:YSGG является более сложным кристаллом для компенсации тепловой линзы, эта среда превосходит другие с точки зрения режима модуляции добротности. В то время как Er:YAG является наиболее популярной средой для генерации 3-мкм излучения, его малое время жизни (0.1 мс) не позволяет накопить достаточно энергии для ее преобразования в наносекундный импульс, в то время как время жизни Er:YSGG и Cr:Er:YSGG составляет 1.3 мс [34]. Кристалл Cr:Er:YSGG из-за легирования хромом поглощает больше энергии импульса накачки и обеспечивает более высокий кпд. Поэтому дальнейшее моделирование и экспериментальная реализация были выполнены для кристалла Cr:Er:YSGG.

3. Моделирование схемы компенсации тепловой линзы. Как уже упоминалось во введении, компенсация тепловой линзы в 3-мкм лазерах реализовывалась различными способами. Предпочтительно, чтобы метод компенсации позволял лазеру работать в широком диапазоне мощностей накачки. Поэтому наш выбор пал на установку в резонатор лазера рассеивающих линз. Для построения каустики пучка внутри резонатора и определения оптимальной оптической силы компенсирующих линз использовался формализм ABCD матриц.

Поскольку в кристалле происходит сильная фокусировка, необходимо корректировать каустику пучка в обоих плечах резонатора, чтобы исключить пробой оптических элементов и сформировать выходной пучок с минимальной расходимостью. Таким образом, две рассеивающие линзы и тепловая линза в кристалле действуют как два телескопа. Поскольку оптическая сила тепловой линзы велика, для получения пучка максимального размера необходимо установить линзы близко к граням кристалла. Оптическая сила рассеивающих линз определяется оптической силой тепловой линзы и желаемым положением рабочей точки на диаграмме устойчивости резонатора. Также на практике важную роль играют пространственные параметры установки, в частности, размер осветителя. Хотя длина кристалла составляет около 100 мм, физическая длина осветителя определяется длиной лампы (240 мм) и не позволяет устанавливать оптические элементы (модулятор добротности и выходное зеркало) близко к кристаллу. Модулятор добротности на основе кристалла KGW имеет длину 50 мм и показатель преломления 2.0, что увеличивает длину глухого плеча резонатора.

Матрица тепловой линзы имеет вид [35]:

$$M = \begin{pmatrix} \cos(\sqrt{2\gamma}l) & \frac{1}{\sqrt{2\gamma n_0}}\sin(\sqrt{2\gamma}l) \\ \sqrt{2\gamma}n_0\sin(\sqrt{2\gamma}l) & \cos(\sqrt{2\gamma}l) \end{pmatrix}$$

l – длина кристалла, n_0 – показатель преломления, $\gamma = 1/2n_0 l f_{th}$ – параметр, характеризующий оптическую силу тепловой линзы. Для определения оптимальной оптической силы рассеивающих линз была построена матрица резонатора с его реальными размерами. Для получения квазиколлимированного пучка в резонаторе рабочую точку необходимо расположить вблизи границы первой области на диаграмме устойчивости. Однако, поскольку оптическая сила тепловой линзы может незначительно изменяться при низкой частоте следования импульсов

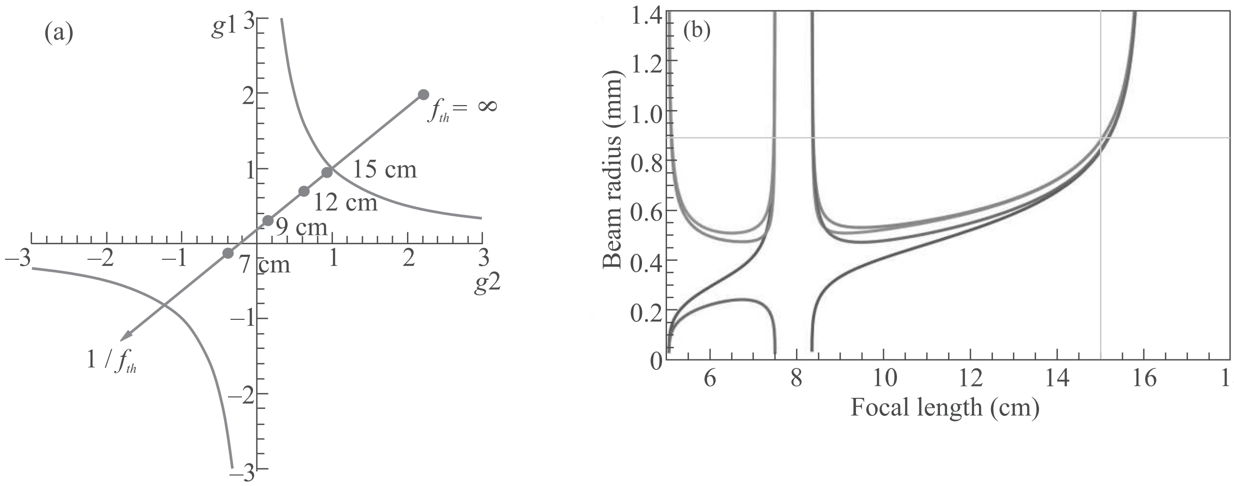


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Диаграмма устойчивости резонатора и (b) – радиус пучка на глухом (синий) и выходном (красный) зеркалах и торцах кристалла (оранжевый и зеленый) в зависимости от фокусного расстояния тепловой линзы с использованием рассеивающих линз с $f_{\mathrm{div}} = -300$ мм. В этой конфигурации с фокусным расстоянием тепловой линзы $f_{th} = 15$ см рабочая точка находится вблизи границы первой области устойчивости

накачки, для большей стабильности рабочая точка должна быть немного глубже в области стабильности. Если плечи резонатора разные по длине, траектория рабочей точки наклоняется и область устойчивости делится на две области.

Диаграмма устойчивости показана на рис. 3a. Без компенсации тепловой линзы рабочая точка покидает первую область при фокусном расстоянии тепловой линзы около 14 см. В расчетах фокусное расстояние тепловой линзы принималось за 12–15 см. Тогда рабочая точка находится вблизи границы области устойчивости с фокусным расстоянием рассеивающих линз между -300 мм и -240 мм. В отсутствие тепловой линзы рабочая точка располагается за пределами области стабильности и входит в нее при увеличении мощности накачки.

На рисунке 3b показан радиус пучка на зеркалах резонатора и на торцах кристалла в зависимости от фокусного расстояния тепловой линзы. С увеличением оптической силы тепловой линзы размер пучка на выходном зеркале уменьшается. Чтобы избежать пробоя оптических элементов нужно поддерживать максимальный размер пучка на зеркалах и кристалле. Режимом работы можно управлять несколькими способами. С увеличением длины резонатора размер пучка на элементах увеличивается, пока рабочая точка не выйдет за границу области устойчивости (рис. 4a). Разница в размере лазерного пучка при разной длине резонатора заметна, если рабочая точка находится в средней части зоны устойчивости. В то же время все же больший пучок реализуется при приближении к границе. Однако, если тепловая линза нестабильна, существует риск выхода из области стабильности. Другая степень свободы – это оптическая сила рассеивающих линз (рис. 4b). Она позволяет подстроить область стабильности под мощность тепловой линзы, но не дает большой гибкости в управлении размером пучка внутри резонатора.

4. Экспериментальная реализация. Экспериментальная установка показана на рис. 5. Резонатор образован двумя плоскими глухим (HR) и выходным (OC) зеркалами и двояковогнутыми линзами из CaF_2 без просветляющих покрытий (L). Использовались несколько выходных зеркал с коэффициентом отражения 80–50 %. В резонаторе также были установлены акустооптический модулятор добротности (AOM), четвертьволновая пластинка и кристалл Cr:Er:YSGG (5×100 мм). Четвертьволновая пластинка предназначена для компенсации теплового двулучепреломления. Для подавления поперечных мод высших порядков на одном из торцов кристалла устанавливалась диафрагма диаметром 2.5 мм.

Для определения влияния длины резонатора и коэффициента отражения выходного зеркала на выходную энергию была проведена серия предварительных экспериментов по свободной генерации. Были использованы две конфигурации: короткая (34 см) и длинная (44 см). Разница в длине между ними соответствует оптическому пути в кристалле акустооптического модулятора на кристалле KGW. Торцы кристалла модулятора длиной 50 мм были скошены под углом Брюстера для устранения френелевских потерь, что также способствовало снижению лучевой нагрузки на грани кристалла. На преобра-

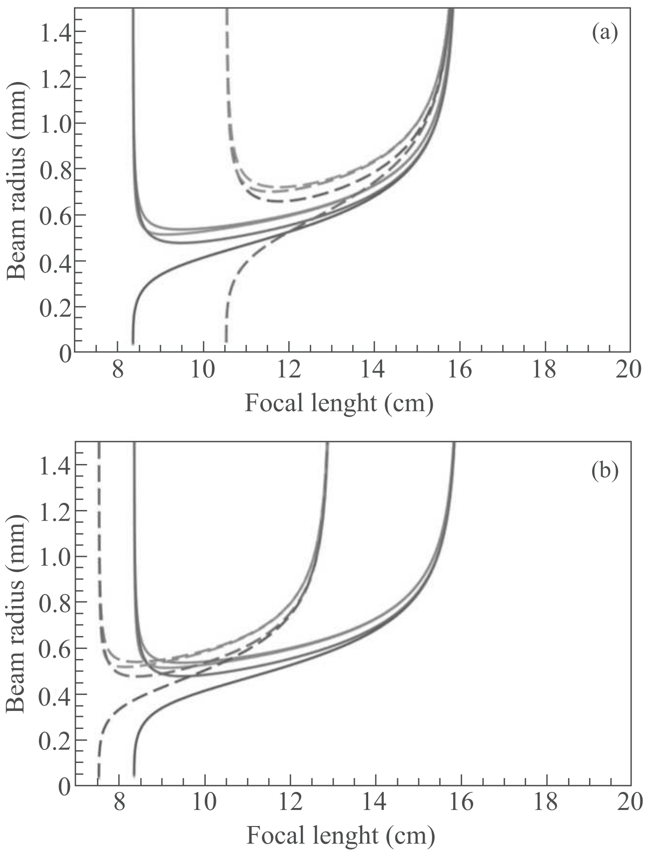


Рис. 4. (Цветной онлайн) Радиус пучка на глухом (синий), и выходном (красный) зеркалах и торцах кристалла (желтый и зеленый) в зависимости от оптической силы тепловой линзы: (a) – для двух длин резонатора $L = 44$ см (сплошная) и $L = 59$ см (пунктир) и фокусного расстояния рассеивающих линз $f_{\rm div} = -300$ мм; (b) – для фокусного расстояния рассеивающих ланз $f_{\rm div} = -300$ мм (сплошная) и $f_{\rm div} = -240$ мм (пунктир) для фиксированной длины резонатора $L = 44$ см в первой зоне устойчивости

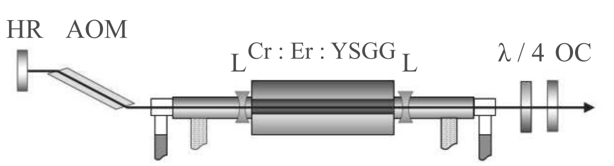


Рис. 5. (Цветной онлайн) Лазер Cr:Er:YSGG с модуляцией добротности и компенсацией тепловой линзы. HR – глухое зеркало; OC – выходное зеркало, AOM – акустооптический модулятор добротности KGW; L – рассеивающие линзы; $\lambda/4$ – четвертьволновая пластинка

зователи модулятора подавалась акустическая мощность до 33 Вт на частоте 50 МГц.

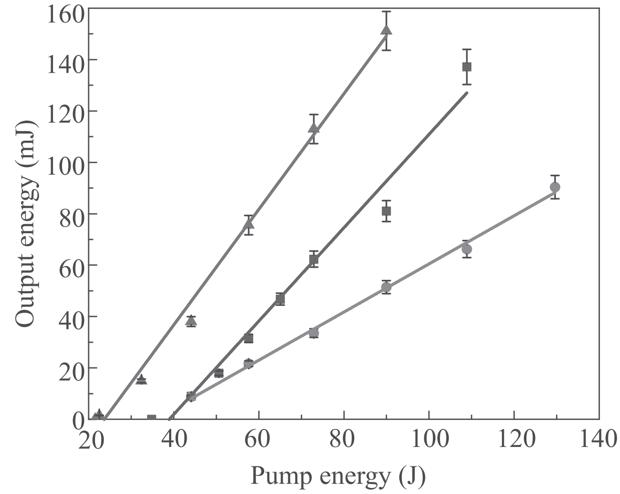


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость выходной энергии свободной генерации лазера Cr:Er:YSGG от энергии накачки для двух длин резонатора L и двух выходных зеркал T (треугольники – T = 30 %, L = 34 см; квадраты – T = 50 %, L = 34 см; круги – T = 50 %, L = 44 см)

Результаты представлены на рис. 6. При использовании выходного зеркала с коэффициентом отражения $R = 50\,\%$ длинная и короткая конфигурации обладают примерно одинаковым порогом генерации, однако для короткой конфигурации дифференциальная эффективность намного выше. Она составляет 0.2 %, тогда как в длинной конфигурации – 0.1 %. Увеличение отражения выходного зеркала до 70 % позволило почти вдвое снизить порог генерации, а дифференциальный кпд увеличить до 0.24 %.

В экспериментах по модуляции добротности изучались различные выходные зеркала и рассеивающие линзы (рис. 7). Сначала использовались линзы с фокусным расстоянием −300 мм и выходное зеркало с коэффициентами отражения 70 и 60 %. Однако высокая внутрирезонаторная интенсивность наносекундных импульсов приводила к пробою зеркал даже при компенсации тепловой линзы. Увеличение энергии стало возможным благодаря большей разгрузке резонатора с помощью выходного зеркала с $R = 50\,\%$ и рассеивающих линз с $f = -240$ мм. Зависимость выходной энергии от энергии накачки показывает довольно высокий дифференциальный кпд и высокий порог накачки. При малой мощности накачки оптическая сила тепловой линзы мала, и резонатор нестабилен (см. рис. 3a). При увеличении энергии накачки рабочая точка пересекает границу устойчивости и устанавливается в оптимальное положение. Полученная максимальная энергия составила 23 мДж в основной поперечной моде на частоте 10 Гц.

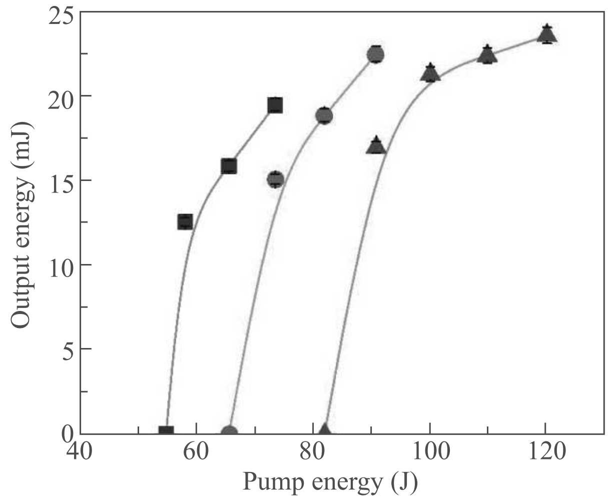


Рис. 7. (Цветной онлайн) Зависимость выходной энергии генерации лазера Cr:Er:YSGG с модуляцией добротности от энергии накачки для различной прозрачности выходного зеркала T и оптической силы рассеивающих линз $f_{\rm div}$ (квадраты – T = 30 %, $f_{\rm div} = -300$ мм; круги – T = 40 %, $f_{\rm div} = -300$ мм; треугольники – T = 50 %, $f_{\rm div} = -240$ мм)

5. Заключение. В работе продемонстрировано увеличение средней мощности импульсно-периодического (10 Гц) наносекундного 3-мкм лазера за счет компенсации сильной тепловой линзы в резонаторе лазера Cr:Er:YSGG с сохранением пиковой мощности мегаваттного уровня. Эксперименты по прямому измерению теплонаведенных искажений в активных 3-мкм элементах (Er:YAG, Er:YSGG и Cr:Er:YSGG) с мощной ламповой накачкой показали, что фокусное расстояние тепловой линзы может достигать 10 см с сильным астигматизмом. Предложенная схема компенсации основана на использовании двух рассеивающих линз, расположенных с обеих сторон от активного элемента. Это позволяет надежно управлять каустикой резонатора в относительно широких диапазонах мощности накачки и оптической силы тепловой линзы. С помощью линз с фокусным расстоянием −240 мм были получены импульсы с энергией 23 мДж, с частотой повторения 10 Гц в маломодовом режиме. Без компенсации тепловой линзы максимальная выходная энергия наблюдалась при частоте повторения 2–5 Гц, а при 10 Гц энергия снижалась до 10 мДж, что было показано в нашей предыдущей работе [29], увеличивая риск повреждения дорогостоящих внутрирезонаторных оптических элементов.

Дальнейшее усовершенствование 3-мкм лазерного источника возможно с уменьшением внутрирезонаторных потерь за счет использования линз с просветляющим покрытием или выпуклых зеркал, а также с лучшим распределением температуры в активном кристалле за счет конструкции осветителя с несколькими лампами для устранения астигматизма. Увеличение энергии может быть достигнуто за счет работы в многомодовом режиме с контролем модового состава или путем расширения основной моды за счет оптимизации конфигурации резонатора.

По сравнению с ранее существующими подходами разработанная методика позволяет вывести 3-мкм лазеры как с ламповой, так и с диодной накачкой в относительно высокочастотный режим работы для приложений, требующих высоких средней и пиковой мощностей, например, оптической накачки лазерных источников, микроструктурирования методом LIBWE, лазерной биопечати LIFT, а также хирургии полости рта и пародонтологии.

Часть исследования, посвященная моделированию, поддержана Российским научным фондом (РНФ) (17-72-20130). Экспериментальная часть исследования поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (РФФИ) (18-29-20074).

А. В. Пушкин благодарит Фонд развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. E. A. Мигаль, Ф. В. Потемкин, Письма в ЖЭТФ, **107**(5), 301 (2018).
2. K. L. Vodopyanov, F. Ganikhanov, J. P. Maffetone, I. Zwieback, and W. Ruderman, Opt. Lett. **25**, 841 (2000).
3. E. Migal, A. Pushkin, B. Bravy, V. Gordienko, N. Minaev, A. Sirotkin, and F. Potemkin, Opt. Lett. **44**, 2550 (2019).
4. F. V. Potemkin, E. A. Migal, A. V. Pushkin, A. A. Sirotkin, V. I. Kozlovsky, Y. V. Korostelin, Y. P. Podmar'kov, V. V. Firsov, M. P. Frolov, and V. M. Gordienko, Laser Phys. Lett. **13**, 125403 (2016).
5. B. G. Bravy, Y. A. Chernyshev, V. M. Gordienko, E. F. Makarov, V. Y. Panchenko, V. T. Platonenko, and G. K. Vasilyev, Opt. Express **20**, 25536 (2012).
6. В. А. Соловьев, М. Ю. Чернов, С. В. Морозов, К. Е. Кудрявцев, А. А. Ситникова, С. В. Иванов, Письма в ЖЭТФ **110**(5), 297 (2019).
7. J. Wang, H. Niino, and A. Yabe, Appl. Phys. A Mater. Sci. Process. **20**, 25536 (1999).
8. R. Böhme, J. Laser Micro-Nanoengineering **1**, 190 (2006).
9. B. Lan, M. H. Hong, K. D. Ye, Z. B. Wang, S. X. Cheng, and T. C. Chong, Jpn. J. Appl. Phys. **43**(10R), 7102 (2004).
10. G. B. J. Cadot, D. A. Axinte, and J. Billingham, Int. J. Mach. Tools Manuf. **107**, 8 (2016).
11. K. Zimmer, R. Böhme, D. Ruthe, and B. Rauschenbach, Appl. Phys. A Mater. Sci. Process. **84**, 455 (2006).

12. A. V. Pushkin, A. S. Bychkov, A. A. Karabutov, and F. V. Potemkin, Laser Phys. Lett. **15**, 065401 (2018).
13. W. Lauterborn and A. Vogel, *Shock Wave Emission by Laser Generated Bubbles Bubble Dynamics and Shock Waves*, ed. by C. F. Delale, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (2013), p. 67.
14. T. Ivanusic, M. Lukac, N. Lukac, and M. Jezersek, J. LAHA **1**, 10 (2019).
15. A. A. Antoshin, S. N. Churbanov, N. V. Minaev, D. Zhang, Y. Zhang, A. I. Shpichka, and P. S. Timashev, Bioprinting **15**, e00052 (2019).
16. V. Yusupov, S. Churbanov, E. Churbanova, K. Bardakova, A. Antoshin, S. Evlashin, P. Timashev, and N. Minaev, International Journal of Bioprinting, **6**, 3 (2020).
17. D. M. Rines, G. A. Rines, and P. F. Moulton, in *Advanced Solid State Lasers*, ed. by B. H. T. Chai and S. A. Payne, OSA Proceedings Series (Optical Society of America), Washington, D.C., **24**, 184 (1995).
18. M. Skorczakowski, J. Swiderski, W. Pichola, P. Nyga, A. Zajac, M. Maciejewska, L. Galeckim, J. Kasprzak, S. Gross, A. Heinrichn, and T. Bragagna, Laser Phys. Lett. **7**, 498 (2010).
19. J. Wang, T. Cheng, L. Wang, J. Yang, D. Sun, S. Yin, X. Wu, and H. Jiang, Laser Phys. Lett. **12**, 105004 (2015).
20. S. Hu, J. Wang, T. Cheng, L. Wang, D. Sun, S. Yin, X. Wu, and H. Jiang, Laser Phys. Lett. **16**, 4 (2019).
21. L. Hu, D. Sun, Y. Wang, J. Luo, H. Zhang, Z. Fang, X. Zhao, C. Quan, Z. Han, M. Cheng, and Q. Guo, Infrared Phys. Technol. **105**, 103224 (2020).
22. Q. Cui, M. Wei, Z. Xiong, S. Hu, J. Jiang, L. Wang, T. Cheng, X. Wu, and H. Jiang, Infrared Phys. Technol. **98**, 256 (2019).
23. Z. Fang, D. Sun, J. Luo, H. Zhang, Z. Zhao, C. Quan, L. Hu, M. Cheng, Q. Zhang, and S. Yin, Opt. Express **25**, 239 (2017).
24. P. Koranda, M. Nemec, H. Jelinkova, J. Sulc, M. Cech, Y.-W. Shi, Y. Matsuura, and M. Miyagi, *XV International Symposium on Gas Flow, Chemical Lasers, and High-Power Lasers* (2005), v. 5777, p. 384.
25. L. Wang, J. Wang, J. Yang, X. Wu, D. Sun, S. Yin, H. Jiang, J. Wang, and C. Xu, Opt. Lett. **38**, 2150 (2013).
26. V. M. Gordienko, F. V. Potemkin, A. V. Pushkin, A. A. Sirotkin, and V. V. Firsov, J. Russ. Laser Res. **36**, 570 (2015).
27. P. Maak, L. Jakab, P. Richter, H. J. Eichler, and B. Liu, Appl. Opt. **39**, 3053 (2000).
28. M. Messner, A. Heinrich, C. Hagen, K. Unterrainer, and B. Liu, in *Solid State Lasers XXVIII: Technology and Devices*, ed. by W. A. Clarkson and R. K. Shori, SPIE Proceedings **10896**, 1089607 (2019).
29. A. V. Pushkin, M. M. Mazur, A. A. Sirotkin, V. V. Firsov, and F. V. Potemkin, Opt. Lett. **44**, 4837 (2019).
30. K. Karki, S. D. Subedi, D. Martyshkin, V. V. Fedorov, and S. Mirov, *Solid State Lasers XXIX: Technology and Devices*, ed. by W. A. Clarkson and R. K. Shori, SPIE **1125913**, 78 (2020).
31. H. Mirzaeian, S. Manjooran, A. Major, and D. Martyshkin, Photonics North **2014**, 9288 (2014).
32. J. H. Liu, J. R. Lu, J. H. Lu, Z. S. Shao, and M. H. Jiang, Chinese Phys. Lett. **16**, 181 (1999).
33. E. V. Zharikov, N. N. Il'ichev, S. P. Kalitin, V. V. Laptev, A. A. Malyutin, V. V. Osiko, V. V. Pashinin, A. M. Prokhorov, Z. S. Saidov, V. A. Smirnov, A. F. Umyskov, and I. A. Shcherbakov, Sov. J. Quantum Electron. **16**, 635 (1986).
34. E. Arbabzadah, S. Chard, H. Amrania, C. Phillips, and M. Damzen, Opt. Express **19**, 25860 (2011).
35. N. Hodgson and H. Weber, *Laser Resonators and Beam Propagation*, Springer, N.Y. (2005), v. 108.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 516 – 522 © 2020 г. 25 октября

Резонансная фотолюминесценция двумерной электронной системы в условиях формирования объемного состояния дробного квантового эффекта Холла 1/3

Л. В. Кулик[+*], *А. С. Журавлев*[+], *Е. И. Белозеров*[+*], *В. А. Кузнецов*[+*1)], *И. В. Кукушкин*

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

[*]*Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", 141700 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 24 сентября 2020 г.
После переработки 24 сентября 2020 г.
Принята к публикации 27 сентября 2020 г.

Исследованы спектры резонансной и нерезонансной фотолюминесценции двумерной электронной системы в условиях формирования дробного состояния квантового эффекта Холла 1/3. Показано, что, в отличие от нерезонансной фотолюминесценции, резонансная фотолюминесценция служит универсальным маркером формирования дробного состояния 1/3 в объеме двумерной системы. Обнаружено, что в состоянии 1/3 вероятности оптических переходов с нулевого уровня Ландау электронов изменяются столь значительно, что это изменение нельзя объяснить в рамках существующих теоретических представлений.

DOI: 10.31857/S1234567820200057

Со времени появления пионерских работ Лафлина, посвященных дробному квантовому эффекту Холла (ДКЭХ) в двумерных электронных системах (2DES), в научном сообществе сформировалось устойчивое представление о том, что физика этого явления может быть объяснена в терминах формирования несжимаемых Лафлиновских жидкостей [1]. Развитие теории Лафлина в рамках модели композитных фермионов Джайном [2] и др. [3] завершило описание почти всех состояний ДКЭХ за исключением небольшого числа дробных состояний с четными знаменателями [4] и анизотропных состояний 2DES с большим числом ($\gg 1$) заполненных уровней Ландау [5]. Несмотря на то, что прямых экспериментальных подтверждений модели композитных фермионов не было представлено, результаты ряда исследований хорошо согласуются с предсказаниями теории [6].

В свете столь серьезных успехов теории композитных фермионов, неожиданными являются недавние экспериментальные работы, посвященные дробному состоянию ДКЭХ 3/2 [7, 8]. Ранее 3/2 описывалось как проводящее состояние композитных фермионов (связанных состояний электрона и двух квантов магнитного потока, на которых не действовало внешнее магнитное поле) [9]. Из состояния 3/2 вырастала иерархия дробных состояний, соответствующих целочисленным заполнениям уровней Ландау композитных фермионов. Оказалось однако, что в латерально-ограниченных проводниках холловская проводимость при 3/2 квантуется с квантом проводимости 3/2, т.е. также, как при любых других состояниях ДКЭХ [7]. На основании результатов оптических экспериментов было дано качественное объяснение этому явлению [8]. Квантование может иметь место даже в отсутствии формирования несжимаемых Лафлиновских жидкостей. Достаточно, чтобы существовала "локальная" несжимаемость 2DES. При этом характерная область "локальной" несжимаемости определяет латеральный размер проводника для наблюдения квантования холловской проводимости. Сам же размер области "локальной" несжимаемости, по крайней мере, для состояния 3/2, определяется характерными размерами спиновых текстур, образуемых электронами проводимости в квантовом пределе. Интересно, что диапазон факторов заполнения, в которых наблюдаются спиновые текстуры, превышает диапазон существования иерархии дробных состояний, вырастающей из 3/2, а поскольку температура разрушения локального порядка в спиновых текстурах существенно превышает температуру переходов из проводящих состояний в холловские изоляторы ДКЭХ [8], можно предположить, что и дробные состояния иерархии 3/2 связаны с некоторым пространственным упорядочением спиновых текстур.

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

Таким образом, под сомнением оказались практически все общепринятые теоретические концепции ДКЭХ. Вне зависимости от причин, по которым транспорт по объему становится невозможным (например, из-за превышения размера спиновой текстуры над латеральным размером проводника), холловская проводимость будет квантоваться, а константа квантования будет определяться фактором заполнения 2DES. В этой связи, на первый план физики ДКЭХ выходит не поиск новых дробных состояний, а экспериментальное исследование и объяснение объемных свойств уже известных. Поскольку транспортные характеристики ДКЭХ изоляторов малоинформативны (вклад в проводимость дают краевые каналы, пространственно отделенные от объемных состояний), возникает необходимость в разработке экспериментальных подходов к непосредственному зондированию объема 2DES в режиме ДКЭХ.

Одним из подтвержденных экспериментальных методов изучения объемных электронных состояний в режиме КЭХ и ДКЭХ является резонансное отражение, а также его модификация – фотоиндуцированное резонансное отражение [10]. Именно в сигнале резонансного отражения впервые была обнаружена линия, связанная с состоянием ДКЭХ 1/3, отделенная спектрально от разрешенных одночастичных оптических переходов 2DES [10]. На возникновение новой линии не повлияла "скрытая симметрия", которая запрещает наблюдение оптических переходов с энергиями, отличными от энергий одночастичных переходов невзаимодействующей 2DES в квантовом пределе [11, 12]. Было высказано предположение о том, что наблюдаемое нарушение "скрытой симметрии" связано с асимметрией между электрон-электронным и электрон-дырочным взаимодействиями в двумерных гетероструктурах со сложной валентной зоной [13].

Несмотря на успехи методики резонансного отражения, она не подходит, в силу своей сложности, для рутинной характеризации 2DES в режиме ДКЭХ. Использование же нерезонансного отражения для тех же целей – невозможно в силу неконтролируемого фотоиндуцированного вклада в конечный результат измерений. Попытки использования фотолюминесценции для анализа состояний ДКЭХ не привели к разумным результатам [14], несмотря на то, что в режиме КЭХ нерезонансная фотолюминесценция (PL, *photoluminescence*) – один из наиболее мощных инструментов исследования объемных состояний 2DES. Причина некорректности использования этой методики стала очевидной лишь недавно, и состоит она в том, что при возбуждении нерезонансной фотолюминесценции вклад в регистрируемый сигнал дают не только двухчастичные возбужденные состояния 2DES, для которых выполняются условия "скрытой симметрии", но и трехчастичные состояния, для которых никаких симметрийных ограничений на спектральные характеристики сигнала фотолюминесценции нет [15, 16]. При этом сам сигнал фотолюминесценции трехчастичных комплексов в режиме ДКЭХ может иметь сложную структуру с несколькими спектральными компонентами из-за нетривиальной дисперсионной зависимости двухчастичных комплексов (магнитоэкситонов), из которых строятся трехчастичные [8]. Поэтому, в представленной работе мы впервые применили методику резонансной фотолюминесценции (RPL, *resonant photoluminescence*) для исследования состояния ДКЭХ 1/3, что позволило избавиться от нежелательной фотолюминесценции трехчастичных комплексов. Показано, что в этом случае нарушения "скрытой симметрии" не наблюдается, однако амплитуда сигнала RPL в условиях формирования объемного состояния ДКЭХ 1/3 изменяется настолько сильно, что это изменение может служить экспериментальным маркером этого дробного состояния.

Для исследований была использована узкая высококачественная гетероструктура с одиночной квантовой ямой GaAs/AlGaAs шириной 19 нм, с концентрацией электронов в двумерном канале $0.84 \times \times 10^{11}\,\text{см}^{-2}$ и подвижностью более $3.5 \cdot 10^7\,\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Ширина ямы и электронная концентрация выбиралась таким образом, чтобы (i) обеспечить достаточную подвижность 2DES для наблюдения в магнитотранспорте холловского плато ДКЭХ 1/3 при 0.5 K; (ii) выполнить условия "скрытой симметрии" для огибающей волновой функции 2DES в направлении роста гетероструктуры [13, 11]; (iii) обеспечить максимально возможное расщепление между зонами легких и тяжелых дырок в валентной зоне гетероструктуры. Электронная концентрация в условиях стационарного фотовозбуждения контролировалась по сигналу PL в режиме КЭХ [17]. Гетероструктура помещались в откачиваемый резервуар с жидким ^{3}He, который, в свою очередь, помещался в криостат со сверхпроводящим соленоидом. Оптические измерения проводились в диапазоне температур 0.45–4.2 K и магнитных полей 0–14 Тл с использованием двухсветоводной методики. Один световод служил для резонансного и нерезонансного возбуждения 2DES, а второй – для сбора сигнала PL и RPL от образца и передачи сигнала на входную щель решеточного спектрометра, оборудованного охлаждаемой ПЗС камерой. Для резонансной накачки использо-

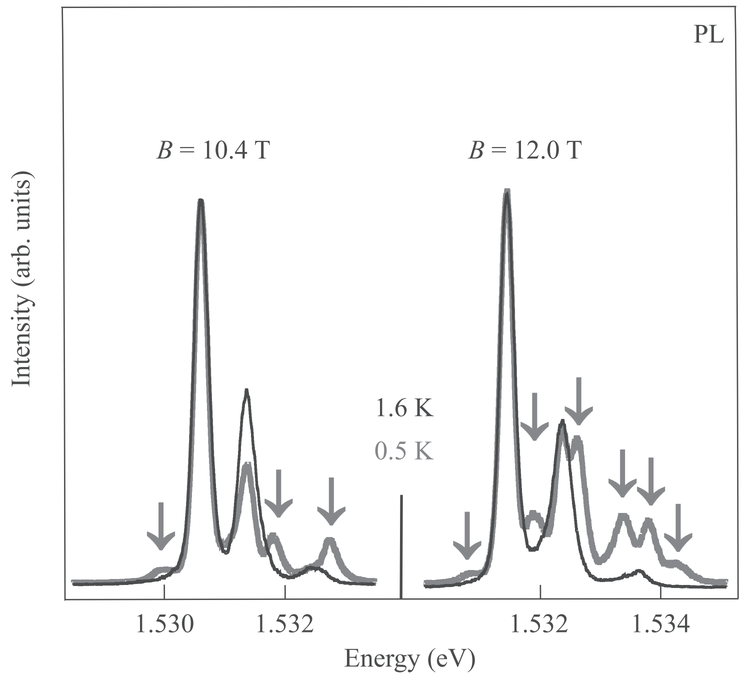


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры нерезонансной фотолюминесценции 2DES, измеренные в двух магнитных полях при двух температурах 0.5 K (красные сплошные линии) и 1.6 K (черные сплошные линии). Стрелками указаны оптические переходы, не соответствующие каким-либо разрешенным двухчастичным оптическим переходам в 2DES

вался полупроводниковый перестраиваемый узкополосный лазер "Toptica", а для нерезонансной – широкополосный диод с длиной волны фотовозбуждения 780 нм.

При температуре 1.6 K принципиальной разницы в спектрах PL и RPL не наблюдается. Спектр состоит из двух основных линий, соответствующих оптическим переходам с нулевого уровня Ландау зоны проводимости на нулевой уровень Ландау первой размерноквантованной зоны тяжелых дырок валентной зоны квантовой ямы (hh1 – e0) (рис. 1). Уменьшение температуры до 0.5 K приводит к появлению трех дополнительных особенностей в спектрах PL непосредственно в области формирования ДКЭХ 1/3 (10.4 T). Новые линии не связаны с какими-либо одночастичными оптическими переходами в 2DES (рис. 1). Аналогичное уменьшение температуры в области больших магнитных полей, где состояние 1/3 уже не наблюдается, приводит к появлению шести новых спектральных особенностей, что делает выявление связи спектров PL с дробным состоянием 1/3 затруднительным (рис. 1).

Низкотемпературные спектры RPL с энергией лазерного возбуждения выше энергии оптических переходов с первого уровня Ландау электронов в валентную зону квантовой ямы имеют тот же вид, что и спектры PL при 0.5 K. Однако, как только энергия возбуждения оказывается меньше энергий оптических переходов с первого уровня Ландау, в спектрах RPL при 0.5 K остаются только те линии, что наблюдаются в спектрах PL при температуре 1.6 K. Таким образом, экспериментально подтверждается вывод о том, что "лишние" линии в спектрах PL в режиме ДКЭХ связаны с рекомбинацией трехчастичных комплексов, состоящих из неравновесных электронов на нижайшем по энергии спиновом подуровне первого уровня Ландау 2DES и двух дырок, одна из которых находится в валентной зоне, а вторая под уровнем Ферми электронов 2DES [9, 15, 16]. Чем выше магнитное поле, тем медленнее релаксация фотовозбужденных электронов, и тем больше наблюдается вкладов в PL спектры от различных трехчастичных состояний. В дальнейшем мы ограничимся обсуждением RPL спектров с энергией резонансного возбуждения меньшей энергии оптических переходов с первого уровня Ландау 2DES.

Чтобы определить энергии низколежащих разрешенных одночастичных оптических переходов в 2DES, которые могут быть использованы в качестве входных резонансов для регистрации спектров RPL, были измерены спектры фотовозбуждения (рис. 2). Спектры фотовозбуждения пропорциональны изменению интегральной амплитуды RPL в зависимости от энергии возбуждающего лазерного излучения. Об-

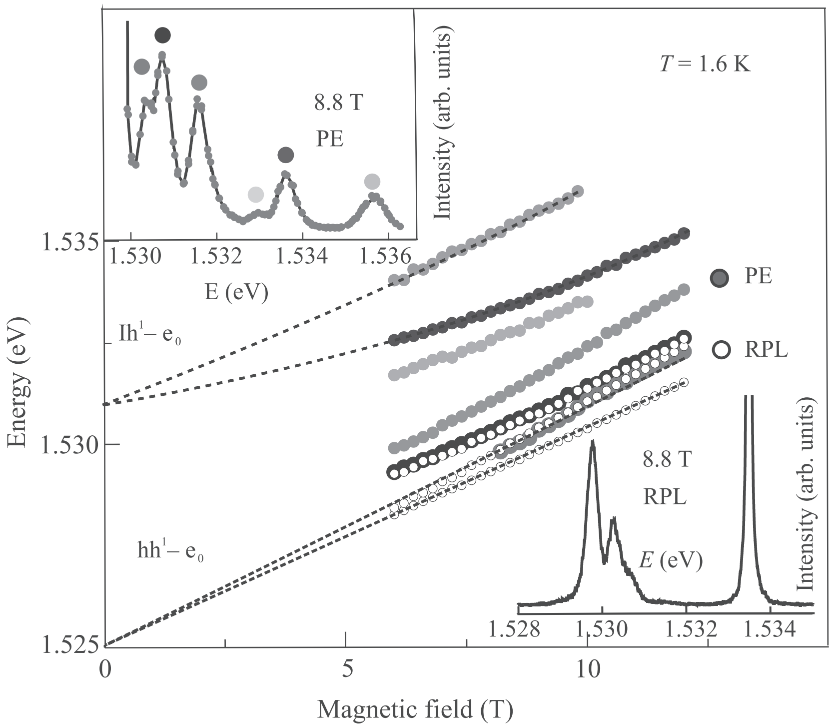


Рис. 2. (Цветной онлайн) Энергии разрешенных оптических переходов с уровней Ландау размерноквантованных подзон тяжелых (hh) и легких (lh) дырок в 2DES, полученные из спектров фотовозбуждения (сплошные точки) и резонансной фотолюминесценции (открытые точки), измеренных при температуре 1.6 K. Пунктирные линии проведены для удобства. На вставках показаны примеры спектров фотовозбуждения (PE) и резонансной фотолюминесценции (RPL)

наружено, что энергии переходов с нулевого уровня Ландау электронов на нулевые уровни Ландау двух нижайших размерноквантованных подзон тяжелых и легких дырок лежат ниже энергии переходов с первого уровня Ландау электронов. При этом энергии оптических переходов, полученных с помощью методики фотовозбуждения хорошо согласуются с энергиями самих линий RPL, полученных с помощью резонансного возбуждения с использованием указанных дырочных состояний (рис. 2).

Основным экспериментальным результатом представленной работы является пороговое изменение интенсивностей линий RPL в условиях формирования ДКЭХ 1/3 при понижении температуры гелиевой бани (рис. 3). Если при температуре 1.6 K интенсивности линий двух переходов с нулевого уровня Ландау отражают заселенность электронных и дырочных уровней в условиях стационарного возбуждения (силы осцилляторов оптических переходов в рассматриваемом диапазоне магнитных полей для двух разрешенных оптических переходов с нулевого уровня Ландау отличаются примерно в 2 раза в пользу нижайшего по энергии перехода [17]). Учитывая, что практически все равновесные электроны при 0.5 K находятся на нижайшем уровне Ландау (один полностью заполненный спиновой подуровень Ландау композитных фермионов), получается парадоксальный результат: концентрация электронов на верхнем спиновом подуровне Ландау электронов много меньше, чем на нижнем, сила осциллятора оптических переходов с нижнего спинового подуровня выше, чем с верхнего, а амплитуда RPL с верхнего спинового подуровня на порядок величины превышает амплитуду RPL с нижнего спинового подуровня. Поскольку время безызлучательной рекомбинации в высокоподвижных AlGaAs/GaAs квантовых ямах на несколько порядков величины превышает время излучательной рекомбинации [18], единственным объяснением наблюдаемого эффекта является гигантское увеличение сечения захвата фотовозбужденной дырки неравновесными электронами с верхнего спинового подуровня Ландау в условиях формирования ДКЭХ 1/3. Получается, что за время релаксации фотовозбужденных дырок в нижайшее состояние (100 пс) практически все дырки захватываются неравновесными электронами, а сила осциллятора оптического перехода электронов с верхнего спинового подуровня Ландау возрастает столь су-

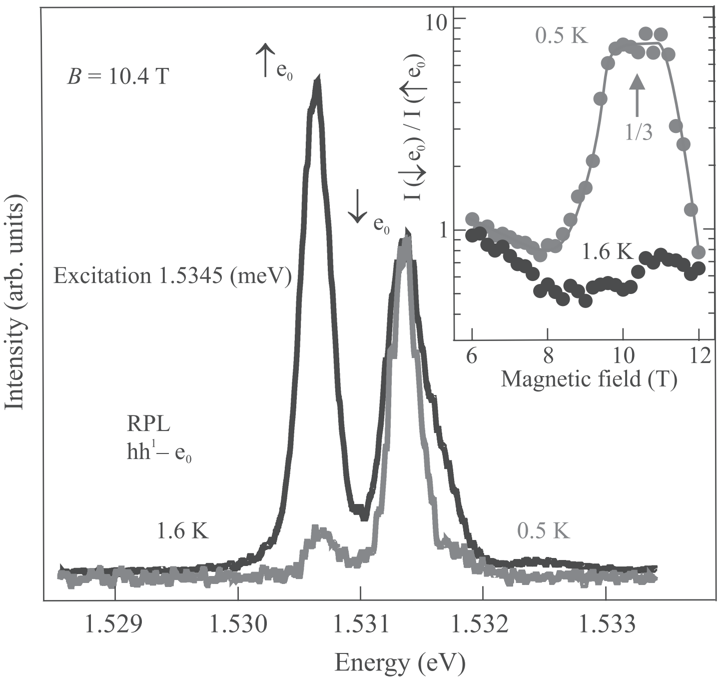


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры резонансной фотолюминесценции (RPL) в области формирования ДКЭХ 1/3 при двух температурах 0.5 K (красные сплошные линии) и 1.6 K (черные сплошные линии), измеренные при резонансном возбуждении оптического перехода из размерноквантованной подзоны легких дырок. На вставке в логарифмическом масштабе показаны зависимости отношений амплитуд линий RPL для перехода с верхнего и нижнего спиновых подуровней нулевого уровня Ландау электронов от магнитного поля, измеренные при температурах 0.5 K (красные сплошные точки) и 1.6 K (черные сплошные точки). Сплошная линия проведена для удобства

щественно, что все связанные дырки успевают прорекомбинировать за время релаксации в нижайшее состояние. Наблюдаемый эффект имеет универсальный характер; т.е. не зависит от энергии используемого резонанса для фотовозбуждения RPL (рис. 4). Данный результат неудивителен, так как в валентной зоне квантовой ямы только нижайшее состояние первой зоны тяжелых дырок является чистым по спину (мы не проводим здесь подробную классификацию состояний валентной зоны, что само по себе не является серьезной проблемой, но находится в стороне от предмета статьи) [19]. Соответственно, резонансное возбуждение с участием любого из дырочных состояний легких или тяжелых дырок приводит к неравновесному заполнению верхнего спинового подуровня нулевого уровня Ландау 2DES.

Необходимо отметить, что аналогичный результат получается при исследовании спектров фотолюминесценции "магнетофермионного конденсата" в режиме КЭХ на факторе заполнения 2 [10]. Увеличение интенсивности оптического перехода с верхнего спинового подуровня нулевого уровня Ландау в условиях стационарного фотовозбуждения связывается, в этом случае, с бозонизацией 2DES и, как следствие, возникновением когерентности в системе неравновесных бозонов (магнитоэкситонов) [20]. Аналогом "магнетофермионного конденсата" в ДКЭХ 1/3 при резонансном фотовозбуждении может служить система неравновесных спиновых магнитоэкситонов (связанных состояний неравновесных электронов на верхнем спиновом подуровне нулевого уровня Ландау и какого-то количества квазидырок (возможно с дробным зарядом) под уровнем Ферми на нижнем спиновом подуровне). К сожалению, на данный момент нет строгого теоретического описания подобных связанных состояний, причем не известны даже их статистические свойства (являются ли они бозонами или энионами). Расчеты дисперсионных зависимостей обычных спиновых экситонов (связанных состояний одного электрона и одной дырки под уровнем Ферми электронов) в рамках одномодового приближения (SMA, *single mode approximation*) с учетом парной корреляционной функции Лафлиновской жидкости в ДКЭХ 1/3 не позволяют надеяться на формирование спин-экситонного конденсата, так как физические свойства этих возбуждений на факторе заполнения 1/3 мало отличаются от свойств спиновых экситонов на факторе заполнения 1 (в холлов-

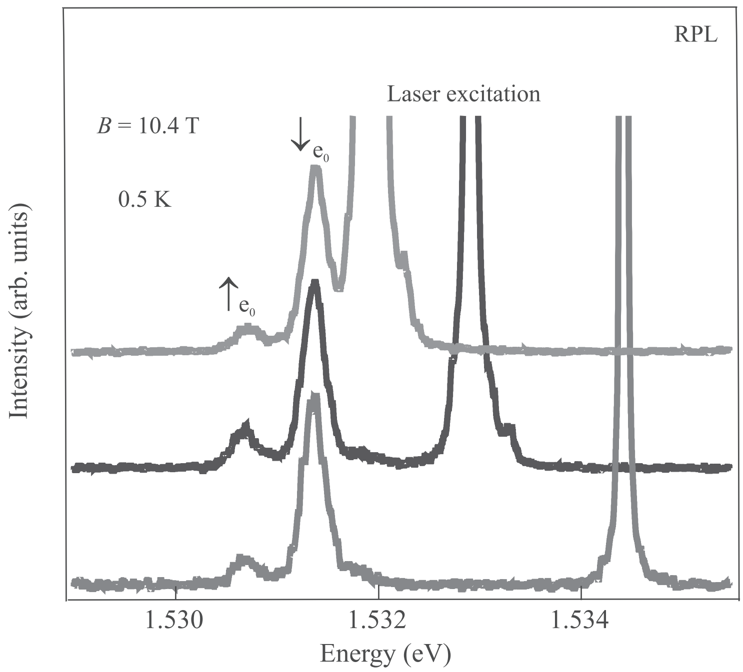


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектры резонансной фотолюминесценции (RPL) в области формирования ДКЭХ 1/3 (10.4 T), измеренные при температуре 0.5 K для трех различных энергий резонансного возбуждения, соответствующих разрешенным оптическим переходам из нижайших размерноквантованных подзон легких и тяжелых дырок

ском ферромагнетике) [21, 22]. Самое главное, что дисперсионные зависимости спиновых экситонов в холловским ферромагнетике и ДКЭХ 1/3 достигают минимума при нулевом обобщенном импульсе, где их энергия равна одночастичной зеемановской энергии (следствие теоремы Лармора). Прямые измерения времен релаксации спиновых экситонов в основное состояние для холловского ферромагнетика дают значения порядка 100 нс [23], что на три порядка величины меньше, чем требуется для формирования конденсата в условиях стационарного фотовозбуждения [10]. Численные же расчеты указывают на существование дополнительных спиновых магнитоэкситонов в ДКЭХ 1/3 с дробным зарядом и минимумом дисперсионной зависимости на обратном межчастичном расстоянии [24]. Существование подобных "ротонных" минимумов на дисперсионной кривой неравновесных возбуждений – необходимое условие формирования конденсата магнитоэкситонов аналогичного "магнетофермионному конденсату" [25]. Вопрос о связи конденсата спиновых магнитоэкситонов с изменением интенсивности RPL в условиях формирования ДКЭХ 1/3 будет изучаться в дальнейшем теоретически и экспериментально. Однако, вне зависимости от физической природы столь кардинальной модификации спектра RPL, сама эта модификация служит экспериментальным маркером состояния ДКЭХ 1/3, а методика RPL может рассматриваться в качестве нового инструмента зондирования объемных состояний ДКЭХ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект # 18-12-00246. А. С. Журавлев благодарит Российский фонд фундаментальных исследований, грант #20-02-00230, за возможность использования приборного парка Центра Коллективного Пользования ИФТТ РАН. В. А. Кузнецов благодарит Российский фонд фундаментальных исследований, грант # 19-32-90192, за финансирование расходных материалов для экспериментальной установки и компьютерного оборудования.

1. R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983).
2. J. K. Jain, Phys. Rev. Lett. **63**, 199 (1989).
3. B. I. Halperin, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **47**, 7312 (1993).
4. G. Moore and N. Read, Nucl. Phys. B **360**, 362 (1991).
5. M. M. Fogler, A. A. Kulakov, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **54**, 1853 (1996).
6. G. Murthy and R. Shankar, Rev. Mod. Phys. **75**, 1101 (2003).
7. H. Fu, Y. Wu, R. Zhang, J. Sun, P. Shan, P. Wang, Z. Zhu, L. N. Pfeier, K. W. West, H. Liu, X. C. Xie, and Xi Lin, Nat. Commun. **10**, 4351 (2019).

8. L. V. Kulik, V. A. Kuznetsov, A. S. Zhuravlev, V. Umansky, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. Research **2**, 033123 (2020).
9. R. R. Du, A. S. Yeh, H. L. Stormer, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **75**, 3926 (1995).
10. L. V. Kulik, A. S. Zhuravlev, S. Dickmann, A. V. Gorbunov, V. B. Timofeev, I. V. Kukushkin, and S. Schmult, Nat. Commun. **7**, 13499 (2016).
11. И. В. Лернер, Ю. Е. Лозовик, ЖЭТФ **78**, 1167 (1980) [I. V. Lerner and Y. E. Lozovik, JETP **51**, 588 (1980)].
12. V. M. Apalkov and E. I. Rashba, Phys. Rev. B **46**, 1628 (1992).
13. Л. В. Кулик, А. С. Журавлев, В. Е. Бисти, В. Е. Кирпичев, М. Н. Ханнанов, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **100**, 659 (2014) [L. V. Kulik, A. S. Zhuravlev, V. E. Bisti, V. E. Kirpichev, M. N. Khannanov, and I. V. Kukushkin, JETP Lett. **100**, 581 (2015)].
14. M. Byszewski, B. Chwalisz, D. K. Maude, M. L. Sadowski, M. Potemski, T. Saku, Y. Hirayama, S. Studenikin, D. G. Austing, A. S. Sachrajda, and P. Hawrylak, Nature Phys. **2**, 239 (2006).
15. A. S. Zhuravlev, V. A. Kuznetsov, L. V. Kulik, V. E. Bisti, V. E. Kirpichev, I. V. Kukushkin, and S. Schmult, Phys. Rev. Lett. **117**, 196802 (2016).
16. V. A. Kuznetsov, L. V. Kulik, M. D. Velikanov, A. S. Zhuravlev, A. V. Gorbunov, S. Schmult, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **98**, 205303 (2018).
17. L. V. Kulik, K. Ovchinnikov, A. S. Zhuravlev, V. E. Bisti, I. V. Kukushkin, S. Schmult, and W. Dietsche, Phys. Rev. B **85**, 113403 (2012).
18. Л. В. Кулик, А. И. Тартаковский, А. В. Ларионов, Е. С. Боровицкая, В. Д. Кулаковский, ЖЭТФ **112**, 353 (1997) [L. V. Kulik, A. I. Tartakovskii, A. V. Larionov, E. S. Borovitskaya, and V. D. Kulakovskii, Sov. Phys. – JETP **85**, 195 (1997)].
19. U. Ekenberg and M. Altarelli, Phys. Rev. B **32**, 3712 (1985).
20. L. V. Kulik, V. A. Kuznetsov, A. S. Zhuravlev, A. V. Gorbunov, V. V. Solovyev, V. B. Timofeev, I. V. Kukushkin, and S. Schmult, Sci. Rep. **8**, 10948 (2018).
21. J. P. Longo and C. Kallin, Phys. Rev. B **47**, 4429 (1993).
22. A. S. Zhuravlev, A. B. Van'kov, L. V. Kulik, I. V. Kukushkin, V. E. Kirpichev, J. H. Smet, K. von Klitzing, V. Umansky, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **77**, 155404 (2008).
23. A. S. Zhuravlev, S. Dickmann, L. V. Kulik, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **89**, 161301(R) (2014).
24. T. Chakraborty, P. Pietilainen, and F. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **57**, 130 (1986).
25. А. С. Журавлев, В. А. Кузнецов, А. В. Горбунов, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **110**, 260 (2019).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 523 – 530

Многозонный андреевский транспорт в сверхпроводящих оксипниктидах оптимального состава

Т. Е. Кузьмичева+1), *С. А. Кузьмичев*+*, *Н. Д. Жигадло*×

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

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

×*CrystMat Company, CH-8046 Zurich, Switzerland*

Поступила в редакцию 15 сентября 2020 г.
После переработки 20 сентября 2020 г.
Принята к публикации 20 сентября 2020 г.

Методами спектроскопии многократных андреевских отражений (МАО) SnS-контактов напрямую измерены температурные зависимости сверхпроводящих параметров порядка, избыточного андреевского тока и проводимости при нулевом смещении для поликристаллов сверхпроводящих оксипниктидов $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$ и $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$ с критическими температурами, близкими к оптимальным. Показано, что полученные данные самосогласованы и могут быть описаны в рамках двухщелевой модели. Оценен доминирующий вклад зон с большой щелью в проводимость 70−85 %.

DOI: 10.31857/S1234567820200069

Свойства железосодержащих сверхпроводников активно исследуются с момента открытия сверхпроводимости в $LaFeAsO_{1-x}F_x$ [1]. В физике этих соединений до сих пор остался ряд нерешенных вопросов, касающихся, в основном, влияния особенностей зонной структуры на высокие критические температуры T_c и симметрию сверхпроводящего параметра порядка [2–8]. В частности, экспериментальные исследования оксипниктидов железа *RE*FeAsO (*RE* – редкоземельный металл) семейства 1111 затруднены в связи с отсутствием крупных монокристаллов.

В большинстве 1111-материалов сверхпроводимость возникает при подавлении волны спиновой плотности допированием или давлением [9]. На фазовой диаграмме оксипниктидов с водородным замещением ($O_{1-x}H_x$) сверхпроводящая фаза представляет собой двойной "колокол" допирования [10, 11] с заметным повышением критической температуры T_c при больших значениях x и сопровождается структурным переходом [12]. С этой точки зрения можно предположить, что 1111H-материалы могут демонстрировать новую физику [13], нехарактерную для большинства сверхпроводящих оксипниктидов.

На поверхность Ферми в материалах системы 1111 выходят квазидвумерные электронные зоны вблизи X-точки и дырочные зоны около Г-точки зоны Бриллюэна, на которых при температурах ниже T_c образуются несколько сверхпроводящих конденсатов. В большинстве экспериментов обнаружена двухщелевая сверхпроводимость с параметрами порядка Δ_L и Δ_S (в качестве обзора см. [14–17]). В частности, в наших экспериментах методами спектроскопии многократных андреевских отражений (МАО) наблюдается скейлинг величин большой и малой щели с T_c в широком диапазоне критических температур 21−54 K для оксипниктидов различного состава и степени замещения [17–20]. Однако, как отмечалось нами ранее [18], для оксипниктидов с критическими температурами, близкими к оптимальным $T_c \approx 50$ K, спектроскопическая особенность от малой щели Δ_S в среднем заметно более подавлена, чем от большой щели, причем интенсивность андреевских минимумов от Δ_S растет при уменьшении T_c в недодопированных образцах.

Данные о структуре сверхпроводящего параметра порядка в 1111H-соединениях редко встречаются в научной литературе на данный момент. В наших предварительных исследованиях оптимально допированных образцов $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$ [21] напрямую определены величины большой сверхпроводящей щели Δ_L и предположительной малой щели. Неоднозначность существования второго объемного параметра порядка Δ_S связана с тем, что андреевская структура от малой щели в Nd-1111H, как и в других 1111, сильно подавлена [21], и набор данных для проверки воспроизводимости величины малой щели весьма затруднителен.

1)e-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

В контактах сверхпроводник – тонкий нормальный металл – сверхпроводник (SnS) при температурах ниже T_c реализуется эффект многократных андреевских отражений. Во всем диапазоне смещений eV на вольтамперной характеристике (ВАХ) такого контакта присутствует избыточный ток (относительно омической зависимости в нормальном состоянии выше T_c), значительно возрастающий при малых смещениях (так называемая область "пьедестала"). На спектре динамической проводимости SnS-контакта возникает субгармоническая щелевая структура (СГС) [22–27]. Для контакта высокой прозрачности (90−98 %) СГС представляет собой серию минимумов при смещениях $|eV_n(T)| = 2\Delta(T)/n$, где Δ – величина сверхпроводящей щели, $n = 1,\ 2,\ \ldots$ [25–27]. Положение первой особенности ($n = 1$) может быть немного смещено в сторону меньших смещений; в этом случае амплитуда щели определяется, исходя из положений субгармоник более высоких порядков ($n \geq 2$).

Согласно расчетам [22, 25–27] для контакта с абсолютно прозрачными NS-границами ($Z = 0$) на базе однощелевого сверхпроводника, выражение для избыточного андреевского тока $I_{\text{exc}}(T) \equiv I(T) - I_N(T_c)$ при больших смещениях $eV \to \infty$ определяется температурной зависимостью сверхпроводящей щели и может быть упрощено до

$$I_{\text{exc}}(T, eV \to \infty) = \frac{8}{3}\frac{G_N}{e}\exp(-\frac{d_c}{l_c})\Delta(T), \qquad (1)$$

где d_c – размер контакта, l_c – неупругая длина рассеяния носителей (обе величины взяты вдоль кристаллографического c-направления), G_N – нормальная проводимость контакта при T_c, e – заряд электрона. Для реального SnS-контакта можно предположить, что абсолютная величина избыточного тока будет зависеть и от баллистического отношения l_c/d_c, и от параметра размытия Γ (влияние которого не рассмотрено ни в одной модели многократных андреевских отражений), что затрудняет оценку этих параметров из эксперимента. Учитывая вышесказанное, далее величины избыточного тока нормированы на свое значение при $T = 0$ для сравнения температурного поведения $I_{\text{exc}}(T)/I_{\text{exc}}(0)$ с нормированными температурными зависимостями сверхпроводящих щелей $\delta_i(T) \equiv \Delta_i(T)/\Delta_i(0)$ $(i = L,\ S)$.

В работах [26, 27] было получено выражение для проводимости при нулевом смещении баллистического SnS-контакта на базе однощелевого сверхпроводника, в котором процесс МАО ограничен $\approx l/d$ отражениями:

$$G^A_{\text{ZBC}}(T) \equiv G_{\text{ZBC}}(T) - G_N \sim \sim G_N\frac{l}{d}\tanh[\frac{\Delta(T)}{2k_BT}], \quad eV \to 0. \qquad (2)$$

Амплитуда основного ($n = 1$) андреевского минимума $A_{n=1} \equiv G_N - G(eV = 2\Delta)$ в рамках однозонного формализма [25] пропорциональна концентрации куперовских пар $\Delta\tanh[\Delta/2k_BT]$ [28] и может быть записана как

$$A_{n=1}(T) \sim G_N\Delta(T)\tanh\left[\frac{\Delta(T)}{2k_BT}\right]\exp\left(-\frac{d}{l}\right), \qquad (3)$$

$$A_{n=1}(0) \sim G_N\Delta(0)\exp\left(-\frac{d}{l}\right), \quad T \to 0. \qquad (4)$$

Для двухщелевого сверхпроводника вклад в андреевский транспорт будут давать зоны, связанные с каждой из щелей; в частности, на ВАХ и $dI(V)/dV$-спектре будут наблюдаться две СГС. В этом случае, пренебрегая межзонным транспортом в процессе МАО, можно ожидать, что избыточный ток представляется суммой парциальных вкладов зон. Полагая в первом приближении примерно одинаковые длины неупругого рассеяния l_i и, соответственно, множители $\exp(-d/l_i)$ $(i = L,\ S)$ для двух зон, из формулы (1) получим

$$\frac{I_{\text{exc}}(T)}{I_{\text{exc}}(0)} = \phi\ \delta_L(T) + (1-\phi)\delta_S(T), \qquad (5)$$
$$\phi \approx \frac{G_L\Delta_L(0)}{G_S\Delta_S(0) + G_L\Delta_L(0)},$$

где G_S и G_L – нормальные парциальные проводимости зон, а весовой коэффициент ϕ определяет вклад зон с большой щелью в избыточный ток.

Для андреевской проводимости SnS-контакта при нулевом смещении в двухзонном приближении и упрощении $l_L \approx l_S$ можно записать

$$\frac{G^A_{\text{ZBC}}(T)}{G^A_{\text{ZBC}}(0)} = \chi\tanh\left[\frac{\Delta_L(T)}{2k_BT}\right] + (1-\chi)\tanh\left[\frac{\Delta_S(T)}{2k_BT}\right], \qquad (6)$$
$$\chi = \frac{G_L}{G_L + G_S}.$$

Заметим, что в выражении для χ множители, содержащие гиперболический тангенс, пропадают, поскольку $\tanh(1/T) \to 1$ при $T \to 0$.

Таким образом, исследование андреевского транспорта в SnS-контакте позволяет оценить вклад зон с большой щелью в общую проводимость тремя способами: определив непосредственно весовой коэффициент χ температурной зависимости проводимости при нулевом смещении; из температурной зависимости избыточного андреевского тока (χ_{EC}) по формуле (5); из отношения амплитуд первых андреевских минимумов A_L/A_S при $T \to 0$ (χ_A), комбинируя (4) и (6):

$$\chi_{\mathrm{EC}} = \frac{\phi\Delta_S(0)}{(1-\phi)\Delta_L(0)+\phi\Delta_S(0)} = \left[\left(\frac{1}{\phi}-1\right)\frac{\Delta_L(0)}{\Delta_S(0)}+1\right]^{-1}, \quad (7)$$

$$\chi_A = \frac{A_L/\Delta_L(0)}{A_S/\Delta_S(0)+A_L/\Delta_L(0)} = \left[\frac{A_S}{A_L}\frac{\Delta_L(0)}{\Delta_S(0)}+1\right]^{-1}. \quad (8)$$

В данной работе приведены прямые самосогласованные данные исследования андреевского транспорта в SnS-контактах, полученных в поликристаллах оксипниктидов для составов, близких к оптимальным: $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$ и $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$ с редкими видами замещения. Показано, что температурные зависимости избыточного андреевского тока и проводимости при нулевом смещении согласуются с температурными зависимостями сверхпроводящих щелей и не могут быть описаны в рамках однощелевой модели. Определен доминирующий вклад зон с большой щелью в общую проводимость 0.7–0.85.

Поликристаллические образцы оксипниктидов с частичным замещением самария торием $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$ и критической температурой $T_c \approx 52$ K (Sm-1111), а также оксипниктиды неодима с водородным замещением $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$ с $T_c \approx 49$ K (Nd-1111H) были выращены методом синтеза под высоким давлением. Детали синтеза и характеризации образцов приведены в работах [21, 29–31]. Андреевские SnS-контакты на микротрещине были получены путем раскалывания образца при низких температурах с помощью техники *"break-junction"* [32]. Схема эксперимента, а также преимущества и недостатки метода подробно обсуждаются в работе [33].

Образец, вырезанный в виде тонкой прямоугольной пластинки размером порядка $2\times1\times0.1$ мм^3, закрепляется на пружинящем столике с помощью четырех капель жидкого при комнатной температуре In-Ga сплава (истинное четырехточечное подключение). Далее столик с образцом охлаждается до 4.2 K и прецизионно изгибается, что приводит к образованию микротрещины – туннельного барьера, полностью разделяющего два сверхпроводящих берега. Исследуемая область контакта располагается на значительном удалении от токовых и потенциальных контактов, что защищает ее от перегрева и химического влияния In-Ga припоя.

В процессе эксперимента берега разводятся на незначительное расстояние, тем самым предотвращая деградацию поверхности криогенных сколов. Сверхпроводящие свойства исследуются локально, в пределах контактной области, минимальные размеры которой в *ab*-плоскости, по нашим оценкам, достигают порядка 10 нм.

Нами неоднократно показано, что техника *"break-junction"* успешно применяется не только к монокристаллам, но и к поликристаллическим образцам слоистых соединений: туннельные контакты высокого качества в них могут быть получены между криогенными поверхностями расколовшихся кристаллических зерен [18, 33, 34]. Это возможно при достаточно прочной механической связи кристаллитов друг с другом, а также при их размерах более 100 нм (т.е. превышающих диаметр контактной области). Ток через такой контакт идет вдоль *c*-направления. В исследованных нами оксипниктидах [18, 21, 33–35] возникающая в контакте слабая связь оказывалась электрически эквивалентна тонкому слою нормального металла высокой прозрачности (90–98 %), а получаемые $I(V)$ и $dI(V)/dV$ контактов на микротрещине характерны именно для режима МАО [22, 24, 25]. Подытоживая преимущества используемого метода, можно сказать, что андреевская спектроскопия SnS-контактов на микротрещине позволяет локально и напрямую исследовать сверхпроводящие свойства материала и их температурное поведение.

На рисунке 1 приведены ВАХ SnS-контакта с локальной критической температурой $T_c \approx 49$ K на

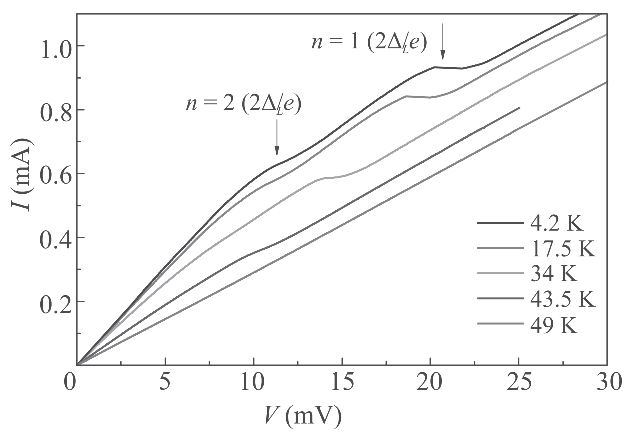


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вольтамперные характеристики андреевского SnS-контакта с локальной $T_c \approx 49$ K, полученного в поликристалле $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$, при различных температурах. Стрелками отмечены положения основной ($n = 1$) и второй ($n = 2$) субгармоники от большой щели $\Delta_L \approx 11.4$ мэВ при $T = 4.2$ K

базе $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$, измеренные при различных температурах. При $T = 4.2$ К на ВАХ заметен выраженный пьедестал при $eV \to 0$, избыточный андреевский ток при больших смещениях, а также горизонтальные участки СГС при $eV_{n=1} \approx 22$ мэВ и $eV_{n=2} \approx \approx 11.4$ мэВ; положения последних определяют амплитуду большой щели $\Delta_L \approx 11.4$ мэВ. Все эти особенности характерны для баллистического контакта ($l_c/d_c \sim 3$) в режиме многократных андреевских отражений. Величина малой щели $\Delta_S \approx 2.7$ мэВ и отношение амплитуд первых ($n = 1$) андреевских минимумов от большой и малой щели $A_L/A_S \approx 10$ при 4.2 К, а также температурная зависимость $\Delta_S(T)$ для данного контакта были определены по соответствующим спектрам динамической проводимости в области пьедестала от большой щели.

С увеличением температуры андреевские особенности ВАХ становятся менее интенсивны и смещаются в сторону нуля; также уменьшаются величины I_{exc} и G_{ZBC}. При $T = 49$ К на ВАХ полностью исчезают особенности, вызванные андреевским транспортом, что означает переход контакта в нормальное состояние и определяет его локальную T_c.

На рисунке 2 показаны температурные зависимости большой и малой сверхпроводящей щели, полученные для контакта на рис. 1 (квадраты). Видно, что температурные зависимости щелей не соответствуют функции, подобной $\Delta(T)$, определяемой предсказаниями однозонной теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) в пределе слабой связи (приведена пунктиром). Такой вид $\Delta_{L,S}(T)$ характерен для оксипниктидов и воспроизводится, по нашим данным, в образцах системы 1111 с различной степенью замещения и T_c [17, 18, 36, 37]. Для сравнения кружками на рис. 2 приведены зависимости $\Delta_{L,S}(T)$ для SnS-контакта в Nd-1111H с водородным замещением. Отметим, что температурная зависимость большой щели в Nd-1111H имеет более выраженный прогиб при температурах $T > 10$ К, который, тем не менее, воспроизводится для различных контактов на базе Nd-1111H [21]. Температурная зависимость $\Delta_S(T)$ в Nd-1111H была определена по данным соответствующих $dI(V)/dV$-спектров, измеренных при T от 4.2 К до T_c. При 4.2 К амплитуда первого андреевского минимума от большой щели примерно в $A_L/A_S \approx 24$ раза интенсивнее, чем для малой щели.

Обе пары зависимостей $\Delta_{L,S}(T)$, приведенные на рис. 2, могут быть описаны в рамках двухзонной модели на основе уравнений Москаленко и Сула [38, 39] с перенормированными БКШ-интегралами [19, 40], как показано сплошными линиями на рис. 2. Опре-

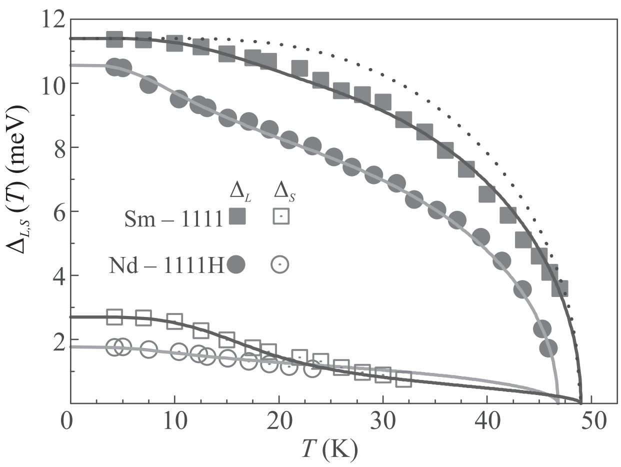


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости большой сверхпроводящей щели (сплошные символы) и малой щели (пустые символы) в $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$ (квадраты) и $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$ (кружки). Линиями показаны теоретические кривые, рассчитанные в рамках двухзонной модели на основе уравнений Москаленко и Сула с перенормированными БКШ-интегралами. Однозонная БКШ-образная зависимость $\Delta(T)$ приведена пунктиром

деленные таким образом четверки “малых” констант связи, диагональных λ_{ii} и недиагональных λ_{ij} ($i = = L, S$), указывают на доминирующую роль внутризонной связи в Sm-1111: оцененный параметр $\beta = = \sqrt{\lambda_{LL}\lambda_{SS}/(\lambda_{LS}\lambda_{SL})} \approx 11$ согласуется со статистикой данных, набранной нами ранее для 1111-пниктидов оптимального состава [17–19]. Напротив, зависимости, полученные для Nd-1111H, соответствуют случаю достаточно сильного межзонного взаимодействия, сравнимого по силе с внутризонным: значение $\beta \approx 1.5$ нехарактерно для большинства оксипниктидов, тем не менее, воспроизводит оценку, полученную нами ранее для Nd-1111H [21]. Полученные четверки λ_{ij} позволяют экстраполировать значения сверхпроводящих щелей при любых температурах. Это потребуется нам для дальнейших рассуждений.

Треугольниками на рис. 3a показана температурная зависимость избыточного тока $I_{\mathrm{exc}}(T)/I_{\mathrm{exc}}(0)$, полученная для Sm-1111 по данным рис. 1 при $eV = = 25$ мэВ и нормированная на свое значение при $T = 0$. С целью учета конечного $eV = 25$ мэВ, при котором были взяты значения $I_{\mathrm{exc}}(T)$ при различных температурах, экспериментальные данные были также нормированы на $\tanh[eV/(2k_BT)]$ для корректного сравнения с формулами (1), (5). Поскольку теоретические зависимости, полученные на основе уравнений Москаленко и Сула (линии на рис. 2), аппрок-

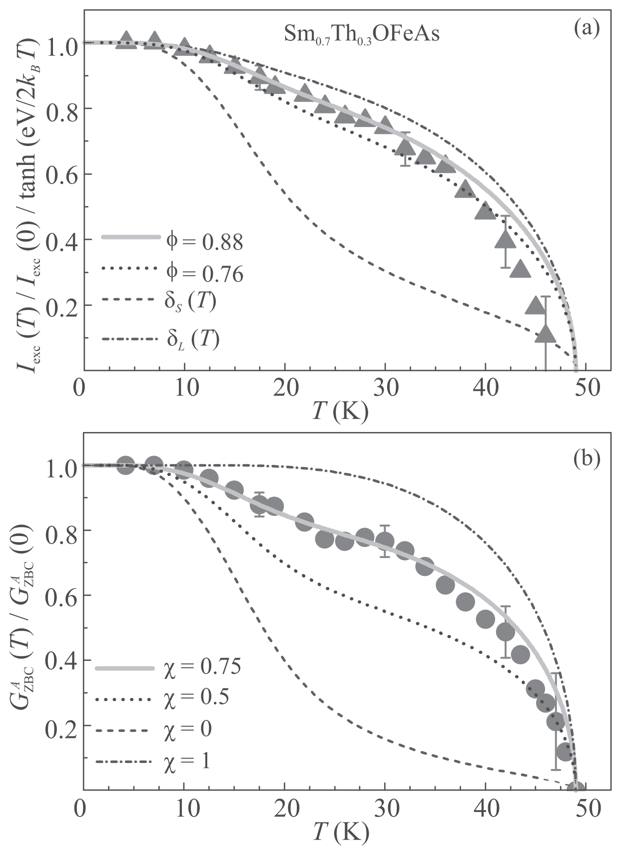


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Температурная зависимость избыточного андреевского тока (треугольники) при смещении $eV = 25$ мэВ $> 2\Delta_L(0)$, нормированная на свое значение при $T = 0$, для SnS-контакта в $\mathrm{Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs}$. Двухзонная аппроксимация формулой (5) с $\phi = 0.88$ показана сплошной линией, пунктиром – кривая при $\phi = 0.76$. Штрихпунктирная и штриховая линии соответствуют зависимостям $\delta_L(T)$ и $\delta_S(T)$ для Sm-1111, показанным квадратами на рис. 2. (b) – Температурная зависимость андреевской проводимости при нулевом смещении (кружки), нормированная на свое значение при $T = 0$. Сплошной линией приведена двухзонная аппроксимация формулой (6) при $\chi = 0.75$, а также соответствующие функции при $\chi = 0.5$, 1 и 0

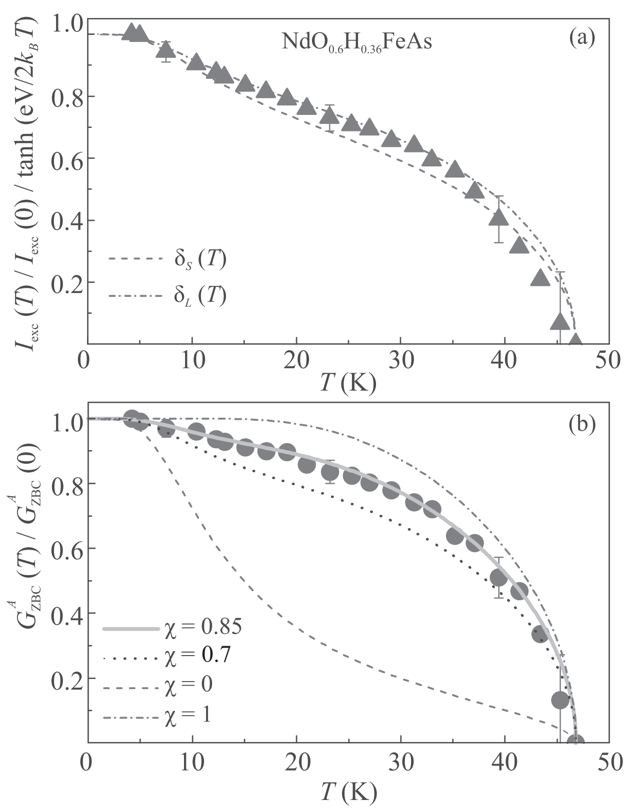


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Температурная зависимость избыточного андреевского тока (треугольники) при смещении $eV = 24$ мэВ $> 2\Delta_L(0)$, нормированная на свое значение при $T = 0$, для SnS-контакта в $\mathrm{NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs}$ с $T_c \approx 47$ К. Штрихпунктирная и штриховая линии соответствуют зависимостям $\delta_L(T)$ и $\delta_S(T)$ для Nd-1111H, показанным кружками на рис. 2. (b) – Температурная зависимость андреевской проводимости при нулевом смещении (кружки), нормированная на свое значение при $T = 0$. Сплошной линией приведена двухзонная аппроксимация формулой (6) при $\chi = 0.85$, а также функции при $\chi = 0.7$, 1 и 0

симируют экспериментальные температурные зависимости щелей во всем диапазоне температур, удобно использовать именно аппроксимационные кривые $\Delta_{L,S}(T)$ при подстановке в формулу (5) с весовым коэффициентом ϕ, который является свободным параметром.

Экспериментальная зависимость избыточного тока от температуры (треугольники на рис. 3a) в целом хорошо согласуется с двухзонной аппроксимацией в случае, если зоны с большой щелью дают заметно больший вклад в избыточный ток ($\phi > 0.8$). Уменьшение избыточного тока относительно теоретической кривой при температурах, больших $\approx 0.7\,T_c$, может быть объяснено влиянием неупругого рассеяния, характеризующегося параметром Γ. Поскольку количество заполненных подщелевых состояний, влияющих на вероятность прохождения носителей внутри сверхпроводящей щели (и, соответственно, потерю андреевских носителей), а также степень размытия зависимости плотности электронных состояний от энергии зависит именно от отношения Γ/Δ, то в первом приближении это отношение растет обратно пропорционально $\Delta(T)$ при увеличении температуры. Поэтому только при $T < 0.5\ T_c$ можно считать, что зависимость $I_{\mathrm{exc}}(T)$ определяется исключительно особенностями $\delta_i(T) \equiv \Delta_i(T)/\Delta_i(0)$ (прогибами

Таблица 1. Параметры, определенные по данным рис. 1–4: величины сверхпроводящих щелей и отношение амплитуд основных ($n = 1$) андреевских минимумов от большой и малой щели A_L/A_S при $T \to 0$, весовые коэффициенты ϕ и χ, соответствующие наилучшей аппроксимации $I_{\rm exc}(T)$ и $G_{\rm ZBC}(T)$ на рис. 3, 4, а также вклады зон с большой щелью в общую проводимость, косвенно оцененные по данным амплитуд андреевских минимумов – χ_A и избыточного андреевского тока - $\chi_{\rm EC}$, по сравнению с определенным напрямую χ

Соединение	T_c, K	Δ_L, Δ_S, мэВ	A_L/A_S	ϕ	χ по данным $G^A_{\rm ZBC}(T)$:	χ_A по данным $A_{L,S}$:	χ_{EC} по данным $I_{\rm exc}(T)$:
$Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$	49	11.4, 2.7	10	0.88 ± 0.09	$\mathbf{0.75 \pm 0.08}$	$\mathbf{0.7 \pm 0.07}$	$\mathbf{0.63 \pm 0.06}$
$NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$	46.8	10.5, 1.75	24	н/о	$\mathbf{0.85 \pm 0.09}$	$\mathbf{0.85 \pm 0.08}$	н/о

при $T \approx 15$ K, см. рис. 2), и оценивать весовой коэффициент из аппроксимации низкотемпературной части зависимости избыточного тока. Сплошной линией приведена наилучшая аппроксимация с весовым коэффициентом $\phi = 0.88$, а также кривая, соответствующая $\phi = 0.76$, для сравнения.

Экспериментальная зависимость андреевской составляющей проводимости при нулевом смещении $G^A_{\rm ZBC}(T)/G^A_{\rm ZBC}(0)$ от температуры для этого же контакта показана на рис. 3b кружками. Хорошо видно, что она проходит значительно ниже однозонной штрихпунктирной кривой, полученной по формуле (2) и соответствующей вкладу зон от большой щели ($\chi = 1$). Двухзонная аппроксимация формулой (6) дает наилучшее совпадение теории и эксперимента при весовом коэффициенте $\chi \approx 0.75$ (сплошная линия). Для сравнения также показана кривая при $\chi = 0.5$, проходящая заметно ниже экспериментальной зависимости. Стоит отметить, что точность определения χ по этим данным достаточно высока, поскольку даже небольшая вариация весового коэффициента сильно меняет вид двухзонной аппроксимационной кривой в диапазоне, ограниченном штриховой и штрихпунктирной линиями.

Аналогичные исследования были проведены для данных, полученных на SnS-контакте с локальной критической температурой $T_c \approx 47$ K в поликристалле Nd-1111H с водородным замещением (рис. 4). Экспериментальная зависимость избыточного тока (треугольники) была получена при конечном $eV = 24$ мВ и нормирована на $\tanh[eV/(2k_BT)]$. Видно, что экспериментальная кривая повторяет выраженный прогиб нормированных температурных зависимостей обеих щелей при $T > 10$ K (штриховая и штрихпунктирная линии). Однако точная оценка весового коэффициента в данном случае затруднена из-за схожести кривых $\delta_{L,S}(T)$ вследствие $\beta \approx 1.5$, т.е. стремящегося к 1. Отметим, что для двухзонного сверхпроводника с нулевым детерминантом матрицы констант связи λ_{ij} (и, соответственно, $\beta = 1$) зависимости $\delta_L(T)$ и $\delta_S(T)$ полностью совпадают во всем диапазоне температур.

На рисунке 4b кружками приведена зависимость андреевской проводимости при нулевом смещении $G_{\rm ZBC}$, аппроксимированная формулой (6). Несмотря на невозможность оценки весовых коэффициентов вклада эффективных зон в проводимость по данным рис. 4a, для $G^A_{\rm ZBC}(T)$ это возможно проделать из-за существенного различия в температурном ходе $\tanh[\Delta_i(T)/(2k_BT)]$. По нашим оценкам, вклад зон с Δ_L для Nd-1111H составляет около $\chi = 0.85$; соответствующая зависимость (сплошная линия) прекрасно согласуется с экспериментальными точками.

В таблице 1 приведены параметры сверхпроводящего состояния $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$ и $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$, определенные методом андреевской спектроскопии для рассмотренных SnS-контактов при $T = 4.2$ K. Из величины вклада зон с большой щелью в избыточный ток (весовой коэффициент ϕ) и отношения амплитуд андреевских минимумов при 4.2 K (A_L/A_S) по формулам (7), (8) были определены парциальные вклады зон с Δ_L в проводимость – коэффициенты $\chi_{\rm EC}$ и χ_A соответственно. Видно, что для обоих контактов парциальные составляющие проводимости зон с большой щелью, χ, χ_A и $\chi_{\rm EC}$, согласуются друг с другом. Для исследованных оксипниктидов вклад зон с Δ_L в общую проводимость доминирует, при этом вклад зон с малой щелью не превышает 25–35 % в Sm-1111 и $\approx$ 15% в Nd-1111H. Это объясняет сильное подавление СГС от малой щели на $dI(V)/dV$-спектрах SnS-контактов, отмеченное нами ранее для ряда оксипниктидов различного состава с T_c порядка 50 K [18, 21, 34].

В заключение, в работе представлены данные спектроскопии многократных андреевских отражений в SnS-контактах на микротрещине, созданных в поликристаллах оксипниктидов $Sm_{0.7}Th_{0.3}OFeAs$ и $NdO_{0.6}H_{0.36}FeAs$ с критическими температурами, близкими к оптимальным. Получены выражения для температурных зависимостей избыточного андреевского тока и андреевской проводимости при нулевом смещении в двухзонном приближении. Показано, что парциальные проводимости зон могут быть определены из $I_{\rm exc}(T)$, $G^A_{\rm ZBC}(T)$, а также из отношения амплитуд основных андреевских минимумов от щелей Δ_L и Δ_S на $dI(V)/dV$-спектре при $T \to 0$.

Полученная двухзонная аппроксимация на основе измеренных напрямую сверхпроводящих параметров порядка $\Delta_{L,S}(T)$ хорошо описывает экспериментальные температурные зависимости избыточного андреевского тока ($eV \gg 2\Delta$) и андреевской проводимости при нулевом смещении ($eV = 0$). Из оцененных весовых коэффициентов, а также из отношения амплитуд основных андреевских минимумов на $dI(V)/dV$-спектре при 4.2 K определен доминирующий вклад зон с большой щелью $\chi \approx 70{-}85\,\%$ в общую проводимость.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема “Физика высокотемпературных сверхпроводников и новых квантовых материалов”, # 0023-2019-0005).

Измерения частично проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИАН.

1. Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006).
2. Q. Si, R. Yu, and E. Abrahams, Nat. Rev. Mater. **1**, 16017 (2016).
3. P. J. Hirschfeld, Comptes Rendus Physique **17**, 197 (2016).
4. H. Hosono, A. Yamamoto, H. Hiramatsu, and Y. Ma, Mater. Today **21**, 278 (2018).
5. A. Kreisel, P. J. Hirschfeld, and B. M. Andersen, Symmetry **12**, 1402 (2020).
6. М. В. Садовский, Письма в ЖЭТФ **109**, 165 (2019) [M. V. Sadovskii, JETP Lett. **109**, 166 (2019)].
7. А. Л. Рахманов, К. И. Кугель, М. Ю. Каган, А. В. Рожков, А. О. Сбойчаков, Письма в ЖЭТФ **105**, 768 (2017) [JETP Lett. **105**, 806 (2017)].
8. I. A. Nekrasov and N. S. Pavlov, Pis'ma v ZhETF **108**, 657 (2018) [JETP Lett. **108**, 623 (2018)].
9. A. Martinelli, F. Bernardini, and S. Massidda, Comptes Rendus Physique **17**, 5 (2016).
10. K. Kobayashi, J. Yamaura, S. Iimura, S. Maki, H. Sagayama, R. Kumai, Y. Murakami, H. Takahashi, S. Matsuishi, and H. Hosono, Sci. Rep. **6**, 39646 (2016).
11. N. Fujiwara, N. Kawaguchi, S. IImura, S. Matsuishi, and H. Hosono, Phys. Rev. B **96**, 140507(R) (2017).
12. M. Hiraishi, S. Iimura, K. M. Kojima et al. (Collaboration), Nature Phys. **10**, 300 (2014).
13. S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **112**, 187001 (2014).
14. P. Seidel, Supercond. Sci. Technol. **24**, 043001 (2011).
15. D. Daghero, M. Tortello, G. A. Ummarino, and R. S. Gonnelli, Rep. Prog. Phys. **74**, 124509 (2011).
16. G. R. Stewart, Rev. Mod. Phys. **83**, 1589 (2011).
17. Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, М. Г. Михеев, Я. Г. Пономарев, С. Н. Чесноков, В. М. Пудалов, Е. П. Хлыбов, Н. Д. Жигадло, УФН **184**, 888 (2014) [T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, Ya. G. Ponomarev, S. N. Tchesnokov, V. M. Pudalov, E. P. Khlybov, and N. D. Zhigadlo, Physics-Uspekhi **57**, 819 (2014)].
18. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, V. M. Pudalov, and N. D. Zhigadlo, Phys. Rev. B **95**, 094507 (2017).
19. Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, Физика Низких Температур **45**, 1366 (2019) [T. E. Kuzmicheva and S. A. Kuzmichev, Low Temp. Phys. **45**, 1161 (2019)].
20. С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева, Письма в ЖЭТФ **105**, 633 (2017) [S. A. Kuzmichev and T. E. Kuzmicheva, JETP Lett. **105**, 671 (2017)].
21. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, and N. D. Zhigadlo, Phys. Rev. B **100**, 144504 (2019).
22. M. Octavio, M. Tinkham, G. E. Blonder, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **27**, 6739 (1983).
23. G. B. Arnold, J. Low Temp. Phys. **68**, 1 (1987).
24. D. Averin and A. Bardas, Phys. Rev. Lett. **75**, 1831 (1995).
25. R. Kümmel, U. Gunsenheimer, and R. Nicolsky, Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990).
26. U. Gunsenheimer and A. D. Zaikin, Phys. Rev. B **50**, 6317 (1994).
27. U. Gunsenheimer and A. D. Zaikin, EPL **41**, 195 (1998).
28. Z. Popović, S. A. Kuzmichev, and T. E. Kuzmicheva, J. Appl. Phys. **128**, 013901 (2020).
29. N. D. Zhigadlo, S. Katrych, S. Weyeneth, R. Puzniak, P. J. W. Moll, Z. Bukowski, J. Karpinski, H. Keller, and B. Batlogg, Phys. Rev. B **82**, 064517 (2010).
30. N. D. Zhigadlo, J. Cryst. Growth **455**, 94 (2016).
31. N. D. Zhigadlo, N. Barbero, and T. Shiroka, J. Alloys Comp. **725**, 1027 (2017).
32. J. Moreland and J. W. Ekin, J. Appl. Phys. **58**, 3888 (1985).
33. С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева, Физика Низких Температур **42**, 1284 (2016) [S. A. Kuzmichev and T. E. Kuzmicheva, Low Temp. Phys. **42**, 1008 (2016)].
34. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, Ya. G. Ponomarev, S. N. Tchesnokov, Yu. F. Eltsev, V. M. Pudalov, K. S. Pervakov, A. V. Sadakov, A. S. Usoltsev, E. P. Khlybov, and L. F. Kulikova, EPL **102**, 67006 (2013).
35. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, T. Hänke, C. Hess, G. Behr, R. Klingeler, and B. Büchner, Phys. Rev. B **79**, 224517 (2009).

36. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, S. N. Tchesnokov, and N. D. Zhigadlo, J. Supercond. Nov. Magn. **29**, 673 (2016).
37. T. E. Shanygina, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, Y. G. Ponomarev, S. N. Tchesnokov, Y. F. Eltsev, V. M. Pudalov, A. V. Sadakov, A. S. Usol'tsev, E. P. Khlybov, and L. F. Kulikova, J. Supercond. Nov. Magn. **26**, 2661 (2013).
38. В. А. Москаленко, Физика Металлов и Металловедение **8**, 522 (1959).
39. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
40. С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева, С. Н. Чесноков, Письма в ЖЭТФ **99**, 339 (2014) [S. A. Kuzmichev, T. E. Kuzmicheva, and S. N. Tchesnokov, JETP Lett. **99**, 295 (2014)].

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 531 – 538

Электрические свойства льда как функции давления

М. И. Рыжкин[+], *И. А. Рыжкин*[+1)], *А. М. Кашин*[*], *В. В. Синицын*[*]

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

[*]*Акционерное общество "Группа компаний ИнЭнерджи", 111524 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 4 сентября 2020 г.
После переработки 20 сентября 2020 г.
Принята к публикации 28 сентября 2020 г.

В работе теоретически исследуется зависимость протонной проводимости водяного льда от давления. Показано, что уменьшение длины водородной связи приводит к уменьшению энергии образования ионных дефектов и к возрастанию энергии образования дефектов связей. В результате парциальная проводимость ионных дефектов, которая определяет статическую проводимость льда, возрастает, а парциальная проводимость дефектов связей, определяющая высокочастотную проводимость льда, падает. При некотором давлении, происходит кроссовер основных и неосновных носителей тока, парциальные проводимости ионных дефектов и дефектов связей сравниваются, при этом статическая проводимость льда достигает максимума, а диэлектрическая проницаемость льда достигает минимума. При дальнейшем росте давления статическая проводимость льда будет определяться парциальной проводимостью дефектов связей и будет уменьшаться, а высокочастотная проводимость парциальной проводимостью ионных дефектов и будет увеличиваться. Даны численные оценки давления, при котором происходит кроссовер, оценки максимума протонной проводимости и минимума диэлектрической проницаемости, обсуждается сравнение с экспериментальными результатами.

DOI: 10.31857/S1234567820200124

1. Введение. Вода и ее твердая фаза – лед является, вероятно, самым распространенным, необычным и важным из окружающих нас веществ. Электрические свойства льда, в частности, протонная проводимость, определяют многие физические процессы с его участием: перенос заряда, адгезию льда к твердым подложкам и так далее. В последнее время стало очень актуальным направлением исследований – поиск состояний льда и воды с высокой протонной проводимостью: к ним относятся исследования воды и льда, ограниченных в наноканалах, а также исследования этих объектов при высоком давлении. В данной работе мы теоретически исследуем зависимость протонной проводимости льда от приложенного давления в той области давлений, в которой сохраняются правила льда. В этой области давлений существенно не меняется структура кислородной подрешетки, т.е. сохраняется тетраэдрическая структура водородных связей. Кроме того, давление и температура не настолько высоки, чтобы в системе произошел суперионный переход.

Эти ограничения позволяют нам для описания проводимости льда использовать модель Бернала–Фаулера–Полинга [1, 2] и теорию протонной проводимости Жаккара [3, 4], первоначально разработанные для гексагонального льда I_h. Однако следует отметить, что с небольшими изменениями их можно использовать для исследования всех модификаций льда, в которых имеют место правила льда, энергетическое вырождение протонных конфигураций, удовлетворяющих правилам льда, и протонный беспорядок. В частности, для исследования I_c и льда VII.

В следующем разделе 2 мы опишем основные положения теории Бернала–Фаулера–Полинга и теорию Жаккара в той мере, в которой необходимо для понимания результатов нашей работы. В разделе 3 мы рассмотрим поведение статической протонной проводимости и диэлектрической проницаемости как функций давления, точнее, как функций длины водородной связи. Мы покажем, что статическая проводимость с ростом давления сначала возрастает, проходит через максимум, и затем начинает убывать, тогда как диэлектрическая проницаемость имеет минимум. Максимальное значение статической проводимости и минимальное значение диэлектрической проницаемости имеет место при условии равенства парциальных проводимостей основных носителей (дефектов связей) и неосновных носителей (ионных дефектов), для более точного усло-

[1)] e-mail: ryzhkin@issp.ac.ru

вия см. раздел 3. При этом условии происходит смена роли носителей, при более высоких давлениях основными носителями будут ионные дефекты, а неосновными – дефекты связей. По этой причине мы будем называть этот процесс кроссовером проводимостей. В этом же разделе будут приведены численные оценки давления, при котором происходит кроссовер, оценки максимальной протонной проводимости, минимальной диэлектрической проницаемости. В последнем разделе 4 мы опишем, как по длине водородной связи оценить необходимое давление, обсудим применимость нашего подхода к различным модификациям льда, сравним полученные результаты с экспериментом и оценим квантовые эффекты, роль которых возрастает с уменьшением длины водородной связи.

2. Описание модели и основные уравнения. Электрические свойства водяного льда уникальны: он одновременно обладает свойствами диэлектриков, в которых заряды являются связанными, и свойствами проводников, в которых заряды являются свободными. Точнее, для льда невозможно однозначно провести традиционное для электродинамики сплошных сред различие между связанными и свободными зарядами.

Пояснить высказанное утверждение можно следующим способом. Решетка льда состоит из двух существенно различающихся подсистем: твердой, упорядоченной подрешетки ионов кислорода и сравнительно подвижной, частично неупорядоченной подрешетки протонов. Атомная решетка самой распространенной, гексагональной модификации льда, состоит из ионов кислорода, образующих решетку типа вюрцита, и протонов, которые распределены по водородным связям в соответствии с правилами льда: (1) два протона вблизи каждого иона кислорода и (2) один протон на каждой водородной связи. При выполнении правил льда протонная подрешетка является замороженной, так как невозможны никакие перескоки протонов без нарушений правил льда. Следовательно, невозможна никакая электрическая релаксация или движение заряженных ионов во внешнем электрическом поле.

При конечных температурах во льду имеются нарушения правил льда: ионные дефекты, нарушения первого правила льда, и дефекты связей, нарушения второго правила льда, которые показаны на рис. 1, 2 [5–7]. Из рисунков виден механизм образования дефектов, а также механизм их движения. Важно отметить, что движение дефектов изменяет состояние водородных связей на пройденном пути. Также нетрудно видеть, что происходит и перемещение заряда на макроскопические расстояния, что является признаком свободных зарядов. В частности, перемещение по некоторому пути одного H_3O^+-дефектов и по тому же пути одного D-дефекта эквивалентно перемещению одного протона. Данный механизм перемещения заряда обычно называют механизмом Гроттхусса [8–10], и наиболее ярко он реализуется именно в водяном льде. Еще раз повторим, что перескоки D-дефектов являются вращениями молекул воды, т.е. движениями связанных зарядов, но и перескоки протонов вдоль водородных связей также являются движениями связанных зарядов, так как протоны остаются на своих связях. Но в результате комбинации двух движений связанных зарядов про-

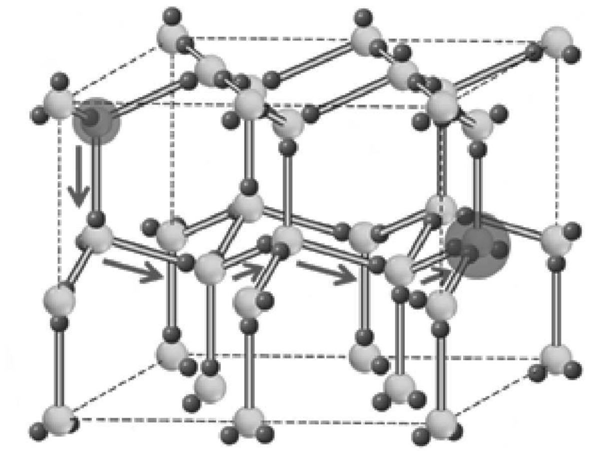


Рис. 1. Образование и движение ионных дефектов (кислородные вершины с тремя и одним протоном вблизи, нарушение первого правила льда)

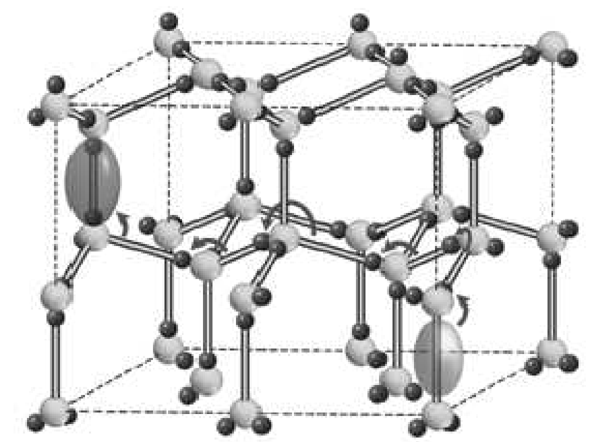


Рис. 2. Образование и движение дефектов связей (водородные связи с двумя и нулем протонов, нарушение второго правила льда)

исходит перемещение протона на макроскопические расстояния, т.е. свободное движение зарядов. Именно в этом состоит условность или невозможность разделения зарядов на свободные и связанные заряды.

Отметим также, что изображенные на рис. 1, 2 дефекты обладают эффективными зарядами, при их движении происходит и перемещение заряда, и возникновение поляризации. Эти дефекты можно рассматривать как классические квазичастицы, делающие возможной электрическую релаксацию во внешнем электрическом поле.

Теперь опишем качественно, что произойдет с атомной структурой льда при включении внешнего поля. При обычных условиях наибольшей парциальной проводимостью обладают дефекты связей. Поэтому при включении поля они быстро перемещаются, и как видно из рис. 2, поляризуют водородные связи. Но повторное их движение по пройденным связям становится невозможным. То есть в решетке возникает некоторая поляризация, как в обычном диэлектрике. Однако, в такой поляризованной решетке по указанным путям могут двигаться ионные дефекты того же знака, которые переносят заряд и восстанавливают исходную ориентация связей (см. рис. 1). Далее водородные связи снова быстро поляризуются движением дефектов связей. В результате лед будет обладать некоторой поляризацией как обычный диэлектрик, и проводить протонный ток, т.е. быть протонным проводником. Теория описанного процесса электрической релаксации была построена Жаккаром, и она включает следующие уравнения, которые приведены в обозначениях работ [11, 12]

$$\mathbf{j}_k = \frac{\sigma_k}{e_k^2}(e_k\mathbf{E} - \eta_k \Phi \mathbf{\Omega}), \tag{1}$$

$$\mathbf{\Omega}(t) = \int_0^t \eta_k \mathbf{j}_k(t')dt'. \tag{2}$$

Первое уравнение дает плотности потоков дефектов, возникающих под действием электрического поля $\mathbf{E}$ и конфигурационного вектора $\mathbf{\Omega}$, который характеризует поляризацию водородных связей и который сам возникает в результате потоков дефектов, смотри второе уравнение. Индекс $k = 1 \div 4$ нумерует дефекты типов H_3O^+, OH^-, D, L соответственно, эффективные заряды дефектов выражаются через заряд протона следующими соотношениями $e_k = 0.62e$, $-0.62e$, $0.38e$, $-0.38e$. Дефекты также характеризуются парциальными проводимостями $\sigma_k = |e_k|\mu_k n_{k0}$, где μ_k, n_{k0} – подвижности и равновесные концентрации дефектов. Величины $\eta_k = +1, -1, -1, +1$ описывают тип поляризации водородных связей при движении в определенном направлении, а величина Φ равна $\Phi = 8r_{OO}k_BT/\sqrt{3}$, r_{OO} – длина водородной связи. Величина Φ рассчитана в работе [13], и она описывает уменьшение энтропии протонной подсистемы при возникновении упорядоченности, описываемой вектором $\mathbf{\Omega}$.

Из второго уравнения видно, что конфигурационный вектор определяется потоками во все предыдущие моменты времени, т.е. в системе имеется своеобразная память, которая в конечном итоге и приводит к Дебаевской зависимости проводимости и диэлектрической проницаемости от частоты. Чтобы получить эту зависимость надо перейти в представление Фурье по времени, исключить конфигурационный вектор с помощью Фурье-образа уравнения (2) и выразить плотность электрического тока только через электрическое поле, и тем самым найти проводимость или обобщенную диэлектрическую проницаемость системы. Опуская простые выкладки, приведем конечные выражения для статической проводимости и диэлектрической проницаемости

$$\sigma_0 = \frac{e^2}{e_1^2/(\sigma_1+\sigma_2) + e_3^2/(\sigma_3+\sigma_4)}, \tag{3}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \frac{4\pi}{\Phi} \times \\ \times \left(\frac{\sigma_1+\sigma_2}{e_1} - \frac{\sigma_3+\sigma_4}{e_3}\right)^2 \Big/ \left(\frac{\sigma_1+\sigma_2}{e_1^2} + \frac{\sigma_3+\sigma_4}{e_3^2}\right)^2, \tag{4}$$

где $\varepsilon_\infty = 3.2$ – высокочастотная проницаемость льда.

В обычных условиях $\sigma_1 + \sigma_2 \ll \sigma_3 + \sigma_4$, и тогда статическая проводимость определяется носителями с меньшей парциальной проводимостью, а диэлектрическая проницаемость определяется носителями с большей парциальной проводимостью

$$\sigma_0 = \frac{e^2}{e_1^2}(\sigma_1+\sigma_2), \tag{5}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + 4\pi e_3^2/\Phi. \tag{6}$$

Численные оценки показывают, что для чистого льда без давления и при температуре 253 К статическая проводимость порядка 10^{-11} См/м, а относительная диэлектрическая проницаемость около 97. Стоит также отметить, что носители с большей парциальной проводимостью определяют время релаксации или характерную частоту, разделяющую низкие и высокие частоты.

3. Электрические свойства как функции давления. Приложенное внешнее давление может кардинально изменить соотношение между парциальными проводимостями. Действительно, с ростом давления уменьшается длина водородной связи r_{OO}. Если при этом давление не настолько высоко, чтобы изменить структуру молекулы воды, т.е. расстояние между ионом кислорода и ближайшим протоном r_{OH}, то можно считать, что давление уменьшает только расстояние между двумя возможными позициями протона на водородной связи $b = r_{OO} - 2r_{OH}$. В качестве обоснования данного предположения заметим, что энергия водородной связи много меньше энергии связи молекулы воды. Далее, энергия рождения пары ионных дефектов уменьшается при уменьшении параметра b, а энергия рождения пары дефектов связей растет. Следовательно, очень быстро возрастает концентрация и парциальная проводимость ионных дефектов, а также уменьшается концентрация и парциальная проводимость дефектов связей. С ростом давления возможно любое соотношение между парциальными проводимостями, что согласно формулам (3), (4) отражается на проводимости и диэлектрической проницаемости.

Определим более точно понятие энергии рождения пар дефектов. Существует два подхода к определению энергии рождения пар дефектов, условно назовем их как модели с короткодействующим и дальнодействующим взаимодействием. В первом подходе пары дефектов, разделенных минимальным расстоянием, рождаются из основного состояния в результате одного прыжка протона вдоль связи (ионные дефекты) и прыжка протона со связи на связь (дефекты связей), как показано на рис. 1, 2. Далее дефекты считаются невзаимодействующими, и их дальнейшее движение не приводит к повышению энергии. Такой подход характерен для простой модели электрических свойств льда [7].

Ясно, что в этом подходе пренебрегается энергией взаимодействия близко расположенных заряженных дефектов. В действительности дефекты обладают эффективными зарядами, и существует энергия кулоновского взаимодействия между рожденными дефектами. Чтобы дефекты можно было считать независимыми, они должны быть удалены на достаточно большое расстояние, при котором кулоновским взаимодействием можно пренебречь. Фактически это расстояние должно быть больше длины экранирования кулоновского взаимодействия, причем последняя зависит от концентрации дефектов. При таком подходе энергия образования пары дефектов есть сумма энергий образования пары дефектов на минимальном расстоянии и энергии разделения на расстояние, превышающее длину экранирования. Такой подход мы называем моделью с дальнодействующим взаимодействием, и он использовался в работе [14] для описания разрушения правил льда с ростом температуры. В данном разделе мы опишем изменение электрических свойств льда в рамках обеих моделей.

В модели с короткодействующим взаимодействием зависимость энергий образования пар ионных дефектов и дефектов связей от длины водородной связи можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} E_{12} &= C_{12}\frac{(r_{OO}-2r_{OH})^2}{r_{OO}^3}, \\ E_{34} &= \frac{C_{34}}{(r_{OO}-2r_{OH})}. \end{aligned} \tag{7}$$

Константы C_{12}, C_{34} можно определить из энергии активации пар при нормальных условиях, которые равны 1.40, 0.68 эВ для ионных дефектов и дефектов связей [7]. Первая формула следует из работы [15], согласно которой энергия образования пары ионных дефектов пропорциональна энергии кулоновского взаимодействия двух диполей смежных водородных связей. При этом величина диполей пропорциональна расстоянию между возможными позициями протонов $r_{OO} - 2r_{OH}$, и третья степень в знаменателе соответствует дипольному взаимодействию. Вторая формула соответствует энергии кулоновского взаимодействия двух зарядов, локализованных в возможных позициях на одной водородной связи. Учитывая, что при нормальных условиях длина водородной связи и расстояние между протоном и ионом кислорода равны $r_{OO} = 2.76$ Å, $r_{OH} = 1.00$ Å, мы получаем для констант следующие значения $C_{12} = 50.96$ эВ · Å, $C_{34} = 0.52$ эВ · Å.

Формулы (7) позволяют оценить длину водородной связи и давления, при которых энергии образования ионных дефектов и дефектов связей сравниваются. Нетрудно получить, что это происходит при длине водородной связи около $r_{OO} \approx 2.55$ Å. Используя данные работы [16], получаем, что такая длина водородной связи соответствует давлению около 18 ГПа. Более детально зависимость длины водородной связи от давления будет описана в разделе 4. Далее, так как подвижности ионных дефектов выше, чем подвижности дефектов связей, то при этом давлении парциальная проводимость ионных дефектов будет выше, чем парциальная проводимость дефектов связей, т.е. ионные дефекты станут основными носителями. Более точные результаты расчетов на основе формул (3), (4), (7) приведены на рис. 3, 4 (сплошные кривые). При этом мы использовали подвижности из работы [7] для температуры $T = 253$ K и обычные выражения для равновесных концентраций в виде:

$$
\begin{aligned}
n_1 = n_2 &= \frac{2}{3} N \exp\left(-\frac{E_{12}}{2kT}\right), \\
n_3 = n_4 &= 2N \exp\left(-\frac{E_{34}}{2kT}\right),
\end{aligned} \tag{8}
$$

где $N = 3\sqrt{3}/8r_{OO}^3$ – объемная концентрация молекул воды [12, 17]. Из рисунков 3, 4 видно, что при длине связи около $r_{OO} \approx 2.55$ Å, статическая проводимость имеет максимум порядка 10^{-7} См/м, а диэлектрическая проницаемость минимум около 3.2, что соответствует качественному рассмотрению, описанному выше. Также напомним, что при этой температуре и без давления статическая проводимость имеет порядок 10^{-11} См/м, а диэлектрическая проницаемость около 97. При указанной длине водородной связи сравниваются парциальные проводимости ионных дефектов и дефектов связи. При большей длине водородной связи основными носителями, т.е. носителями с большей парциальной проводимостью, являются дефекты связей, а при меньшей длине основными носителями являются ионные дефекты. Таким образом, при $r_{OO} \approx 2.55$ Å происходит кроссовер парциальных проводимостей, обнаруженный впервые при допинге льда растворимыми примесями [7]. Также стоит отметить, что численное значение длины водородной связи, при которой происходит кроссовер, зависит от энергий образования дефектов при нормальных условиях, которые для других модификаций льда могут заметно отличаться.

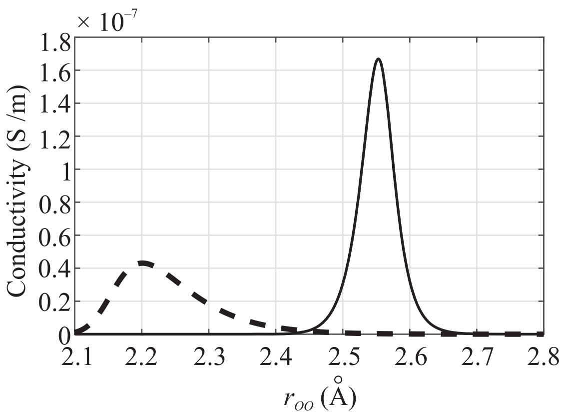


Рис. 3. Статическая проводимость льда как функция длины водородной связи (модель с короткодействием – сплошная кривая, модель с дальнодействием – пунктирная кривая)

Рассмотрим теперь модель с дальнодействующим взаимодействием между заряженными дефектами. В этой модели энергия образования пары свободных дефектов состоит из двух частей: энергии образования пары дефектов на минимальном расстоянии

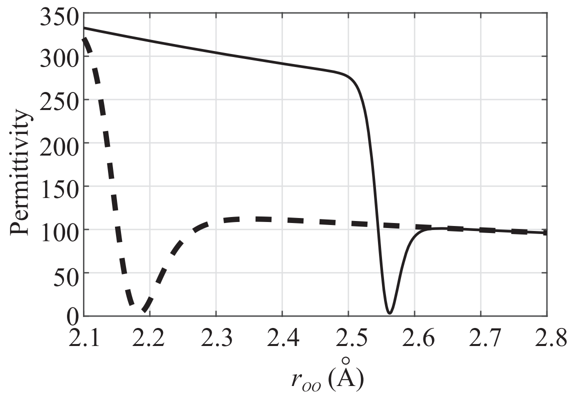


Рис. 4. Относительная диэлектрическая проницаемость льда как функция длины водородной связи (модель с короткодействием – сплошная кривая, модель с дальнодействием – пунктирная кривая)

и энергии разделения зарядов на достаточно большое расстояние. В этом случае зависимость полных энергий образования дефектов от длины водородной связи будет отличаться от формул (7), и даже нельзя пользоваться простыми формулами (8) для концентраций дефектов. Для получения численных результатов в этом случае можно использовать результаты работы [14]. Как показано в этой работе, равновесные концентрации дефектов определяются минимумами свободной энергии как функции концентраций:

$$
\begin{aligned}
f(x, y) = E_{12}^1 x + 2E_{34}^1 y + \frac{q_1^2/\varepsilon(a)a}{1+\kappa a} x + \frac{2q_3^2/\varepsilon(b)b}{1+\kappa b} + \\
+ k_B T \left[2x \ln x + (1-2x) \ln \frac{2(1-2x)}{3}\right] + \\
+ 2k_B T [2y \ln 2y + (1-2y) \ln(1-2y)].
\end{aligned} \tag{9}
$$

Здесь $x = n_{12}/N$, $y = n_{34}/2N$ – относительные концентрации ионных дефектов и дефектов связей, E_{12}^1, E_{34}^1 – энергии образования пар дефектов, разделенных минимальным расстоянием, равны 0.64 и 0.05 эВ соответственно, $aq = r_{OO}$, $b = \sqrt{2/3} r_{OO}$ – минимальные расстояния для ионных дефектов и дефектов связей, $\varepsilon(a)$, $\varepsilon(b)$ – значения высокочастотной диэлектрической проницаемости на соответствующих расстояниях. В работе [14] они рассматривались как феноменологические параметры со значениями равными 2.65, 1.45 соответственно (выбраны из условия совпадения с экспериментом). Первые два слагаемых представляют работу по образованию дефектов на минимальном расстоянии, третье и четвертое слагаемые равны работам по разделению дефектов. Знаменатели в них появляются от учета Дебаевской экранировки кулоновского взаимодействия зарядов, причем обратный Дебаевский радиус определяется формулой

$$\kappa = \sqrt{\frac{8\pi N}{k_B T}\left(\frac{q_{12}^2}{\varepsilon(a)}x + 2\frac{q_{34}^2}{\varepsilon(b)}y\right)}. \qquad (10)$$

Последние два слагаемых в формуле (9) представляют энтропийный вклад.

В работе [14] использовалось приближение $y \gg x$, и далее определялся минимум свободной энергии по одной переменной y в зависимости от температуры при фиксированной длине водородной связи. В данной задаче имеется два отличия от задачи, рассмотренной ранее. Во-первых отсутствует условие $y \gg x$, при изменении длины водородной связи соотношение между концентрациями может быть любым, т.е. следует искать минимум выражения (9) по двум переменным x, y. Во-вторых, здесь мы фиксируем температуру и будем искать минимумы для различных длин связей. Это достаточно сложная задача, но она может быть кардинально упрощена. Действительно, как показывает численный анализ, область минимумов функции (9) при выбранной температуре такова, что слагаемыми типа κa, κb в знаменателях можно пренебречь. Физически это допущение означает, что приложение давления не приводит к фазовому переходу в состояние льда с жидкой системой водородных связей [14]. Тогда выражение (9) приобретает более простой, следующий вид

$$f(x,y) = \left(E_{12}^1 + \frac{q_1^2}{\varepsilon(a)a}\right)x + 2\left(E_{34}^1 + \frac{q_3^2}{\varepsilon(b)b}\right)y + \\ + k_B\left[2x\ln x + (1-2x)\ln\frac{2(1-2x)}{3}\right] + \\ + 2k_B T[2y\ln 2y + (1-2y)\ln(1-2y)]. \qquad (11)$$

Коэффициенты перед x, y в первых двух слагаемых являются энергиями возбуждения пар дефектов, причем они не зависят от самих концентраций. Эта задача фактически, очевидной заменой, совпадает с задачей нахождения концентраций в модели с короткодействующим взаимодействием. Поэтому для концентраций дефектом можно использовать аналоги формул (8). Опуская простые выкладки, приведем сразу зависимости энергий образования, как функции длины водородной связи

$$E_{12} = 23.30\cdot 10^{-10}\frac{(r_{OO}-2r_{OH})^2}{r_{OO}^3} + \frac{2.10\cdot 10^{-10}}{r_{OO}},$$

$$E_{34} = \frac{0.038\cdot 10^{-10}}{(r_{OO}-2r_{OH})} + \frac{1.74\cdot 10^{-10}}{r_{OO}}. \qquad (12)$$

Первые слагаемые в этих формулах равны энергии, затрачиваемой на образование пар дефектов, разделенных минимальным расстоянием, тогда как вторые слагаемые равны энергиям разделения. Коэффициенты также, как и в [14], выбраны так, чтобы при нормальных условиях, при длине связи $r_{OO} = 2.76$ Å, полные энергии возбуждения равнялись $E_{12} = 1.4$ эВ и $E_{34} = 0.68$ эВ (гексагональный лед). Используя формулы (3), (4), (12) и значения подвижности из монографии [7], мы получаем зависимости статической проводимости и диэлектрической проницаемости, которые изображены на рис. 3, 4 (пунктирные кривые). Из рисунков 3, 4 видно, что кроссовер в этом случае происходит при длине водородной связи, равной $r_{OO} \approx 2.2$ Å, что по оценкам соответствует давлениям выше 100 ГПа [16]. Однако, при таких давлениях лед переходит в состояние с симметричной водородной связью, и наше описание электрических свойств льда перестает работать. Резкое уменьшение длины водородной связи, при которой происходит кроссовер в модели с дальнодействием, обусловлено тем, что энергия рождения ионных дефектов и дефектов связей в этом подходе содержит энергию разделения дефектов, вторые слагаемые в формулах (12), которые зависят от длины водородной связи одинаково. В этом случае энергии сравниваются только за счет первых слагаемых в формуле (12), вклад которых заметно меньше.

4. Обсуждение результатов и сравнение с экспериментом. В предыдущем разделе была исследована зависимость протонной проводимости и диэлектрической проницаемости от длины водородной связи. Для сравнения полученных результатов с экспериментом необходимо оценить область давлений, соответствующую рассматриваемым длинам связей. Как уже было отмечено выше, грубые оценки показывали, что это область давления от десятков до сотни ГПа. В большей части этой области давлений лед находится в модификации VII, и по этой причине, для уточнения результатов мы использовали работу [16], в которой исследовалось статическое сжатие этой модификации льда в соответствующей области давлений. Молярный объем этой модификации льда при нулевом давлении (это подгоночный параметр уравнения состояния) был взят равным 12.3 см^3/моль. При этом длина водородной связи каждой из двух взаимопроникающих решеток равна $r_{OO}(0) \approx 2.85$ Å. Приложенное давление уменьшает длину водородной связи, и соответствующий молярный объем при некотором давлении пропорционален третьей степени отношения $r_{OO}(p)/r_{OO}(0)$. По уравнению состояния, зная молярный объем, находим соответствующее давление. Таким образом было получено, что длине связи $r_{OO} \approx 2.55\,\text{Å}$ соответствует давление около 18 ГПа, а длине связи $r_{OO} \approx 2.2\,\text{Å}$ – давление выше 100 ГПа, что выше давления перехода льда в состояние с симметричной водородной связью. Фактически это означает, что для модели с дальнодействием кроссовер не реализуется экспериментально, по крайней мере, при выбранных значениях числовых параметров в формуле (12). При выборе последних мы ориентировались на экспериментальные данные по энергии рождения пар дефектов для гексагонального льда, которые для льда VII существенно отличаются (см. численные оценки ниже). По этой причине нельзя категорически утверждать, что в модели с дальнодействием кроссовер невозможен, но в любом случае в этой модели он будет происходить при более высоких давлениях и будет менее резко выражен.

Теперь уточним условия применимости нашей модели и точность полученных результатов. Как нетрудно видеть, мы использовали теорию Жаккара, которая была исходно разработана для гексагонального льда. Однако, при незначительных модификациях эта теория может быть применима к любой форме льда, в которой имеет место тетраэдрическая структура водородных связей, как следствие этой структуры возникают правила льда и вырождение протонных конфигураций, удовлетворяющих правилам льда. Все перечисленное позволяет ввести понятие точечных протонных дефектов (ионных дефектов и дефектов связей) и рассматривать их как классические квазичастицы, движение которых реализует электрическую релаксацию. С этой точки зрения теория Жаккара применима ко льду VII, который реализуется при рассматриваемых нами давлениях. Действительно, кислородная решетка этой модификации льда состоит из двух взаимопроникающих кислородных подрешеток кубического льда, которые с точки зрения ближайших соседей (что и необходимо для существования правил льда) эквивалентны кислородной подрешетке гексагонального льда. Предположив, что дефекты двигаются по подрешеткам независимо, что может происходит при их низкой концентрации, мы получаем утверждение о применимости теории Жаккара.

К предыдущему утверждению следует сделать следующее дополнение. Дело в том, что, помимо основных уравнений, теория Жаккара включает ряд числовых параметров, из которых наиболее важными являются энергии рождения дефектов, так как от этих энергий концентрации дефектов зависят экспоненциально. Для льда VII энергии рождения дефектов могут заметно отличаться от соответствующих энергий для гексагонального льда. Физически очевидно, что энергия рождения ионных дефектов во льду VII ниже, а энергия рождения дефектов связей выше, чем в гексагональном льду. Для иллюстрации этой зависимости, представим, что при переходе от гексагонального льда ко льду VII, энергия рождения ионных дефектов упала на 0.2 эВ, а энергия рождения дефектов связей возросла на такую же величину. Расчет показывает, что при этом кроссовер для модели с короткодействием будет иметь место при длине водородной связи $r_{OO} \approx 2.66\,\text{Å}$, т.е. при давлении около 10 ГПа. В этом случае также становится экспериментально реализуемым и кроссовер в модели с дальнодействием.

Переходя к сравнению полученных результатов с экспериментом, отметим, что корректное измерение протонной проводимости и диэлектрической проницаемости в области давлений в десятки гигопаскалей является очень трудной задачей. Для правильного измерения необходимо исследовать частотную зависимость этих величин, и тогда измеренные значения для частот много ниже частоты Дебая можно отождествить со статической проводимостью и статической проницаемостью (метод импедансной спектроскопии). Прямое же измерение на нулевой частоте невозможно из-за образования заряженных слоев в контактной области. По этой причине мы не будем рассматривать экспериментальные работы, в которых прямо измерялась проводимость на постоянном токе, а рассмотрим только работы, в которых влияние контактов было исключено. В работе [18] было обнаружено возрастание протонной проводимости с ростом давления в области давлений 2–4.5 ГПа. Это означает, что неосновными носителями, ответственными за проводимость являются ионные дефекты. Соответственно, данная область лежит ниже давления кроссовера. В работе [19] измерялась протонная проводимость в области давлений 20–62 ГПа и было обнаружено, что проводимость падает с ростом давления. Этот результат является доказательством, что неосновными носителями, ответственными за низкочастотную проводимость являются дефекты связей. Таким образом указанная область давлений лежит выше давления кроссовера. В работе [20] был экспериментально обнаружен максимум проводимости и минимум диэлектрической проницаемости при давлении около 10 ГПа, а в работе [21] был обнаружен максимум в коэффициенте самодиффузии протонов при том же давлении. Эти результаты качественно согласуются с нашими теоретическими результатами, при этом незначительным изменением энергий рождения пар дефектов можно добиться и количественного согласия.

В заключение заметим, что с уменьшением длины водородной связи возрастает роль квантового туннелирования протонов вдоль связей, т.е. возрастают квантовые эффекты в протонной подсистеме льда. Для оценки последних обычно используется параметр де Бура:

$$\Lambda = \frac{\hbar}{(r_{OO} - 2r_{OH})\sqrt{\varepsilon m_p}}, \tag{13}$$

где ε – характерная энергия, m_p – масса протона. Выбирая в качестве характерной энергии энергию водородной связи 0.2 эВ, можно получить, что уже при длине связи $r_{OO} = 2.55$ Å значение параметра де Бура равно 0.26. Для сравнения отметим, что значение параметра де Бура для такого квантового объекта, как жидкий гелий, равно 0.40. Для льда такое значение получается при длине водородной связи, равной 2.36 Å. Следовательно, при длинах связей и при соответствующих давлениях, при которых происходить кроссовер, могут стать существенными квантовые эффекты в протонной подсистеме, соответственно возникает задача квантового описания протонов во льду.

Авторы благодарят А. В. Клюева за полезное обсуждение и за помощь в подготовке рисунков.

---

1. J. D. Bernal and R. H. Fowler, J. Chem. Phys. **1**, 515 (1933).
2. L. Pauling, J. Amer. Chem. Soc. **57**, 2680 (1935).
3. C. Jaccard, Physics. Kondensierten Materie **3**, 99 (1964).
4. M. Hubmann, Z. Physik B **32**, 127 (1979).
5. N. Bjerrum, Kongelige Videns. Selskab Matematisk-fysiske Meddelelser **27**, 1 (1951).
6. H. Granicher, C. Jaccard, P. Sherrer, and A. Steinemann, Discussion of the Faraday Society **23**, 50 (1957).
7. V. F. Petrenko and R. W. Whitworth, *Physics of Ice*, Oxford University Press, N.Y., USA (1999).
8. C. J. T. Grotthuss, Ann. Chim. LVIII **54** (1806).
9. S. Cukierman, Biochim. Biophys. Acta **1757**, 876 (2006).
10. D. Marx, ChemPhysChem **7**, 1848 (2006).
11. V. F. Petrenko and I. A. Ryzhkin, J. Phys. Chem. A **115**, 6202 (2011).
12. A. V. Klyuev, I. A. Ryzhkin, and M. I. Ryzhkin, JETP Lett. **100**, 604 (2014).
13. I. A. Ryzhkin and R. W. Whitworth, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 395 (1997).
14. M. I. Ryzhkin, A. V. Klyuev, V. V. Sinitsyn, and I. A. Ryzhkin, JETP Lett. **104**, 248 (2016).
15. I. A. Ryzhkin, Solid State Commun. **52**, 49 (1984).
16. R. J. Hemley, A. P. Jephcoat, H. K. Mao, C. S. Zha, L. W. Finger, and D. E. Cox, Nature **330**, 737 (1987).
17. V. F. Petrenko and I. A. Ryzhkin, J. Phys. Chem. B **101**, 6285 (1997).
18. H. Zheng, H. Xie, Y. Xu, M. Song, J. Guo, and Y. Zhang, Chinese Science Bulletin **42**, 969 (1997).
19. E. Sugimura, T. Komabayashi, K. Ohta, K. Hirose, Y. Ohishi, and L. S. Dubrovinsky, J. Chem. Phys. **137**, 194505 (2012).
20. T. Okada, T. Iitaka, T. Yogi, and K. Aoki, Sci. Rep. **4**, 5778 (2014).
21. N. Noguchi and T. Okuchi, J. Chem. Phys. **144**, 234503 (2016).

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 8, pp. 539 – 540

Vielbein with mixed dimensions and gravitational global monopole in the planar phase of superfluid ^{3}He

G. E. Volovik[1)]

Low Temperature Laboratory, Aalto University, School of Science and Technology, P.O. Box 15100, FI-00076 AALTO, Finland

Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 20 September 2020
Resubmitted 20 September 2020
Accepted 20 September 2020

DOI: 10.31857/S1234567820200070

The planar phase is one of the possible superfluid phases of liquid ^{3}He [1]. It may exist in some region of the phase diagram of superfluid ^{3}He confined in aerogels [2]. The planar phase has two Dirac points in the quasiparticle spectrum, which are supported by combined action of topology and some special symmetry, see e.g. [3]. The quasiparticles in the planar phase with fixed spin behave as Weyl fermions. Similar to the chiral superfluid ^{3}He-A, they experience the effective gravity and gauge field produced by the deformation of the order parameter. But there is the following important difference. In ^{3}He- A, the spin-up and spin-down fermions have the same chirality, while in the planar phase the spin-up and spin-down fermions have the opposite chirality. As a result the Weyl fermions in planar phase form the massless Dirac fermions, see [4].

Here we study the planar phase fermions in the presence of the topological defect – the hedgehog. The effective gravity produced by the hedgehog appears to be similar to the gravitational effect of the global monopole in general relativity: it gives rise to the conical space [5–12]. Another consequence of the hedgehog is that the vielbein, which describes the effective gravity, is the 4×5 matrix, as distinct from the conventional 4×4 matrix in the tetrad formalism of general relativity.

In the general spin triplet p-wave pairing state the 2×2 matrix of the gap function is:

$$\hat{\Delta} = A^i_\alpha \sigma^\alpha p_i, \tag{1}$$

where $A_{\alpha i}$ is the 3×3 complex matrix [1]. In the planar phase the particular representative is:

$$A_{\alpha i} = c_\perp e^{i\Phi} \left(\delta^i_\alpha - \hat{l}_\alpha \hat{l}^i\right), \tag{2}$$

where Φ is the phase of the order parameter and $\hat{l}$ is the unit vector. All the other degenerate states of the planar phase are obtained by spin, orbital and phase rotations of the group $G = SO(3)_S \times SO(3)_L \times U(1)$ (here we ignore the discrete symmetry, since we are only interested in the global monopole).

The order parameter in Eq. (2) has the symmetry $H = SO(2)_J$ – the symmetry under the common spin and orbital rotations about the axis $\hat{l}$. As the result, the manifold of the degenerate states is $R = (SO(3)_S \times SO(3)_L \times U(1))/SO(2)_J$, which supports the monopoles (hedgehogs), described by the homotopy group $\pi_2(R) = Z$. The particular form of the monopole with the topological charge $N = 1$ is:

$$A_{\alpha i}(\mathbf{r}) = f(r)\left(\delta^i_\alpha - \hat{r}_\alpha \hat{r}^i\right), \tag{3}$$

where $\hat{r} = \mathbf{r}/r$, and $f(r \to \infty) = c_\perp$. The Bogoliubov–Nambu Hamiltonian for quasiparticles:

$$\begin{pmatrix} \epsilon(p) & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\epsilon(p) \end{pmatrix}, \tag{4}$$

where $\epsilon(p) = c_\parallel(p - p_F)$, $c_\parallel = v_F$, and v_F and p_F are correspondingly the Fermi velocity and Fermi momentum of the normal Fermi liquid.

The planar phase has the Weyl–Dirac points at $\mathbf{p} = \pm p_F \hat{l}$. Near the Weyl–Dirac nodes the Hamiltonian is:

$$H = \sum_a \Gamma^a e^i_a (p_i - qA_i)\,. \tag{5}$$

Here $\mathbf{A} = p_F \hat{l}$ is the vector potential of effective gauge field acting on the massless Dirac fermions; $q = \pm 1$ is the corresponding electric charge; Γ^a with $a = 1, 2, 3, 4$ are the Hermitian Γ-matrices with $\{\Gamma^a, \Gamma^b\} = 2\delta^{ab}$:

$$\Gamma^1 = \tau_1\sigma_x,\ \Gamma^2 = \tau_1\sigma_y,\ \Gamma^3 = \tau_1\sigma_z,\ \Gamma^4 = \tau_3; \tag{6}$$

e^i_a are the components of the spatial vielbein with $a = 1, 2, 3, 4$ and $i = 1, 2, 3$:

$$e^i_a = c_\perp(\delta^i_a - \hat{l}_a \hat{l}^i) \text{ for } a = 1, 2, 3,\ e^i_4 = c_\parallel \hat{l}^i. \tag{7}$$

Such vielbein is the 3×4 matrix, instead of the conventional 3×3 matrix of the dreibein. Nevertheless, this asymmetric vielbein provides the correct expression for the elements of the effective metric:

$$g^{ik} = \sum_{a,b} \delta^{ab} e^i_a e^k_b,\ a, b = 1, 2, 3, 4,\ i, k = 1, 2, 3, \tag{8}$$

[1)]e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

$$g^{ik} = c_\parallel^2 \hat{l}^i \hat{l}^k + c_\perp^2(\delta^{ik} - \hat{l}^i\hat{l}^k). \qquad (9)$$

This metric coincides with the effective metric in ^{3}He-A with Weyl nodes, see [4]. The $3+1$ effective metric is expressed in terms of the 4×5 vielbein,

$$g^{\mu\nu} = \sum_{a,b} \eta^{ab} e_a^\mu e_b^\nu,\ a,b = 0,1,2,3,4,\ \mu,\nu = 0,1,2,3. \qquad (10)$$

In spite of the asymmetric non-invertible 4×5 vielbein, the effective metric is well defined and is invertible:

$$g_{ik} = \frac{1}{c_\parallel^2}\hat{l}_i\hat{l}_k + \frac{1}{c_\perp^2}(\delta_{ik} - \hat{l}_i\hat{l}_k),\ g_{00} = -1. \qquad (11)$$

For the monopole one has:

$$g^{ik}(\mathbf{r}) = c_\perp^2\delta^{ik} + (c_\parallel^2 - c_\perp^2)\hat{r}^i\hat{r}^k, \qquad (12)$$

$$ds^2 = -dt^2 + \frac{1}{c_\perp^2}r^2 d\Omega^2 + \frac{1}{c_\parallel^2}dr^2. \qquad (13)$$

Equation (13) represents conical spacetime, which in GR is produced by the global monopoles (monopoles without gauge fields, see [5–12]). This spacetime has the nonzero scalar curvature:

$$R = 2\frac{1-\alpha^2}{r^2},\ \alpha^2 = \frac{c_\parallel^2}{c_\perp^2}. \qquad (14)$$

The analog of the global monopole was considered in ^{3}He-A [8, 13], where it has the tail – the doubly quantized vortex. This is the analog of the Nambu monopole [14] terminating cosmic string (see classification of such composite objects in [15]). In the planar phase the monopole is topologically stable: the Dirac string of the monopole in the orbital vector $\hat{l}^i(\mathbf{r}) = \hat{r}^i$ in Eq. (3) is cancelled by the Dirac string from the monopole in the spin vector $\hat{l}_\alpha(\mathbf{r}) = \hat{r}_\alpha$.

Since in superfluid ^{3}He $c_\parallel^2 > c_\perp^2$, the metric corresponds to the spacetime with the solid angle excess [8, 13], $\alpha^2 > 1$, instead of the angle deficit discussed for the global cosmic monopoles with $\alpha^2 < 1$. For the cosmic monopole in the scalar field η with $\alpha^2 = 1 - 8\pi G\eta^2$, the angle excess corresponds to the repulsive gravity, $G < 0$, and super-Planckian field, $\eta^2 > 1/|G|$.

For $c_\parallel^2 = c_\perp^2 \equiv c^2$ the metric far from the monopole is flat, $g^{ik} = c^2\delta^{ik}$. In cosmology this corresponds to the absence of the cosmic global monopole, or the absence of the scalar field in the vacuum, $\eta = 0$. However, the planar phase monopole does not disappear: the singularity remains in the vielbein field, while the metric has only the localized bump in the curvature and is flat (not conical) at infinity. The tetrad field monopole in the 4D Euclidean space (torsional instanton) with the localized bump in the curvature and the flat metric at infinity was considered in [16–18].

The planar phase provides an example, when the gravity for fermions and bosons can be essentially different. While the fermions are described by the 4×5 vielbein matrix e_a^μ, the bosons are described by the conventional 4D metric $g_{\mu\nu}$. The vielbein with non-quadratic matrix e_a^μ may exist in other superfluid phases, including the ultracold fermionic gases. In the presence of topological objects, they may give rise to exotic effective spaces and spacetimes, which are different for fermions and bosons. One may expect the similar effects in general relativity with degenerate metric. Exotic monopole in gravity with degenerate tetrads was discussed for example in [19]. It would be interesting to consider the transition from the planar phase to the ^{3}He-B with massive Dirac fermions.

This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement # 694248).

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020200035

1. D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of Helium 3*, Taylor & Francis, London (1990).
2. E. V. Surovtsev, JETP **128**, 477 (2019).
3. Y. Makhlin, M. Silaev, and G. E. Volovik, Phys. Rev. B **89** 174502 (2014).
4. G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
5. D. D. Sokoloff and A. A. Starobinskii, Sov. Phys. Dokl. **22**, 312 (1977) [D. D. Sokoloff, Sov. Phys. Dokl. **22**, 312 (1977)].
6. M. Barriola and A. Vilenkin, Phys. Rev. Lett. **63**, 341 (1989).
7. D. Harari and C. Loustó, Phys. Rev. D **42**, 2626 (1990).
8. E. R. Bezerra de Mello, Braz. J. Phys. **31**, 211 (2001).
9. K. A. Bronnikov, B. E. Meierovich, and E. R. Podolyak, JETP **95**, 392 (2002).
10. N. E. Mavromatos and S. Sarkar, Phys. Rev. D **95**, 104025 (2017).
11. J. R. Nascimento, G. J. Olmo, P. J. Porfírio, A. Yu. Petrov, and A. R. Soares, Phys. Rev. D **99**, 064053 (2019).
12. E. A. F. Braganca, R. L. L. Vitoria, H. Belich, and E. R. Bezerra de Mello, Eur. Phys. J. C **80**, 206 (2020).
13. G. E. Volovik, Pis'ma v ZhETF **67**, 666 (1998) [G. E. Volovik, JETP Lett. **67**, 698 (1998)].
14. Y. Nambu, Nucl. Phys. B **130**, 505 (1977).
15. G. E. Volovik and K. Zhang, Phys. Rev. Research **2**, 023263 (2020).
16. T. Eguchi and A. J. Hanson, Phys. Lett. B **74**, 249 (1978).
17. T. Eguchi and A. J. Hanson, Ann. Phys. **120**, 82 (1979).
18. A. J. Hanson and T. Regge, Lecture Notes in Physics **94**, 354 (1979).
19. S. Gera and S. Sengupta, arXiv:2004.13083.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 541 – 546

Эффекты электрон-электронного взаимодействия в спектрах магнитопоглощения квантовых ям HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой

Л. С. Бовкун[a,b], А. В. Иконников[c], С. С. Криштопенко[d], В. Я. Алешкин[a], М. С. Жолудев[a], С. Руффенах[d 1)], К. Консежо[d 1)], Ф. Тепп[d 1)], С. А. Дворецкий[e], Н. Н. Михайлов[e], М. Потемски[b 1)], М. Орлита[b 1)], В. И. Гавриленко[a,g 2)]

[a] *Институт физики микроструктур РАН – филиал Федерального исследовательского центра Институт прикладной физики РАН, 603950 Н. Новгород, Россия*

[b] *Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses, CNRS-UGA-EMFL-UPS-INSA, FR-38042 Grenoble, France*

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

[d] *Laboratoire Charles Coulomb, UMR CNRS 5221, Université de Montpellier, 34095 Montpellier, France*

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

[g] *Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 22 сентября 2020 г.
После переработки 22 сентября 2020 г.
Принята к публикации 23 сентября 2020 г.

Выполнены исследования магнитопоглощения квантовых ям HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой в магнитных полях до 30 Тл. Показано, что положение линий магнитопоглощения для переходов с "нулевых" уровней Ландау в широком диапазоне магнитных полей принципиально не может быть описано в рамках "одноэлектронного" приближения с использованием 8-зонной модели Кейна и учетом эффектов, связанных с отсутствием пространственной инверсии. Обнаруженное поведение энергий оптических переходов в зависимости от магнитного поля может быть качественно объяснено в рамках "многочастичной" картины, в которой переходы между уровнями Ландау рассматриваются как коллективные моды, гибридизованные электрон-электронным взаимодействием.

DOI: 10.31857/S1234567820200082

1. Введение. В последние годы наблюдается большой интерес к квантовым ямам (КЯ) HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой, являющимися двумерными (2D) топологическими изоляторами при толщинах КЯ (d_{QW}), больших критической величины $d_c \sim 6.3$ нм [1–3]. Эффективным методом исследования зонной структуры таких материалов является магнитоспектроскопия в дальнем и среднем инфракрасных (ИК) диапазонах, в который попадают как внутризонные, так и межзонные оптические переходы (см., например, [4–7]). Хорошо известно, что в 2D системах с параболичным законом дисперсии энергия циклотронных переходов нечувствительна к электрон-электронному (e–e) взаимодействию [8]. В то же время, сильная непараболичность законов дисперсии в подзонах размерного квантования в КЯ HgTe/CdHgTe приводит к различию в энергиях переходов между уровнями Ландау и большому количеству линий в спектрах магнитопоглощения (см., например, [6, 7]). Поскольку положение каждой из этих линий поглощения соответствует длинноволновой энергии магнитоплазменного возбуждения (магнитоэкситона [9, 10]), непараболичность электронных подзон может приводить к гибридизации магнитоплазменных мод с близкими энергиями даже в длинноволновом пределе (ср. [11–14]). Особенно выраженно эффекты e–e взаимодействия в спектрах магнитопоглощения должны проявляться для переходов, разница энергий которых меньше характерного масштаба кулоновского взаимодействия в заданном магнитном поле $E_c \sim \frac{e^2}{\epsilon l_B}$, где e – заряд электрона, l_B – магнитная длина ($l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$, B – напряженность магнитного поля, $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, c – скорость света) и $\epsilon \sim 21$ – статическая диэлектрическая проницаемость HgTe.

[1)] S. Ruffenach, C. Consejo, F. Teppe, M. Potemski, M. Orlita.
[2)] e-mail: gavr@ipmras.ru

Отличительной особенностью КЯ с инвертированной зонной структурой, помещенных в перпендикулярное магнитное поле, является возникновение пары пересекающихся уровней Ландау [3, 6, 15, 16]. В двухзонной 2D модели Берневига–Хьюза–Чжана (Bernevig–Hughes–Zhang, BHZ) [2] оба уровня имеют нулевой индекс $n = 0$, в то время как в 8-зонной модели Кейна в аксиальном приближении “нулевые” уровни Ландау имеют индексы $n = -2$ и $n = 0$ (см. рис. 1) [5, 6, 17–19]. Уровень $n = 0$ является электрон-

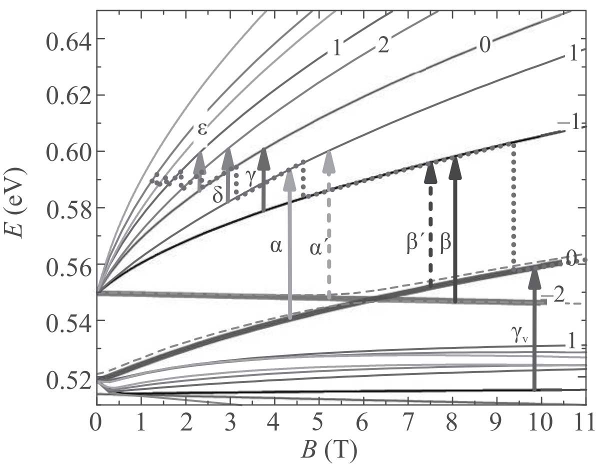


Рис. 1. (Цветной онлайн) Уровни Ландау в образце 091223-1 с шириной КЯ HgTe 8 нм, рассчитанные в рамках аксиального приближения (детали расчета представлены в [6, 18, 19]). Уровни Ландау с номерами $n = 0$ и $n = -2$, соответствующие “нулевым” уровням Ландау в двухзонной BHZ модели [2, 3], выделены жирным. Штриховые линии – “нулевые” уровни Ландау, рассчитанные с учетом BIA и IIA. Точечная линия – положение уровня Ферми для концентрации электронов $2.3 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$. Стрелками указаны наблюдаемые переходы. Обозначения переходов соответствуют [4, 18, 24]

подобным, и его энергия возрастает с ростом магнитного поля. В свою очередь уровень $n = -2$ является дырочно-подобным, и его энергия уменьшается с ростом поля. В некотором критическом поле B_c ($B_c \approx 6$ Тл в КЯ HgTe шириной 8 нм) “нулевые” уровни пересекаются [3–5, 17], и зонная структура перестает быть инвертированной [3]. В результате этого, переходы с участием “нулевых” уровней Ландау в инвертированных КЯ могут иметь близкие энергии в некотором диапазоне полей, что делает привлекательными такие структуры для исследования эффектов e–e взаимодействия в спектрах магнитопоглощения.

Ранее в инвертированных КЯ HgTe/CdHgTe в окрестности критического поля B_c были обнаружены расщепления основных линий магнитопоглощения α [6, 17, 18] и β [18], обусловленных переходами с “нулевых” уровней Ландау (см. рис. 1). Обнаруженные в указанных работах расщепления линий связывались с возможным антипересечением “нулевых” уровней Ландау, вызванным отсутствием центра пространственной инверсии в элементарной ячейки полупроводников со структурой цинковой обманки (*Bulk Inversion Asymmetry*, BIA). В работе [17] также отмечалось, что антипересечение уровней Ландау может быть связано и с эффектами e–e взаимодействия. Позже в работе [19] было показано, что основной вклад в расщепление линий α и β в рамках “одноэлектронного” приближения обусловлен отсутствием центра инверсии из-за анизотропии химических связей на гетероинтефейсах HgTe/CdHgTe (*Interface Inversion Asymmetry*, IIA [20]). Наконец, в недавней работе [21] было обнаружено, что параметры расщепления линий α и β в окрестности B_c имеют сильную зависимость от концентрации 2D электронов в КЯ HgTe/CdHgTe, которая не может быть объяснена в рамках “одноэлектронного” приближения. Как видно из рис. 1, пары переходов (α, α') и (β, β'), с которыми связывается расщепление линий α и β, имеют близкие значения энергий в окрестности B_c, что может вызывать их возможную гибридизацию, вызванную e–e взаимодействием.

Кроме близких по энергиям в окрестности B_c указанных пар переходов (α, α') и (β, β'), в КЯ HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой в более сильных магнитных полях энергии самих переходов α и β могут оказаться близки. Это было впервые экспериментально продемонстрировано в работе [22]. Было показано, что подобное поведение переходов в КЯ HgTe/CdHgTe в сильных магнитных полях является следствием инвертированной зонной структуры в нулевом магнитном поле. В более поздней работе [23] “пересечение” переходов α и β с ростом магнитного поля было использовано для наблюдения топологического фазового перехода при повышении температуры в спектрах магнитопоглощения. Отметим, что в обеих работах [22, 23] слияния линий α и β с ростом магнитного поля, предсказываемого в рамках “одноэлектронного” приближения, в спектрах магнитопоглощения не наблюдалось.

В настоящей работе выполнены детальные экспериментальные исследования спектров магнитопоглощения КЯ HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой в окрестности критического магнитного поля B_c и в полях, соответствующим близким значениям энергий переходов α и β. Полученные экспериментальные результаты однозначно демонстрируют неприменимость "одноэлектронного" приближения для описания поведения переходов с близкими резонансными энергиями в зависимости от магнитного поля.

2. Результаты и обсуждение. В работе исследовались образцы с КЯ HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии в ИФП СО РАН на полуизолирующих подложках GaAs(013) [25]: **091223-1** ($d_{QW} = 8$ нм, $x = 0.62$) и **091217-1** ($d_{QW} = 7$ нм, $x = 0.72$). Концентрация электронов при $T = 4.2$ К в обеих структурах составляла $(2.2-2.3) \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$, характерная величина подвижности – 50000 см^2/В · с. Спектры магнитопоглощения измерялись при $T = 2-4.2$ К методом фурье-спектроскопии в Национальной лаборатории сильных магнитных полей в Гренобле (LNCMI-G) в полях до 11 Тл с использованием сверхпроводящего соленоида и в полях до 30 Тл с использованием резистивного соленоида [26].

На рисунке 2 представлены сводные данные по положению линий поглощения в образце 091223-1.

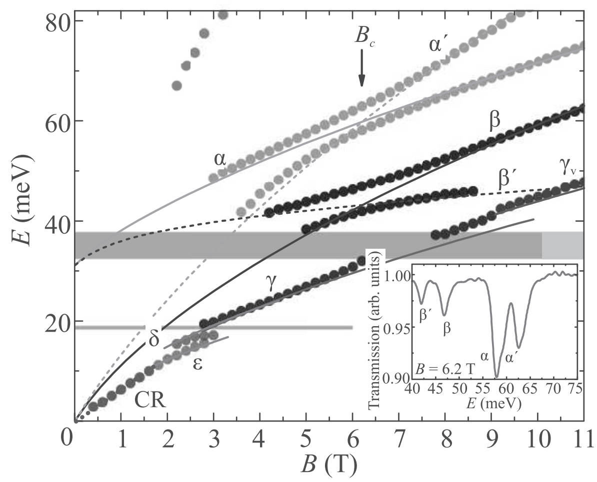


Рис. 2. (Цветной онлайн) Рассчитанные энергии магнитооптических переходов (линии) и положения экстремумов магнитопоглощения в образце 091223-1 (символы). Серые полосы – область фононного поглощения в структуре и область остаточных лучей в подложке GaAs. CR – линия классического циклотронного резонанса. Магнитопоглощение в области энергий 70 мэВ в небольших полях (серые символы) связано с межзонными переходами (см. [19]). Стрелкой отмечено критическое поле B_c, соответствующее пересечению "нулевых" уровней Ландау. На вставке: спектр магнитопоглощения в критическом магнитном поле B_c

Как видно из рисунка, в спектрах помимо "основных" линий α и β, вызванных переходами $0 \to 1$ и $-2 \to -1$ с "нулевых" уровней Ландау (рис. 1), наблюдаются линии α' и β' (см. также [18]). Последние в рамках "одноэлектронного" приближения связывались с замешиванием состояний и антипересечением "нулевых" уровней Ландау вследствие отсутствия центра инверсии в кристаллической решетке (BIA) и/или анизотропии химических связей на гетероинтерфейсах КЯ (IIA) [18, 19]. Как отмечалось ранее, в рамках аксиального приближения для 8-зонной модели Кейна "нулевые" уровни Ландау пересекаются в критическом поле B_c (6.2 Тл для данного образца, рис. 1). Учет неаксиальных слагаемых в гамильтониане Кейна, в том числе связанных с BIA и IIA, приводит к конечной разнице энергий между "нулевыми" уровнями, минимум которой достигается при $B = 5.8$ Тл (рис. 1). В рамках "одноэлектронной" картины разность энергий между "нулевыми" уровнями Ландау может быть непосредственно определена из разности энергий переходов (α, α') и (β, β'). Очевидно, что в рамках одночастичного приближения величина расщепления и значение магнитного поля, в котором достигается минимум, должны совпадать для обеих пар (α, α') и (β, β'), поскольку переходы в обоих случаях идут с *одних и тех же* "нулевых" уровней Ландау. Однако, как видно из рис. 3, разница энергий

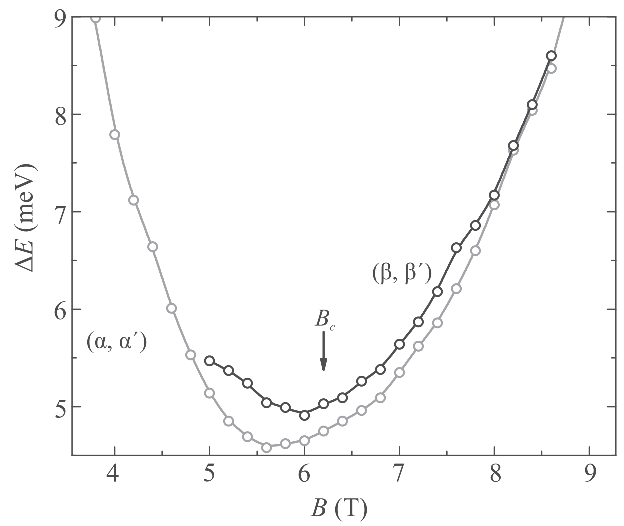


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость от магнитного поля абсолютной разницы энергий наблюдаемых магнитооптических переходов в парах (α, α') и (β, β') в образце 091223-1. Стрелкой отмечено критическое поле B_c, соответствующее пересечению "нулевых" уровней Ландау

между парами переходов (α, α') и (β, β') оказывается неодинаковой и, кроме того, минимум для каждой из пар достигается при различных значениях магнитных полей (5.6 и 6.1 Тл соответственно). Данный факт не может быть объяснен в рамках "одноэлектронного" приближения и требует рассмотрения переходов (α, α') и (β, β') в качестве коллективных мод, гибридизованных e–e взаимодействием.

Другие подтверждения проявления эффектов e–e взаимодействия в спектрах магнитопоглощения инвертированных КЯ HgTe/CdHgTe были получены при исследовании образца 091217-1 с шириной КЯ 7 нм. Уменьшение толщины КЯ приводит к уменьшению величины критического поля B_c до 2.75 Тл (рис. 4), в окрестности которого в этом образце в

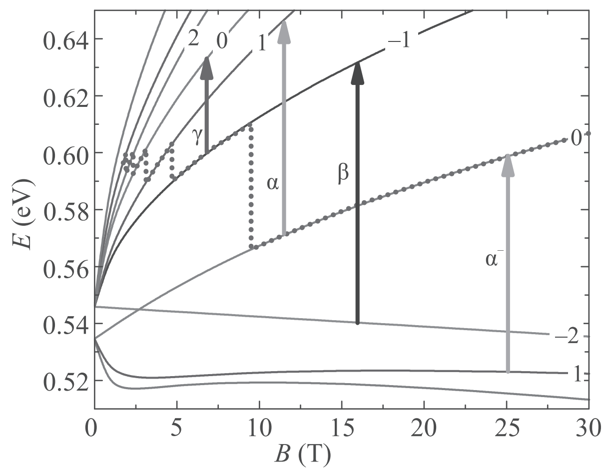


Рис. 4. (Цветной онлайн) Уровни Ландау в образце 091217-1 с шириной КЯ HgTe 7 нм, рассчитанные в рамках аксиального приближения. Точечная линия – положение уровня Ферми для концентрации электронов $2.3 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$. Стрелками указаны наблюдаемые переходы

спектрах магнитопоглощения переходы α $(0 \to 1)$ и β $(-2 \to -1)$ еще не наблюдаются вследствие заполнения конечных для этих переходов уровней Ландау. Как видно из рис. 5, "одноэлектронный" расчет предсказывает слияние линий поглощения α и β (переходов $0 \to 1$ и $-2 \to -1$) в магнитном поле 11 Тл, значительно превышающем величину B_c. Для этого образца мы ограничились расчетами уровней Ландау в аксиальном приближении, поскольку в сильных магнитных полях, существенно превышающих B_c, влиянием эффектов, связанных с BIA и IIA, на энергии магнитооптических переходов можно пренебречь [19]. В этом случае, единственной причиной для "антипересечения" энергий переходов α и β при изменении магнитного поля может быть только "взаимодействие" самих переходов, т.е. гибридизация магнитоплазменных мод (магнитоэкситонов) с близкими энергиями [11–14]. Детальный анализ линий маг-

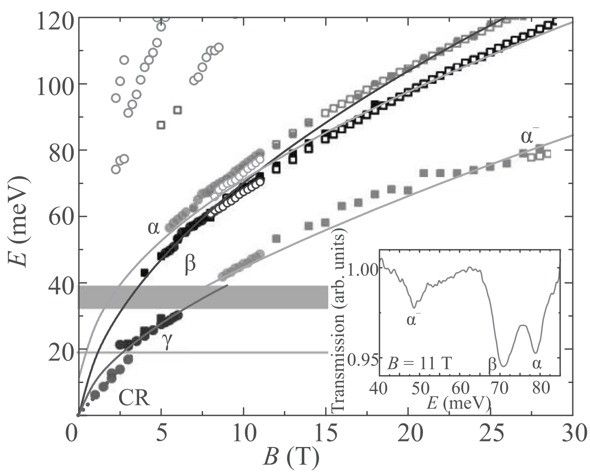


Рис. 5. (Цветной онлайн) Рассчитанные энергии магнитооптических переходов и положения линий магнитопоглощения в образце 091217-1, полученные из различных измерений: кружки – измерения в сверхпроводящем соленоиде до 11 Тл, квадраты – в резистивном соленоиде до 30 Тл; сплошные символы – измерения с использованием фильтра из черного полиэтилена, открытые – с фильтром ZnSe. Серые полосы – область фононного поглощения в структуре и область остаточных лучей в подложке GaAs. CR – линия классического циклотронного резонанса. Магнитопоглощение в области энергий 100 мэВ в небольших полях (серые символы) связано с межзонными переходами (см. [19]). На вставке: спектр магнитопоглощения в магнитном поле, соответствующем пересечению переходов α и β в "одноэлектронном" приближении

нитопоглощения в структуре 091217-1, измеренных при различных условиях (на образцах, выколотых из различных частей структуры, на разных установках и с использованием различных фильтров) (рис. 5) показывает, что линии α и β в диапазоне полей 10–30 Тл идут практически параллельно друг другу на "расстоянии" порядка 9 мэВ. Характерный масштаб кулоновского взаимодействия E_c в этом же диапазоне полей составляет 8–14 мэВ, что также свидетельствует о "многочастичной" природе "взаимодействия" переходов α и β.

Аналогичное отсутствие пересечения линий α и β наблюдалось и в работе [23], в которой исследовалось магнитопоглощение в КЯ HgTe/CdHgTe шириной 8 нм при различных температурах. При низкой температуре 2 К так же, как и в структуре 091223-1, исследованной в настоящей работе, наблюдается пара линий (α, α') вблизи $B_c \sim 6$ Тл (см. рис. 3d в [23]). При повышении температуры до 90 К спектр становится бесщелевым, а при промежуточной температуре 50 К ширина инвертированной щели и критическое поле B_c уменьшаются, и расчет предсказывает пересечение линий α и β в магнитном поле ~ 10 Тл. Однако, как и для образца 091217-1, в этом случае линии не демонстрируют никакой тенденции к пересечению вплоть до максимального в рассматриваемом эксперименте магнитного поля 16 Тл [23].

Неизбежность пересечения линий поглощения α и β с ростом магнитного поля в рамках "одноэлектронного" описания можно пояснить качественными соображениями. В образцах с инвертированной зонной структурой линия α обусловлена *межзонным* переходом $0 \to 1$ (рис. 1, 4), а линия β – *внутризонным* циклотронным переходом, энергия которого стремится к нулю при уменьшении магнитного поля. Таким образом, в слабых магнитных полях в КЯ с инверсией зон линия α всегда лежит выше по энергии, чем линия β. В бесщелевом образце эти линии сливаются в малых магнитных полях, а в сильных полях линия β лежит выше линии α [23]. Равенство энергий переходов α $(0 \to 1)$ и β $(-2 \to -1)$ в пределе малых магнитных полей можно строго показать в рамках двухзонной 2D BHZ модели [23]. В то же время, расчет с использованием 8-зонной модели Кейна показывает, что с ростом магнитного поля "расстояние" между уровнями Ландау 0 и 1 становится меньше, чем между уровнями -2 и -1 – см. рис. 3а в работе [27]. Причиной этого является отклонение закона дисперсии от линейного, т. е. возрастание вкладов членов гамильтониана, пропорциональных k^2 с ростом квазиимпульса и, соответственно, магнитного поля [2, 3, 23]. В случае КЯ с инвертированной зонной структурой конечная величина щели в сильных магнитных полях дает малую добавку к энергии уровней Ландау, и с ростом поля энергия перехода β $(-2 \to -1)$ рано или поздно становится меньше энергии перехода α $(0 \to 1)$.

3. Заключение. В работе исследованы спектры магнитопоглощения КЯ HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой в дальнем и среднем ИК диапазонах. Из анализа положения линий в спектрах магнитопоглощения выявлены эффекты, которые принципиально не могут быть объяснены в рамках "одноэлектронного" приближения с использованием 8-зонной модели Кейна. Обнаруженное поведение энергий оптических переходов с близкими энергиями в сильных магнитных полях однозначно демонстрирует "многочастичную" природу переходов между уровнями Ландау, которые должны рассматриваться как коллективные моды (магнитоэкситоны), гибридизованные e–e взаимодействием.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант RSF-ANR 20-42-09039) и Национального исследовательского агентства Франции (Agence nationale de la recherche (ANR), проект Colector).

Авторы благодарят за поддержку Национальную лабораторию сильных магнитных полей LNCMI-G, члена европейской лаборатории сильных магнитных полей (European Magnetic Field Laboratory).

1. L. G. Gerchikov and A. Subashiev, Phys. Status Solidi B **160**, 443 (1990).
2. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
3. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi, and S. C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
4. M. Schultz, U. Merkt, A. Sonntag, U. Rossler, R. Winkler, T. Colin, P. Helgesen, T. Skauli, and S. Løvold, Phys. Rev. B **57**, 14772 (1998).
5. A. V. Ikonnikov, M. S. Zholudev, K. E. Spirin et al. (Collaboration), Semicond. Sci. Technol. **26**, 125011 (2011).
6. M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **86**, 205420 (2012).
7. M. S. Zholudev, A. V. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K. V. Maremyanin, K. E. Spirin, V. I. Gavrilenko, W. Knap, S. A. Dvoretskiy, and N. N. Mihailov, Nanoscale Res. Lett. **7**, 534 (2012).
8. W. Kohn, Phys. Rev **123**, 1242 (1961).
9. Ю. А. Бычков, С. В. Иорданский, Г. М. Элиашберг, Письма в ЖЭТФ **33**, 152 (1981).
10. C. Kallin and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **30**, 5655 (1984).
11. A. H. MacDonald and C. Kallin, Phys. Rev. B **40**, 5795 (1989).
12. S. S. Krishtopenko, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 365602 (2013).
13. S. S. Krishtopenko, A. V. Ikonnikov, M. Orlita, Yu. G. Sadofyev, M. Goiran, F. Teppe, W. Knap, and V. I. Gavrilenko, J. Appl. Phys. **117**, 112813 (2015).
14. Y. A. Bychkov and G. Martinez, Phys. Rev. B **66**, 193312 (2002).
15. S. S. Krishtopenko and F. Teppe, Sci. Adv. **4**, eaap752 (2018).
16. S. S. Krishtopenko, S. Ruffenach, F. Gonzalez-Posada et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **97**, 245419 (2018).
17. M. Orlita, K. Masztalerz, C. Faugeras, M. Potemski, E. G. Novik, C. Brune, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **83**, 115307 (2011).
18. М. С. Жолудев, Ф. Теп, С. В. Морозов, М. Орлита, К. Консейо, С. Руфенах, В. Кнап, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **100**, 895 (2014).

19. L. S. Bovkun, A. V. Ikonnikov, V. Ya. Aleshkin, K. E. Spirin, V. I. Gavrilenko, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretskii, F. Teppe, B. A. Piot, M. Potemski, and M. Orlita, J. Phys. Condens. Matter **31**, 145501 (2019).
20. S. A. Tarasenko, M. V. Durnev, M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-W. Luo, and A. Zunger, Phys. Rev. B **91**, 081302(R) (2015).
21. S. S. Krishtopenko, A. M. Kadykov, S. Gebert, S. Ruffenach, C. Consejo, J. Torres, C. Avogadri, B. Jouault, W. Knap, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretskii, and F. Teppe, Phys. Rev. B **102**, 041404(R) (2020).
22. A. V. Ikonnikov, S. S. Krishtopenko, O. Drachenko et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **94**, 155421 (2016).
23. M. Marcinkiewicz, S. Ruffenach, S. S. Krishtopenko et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **96**, 035405 (2017).
24. А. В. Иконников, М. С. Жолудев, К. В. Маремьянин, К. Е. Спирин, А. А. Ластовкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **95**, 452 (2012).
25. S. Dvoretsky, N. Mikhailov, Y. Sidorov, V. Shvets, S. Danilov, B. Wittman, and S. Ganichev, J. Electron. Mater. **39**, 918 (2010).
26. L. S. Bovkun, A. V. Ikonnikov, V. Ya. Aleshkin, K. V. Maremyanin, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretskii, S. S. Krishtopenko, F. Teppe, B. A. Piot, M. Potemski, M. Orlita, and V. I. Gavrilenko, Opto-Electronics Review **27**, 213 (2019).
27. B. Buttner, C. X. Liu, G. Tkachov, E. G. Novik, C. Brune, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp, Nat. Phys. **7**, 418 (2011).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 547 – 553 © 2020 г. 25 октября

Универсальные колебательные свойства неупорядоченных систем с точки зрения теории случайных коррелированных матриц

Д. А. Конюх[1], *Я. М. Бельтюков*

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

Поступила в редакцию 16 сентября 2020 г.
После переработки 16 сентября 2020 г.
Принята к публикации 21 сентября 2020 г.

Показано, что коррелированный ансамбль Вишарта может быть использован для изучения общих колебательных свойств устойчивых аморфных твердых тел, в которых энергия инвариантна относительно сдвига. С помощью теории случайных матриц найдены плотность колебательных состояний и динамический структурный фактор системы. Полученные результаты показывают наличие кроссовера Иоффе–Регеля между низкочастотными распространяющимися фононами и диффузонами на более высоких частотах. Приведенная плотность колебательных состояний демонстрирует бозонный пик, частота которого близка к частоте кроссовера Иоффе–Регеля.

DOI: 10.31857/S1234567820200094

Известно, что доминирующую часть колебательного спектра таких неупорядоченных систем, как аморфные диэлектрики (стекла), выше порога Иоффе–Регеля, но ниже порога локализации, занимают делокализованные колебания – *диффузоны* [1, 2]. Диффузоны распространяются посредством диффузионной передачи энергии от атома к атому. Несмотря на то, что диффузоны определяют теплопроводность стекол в широком диапазоне частот свыше 0.4 ТГц (20 К), их микроскопическая природа до сих пор остается не полностью изученной.

Другим универсальным колебательным свойством практически всех стекол является избыточная над дебаевской плотность колебательных состояний, известная как *бозонный пик*. Бозонный пик наблюдался в различных экспериментах: в комбинационном рассеянии света [3, 4], в рассеянии рентгеновских лучей [5], в неупругом нейтронном рассеянии [6], в дальней инфракрасной спектроскопии [7–9], при измерении теплоемкости аморфных тел [10–13]. Не так давно бозонный пик наблюдался в двумерных структурах [14–17]. Во многих работах отмечается корреляция между частотой бозонного пика ω_b и частотой кроссовера Иоффе–Регеля $\omega_{\rm ir}$ – перехода между хорошо определенными колебаниями с большой длиной свободного пробега (фононами) и неупорядоченными колебаниями (диффузонами) [18–20]. Другими словами, бозонный пик появляется на границе фононной и диффузонной областей.

Теория бозонного пика и кроссовера Иоффе–Регеля способна пролить свет на природу колебаний в аморфных твердых телах. Существуют разные теоретические модели для описания этих свойств аморфных диэлектриков, такие как теория эффективной среды [21–25], теория мягких потенциалов [26–30], теория связанных мод [31]. Некоторые авторы связывают появление бозонного пика с сингулярностью ван-Хова поперечных акустических фононов [32–34]. Несмотря на большое число таких работ, общепринятая теория бозонного пика по-прежнему отсутствует. В данной работе в рамках модели случайных матриц мы показываем, что только два наиболее важных свойства аморфных твердых тел — механическая устойчивость и инвариантность потенциальной энергии относительно сдвига системы, достаточны для возникновения бозонного пика и кроссовера Иоффе–Регеля.

Колебания в аморфных телах определяются собственными векторами и числами динамической матрицы $\hat{M}$. Наличие беспорядка в аморфных системах приводит к случайному характеру матричных элементов M_{ij}. В связи с этим, теория случайных матриц может применяться для изучения колебательных свойств аморфных тел [35–38]. Теория случайных матриц широко применяется во многих областях науки и техники при анализе сложных систем, состоящих из большого числа степеней свободы [39–46]. Кроме этого, теория случайных матриц нашла применение и в гранулярных средах [47–49].

Различные ансамбли случайных матриц описывают неупорядоченные системы с разным свойства-

[1]e-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

ми симметрии [50]. Так, например, классические ансамбли случайных матриц описывают системы с различной симметрией по отношению к инверсии времени [51, 52]. Однако не каждый матричный ансамбль способен учесть особые корреляции между матричными элементами M_{ij} в аморфных телах. Рассматриваемый в данной работе ансамбль является коррелированным и учитывает только два наиболее важных свойства аморфных твердых тел: (i) система находится вблизи *устойчивого* положения равновесия и (ii) потенциальная энергия инвариантна относительно *сдвига* системы как целого.

Коррелированный ансамбль Вишарта. Механическая устойчивость аморфных тел соответствует положительно определенной динамической матрице $\hat{M}$. Любая положительно определенная матрица может быть представлена в виде $\hat{M} = \hat{A}\hat{A}^T$, и наоборот, $\hat{A}\hat{A}^T$ является положительно определенной матрицей для любой (не обязательно квадратной) матрицы $\hat{A}$ [53]. Исходя из этого, мы рассмотрим случайную матрицу $\hat{A}$ размером $N\times K$ для получения механически устойчивой системы с динамической матрицей в виде ансамбля Вишарта $\hat{M} = \hat{A}\hat{A}^T$. Каждый столбец матрицы $\hat{A}$ можно интерпретировать как элементарную *связь* с потенциальной энергией в виде положительно определенной квадратичной формы [54]

$$U_k = \frac{1}{2}\Big(\sum_i A_{ik}u_i\Big)^2, \tag{1}$$

где u_i – смещение i-го атома из положения равновесия. Каждая строка матрицы $\hat{A}$ соответствует некоторой степени свободы. Заметим, что каждая связь, соответствующая столбцу матрицы $\hat{A}$, описывает взаимодействие между несколькими степенями свободы. Так, например, связь, определяющая угол между тремя ближайшими атомами в аморфном кремнии, описывает взаимодействие девяти степеней свободы.

Разница между числом связей K и числом степеней свободы N системы играет ключевую роль в ее колебательных и механических свойствах. В механически стабильной системе с конечной жесткостью число связей должно быть больше числа степеней свободы, что известно как правило Максвелла. Для гранулярных сред было показано, что многие свойства (такие, как модуль упругости и частота кроссовера) зависят от параметра $z - z_c \sim K - N$ [47, 49], где число упругих контактов между гранулами определяет число связей K.

Энергия связи U_k не должна зависеть от сдвига $u_i \to u_i + \mathrm{const}$. Поэтому матрица $\hat{A}$ должна удовлетворять *правилу сумм* $\sum_i A_{ik} = 0$. Это означает, что матричные элементы A_{ik} *коррелированны*, что не было учтено ранее [47]. В простейшем случае будем считать, что аморфная система содержит статистически эквивалентные случайные связи. В этом случае парные корреляции между матричными элементами A_{ik} могут быть записаны как

$$\langle A_{ik}A_{jl}\rangle = \frac{1}{N}C_{ij}\delta_{kl}, \tag{2}$$

где $\hat{C}$ – некоторая матрица корреляций. Можно показать, что матрица корреляций $\hat{C}$ пропорциональна усредненной динамической матрице: $\hat{C} = \frac{N}{K}\langle\hat{M}\rangle$. Для простоты рассмотрим скалярную модель аморфного тела с простой кубической решеткой со случайными связями и единичной постоянной решетки $a_0 = 1$. В этом случае усредненная динамическая матрица $\langle\hat{M}\rangle$ является матрицей, описывающей кристаллическую систему. Поэтому естественно предполагать, что матрица корреляций $\hat{C}$ является регулярной матрицей, которая описывает простую кубическую решетку со взаимодействием соседних атомов. Недиагональные элементы $C_{ij} = -\Omega^2$, если атомы с индексами i и j являются ближайшими соседями в решетке, и $C_{ij} = 0$ в остальных случаях. Диагональные элементы $C_{ii} = 6\Omega^2$. Постоянная Ω определяет характерную частоту колебаний системы. Собственные значения регулярной матрицы корреляций $\hat{C}$ зависят от волнового вектора $\mathbf{q}$, что выражается в виде закона дисперсии

$$\omega_0^2(\mathbf{q}) = 4\Omega^2\Big(\sin^2\frac{q_x}{2} + \sin^2\frac{q_y}{2} + \sin^2\frac{q_z}{2}\Big). \tag{3}$$

Статистические свойства случайной матрицы $\hat{M}$ связаны с известной матрицей корреляций $\hat{C}$. Для нахождения этих свойств мы рассмотрим следующие резольвенты:

$$\hat{G}(z) = \left\langle\frac{1}{z - \hat{M}}\right\rangle, \quad \hat{G}_0(Z) = \frac{1}{Z - \hat{C}}, \tag{4}$$

где z и Z – комплексные параметры. Усреднение проводится по разным реализациям случайной матрицы $\hat{M}$. В термодинамическом пределе $N \to \infty$ существует фундаментальное соотношение между спектральными свойствами $\hat{M}$ и $\hat{C}$ [55]:

$$Z\hat{G}_0(Z) = z\hat{G}(z), \tag{5}$$

где комплексные параметры z и Z связаны конформным преобразованием $Z(z)$ следующего вида:

$$\varkappa Z + \frac{Z^2}{N}\mathrm{Tr}\,\hat{G}_0(Z) = z. \tag{6}$$

Параметр $\varkappa = (K - N)/N$ определяет относительное превышение числа связей над числом степеней свободы, которое контролирует соотношение между жесткостью и беспорядком в системе. Например, в аморфном кремнии в модели Стиллинджера–Вебера на один атом приходится $4/2 = 2$ связи, определяющих расстояние между атомами, и 6 связей, определяющих углы между связями аморфного кремния [56]. Поэтому мы можем оценить параметр как $\varkappa = 5/3$, что по порядку величины близко к 1. В аморфном SiO_2 на каждый атом кремния приходится 9 степеней свободы. При этом число связей можно оценить как 12 (4 определяют расстояние Si-O, 6 определяют углы O-Si-O и $4/2 = 2$ определяют углы Si-O-Si). В этом случае параметр $\varkappa = 1/3$ (в реальности связь Si-O-Si имеет меньшую жесткость, в результате чего эффективные значения числа связей N и параметра $\varkappa$ несколько меньше). Отличие в параметрах $\varkappa$ хорошо коррелирует с формой плотности колебательных состояний, положением частоты бозонного пика и критерия Иоффе–Регеля в аморфных Si и SiO_2. В модели гранулярных сред [49] параметр $\varkappa$ определяется числом контактов между соседними гранулами и может меняться в широком диапазоне значений.

Плотность колебательных состояний. Для изучения плотности колебательных состояний $g(\omega)$ мы рассмотрим нормированный след резольвенты $\hat{G}(z)$, являющийся преобразованием Стилтьеса от $g(\omega)$:

$$F(z) = \frac{1}{N}\mathrm{Tr}\,\hat{G}(z) = \int \frac{g(\omega)}{z - \omega^2} d\omega. \qquad (7)$$

Для регулярной матрицы корреляций $\hat{C}$ мы также можем посчитать преобразованием Стилтьеса $F_0(Z) = \frac{1}{N}\mathrm{Tr}\,\hat{G}_0(Z)$. Используя закон дисперсии для кубического кристалла (3), мы находим

$$F_0(Z) = \frac{1}{2\Omega^2} W_s \left(\frac{Z}{2\Omega^2} - 3\right), \qquad (8)$$

где W_s – третий интеграл Ватсона [57]. Из формулы (5) получается соотношение $ZF_0(Z) = zF(z)$. При этом плотность колебательных состояний может быть выражена в виде $g(\omega) = \frac{2\omega}{\pi}\mathrm{Im}\,F(\omega^2 - i0)$. В итоге мы находим $g(\omega)$ в следующем виде:

$$g(\omega) = \frac{2\omega}{\pi}\mathrm{Im}\frac{1}{Z(\omega^2)}, \qquad (9)$$

где комплексный параметр Z определяется вещественным параметром ω^2 с помощью следующего комплексного уравнения:

$$\varkappa Z + Z^2 F_0(Z) = \omega^2. \qquad (10)$$

Это уравнение определяет некоторый контур на комплексной плоскости, известный как критический горизонт [58].

Уравнения (8)–(10) определяют плотность состояний $g(\omega)$ в неявном виде, что может быть посчитано численно. Результат представлен на рис. 1. Случай

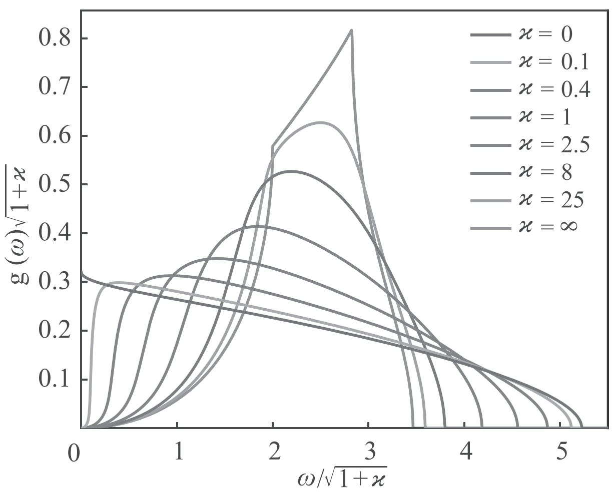


Рис. 1. (Цветной онлайн) Плотность колебательных состояний $g(\omega)$ для различных значений параметра $\varkappa$, посчитанная с помощью уравнений (8)–(10)

$\varkappa = 0$ соответствует мягкой аморфной среде с нулевой макроскопической жесткостью. При увеличении $\varkappa$ плотность колебательных состояний постепенно переходит к плотности состояний кристаллической системы ($\varkappa = \infty$).

Динамический структурный фактор. Для анализа пространственной структуры колебательных мод мы рассчитали динамический структурный фактор, который определяет связь между частотой ω и волновым вектором $\mathbf{q}$ [34]. В скалярной модели динамический структурный фактор имеет вид $S(\mathbf{q},\omega) = (k_B T q^2/m\omega^2)\mathcal{F}(\mathbf{q},\omega)$, где фурье-образ собственных мод определен как $\mathcal{F}(\mathbf{q},\omega) = \sum_n |\langle n|\mathbf{q}\rangle|^2 \delta(\omega - \omega_n)$. Заметим, что динамический структурный фактор может быть записан с помощью резольвенты $\hat{G}$:

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{2k_B T q^2}{\pi m \omega}\mathrm{Im}\langle \mathbf{q}|\hat{G}(\omega^2)|\mathbf{q}\rangle. \qquad (11)$$

Тогда, используя соотношения (5) и $\langle \mathbf{q}|\hat{G}_0(Z)|\mathbf{q}\rangle = 1/(Z - \omega_0^2(\mathbf{q}))$, получаем динамический структурный фактор в форме затухающего гармонического осциллятора:

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{k_B T}{\pi m}\frac{2q^2\Gamma(\mathbf{q},\omega)}{(\omega^2 - q^2 E(\mathbf{q},\omega))^2 + \omega^2\Gamma^2(\mathbf{q},\omega)}, \quad (12)$$

где модуль Юнга

$$E(\mathbf{q},\omega) = \frac{\omega_0^2(\mathbf{q})}{q^2}\mathrm{Re}\frac{\omega^2}{Z(\omega^2)}, \tag{13}$$

и затухание

$$\Gamma(\mathbf{q},\omega) = \omega_0^2(\mathbf{q})\mathrm{Im}\frac{\omega}{Z(\omega^2)} = \frac{\pi}{2}\omega_0^2(\mathbf{q})g(\omega). \tag{14}$$

На рисунке 2 показан нормированный на максимум по частоте фурье-образ собственных мод для

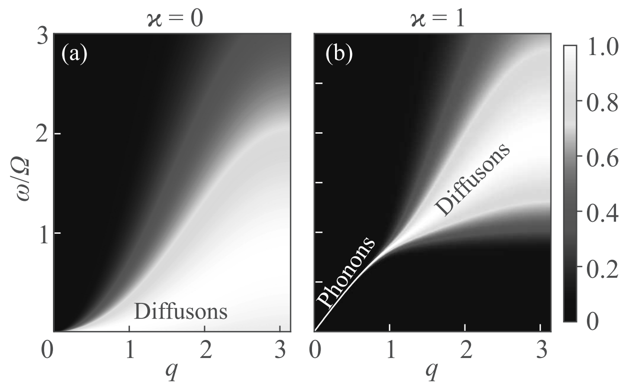


Рис. 2. (Цветной онлайн) Колебательные моды неупорядоченного тела в обратном пространстве. Цветом показан нормированный фурье-образ собственных мод $\mathcal{F}(\mathbf{q},\omega)/\max_\omega \mathcal{F}(\mathbf{q},\omega)$ для $\varkappa = 0$ и $\varkappa = 1$

различных параметров $\varkappa$. Такой рисунок наглядно отображает форму динамического структурного фактора и позволяет качественно определить связь частоты ω и волнового вектора $\mathbf{q}$. В случае $\varkappa = 0$ однозначная связь между ω и $\mathbf{q}$ отсутствует, поэтому можно считать, что такой структурный фактор соответствует *диффузонам* [2, 37]. Для $\varkappa = 1$ в низкочастотной области хорошо проявляется линейная дисперсия $\omega \sim \mathbf{q}$ с небольшим уширением из-за малого рассеяния плоских волн. Такие низкочастотные колебания распространяются как слабозатухающие *фононы*. Однако в доминирующем диапазоне частот структурный фактор сильно уширен. Это означает, что для $\varkappa \neq 0$ существует кроссовер между фононами и диффузонами, известный как кроссовер Иоффе–Регеля. Отметим, что при относительно высоких частотах имеет место локализация Андерсона, однако она оказывает влияние только на небольшую часть наиболее высокочастотных колебаний [2, 37].

Критерий Иоффе–Регеля, фононы и диффузоны. Для анализа кроссовера Иоффе–Регеля мы рассмотрим низкочастотную область $\omega \ll \Omega$. В этом случае мы можем использовать разложение $F_0(Z)$ по малому аргументу. Для *любой* трехмерной системы с линейным законом дисперсии $\omega_0(\mathbf{q}) = \Omega q$ при $q \to 0$ это разложение имеет вид

$$F_0(Z) = -a^2 + \frac{\sqrt{-Z}}{4\pi\Omega^3} + O(Z). \tag{15}$$

В случае рассматриваемой кубической решетки $a = \Omega^{-1}\sqrt{w_s/2}$, где $w_s \approx 0.505462$ – постоянная Ватсона [57]. Используя (15), мы находим критический горизонт $Z(\omega)$ для $\omega \ll \Omega$ в явном виде, используя метод итераций для решения (10):

$$\frac{1}{Z(\omega^2)} = \frac{\varkappa}{2\omega^2} + \frac{1}{\omega}\sqrt{f(\omega) + \frac{i\omega/4\pi\Omega^3}{\sqrt{\varkappa/2 + \omega\sqrt{f(\omega)}}}}, \tag{16}$$

где $f(\omega) = \frac{\varkappa^2}{4\omega^2} - a^2$. Знак $f(\omega)$ существенно влияет на поведение $Z(\omega^2)$. Соответствующая частота кроссовера $\omega_c = \varkappa/2a$ разделяет частотную область на две части.

Для $\varkappa \ll 1$ результат (16) можно упростить и получить плотность колебательных состояний для областей $\omega < \omega_c$ и $\omega > \omega_c$ раздельно:

$$g(\omega) = \frac{\omega}{4\pi^2\Omega^3 a^{3/2}}\sqrt{\frac{\omega_c - \sqrt{\omega_c^2 - \omega^2}}{\omega_c^2 - \omega^2}}, \quad \omega < \omega_c, \tag{17}$$

$$g(\omega) = \frac{2a}{\pi\omega}\sqrt{\omega^2 - \omega_c^2}, \qquad \omega > \omega_c. \tag{18}$$

Существует узкая область плавного перехода между (17) и (18), однако она мала по сравнению с ω_c при $\varkappa \ll 1$.

В низкочастотной области $\omega \ll \omega_c$ плотность колебательных состояний принимает дебаевскую зависимость $g(\omega) \propto \omega^2$:

$$g_D(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2\Omega^3\varkappa^{3/2}}, \tag{19}$$

что соответствует статическому модулю Юнга $E_0 = \Omega^2\varkappa$. Для $\varkappa = 0$ модуль Юнга обращается в нуль, что соответствует предельно мягкой системе без распространения в ней фононов.

Рисунок 3 демонстрирует бозонный пик в приведенной плотности состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ для различных значений параметра $\varkappa$. Положение максимума $g(\omega)/g_D(\omega)$ определяет частоту бозонного пика ω_b, которая связана с частотой кроссовера ω_c. При $\varkappa \ll 1$ данная связь имеет вид $\omega_b = \sqrt{3/2}\omega_c$. Как следствие, модуль Юнга E_0 пропорционален частоте бозонного пика ω_b. Эта корреляция наблюдалась ранее различными экспериментальными и теоретическими группами [13, 59]. Высота бозонного пика пропорциональна $\varkappa^{-1/2}$ и имеет расходимость в случае $\varkappa \to 0$. Бозонный пик также наблюдался в двумерных системах с логарифмической расходимостью высоты бозонного пика [60].

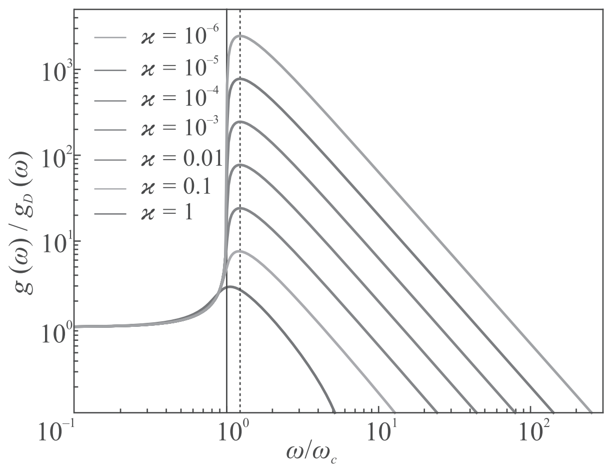


Рис. 3. (Цветной онлайн) Приведенная плотность состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ для различных параметров системы $\varkappa$, посчитанная с помощью уравнений (8)–(10). Сплошной линией отмечена частота кроссовера ω_c, пунктирной линией отмечена частота бозонного пика $\omega_b = \sqrt{3/2}\omega_c$

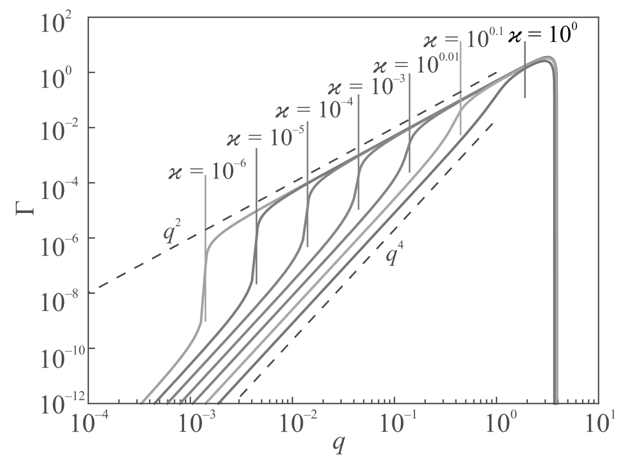


Рис. 4. (Цветной онлайн) Затухание Γ в зависимости от волнового вектора $\mathbf{q}$ при различных значениях параметра $\varkappa$, посчитанное с помощью уравнений (8)–(10), (14). Пунктирной линией отмечено рэлеевское рассеяние $\Gamma \propto q^4$ и диффузонный закон $\Gamma \propto q^2$. Вертикальными сплошными линиями отмечен волновой вектор кроссовера q_c для соответствующего значения параметра $\varkappa$

Найденный динамический структурный фактор (12) определяется модулем Юнга $E(\mathbf{q},\omega)$ и затуханием $\Gamma(\mathbf{q},\omega)$. В случае $\varkappa \ll 1$ и $q \ll 1$ модуль Юнга можно разделить на две части, зависящих только от частоты:

$$E(\omega) = \frac{\Omega^2\varkappa}{2}\left(1+\sqrt{1-\frac{\omega^2}{\omega_c^2}}\right), \quad \omega < \omega_c, \qquad (20)$$

$$E(\omega) = \frac{\Omega^2\varkappa}{2} + \frac{1}{4\pi\Omega}\left(\frac{\omega}{2a}\right)^{3/2}, \quad \omega > \omega_c. \qquad (21)$$

Для $\omega < \omega_c$ мы находим дисперсию фононов, используя соотношение $\omega^2/q^2 = E(\omega)$:

$$\omega(q) = \Omega^2 aq\sqrt{2q_c^2 - q^2}, \qquad (22)$$

где волновой вектор кроссовера $q_c = \sqrt{\varkappa/2\Omega^2a^2}$ соответствует частоте кроссовера ω_c. Для низкочастотных мод с $q \ll q_c$ имеется линейная дисперсия $\omega(q) = \sqrt{E_0}q$.

Затухание Γ определяется плотностью колебательных состояний $g(\omega)$ согласно уравнению (14). Используя дисперсионное соотношение для $\omega < \omega_c$, можно записать, что

$$\Gamma = \frac{q^4}{8\pi a}\frac{\sqrt{2q_c^2 - q^2}}{q_c^2 - q^2}. \qquad (23)$$

Для низкочастотных мод с $q \ll q_c$ затухание $\Gamma(\mathbf{q}) \sim q^4$, что соответствует рэлеевскому рассеянию на беспорядке (рис. 4). В реальных аморфных телах может происходить дополнительное резонансное рассеяние фононов на квазилокальных колебаниях [30], чья плотность состояний имеет вид $g_{\rm qlv} \sim \omega^4$. Однако количество квазилокальных колебаний уменьшается с уменьшением скорости охлаждения системы [61], и это явление выходит за рамки общих предположений (i) и (ii), приведенных во введении. При этом мы можем предполагать, что в реальных аморфных телах могут возникать локальные аномально мягкие участки, чья статистика выходит за рамки рассмотренного приближения парных корреляций. Наличие таких участков будет приводить к появлению дополнительных низкочастотных (мягких) мод в области $\omega < \omega_c$ и размытию ступеньки плотности колебательных состояний в области кроссовера.

Длина свободного пробега определяется групповой скоростью $v_g = \mathrm{d}\omega(q)/\mathrm{d}q$ и затуханием Γ как

$$l = \frac{v_g}{\Gamma} = \frac{16\pi\Omega^2a^2}{q^4}\frac{(q_c^2 - q^2)^2}{2q_c^2 - q^2}. \qquad (24)$$

В переходной области $\omega \approx \omega_c$ длина свободного пробега l становится порядка длины волны $\lambda = 2\pi/q$ (рис. 5). Это означает, что частота ω_c определяет кроссовер Иоффе–Регеля, который можно записать как $l/\lambda \approx 1/2$ [37].

Для анализа динамического структурного фактора в области частот $\omega > \omega_c$ мы рассмотрим доминирующую часть этой области: $\omega_c \ll \omega \ll \Omega$. В этом

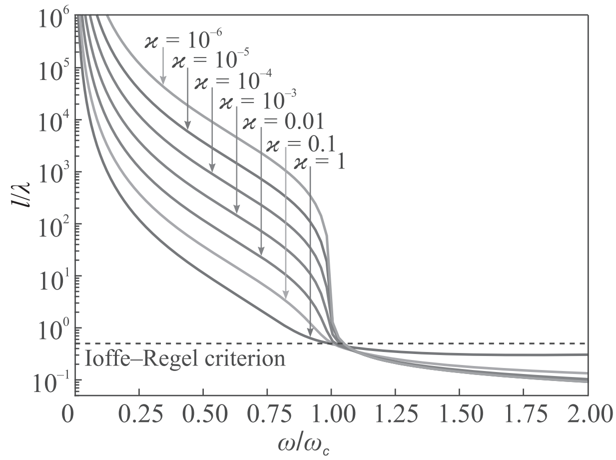


Рис. 5. (Цветной онлайн) Отношение длины свободного пробега l к длине волны λ как функция нормированной частоты ω/ω_c для различных значений параметра $\varkappa$. Горизонтальная пунктирная линия показывает критерий Иоффе–Регеля $l \approx \lambda/2$

случае динамический структурный фактор (12) принимает диффузионный вид:

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{k_B T q^2}{\pi m \omega^2} \frac{2\Gamma(\mathbf{q},\omega)}{\omega^2 + \Gamma^2(\mathbf{q},\omega)}, \tag{25}$$

что соответствует понятию диффузонов, введенному в [1, 2]. В этом частотном диапазоне $g(\omega) \approx 2a/\pi$, и $\Gamma = Dq^2$, где $D = \Omega^2 a$ – коэффициент диффузии. Ранее такая форма структурного фактора была получена численно [37].

Рисунок 4 показывает кроссовер между низкочастотным рэлеевским рассеянием $\Gamma \propto q^4$ и диффузионным затуханием $\Gamma \propto q^2$. Эта квадратичная зависимость выше кроссовера Иоффе–Регеля отмечалась ранее в экспериментальных и теоретических работах [62–66].

Изостатический случай. При $\varkappa = 0$ число степеней свободы N равно числу связей K, и макроскопическая жесткость системы равна нулю. В теории гранулярных сред этот случай известен как изостатический. При этом низкочастотная плотность колебательных состояний не подчиняется закону Дебая и отлична от нуля. Используя полученные результаты теории случайных матриц, мы нашли, что в изостатическом случае низкочастотная плотность колебательных состояний обладает особенностью

$$g_{\mathrm{is}}(\omega) \simeq \frac{2a}{\pi} - \frac{1}{4\pi^2\Omega^3}\sqrt{\frac{\omega}{2a^3}}. \tag{26}$$

Такой вид плотности колебательных состояний наблюдался численно в модели случайных матриц [37] и в гранулярных средах [49, 67, 68]. Как показывает рассмотренная модель, эта зависимость связана с диффузионным характером колебаний в данном диапазоне частот. При этом динамический структурный фактор соответствует формуле (25).

Подводя итог, в данной работе мы показали, что теория случайных матриц может успешно применяться для изучения основных колебательных свойств аморфных тел. Учитывая только наиболее важные корреляции элементов случайной матрицы, обеспечивающих механическую устойчивость (i) и инвариантность относительно сдвига (ii), мы нашли плотность колебательных состояний и динамический структурный фактор системы. Мы показали наличие кроссовера Иоффе–Регеля между низкочастотными слабозатухающими фононами и диффузонами, лежащими в области более высоких частот. Бозонный пик естественным образом появляется вблизи кроссовера Иоффе–Регеля. Отметим, что полученные в приближении $\varkappa \ll 1$, $\omega \ll \Omega$ формулы (15)–(25) применимы для любой трехмерной системы, тогда как рисунки демонстрируют точные результаты, полученные для простой кубической решетки. Полученные формулы соответствуют масштабным соотношениям в свойствах поперечных колебаний гранулярных сред при $\varkappa \sim z - z_c \sim \Delta\phi^{1/2}$ и $\Omega \sim \sim \Delta\phi^{(\alpha-2)/2}$ [49, 22, 59].

Мы благодарим Д. А. Паршина и В. И. Козуба за конструктивные дискуссии.

Эта работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации МК-3052.2019.2.

1. P. B. Allen and J. L. Feldman, Phys. Rev. B **48**, 12581 (1993).
2. B. Allen, J. L. Feldman, J. Fabian, and F. Wooten, Phil. Mag. B **79**, 1715 (1999).
3. V. K. Malinovsky and A. P. Sokolov, Solid State Commun. **57**, 757 (1986).
4. M. Kabeya, T. Mori, Y. Fujii, A. Koreeda, B. W. Lee, J-H. Ko, and S. Kojima, Phys. Rev. B **94**, 224204 (2016).
5. P. Benassi, M. Krisch, C. Masciovecchio, V. Mazzacurati, G. Monaco, G. Ruocco, F. Sette, and R. Verbeni, Phys. Rev. Lett. **77**, 3835 (1996).
6. A. Wischnewski, U. Buchenau, A. J. Dianoux, W. A. Kamitakahara, and J. L. Zarestky, Phil. Mag. B **77**, 579 (1998).
7. K. Matsuishi, S. Onari, and T. Arai, Jpn. J. Appl. Phys. **25**, 1144 (1986).
8. K. W. Hutt, W. A. Phillips, and R. J. Butcher, J. Phys. Condens. Matter **1**, 4767 (1989).
9. T. Ohsaka and T. Ihara, Phys. Rev. B **50**, 9569 (1994).

10. R. C. Zeller and R. O.Pohl, Phys. Rev. B **4**, 2029 (1971).
11. W. A. Phillips, *Amorphous Solids: Low-Temperature Properties*, Springer, Berlin (1981).
12. G. K. White, S. J. Collocott, and J. S. Cook, Phys. Rev. B **29**, 4778 (1984).
13. S. Kojima, Y. Matsuda, M. Kodama, H. Kawaji, and T. Atake, Chin. J. Phys. **49**, 414 (2011).
14. W. Steurer, A. Apfolter, M. Koch, W. E. Ernst, B. Holst, E. Søndergård, and J. R. Manson, Phys. Rev. Lett. **99**, 035503 (2007).
15. W. Steurer, A. Apfolter, M. Koch, W. E. Ernst, E. Sondergard, J. R. Manson, and B. Holst, Phys. Rev. B **78**, 045427 (2008).
16. L. Zhang, J. Zheng, Y. Wang, L. Zhang, Z. Jin, L. Hong, Y. Wang, and J. Zhang, Nat. Commun. **8**, 67 (2017).
17. Y. Wang, L. Hong, Y. Wang, W. Schirmacher, and J. Zhang, Phys. Rev. B **98**, 174207 (2018).
18. B. Rufflé, G. Guimbretière, E. Courtens, R. Vacher, and G. Monaco, Phys. Rev. Lett. **96**, 045502 (2006).
19. B. Rufflé, D. A. Parshin, E. Courtens, and R. Vacher, Phys. Rev. Lett. **100**, 015501 (2008).
20. H. Shintani and H. Tanaka, Nature Mater. **7**, 870 (2008)
21. W. Schirmacher, G. Ruocco, and T. Scopigno, Phys. Rev. Lett. **98**, 025501 (2007).
22. M. Wyart, EPL **89**, 64001 (2010).
23. A. Marruzzo, W. Schirmacher, A. Fratalocchi, and G. Ruocco, Sci. Rep. **3**, 1407 (2013).
24. E. DeGiuli, A. Laversanne-Finot, G. Diring, E. Lernera, and M. Wyart, Soft Matter **10**, 5628 (2014).
25. E. DeGiuli, E. Lerner, and M. Wyart, J. Chem. Phys. **142**, 164503 (2015).
26. V. L. Gurevich, D. A. Parshin, and H. R. Schober, Phys. Rev. B **67**, 094203 (2003).
27. D. A. Parshin, H. R. Schober, and V. L. Gurevich, Phys. Rev. B **76**, 064206 (2007).
28. В. Г. Карпов, М. И. Клингер, Ф. Н. Игнатьев, ЖЭТФ **84**, 760 (1983).
29. U. Buchenau, Yu. M. Galperin, V. L. Gurevich, and H. R. Schober, Phys. Rev. B **43**, 5039 (1991).
30. U. Buchenau, Yu. M. Galperin, V. L. Gurevich, D. A. Parshin, M. A. Ramos, and H. R. Schober, Phys. Rev. B **46**, 2798 (1992).
31. W. Götze and M. R. Mayr, Phys. Rev. E **61**, 587 (2000).
32. S. N. Taraskin, Y. L. Loh, G. Natarajan, and S. R. Elliott, Phys. Rev. Lett. **86**, 1255 (2001).
33. A. I. Chumakov, G. Monaco, A. Monaco et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **106**, 225501 (2011).
34. H. Shintani and H. Tanaka, Nature Mater. **7**, 870 (2008).
35. T. S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, and P. Verrocchio, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 2167 (2002).
36. M. L. Manning and A. J. Liu, EPL **109**, 36002 (2015).
37. Y. M. Beltukov, V. I. Kozub, and D. A. Parshin, Phys. Rev. B **87** 134203 (2013).
38. M. Baggioli, R. Milkus, and A. Zaccone, Phys. Rev. E **100**, 062131 (2019).
39. R. Speicher and C. Vargas, Random Matrices: Theory and Applications **1**, 1150008 (2012).
40. L. Laloux, P. Cizeau, M. Potters, and J.-P. Bouchaud, Int. J. Theor. Appl. Finance **3**, 391 (2000).
41. K. Rajan and L. F. Abbott, Phys. Rev. Lett. **97**, 188104 (2006).
42. J. Harnad, *Random Matrices, Random Processes and Integrable Systems*, Springer, N.Y. (2011).
43. A. M. Tulino and S. Verdu, Found. Trends Commun. Inf. Theory **1**, 1 (2004).
44. K. E. Wage, J. Acoust. Soc. Am. **138**, 1840 (2015).
45. H. Meyer and J. C. Angles d'Auriac, Phys. Rev. E **55**, 6608 (1997).
46. N. A. Olekhno and Y. M. Beltukov, Phys. Rev. E **97**, 050101(R) (2018).
47. Я. М. Бельтюков, Письма в ЖЭТФ **101**, 377 (2015).
48. A. J. Liu and S. R. Nagel, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **1**, 347 (2010).
49. C. S. O'Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu, and S. R. Nagel, Phys. Rev. E **68**, 011306 (2003).
50. F. Evers and A. D.Mirlin, Rev. Mod. Phys. **80**, 1355 (2008).
51. F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140 (1962).
52. F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 1199 (1962).
53. R. Bhatia, *Positive Definite Matrices*, Princeton University Press, Princeton (2007).
54. Я. М. Бельтюков, Д. А. Паршин, Письма в ЖЭТФ **104**, 570 (2016).
55. Z. Burda, A. Görlich, A. Jarosz, and J. Jurkiewicz, Physica A **343**, 295 (2004).
56. F. H. Stillinger and T. A. Weber, Phys. Rev. B **31**, 5262 (1985).
57. I. J. Zucker, J. Stat. Phys. **145**, 591 (2011).
58. Z. Burda, A. Görlich, J. Jurkiewicz, and B. Wacław, Eur. Phys. J. B **49**, 319 (2006).
59. V. Vitelli, N. Xu, M. Wyart, A. J. Liu, and S. R. Nagel, Phys. Rev. E **81**, 021301 (2010).
60. Д. А. Конюх, Я. М. Бельтюков, ФТТ **62**, 603 (2020).
61. C. Rainone, E. Bouchbinder, and E. Lerner, PNAS **117**, 5228 (2020).
62. F. Sette, M. H. Krisch, C. Masciovecchio, G. Ruocco, and G. Monaco, Science **280**, 1550 (1998).
63. G. Ruocco and F. Sette, J. Phys.: Condens. Matter **13**, 9141 (2001).
64. J. K. Christie, S. N. Taraskin, and S. R. Elliott, J. Non-Cryst. Solids **353**, 2272 (2007).
65. G. Monaco and S. Mossa, PNAS **106**, 16907 (2009).
66. H. Mizuno and A. Ikeda, Phys. Rev. E **98**, 062612 (2018).
67. M. Wyart, L. E. Silbert, S. R. Nagel, and T. A. Witten, Phys. Rev. E **72**, 051306 (2005).
68. O. Narayan and H. Mathur, arXiv:2006.16497.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 554 – 561

Вихревые нити на массивах связанных осцилляторов в режиме нелинейного резонанса

В. П. Рубан[1)]

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

Поступила в редакцию 16 сентября 2020 г.
После переработки 23 сентября 2020 г.
Принята к публикации 23 сентября 2020 г.

Численное моделирование указывает на возможность долговременного существования вихревых структур в виде квантованных нитей на массивах связанных слабодиссипативных нелинейных осцилляторов в пределах трехмерной конечной области под резонансным внешним воздействием, приложенным на границе области. Качественно выяснены диапазоны параметров системы и внешнего сигнала, благоприятные для формирования модуляционно устойчивого квазиоднородного энергетического фона – решающего фактора для реализации данного явления.

DOI: 10.31857/S1234567820200100

Как известно, квантованные вихри являются характерными для нелинейных комплексных волновых полей когерентными структурами – при условии согласования знаков дисперсии и нелинейности [1–7]. Например, уравнение Гросса–Питаевского (дефокусирующее нелинейное уравнение Шредингера с внешним потенциалом) описывает вихри в захваченных Бозе-конденсатах холодных атомов. Эти объекты стали предметом интенсивных исследований (см., в частности, [8–17]).

В последние десятилетия в связи с развитием технологии метаматериалов (в широком смысле этого слова) когерентные структуры изучаются не только в сплошных средах, но и в (квази-) дискретных системах (дискретные солитоны и бризеры, вихри и вихревые солитоны на решетках; см. [18–30] и ссылки там).

Надо отметить, что собственно вихри как дальнодействующие объекты на модуляционно устойчивом фоне составили лишь малую долю в этих исследованиях по сравнению с локализованными структурами, характерными для модуляционно неустойчивых дискретных систем. В частности, традиционные вихри в рамках дискретного нелинейного уравнения Шредингера (ДНУШ) рассматривались в работах [24, 27, 28], а вихри на решетках осцилляторов моделировались численно в недавних работах [29, 30].

При этом в ходе численных экспериментов выяснилось, что диссипация должна быть чрезвычайно мала (требуемая добротность осцилляторов $Q \gtrsim 10^4$), чтобы в автономной дискретной системе можно было успеть пронаблюдать динамику взаимодействующих вихревых структур до того, как система перейдет в линейный режим.

Встает проблема: как ослабить столь непомерное требование высокой добротности? Возможное ее решение – поддерживать энергетический фон системы за счет монохроматической по времени накачки. Чтобы внешнее воздействие не слишком изменяло динамические свойства решетки, накачку следует приложить только к тем узлам, которые находятся на границе системы. А чтобы вихрям было “выгодно” сформироваться и затем продолжить существование внутри массива – начальные фазы вынуждающих сигналов сделать плавно меняющимися от одного граничного узла к другому. Такой рецепт полностью оправдал себя в работе [30], где моделировались двумерные массивы нелинейных электрических колебательных контуров, объединенных емкостными связями в единую сеть, как показано на рис. 1. Слабодиссипативные вихревые структуры в такой модели наблюдались численно в течение многих тысяч периодов колебаний. Энергетический фон при этом был квазиоднородным в пространстве, поскольку осцилляторы находились в режиме нелинейного резонанса (на его верхней ветви), когда амплитуда колебаний в большей степени определяется частотой внешнего периодического воздействия, и в значительно меньшей степени – его амплитудой. Однако, благопрятные для вихрей параметрические области остались неопределенными.

В данной работе делается следующий естественный и важный шаг в изучении подобных систем – путем массированных численных экспериментов вы-

1)e-mail: ruban@itp.ac.ru

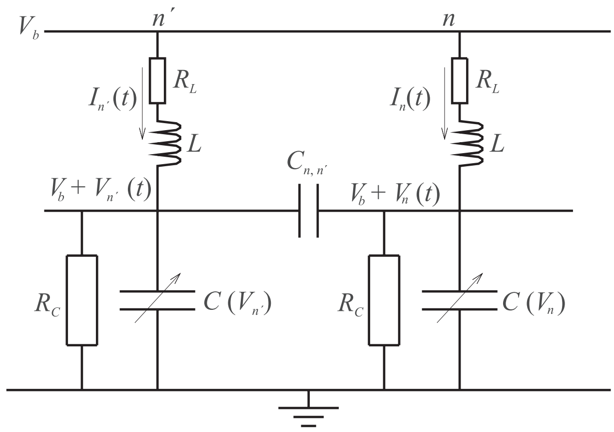


Рис. 1. Идеализированная электрическая схема, соответствующая уравнениям (4)–(5). Показан лишь фрагмент полной сети (две ячейки и связь между ними)

ясняются диапазоны параметров, в пределах которых внешнее воздействие приводит к формированию устойчивого фона и зарождению вихрей, причем уже в трехмерном массиве. Надо сказать, что это первые результаты такого рода. Насколько известно автору, ранее о долгоживущих вихревых нитях на решетках осцилляторов в режиме нелинейного резонанса в научных публикациях не сообщалось.

Чтобы пояснить суть задачи, удобно сначала рассмотреть ДНУШ как более простую модель. Слабодиссипативное ДНУШ с монохроматической накачкой имеет вид (см., например, [31, 32]),

$$i(\dot{A}_n + \gamma A_n) = (-\delta + g|A_n|^2)A_n + \\ + \frac{1}{2}\sum_{n'} c_{n,n'}(A_n - A_{n'}) + f_n, \qquad (1)$$

где $A_n(t)$ – неизвестные комплекснозначные функции на узлах $n = (n_1, n_2, n_3)$ трехмерной решетки, γ – малый темп линейного затухания, δ – отстройка частоты накачки от линейного резонанса, g – нелинейный коэффициент, $c_{n,n'}$ – (действительная) матрица связей (обычно между ближайшими соседями), f_n – комплексные амплитуды внешнего воздействия.

Хорошо известно, что имеется родственное отношение между ДНУШ и различными системами связанных нелинейных осцилляторов (см., например, [28, 29]), поскольку многие осцилляторные системы в слабонелинейном пределе сводятся к ДНУШ для комплексных огибающих $A_n(t)$ канонических комплексных переменных $a_n = \sqrt{S_n}\exp(i\Theta_n) = A_n(t)\exp(-i[\omega_0 + \delta]t)$, где S_n и Θ_n – переменные действие-угол для отдельно взятого осциллятора, а ω_0 – частота колебаний в пределе малых амплитуд. Фаза Θ при обходе по замкнутому контуру, составленному из переходов между соседними узлами, может относительно небольшими изменениями набирать приращение, кратное 2π, образуя тем самым дискретный квантованный вихрь. Что характерно, переменная S при этом не обязана обращаться в ноль ни на одном из узлов в коре вихря. Таково принципиальное отличие дискретных вихрей от непрерывных.

Будет ли система способна поддерживать вихри, зависит от соотношения знаков g и $c_{n,n'}$. В простейшем случае одинаковых взаимодействий между ближайшими соседями на правильной решетке, знаки должны совпадать. Но одного этого условия оказывается мало, чтобы в системе в течение длительного времени существовали вихревые структуры. Предположим, что у нас имеется конечная система, составленная из осцилляторов на кубической решетке в пределах некоторой трехмерной области $\mathcal{D}$. Пусть для простоты все ненулевые параметры f_n имеют одинаковую амплитуду f, но различные фазы φ_n. Даже без учета формы области, набора параметров φ_n и амплитуды f, мы имеем два существенных коэффициента: γ/δ и c/δ (коэффициент g/δ в рамках ДНУШ можно обратить в единицу изменением масштаба переменной A). Возникающая с течением времени картина в сильной мере зависит от этих чисел. Важно еще заметить, что в исходных полностью нелинейных уравнениях движения осцилляторов параметр δ и аналоги параметров γ и c важны каждый по отдельности, поскольку там могут иметь место параметрические резонансы, не учитываемые уравнением (1) и разрушающие квазиоднородный энергетический фон. Фактически это нелинейные волновые процессы типа $p \to 2$, где p – число распадающихся волн с нулевым квазиимпульсом. Появление таких резонансов при увеличении параметра связи c и соответствующие неустойчивые моды определяются спецификой системы. Например, для схемы на рис. 1 свойства основных параметрических резонансов будут существенно разными в зависимости от типа используемых нелинейных емкостей. Для решетки Клейна–Гордона

$$\ddot{q}_n + 2\gamma\dot{q}_n + q + q^3 + \sum_{n'} c_{n,n'}(q_n - q_{n'}) = \\ = F_n\cos([1+\delta]t + \varphi_n)$$

ответ будет отличаться еще сильнее из-за качественно иного закона дисперсии линейных возмущений.

Понятно, что пройти достаточно подробно диапазоны всех параметров в численных симуляциях – дело тяжелое. Поэтому на первом этапе исследований имеет смысл зафиксировать, например, форму области, фазы φ_n и отстройку частоты δ. Остаются параметры γ, c и f. Для каждого из них следует взять несколько значений. Таким образом, для получения более-менее ясной картины необходимо провести несколько десятков численных экспериментов. Собственно говоря, такая работа и была проделана автором, но не в рамках ДНУШ, а в рамках электрической модели, представленной на рис. 1. Тем самым данное исследование находится в русле моделирования базовых нелинейных явлений на примере электрических сетей [33–46]. Но представленные здесь качественные результаты выходят за рамки конкретной модели, поскольку аналогичные вихревые структуры были отмечены автором и на решетке Клейна–Гордона.

Итак, рассмотрим электрическую схему, составленную из нелинейных колебательных контуров с емкостными связями между ними, как показано на рис. 1. Связь между этой схемой и уравнением (1) обсуждалась в недавней работе автора [29]. Состояние системы описывается напряжениями $V_n(t)$, а также токами $I_n(t)$ через катушки индуктивности L. Нелинейными элементами здесь являются емкости $C(V_n)$. В данной работе использовались два типа функциональной зависимости емкости от напряжения. Первая имеет вид

$$C(V_n) = C_0(1 + V_n^2/V_*^2), \tag{2}$$

с некоторым параметром V_*. Такая симметричная зависимость характерна для конденсаторов с диэлектрическими пленками [47, 48]. Другая зависимость свойственна варакторным диодам, которые (при наличии обратного напряжения смещения V_b и в параллельном соединении с обычным конденсатором) приближенно описываются подгоночной формулой (см., например, [49])

$$C(V_n) = C_0\Big[\mu + (1-\mu)/(1+V_n/V_*)^\nu\Big], \tag{3}$$

где $0 < \mu < 1$ учитывает параллельно подключенный простой конденсатор, а подгоночный параметр диода ν зависит от технологии изготовления и обычно лежит в диапазоне $0.3 \lesssim \nu \lesssim 6.0$. Конкретно здесь брались значения $\mu = 0.5$, $\nu = 2$.

Разумеется, формулы (2) и (3), да и саму схему на рис. 1 не следует воспринимать слишком буквально, поскольку трехмерный массив должен содержать настолько большое число узлов, что вряд ли он может быть собран из обычных радиотехнических элементов. Это было бы слишком громоздко и дорого. Скорее можно думать о некой миниатюрной трехмерной структуре с электрическими свойствам, близкими к нашей идеализированной схеме.

Запасенная электростатическая энергия на конденсаторе (дополнительная по сравнению с состоянием $V_n = 0$) есть $W(V_n) = \int_0^{V_n} C(u)u du$.

Диссипативные элементы схемы – малое активное сопротивление катушки $R_L \ll \sqrt{L/C_0}$, а также большое сопротивление утечки конденсатора $R_C \gg \gg \sqrt{L/C_0}$. Безразмерный коэффициент затухания

$$\frac{\gamma}{\omega_0} = \Big(R_L\sqrt{C_0/L} + R_C^{-1}\sqrt{L/C_0}\Big)/2 = (\gamma_L + \gamma_C)/2.$$

Кроме того, к тем осцилляторам, которые расположены на границе области, подведено переменное по времени напряжение $\mathcal{E}_n(t)$. Соответствующая система уравнений движения имеет вид

$$C(V_n)\dot V_n + \sum_{n'} C_{n,n'}(\dot V_n - \dot V_{n'}) + V_n/R_C = I_n, \tag{4}$$

$$L\dot I_n + V_n + R_L I_n = \mathcal{E}_n(t) = F_n\cos([\omega_0+\delta]t + \varphi_n). \tag{5}$$

В отсутствие связей и диссипации каждый осциллятор обладал бы законом сохранения энергии $\varepsilon_n = = LI_n^2/2 + W(V_n)$.

При вычислениях использовались обезразмеренные переменные, соответствующие значениям $L = 1$, $C_0 = 1$, $V_* = 1$. Частота малых колебаний при этом $\omega_0 = 1$, а их период $T_0 = 2\pi$. Уравнения (4) разрешались относительно $\dot V_n$ подходящей итеративной процедурой, а продвижение по времени осуществлялось по методу Рунге–Кутта 4-го порядка.

В качестве области $\mathcal{D}$ была выбрана полость эллипсоида $x^2 + y^2 + 2.5z^2 < 3$, причем шаг кубической решетки $h = 0.06$ либо $h = 0.04$ определял общее количество степеней свободы системы. Сигнал накачки подавался на те узлы решетки, которые попадают в тонкую оболочку $0 < (3 - x^2 - y^2 - 2.5z^2) < 2h$. Фазы накачки при этом определялись простой зависимостью $\varphi_{n_1,n_2,n_3} = -3.0\pi h n_3 = -3.0\pi z_n$.

Диссипативные параметры γ_L и γ_C для простоты брались равными, с произвольно наложенным условием $\gamma \geqslant 0.001$, что соответствует ослабленному требованию по добротности в сравнении со свободно затухающим режимом, рассмотренным в работе [29].

Отстройка частоты внешнего сигнала была фиксирована значением $\delta = -0.1$ при использовании формулы (3). Знак отстройки отрицателен в соответствии с отрицательностью нелинейного коэффициента и констант связи $c_{n,n'} = -C_{n,n'}/C_0$ (см. подробности в [29, 30]). Для краткости мы далее под символом c будем иметь в виду положительную величину $C_{n,n'}/C_0$.

Здесь важно сказать, что, в отличие от систем с нелинейностью (3), где распады $1 \to 2$ заведомо идут при $c > 1/4$ в пределе слабого энергетического фона, а в существенно нелинейном режиме и при меньших значениях c, использование симметричной зависимости (2) приводит к отсутствию трехволновых взаимодействий. Поэтому допустимы увеличенные значения параметров. Например, бралась константа связи вплоть до $c = 2$, отстройка вплоть до $\delta = -0.32$, затухание вплоть до $\gamma = 0.01$. И даже при таком относительно сильном затухании в ряде случаев наблюдались вихревые нити.

В качестве начального бралось слегка возмущенное квазиоднородное состояние. Система его "забывала" через несколько сотен периодов. В течение этого времени (при "благоприятных" наборах параметров) на границе области зарождались вихревые нити, часто в форме колец, которые затем перемещались в объем и там взаимодействовали между собой. Нити в большей или меньшей степени деформировались, их симметрия обычно нарушалась и возникали структуры с различной геометрией. Разумеется, картина при этом не была стационарной, поскольку вблизи оси эллипсоида вихри перемещались главным образом вниз, а на периферии – вверх. Но характерные статистические свойства вихрей в большинстве случаев оказывались достаточно определенными и существенно зависящими от параметров.

Примеры наиболее типичных вихревых структур представлены на рис. 2–6. Общими для всех этих рисунков являются формула (3), а также значения параметров $h = 0.06$ и $\delta = -0.1$. Различающиеся параметры указаны в подписях к рисункам. Для достаточно полной визуализации мгновенного вихревого состояния обычно использованы три картинки. На одной показан энергетический профиль в сечении эллипсоида плоскостью $y = 0$. На другой картинке показаны величины $\Phi_n = \mathrm{arctg}(I_n/V_n)$, которые в качественном отношении подобны каноническим фазам Θ_n. На третьей картинке показана форма вихревых нитей в проекции на плоскость (x, y), причем цветом отмечена соответствующая z-координата.

На рисунке 2 мы видим достаточно развитую и не вполне упорядоченную вихревую структуру, интенсивно взаимодействующую с границей. Такие получаются при не слишком больших амплитудах накачки (в данном случае это $F = 0.06$). При еще меньших амплитудах требуемый энергетический фон вообще не формируется (как, например, при $F = 0.04$; на рисунках не представлено).

При усилении накачки до $F = 0.12$ наблюдается более "строгая" и "спокойная" конфигурация из трех близко расположенных вихревых колец, как показано на рис. 3. Кольца значительно деформированы и находятся в режиме "чехарды" (*leapfrogging*). Надо отметить, что при некоторых других наборах пара-

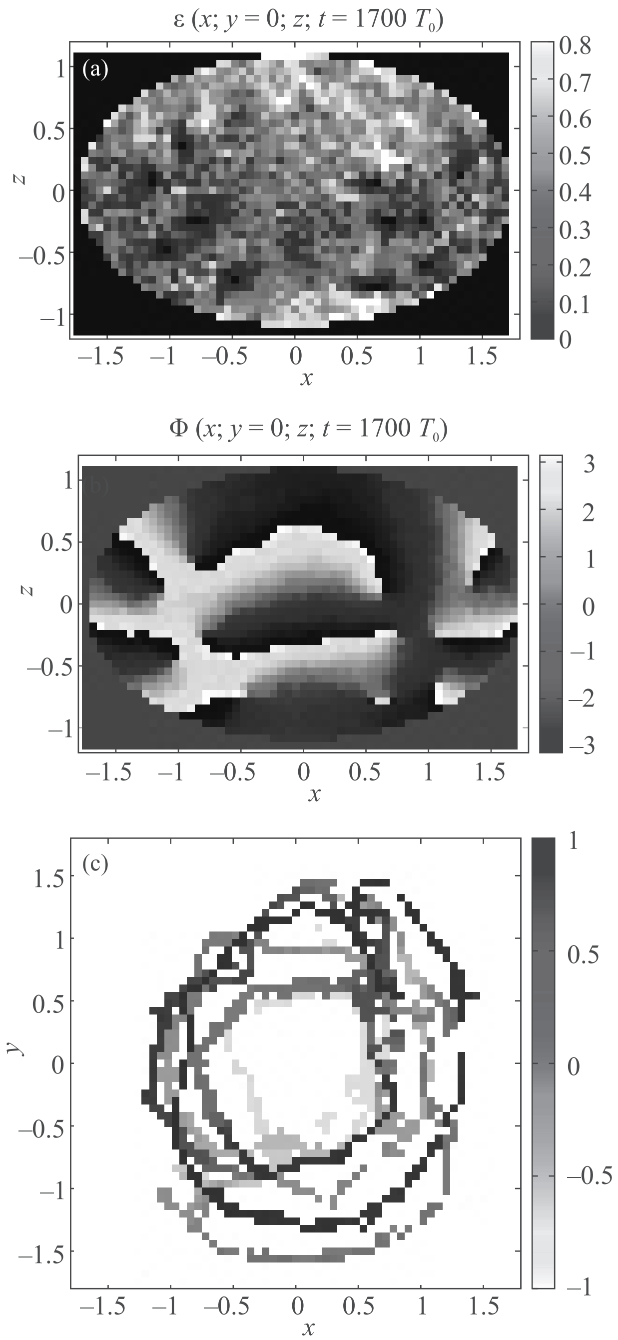


Рис. 2. (Цветной онлайн) Вихревая конфигурация, образовавшаяся в момент времени $t = 1700T_0$ при значениях параметров $\gamma_L = \gamma_C = 0.01$, $c = 0.1$, $F = 0.06$. Каждый цветной квадратик-"пиксель" соответствует отдельному осциллятору на кубической решетке. Показаны: (a) – энергии осцилляторов в слое $y = 0$; (b) – их фазы в слое $y = 0$; (c) – проекция вихревых нитей на плоскость (x, y), причем цветом здесь указана z-координата тех узлов решетки, в которых $\varepsilon < 0.125$

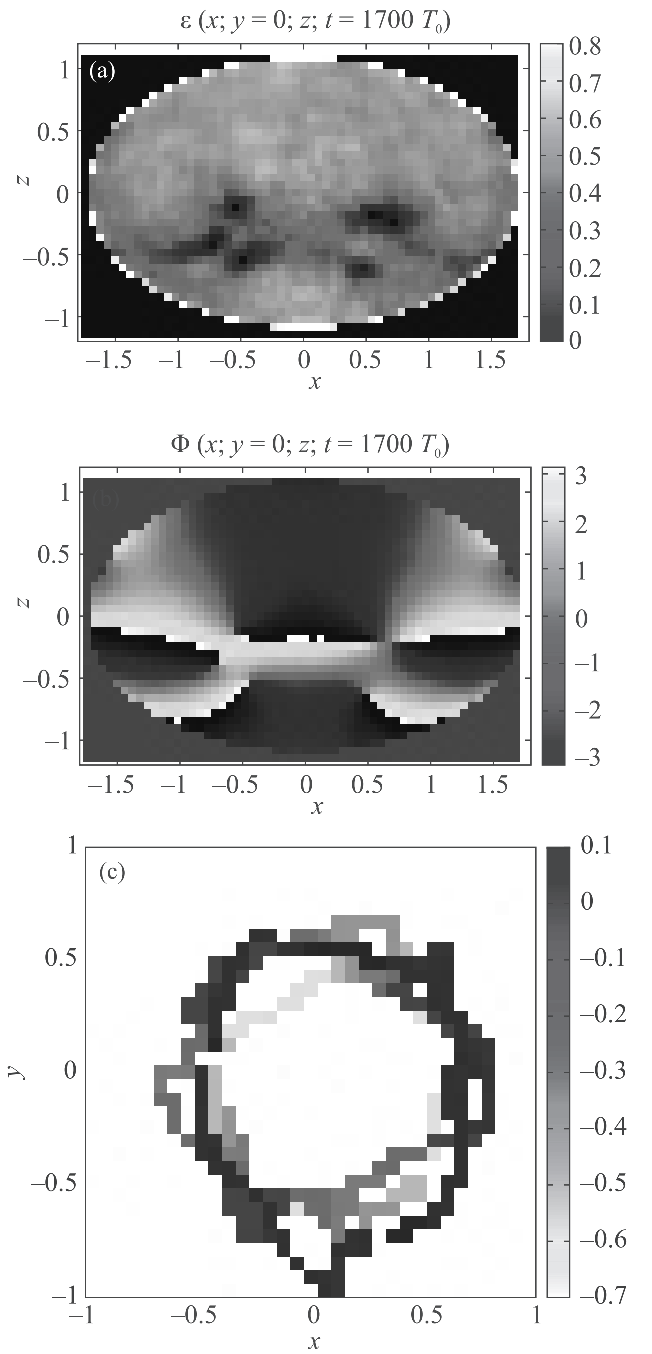


Рис. 3. (Цветной онлайн) Вихревая структура из трех колец, сформировавшаяся при значениях параметров $\gamma_L = \gamma_C = 0.01$, $c = 0.1$, $F = 0.12$. Показаны: (a) – энергетический профиль в слое $y = 0$; (b) – фазы осцилляторов в слое $y = 0$; (c) – (x, y)-проекция вихревых нитей

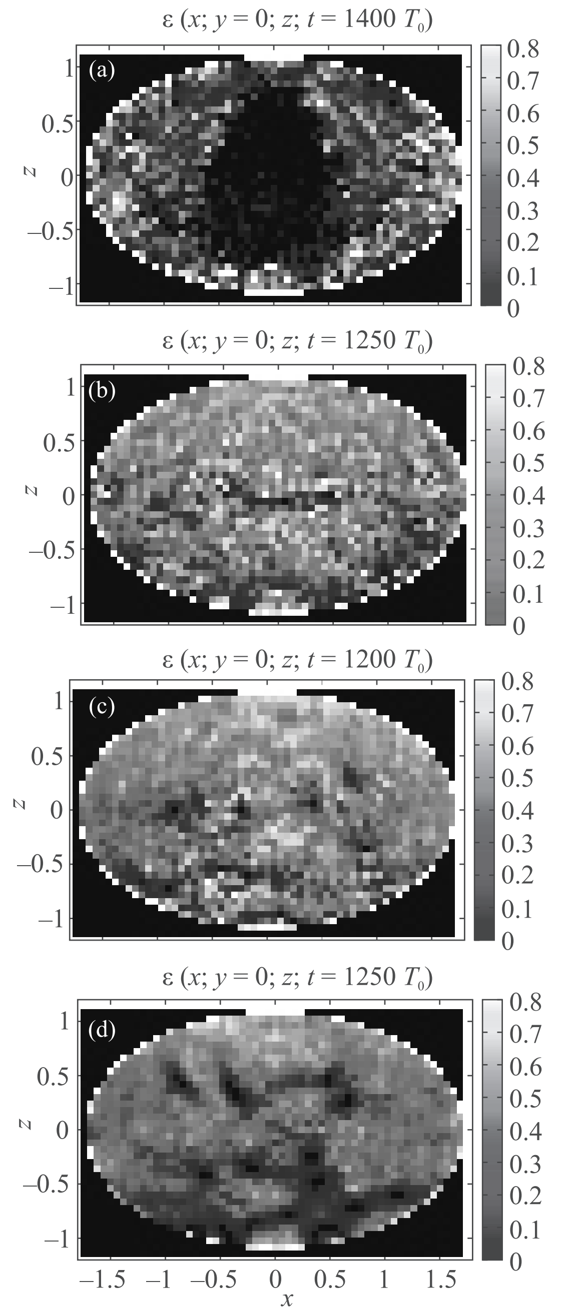


Рис. 4. (Цветной онлайн) Энергии осцилляторов в слое $y = 0$ при различных значениях констант связи: (a) – $c = 0.02$; (b) – $c = 0.03$; (c) – $c = 0.06$; (d) – $c = 0.12$. Остальные параметры: $\gamma_L = \gamma_C = 0.01$, $F = 0.12$. При слишком малых c фон не получается квазиоднородным. В случае (b) вихри настолько тонкие, что их присутствие почти не заметно. Эти рисунки следует сравнить с рис. 3a

метров наблюдались аналогичные структуры из четырех колец.

При увеличении F до значения 0.16 (этот случай не проиллюстрирован) мы наблюдали бы попеременно два либо три сильно деформированных и подвижных кольца на достаточном удалении друг от друга. При $F = 0.20$ (этот случай также не представлен на рисунках) результатом были бы два тесно распо-

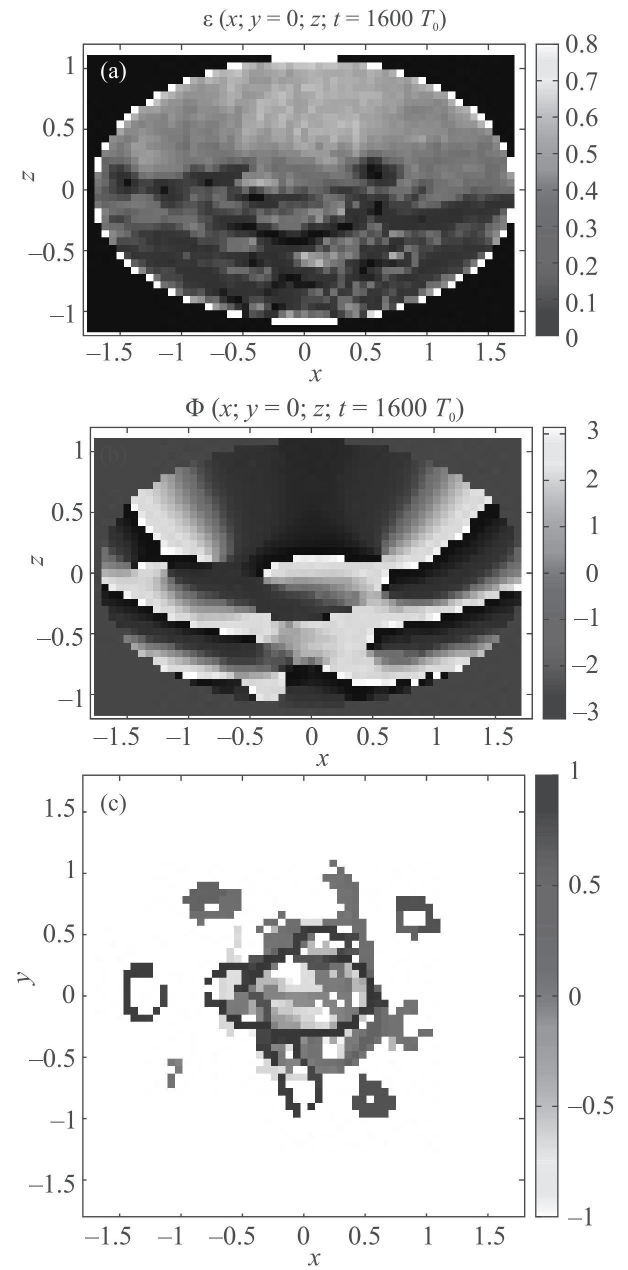


Рис. 5. (Цветной онлайн) Вихревая конфигурация, образовавшаяся при значениях параметров $\gamma_L = \gamma_C = 0.002$, $c = 0.1$, $F = 0.20$: (a) – энергии осцилляторов в слое $y = 0$; (b) – их фазы в слое $y = 0$; (c) – (x, y)-проекция вихревых нитей. Видны небольшие вихревые колечки на периферии

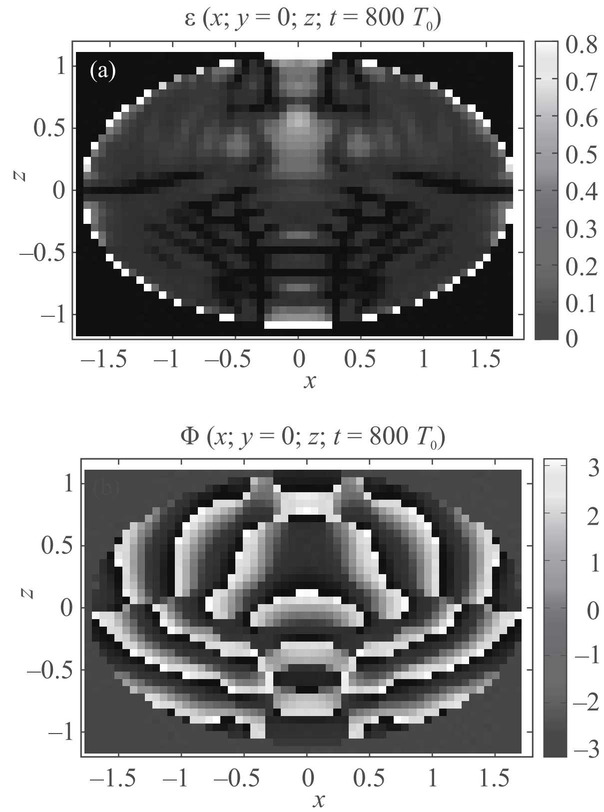


Рис. 6. (Цветной онлайн Когерентная диссипативная структура, образовавшаяся при значениях параметров $\gamma_L = \gamma_C = 0.006$, $c = 0.1$, $F = 0.20$: (a) – энергии осцилляторов в слое $y = 0$; (b) – их фазы в слое $y = 0$. В данном примере структура состоит из вихрей в комбинации с темными солитонами

ложенных кольца, в целом похожих на кольца при $F = 0.12$. Дальнейшее усиление накачки начинает портить фон (также не проиллюстрировано).

Рисунок 4 дает представление о том, как изменение параметра c влияет на вихревые структуры. Из рисунка 4a видно, что слишком слабые связи не способны передавать достаточный поток энергии, чтобы с учетом диссипации "заполнить" ею всю область. Заполнение происходит только в некотором, довольно четко выраженном слое вблизи границы, а центральная часть оказывается в режиме дефицита энергии. Надо сказать, что толщина указанного слоя при заданном c зависит в основном от диссипативного параметра γ и в малой мере – от амплитуды накачки. Уже небольшого увеличения c оказывается достаточно, чтобы сформировать квазиоднородный фон (см. рис. 4b). Вихри при этом оказываются "сверхдискретными", так как существенного понижения энергии осцилляторов вблизи оси вихря практически не происходит. Дальнейшее усиление связей делает ядра вихрей все заметнее и толще, как это видно из рис. 4c и d, пока при $c \approx 0.14$ фон не начинает портиться (не показано) за счет ранее упоминавшихся параметрических процессов $1 \to 2$.

Наконец, рисунки 5 и 6 демонстрируют, что происходит с вихрями при увеличении темпа диссипации. Так, при увеличении γ вдвое по сравнению с рис. 2–4, появляется новая черта в динамике – на периферии системы в объеме рождаются маленькие вихревые колечки (см. рис. 5c), которые затем дрейфуют по направлению к оси и там присоединяются к диссипируемой основной структуре.

Увеличение γ до значения 0.06 кардинально меняет всю картину, как показано на рис. 6. Вместо вихревых нитей мы имеем здесь почти стационарную комбинированную структуру, в которой присутствуют темные солитоны. Энергетический фон в целом понижен и далек от однородного. Дальнейшее усиление диссипации разрушает его полностью.

Таким образом, в данной работе показан новый режим существования квантованных вихревых нитей в слабодиссипативных дискретных системах. Выяснены сценарии, по которым этот режим нарушается при изменении основных параметров системы.

1. L. M. Pismen, *Vortices in Nonlinear Fields*, Clarendon, Oxford (1999).
2. C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge University Press, Cambridge (2002).
3. L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press, Oxford (2003).
4. P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and R. Carretero-González, *The Defocusing Nonlinear Schrödinger Equation: From Dark Solitons and Vortices to Vortex Rings*, SIAM, Philadelphia (2015).
5. B. Y. Rubinstein and L. M. Pismen, Physica D **78**, 1 (1994).
6. A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, Phys. Rev. A **62**, 063617 (2000).
7. A. L. Fetter, Rev. Mod. Phys. **81**, 647 (2009).
8. V. P. Ruban, Phys. Rev. E **64**, 036305 (2001).
9. J. Garcia-Ripoll and V. Perez-Garcia, Phys. Rev. A **64**, 053611 (2001).
10. P. Rosenbusch, V. Bretin, and J. Dalibard, Phys. Rev. Lett. **89**, 200403 (2002).
11. A. Aftalion and I. Danaila, Phys. Rev. A **68**, 023603 (2003).
12. T.-L. Horng, S.-C. Gou, and T.-C. Lin, Phys. Rev. A **74**, 041603(R) (2006).
13. В. А. Миронов, Л. А. Смирнов, Письма в ЖЭТФ **95**, 627 (2012).
14. S. Serafini, L. Galantucci, E. Iseni, T. Bienaime, R. N. Bisset, C. F. Barenghi, F. Dalfovo, G. Lamporesi, and G. Ferrari, Phys. Rev. X **7**, 021031 (2017).
15. C. Ticknor, W. Wang, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A **98**, 033609 (2018).
16. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **108**, 638 (2018).
17. C. Ticknor, V. P. Ruban, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A **99**, 063604 (2019).
18. B. A. Malomed and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. E **64**, 026601 (2001).
19. P. G. Kevrekidis, B. A. Malomed, and Yu. B. Gaididei, Phys. Rev. E **66**, 016609 (2002).
20. P. G. Kevrekidis, B. A. Malomed, D. J. Frantzeskakis, and R. Carretero-Gonzalez, Phys. Rev. Lett. **93**, 080403 (2004).
21. P. G. Kevrekidis, B. A. Malomed, Zh. Chen, and D. J. Frantzeskakis, Phys. Rev. E **70**, 056612 (2004).
22. D. E. Pelinovsky, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, Physica D **212**, 20 (2005).
23. F. Lederer, G. I. Stegeman, D. N. Christodoulides, G. Assanto, M. Segev, and Ya. Silberberg, Phys. Rep. **463**, 1 (2008).
24. J. Cuevas, G. James, P. G. Kevrekidis, and K. J. H. Law, Physica D **238**, 1422 (2009).
25. Ya. V. Kartashov, B. A. Malomed, and L. Torner, Rev. Mod. Phys. **83**, 247 (2011).
26. M. Lapine, I. V. Shadrivov, and Yu. S. Kivshar, Rev. Mod. Phys. **86**, 1093 (2014).
27. J. J. Bramburger, J. Cuevas-Maraver, and P. G. Kevrekidis, Nonlinearity **33**, 2159 (2020).
28. V. P. Ruban, Phys. Rev. E **100**, 012205 (2019).
29. V. P. Ruban, Phys. Rev. E **102**, 012204 (2020).
30. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **111**, 455 (2020).
31. I. V. Shadrivov, A. A. Zharov, N. A. Zharova, and Yu. S. Kivshar, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **4**, 69 (2006).
32. Н. Н. Розанов, Н. В. Высотина, А. Н. Шацев, И. В. Шадривов, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **93**, 826 (2011).
33. R. Hirota and K. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **28**, 1366 (1970).
34. R. Hirota and K. Suzuki, Proc. IEEE **61**, 1483 (1973).
35. A. C. Hicks, A. K. Common, and M. I. Sobhy, Physica D **95**, 167 (1996).
36. A. C. Singer and A. V. Oppenheim, International Journal of Bifurcation and Chaos **9**(4), 571 (1999).
37. D. Cai, N. Gronbech-Jensen, A. R. Bishop, A. T. Findikoglu, and D. Reagor, Physica D **123**, 291 (1998).
38. T. Kofane, B. Michaux, and M. Remoissenet, J. Phys. C: Solid State Phys. **21**, 1395 (1988).
39. P. Marquie, J. M. Bilbault, and M. Remoissenet, Phys. Rev. E **49**, 828 (1994).
40. P. Marquie, J. M. Bilbault, and M. Remoissenet, Phys. Rev. E **51**, 6127 (1995).
41. V. A. Makarov, E. del Rio, W. Ebeling, and M. G. Velarde, Phys. Rev. E **64**, 036601 (2001).
42. D. Yemele, P. Marquie, and J. M. Bilbault, Phys. Rev. E **68**, 016605 (2003).
43. L. Q. English, F. Palmero, A. J. Sievers, P. G. Kevrekidis, and D. H. Barnak, Phys. Rev. E **81**, 046605 (2010).

44. F. Palmero, L. Q. English, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. E **84**, 026605 (2011).
45. L. Q. English, F. Palmero, J. F. Stormes, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. E **88**, 022912 (2013).
46. F. Palmero, L. Q. English, X.-L. Chen, W. Li, J. Cuevas-Maraver, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. E **99**, 032206 (2019).
47. C. J. G. Meyers, C. R. Freeze, S. Stemmer, and R. A. York, Appl. Phys. Lett. **109**, 112902 (2016).
48. Y. Shen, P. G. Kevrekidis, G. P. Veldes, D. J. Frantzeskakis, D. DiMarzio, X. Lan, and V. Radisic, Phys. Rev. E **95**, 032223 (2017).
49. А. П. Слобожанюк, П. В. Капитанова, И. В. Шадривов, П. А. Белов, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **95**, 693 (2012).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 8, с. 562 – 567

Наноструктурированные микросферы на основе нанооксида титана с функцией накопления заряда для пролонгированного катализа

Е. А. Константинова[+*×], *А. А. Миннеханов*[*1)], *Е. В. Кытина*[+], *Г. В. Трусов*[°]

[+]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия*

[*]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

[×]*Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия*

[°]*Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", 119049 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 21 сентября 2020 г.
После переработки 22 сентября 2020 г.
Принята к публикации 22 сентября 2020 г.

Синтезированы наногетероструктуры на основе оксидов титана, ванадия, молибдена и вольфрама, ассемблированные в форме микросфер, и исследованы их структурные и фотоэлектронные свойства. Показано, что скорость фотокатализа существенно увеличивается при переходе к микросферам, состоящим из нескольких оксидов металлов. Выявлена связь между данной величиной, количеством парамагнитных центров V^{4+} и временем их релаксации после выключения освещения. Установлено, что пространственное разделение фотовозбужденных носителей заряда между различными нанооксидами в составе гетероструктур приводит к накоплению заряда в них и пролонгированному катализу, что свидетельствует об их перспективности для практического использования в качестве основного материала фотокаталитических фильтров для очистки окружающей среды.

DOI: 10.31857/S1234567820200112

Наноструктурированные материалы в течение нескольких десятилетий постоянно находятся в центре внимания исследователей благодаря своим уникальным свойствам [1, 2]. Среди них можно выделить полупроводниковые оксиды металлов, представляющие несомненный интерес как с фундаментальной точки зрения, так и для прикладных целей [3, 4]. Так, например, неослабевающий интерес к наночастицам диоксида титана (TiO_2) на протяжении многих лет обусловлен возможностью его использования в качестве основного компонента для создания фотокаталитических систем нового поколения [5]. Это связано как с высокой доступностью данного фотокатализатора, так и с его безопасностью для здоровья человека. В то же время, хорошо известен главный недостаток TiO_2 – большая ширина запрещенной зоны ($E_g \approx 3.2$ эВ для анатаза), что требует использования ультрафиолетового (УФ) излучения для его эффективной работы. Для контроля E_g прибегают либо к изменению структуры TiO_2 (например, путем формирования мезокристаллов [6, 7]), либо к вариации его химического состава путем легирования азотом, углеродом, хромом и другими атомами неметаллов и металлов [8–10]. В последнее время в научной среде набирает популярность другая стратегия улучшения фотоактивности TiO_2, а именно – пролонгированное действие катализаторов на его основе в темноте при условии предварительного облучения УФ или видимым светом. Такой эффект достигается путем использования наногетероструктур типа "TiO_2/оксид металла", что делает возможным пространственное разделение носителей заряда – электронов и дырок – в них и их последующее сохранение при подавленной рекомбинации [11–13]. В работах [14–16] получены и исследованы представляющие интерес для практических приложений фотокатализаторы на основе гетеропереходов TiO_2/MoO_3 и TiO_2/WO_3 в форме микросфер. Исследования по совершенствованию методов синтеза фотокатализаторов на основе TiO_2 до сих пор активно продолжаются с целью получения более энергоэффективных и стабильных структур. В данной работе получены и исследованы наноструктурированные микросферы, состоящие из большого числа оксидов металлов в различной комбинации ($TiO_2/WO_3/V_2O_5$, $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$), в которых наблюдается рост скорости фотокаталитических реакций и пролонгированное каталитическое действие после прекращения освещения по сравнению

1)e-mail: minnekhanov@physics.msu.ru

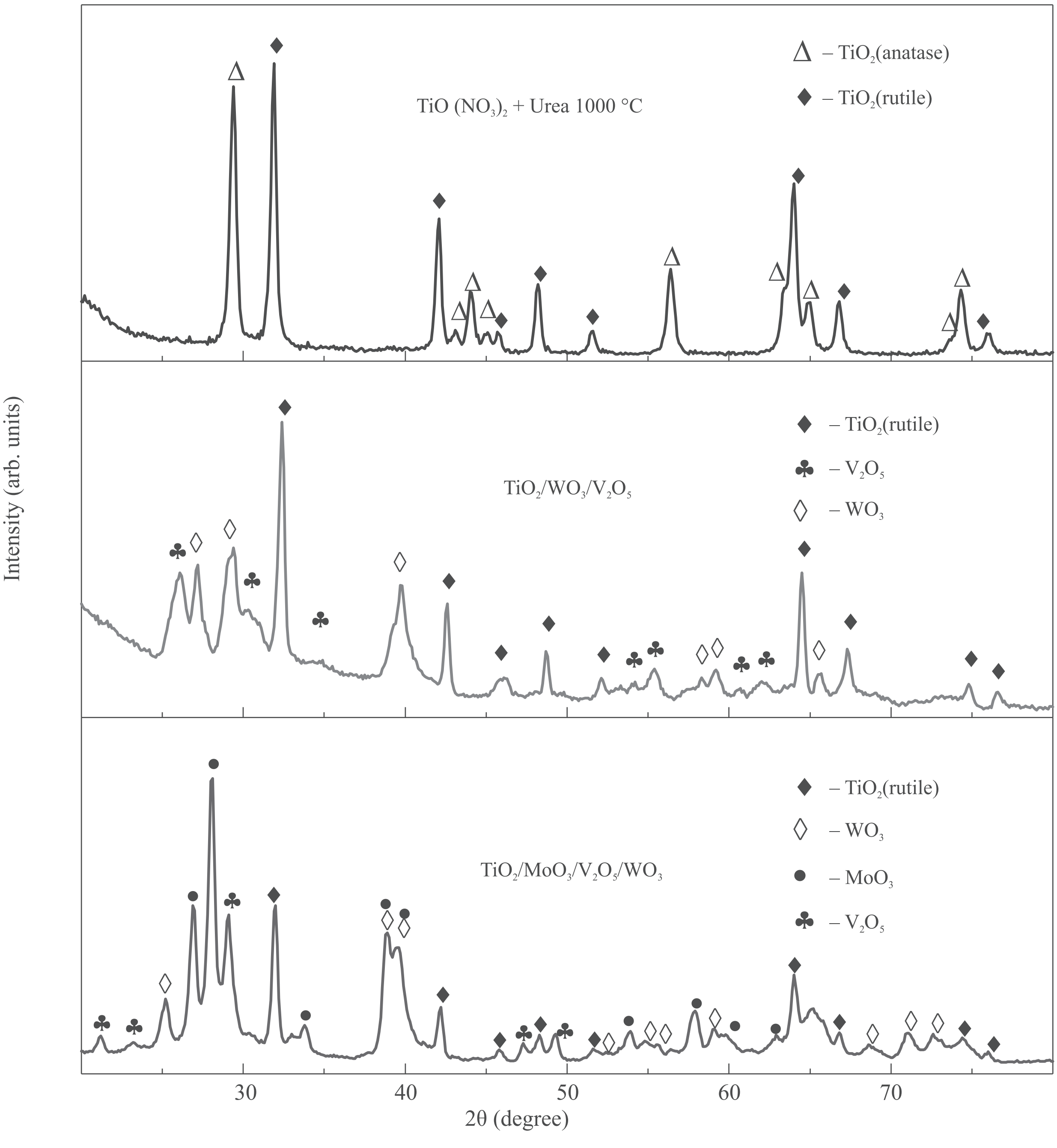


Рис. 1. (Цветной онлайн) Дифрактограммы исследуемых микросфер

с мономикросферами (состоящими только из TiO_2), что важно с точки зрения энергосбережения. Впервые нами установлен факт накопления фотоиндуцированного заряда в полученных микросферах с помощью разработанного нами метода на основе спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), о котором мы сообщали в работе [13].

Для формирования указанных микросфер использовался усовершенствованный нами метод пиролиза аэрозолей, подробно описанный в работах [16, 17]. Также для сравнения были синтезированы микросферы, состоящие только из наночастиц TiO_2. Установка состояла из регулятора расхода газа РРГ-10, ультразвукового распылителя ИН-8 и лабораторной трубчатой печи СУОЛ-0,4.4/12-М2-У4.2 с кварцевым реактором и фильтром Шотта. Температура отжига образцов составляла 1000 °C. В качестве прекурсоров металлов использовались нитрат тита-

Таблица 1. Средний диаметр наночастиц оксидов металлов в микросферах и их удельная площадь поверхности S. A – анатаз, R – рутил

Образец	d_{TiO2}, A/R, нм	d_{MoO3}, нм	d_{WO3}, нм	d_{V2O5}, нм	S, м^2/г
TiO_2	$24 \pm 2/28 \pm 3$	–	–	–	55 ± 6
$TiO_2/WO_3/V_2O_5$	$-/32 \pm 3$	–	12 ± 1	11 ± 1	78 ± 7
$TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$	$-/30 \pm 3$	23 ± 2	18 ± 2	21 ± 2	58 ± 6

нила, паравольфрамат аммония, парамолибдат аммония, метаванадат аммония. В качестве легирующей азотом добавки использовалась мочевина.

Удельную площадь поверхности образцов определяли по методу БЭТ (Брунауэр–Эммет–Теллер) с использованием анализатора Chemisorb 2750 (Micromeritics). Дифракцию рентгеновских лучей (XRD) на порошках измеряли при помощи дифрактометра ДРОН-4 (CuK$_\alpha$ излучение). Расчет ОКР производился по формуле Шеррера, приборное уширение составило 0.09°. Регистрация спектров ЭПР проводилась в X-диапазоне на спектрометре Bruker ELEXSYS-500 (ЦКП МГУ им. М. В. Ломоносова) при температуре 300 К. Микросферы освещались непосредственно в резонаторе спектрометра в диапазоне 450–900 нм. В качестве источника света использовалась галогеновая лампа. Интенсивность освещения составляла 40 мВт $\cdot$ см$^{-2}$. Для изучения фотокаталитической активности (окислительной способности) образцов на их поверхность наносился краситель Родамин 6Ж из водного раствора. Изменение концентрации красителя определяли по величине диффузного отражения R на длине волны 530 нм (максимум поглощения адсорбированного красителя). Далее R пересчитывалось в величину, пропорциональную поверхностной концентрации ($\sim (1-R)^2/2R$), по методу Кубелки–Мунка [18].

Данные, полученные методом XRD (рис. 1), свидетельствуют о том, что исследуемые образцы представляют собой ансамбли нанокристаллов различного размера и фазового состава. При этом диоксид титана имеет две фазы – анатаз и рутил. Размеры наночастиц, рассчитанные по уширению линий в дифрактограммах, представлены в таблице 1. Также в таблице 1 приведена удельная площадь поверхности образцов.

Перейдем к обсуждению результатов по фотокатализу на исследуемых структурах. Кинетики фотокатализа были получены при облучении микросфер светом в диапазоне длин волн $\Delta\lambda = 450-900$ нм (рис. 2). Видно, что в образцах TiO_2 процесс деградации красителя прекращался после выключения освещения ($t = 20$ мин). Анализ приведенных зависимостей показывает, что в серии микросфер

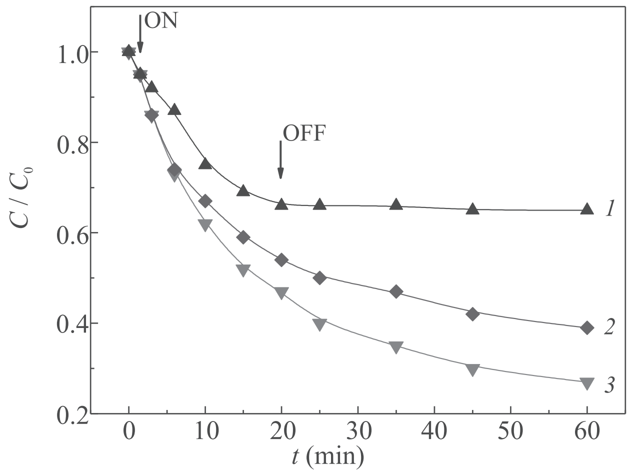


Рис. 2. (Цветной онлайн) Кинетики фотокатализа для образцов: TiO_2 (*1*), $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$ (*2*), $TiO_2/WO_3/V_2O_5$ (*3*) при фотовозбуждении в видимом диапазоне спектра. Стрелками показаны моменты включения ($t = 0$) и выключения освещения ($t = 20$ мин). C_0 – концентрация красителя в момент времени $t = 0$, C – концентрация красителя в момент времени t. Образцы легированы азотом

TiO_2, $TiO_2/WO_3/V_2O_5$, $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$ трехсоставные микросферы обладают наибольшей фотоактивностью в видимом диапазоне спектра. Микросферы из четырех оксидов начинают уступать трехсоставным, вероятно, вследствие роста конкурирующего процесса – рекомбинации носителей заряда на дефектах.

После выключения освещения ($t = 20$ мин) процесс деградации красителя в комбинированных микросферах продолжался (рис. 2), что свидетельствует о подавлении рекомбинации фотовозбужденных электронов и дырок. Мы предполагаем, что это происходит вследствие перераспределения фотогенерированных в данном оксиде металла носителей заряда (например, в TiO_2, как наиболее фотоактивном) между другими оксидами в составе микросфер. Наиболее интенсивный темновой катализ наблюдался на гетероструктурах $TiO_2/WO_3/V_2O_5$. Из таблицы 1 следует, что удельные площади поверхности всех исследуемых образцов отличаются друг относительно друга незначительно, что позволяет сделать вывод

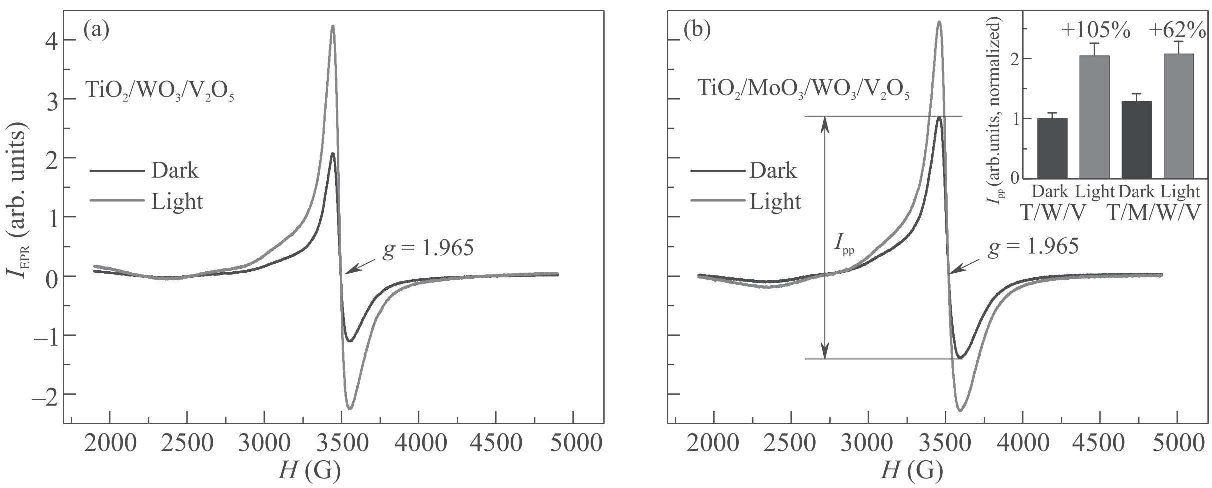


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Спектры ЭПР $TiO_2/WO_3/V_2O_5$ микросфер в темноте и при освещении. (b) – Спектры ЭПР $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$ структур в темноте и при освещении. На вставке приведены интенсивности спектров "от пика до пика" I_{pp} для исследуемых образцов

о ключевой роли гетеропереходов (интерфейсов), а также дефектов кристаллической решетки в фотокаталитической активности структур подобного составного типа. Большая часть данных дефектов в полупроводниковых нанооксидах находится в парамагнитном состоянии, поэтому образцы были изучены методом ЭПР (рис. 3).

Как видно из рис. 3a и b, сигналы ЭПР представляют собой широкие асимметричные линии с $g_{\text{eff}} = 1.965$. Такие уширенные спектры ЭПР характерны для ионов ванадия V^{4+} с очень высокой локальной концентрацией парамагнитных центров (ПЦ), между которыми наряду с диполь-дипольным также наблюдается сильное спин-обменное взаимодействие [19, 20]. В уширение спектра также вносит вклад неразрешенное сверхтонкое взаимодействие неспаренного электрона с парамагнитным ядром ванадия (спин ядра 7/2) [20]. Отметим, что интенсивность сигнала ЭПР была больше для $TiO_2/WO_3/V_2O_5$ структур (рис. 3, вставка). При освещении образцов $TiO_2/WO_3/V_2O_5$ и $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$ наблюдалось увеличение интенсивности спектра ЭПР примерно в 2 и 1.5 раза, соответственно, что свидетельствует об увеличении концентрации V^{4+} центров. Мы предполагаем, что в исследуемых микросферах наряду с ПЦ присутствуют также непарамагнитные дефекты (V^{5+}). Под действием света протекают следующие фотоиндуцированные реакции: образец $+ h\nu \rightarrow e + h$, $V^{5+} + e \rightarrow V^{4+}$. Таким образом, при освещении происходит накопление заряда в форме V^{4+}, причем данный эффект наиболее выражен для $TiO_2/WO_3/V_2O_5$ микросфер.

Учитывая данные фотокатализа (рис. 2), можно сделать важный вывод, что скорость фотокатализа не всегда коррелирует с концентрацией дефектов. Существует некоторая, назовем ее оптимальной, концентрация дефектов, превышение которой вызывает усиление процессов рекомбинации носителей заряда, что отрицательно сказывается на окислительной способности исследуемых образцов. Такая ситуация имеет место для микросфер $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$. С другой стороны, количество ПЦ в трехсоставных структурах отражает именно то оптимальное значение, которое обеспечивает как эффективную генерацию носителей заряда при освещении образцов видимым светом (вследствие примесного поглощения), так и невысокую скорость их рекомбинации на дефектах.

С целью сравнения с данными по фотокатализу мы исследовали релаксацию аккумулированного на центрах ванадия заряда в микросферах с помощью предложенного нами ранее метода [13]. На рисунке 4 представлены кинетики данного процесса. После выключения освещения через определенные промежутки времени мы регистрировали спектры ЭПР и определяли интенсивность сигнала ЭПР. Как видно из рис. 4, процесс "стекания" заряда существенно замедлен в структурах $TiO_2/WO_3/V_2O_5$ и продолжается более двух суток.

Для образцов $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$ данный процесс по-прежнему имеет долговременной характер, но длится меньше – чуть более суток (рис. 4). В то же время, микросферы моносостава TiO_2 релаксируют достаточно быстро, полностью теряя накоп-

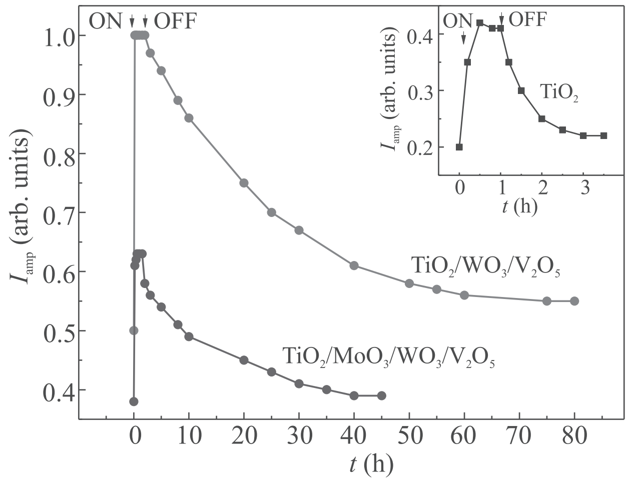


Рис. 4. (Цветной онлайн) Кинетики релаксации интенсивности сигнала ЭПР $TiO_2/WO_3/V_2O_5$, $TiO_2/MoO_3/WO_3/V_2O_5$ и TiO_2 (на вставке) микросфер после выключения освещения (OFF)

ленный заряд примерно в течение полутора часов. Полученные данные хорошо коррелируют с результатами по фотокатализу. Так, микросферы с самой замедленной релаксацией заряда ($TiO_2/WO_3/V_2O_5$) характеризуются наиболее высокой скоростью фотокатализа (ср. рис. 2 и 4). И наоборот – быстрая потеря накопленного под действием освещения заряда приводит к прекращению каталитического процесса после выключения света. Действительно, в случае односоставных микросфер генерация и рекомбинация происходят в одном и том оксиде металла (фотовозбужденные электроны и дырки не разделены пространственно).

Путем периодического контроля фотокаталитических свойств исследуемых микросфер в зависимости от времени хранения было установлено, что образцы характеризуются временной стабильностью фотокаталитических свойств (изменения скорости фотокатализа в процессе хранения не превышали 10 %, что лежит в диапазоне погрешности).

Таким образом, в данной работе получены перспективные для прикладных целей фотокатализаторы в виде многосоставных микросфер (состоящих из трех и четырех оксидов металлов). В полученных образцах обеспечивается пространственное разделение носителей заряда за счет использования гетероструктур, что в свою очередь создает условия для пролонгированного катализа в течение длительного времени (более двух суток) даже в отсутствие освещения. Для микросфер эффект накопления заряда (в форме V^{4+}) выявлен с помощью ЭПР-спектроскопии, что наряду с важностью данного результата для дальнейшего практического использования полученных фотокатализаторов в качестве основных элементов энергосберегающих фотокаталитических фильтров для очистки окружающей среды демонстрирует эффективность предложенного нами метода для диагностики эффекта накопления заряда в наноструктурированных материалах. Обнаружена корреляция между кинетическими зависимостями фотокатализа и интенсивностью сигнала ЭПР.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 18-29-23051. Также один из авторов (Г. В. Трусов) дополнительно благодарен за финансовую поддержку Министерству науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы повышения конкурентоспособности НИТУ “МИСиС” (# К2-2019-007), осуществляемой постановлением правительства от 16 марта 2013, # 211.

1. Н. И. Петров, В. И. Пустовойт, Письма в ЖЭТФ **109**(1), 19 (2019).
2. S. Sakthivel and H. Kisch, Angew. Chem. Int. Ed. **42**, 4908 (2003).
3. Е. В. Харин, Е. Н. Шефтель, В. А. Теджетов, Письма в ЖТФ **44**(10), 29 (2018).
4. R. Marschall, Adv. Funct. Mater. **24**, 2421 (2014).
5. *TiO_2 photocatalysis, fundamentals and applications*, ed. by A. Fujishima, K. Hashimoto, and T. Watanabe, Bkc Inc., Tokyo (1999), p. 9.
6. O. V. Boytsova, A. A. Sadovnikov, K. E. Yorov, A. N. Beltiukov, A. E. Baranchikov, V. K. Ivanov, X. Zhong, D. J. Lewis, P. O'Brien, and A. J. Sutherland, CrystEngComm. **19**, 3281 (2017).
7. M. Inoguchi, M. Afzaal, N. Tanakaa, and P. O'Brien, J. Mater. Chem. **22**, 25123 (2012).
8. J. C. S. Wu and C. H. Chen, J. Photochem. Photobiol. A **163**, 509 (2004).
9. T. Ohno, T. Mitsui, and M. Matsumura, Chem. Lett. **32**, 364 (2003).
10. A. A. Minnekhanov, N. T. Le, E. A. Konstantinova, and P. K. Kashkarov, Appl. Magn. Reson. **48**, 335 (2017).
11. J. X. Low, J. G. Yu, M. Jaroniec, S. Wageh, and A. A. Al-Ghamdi, Adv. Mater. **29**, 1601694 (2017).
12. Y. Cho, S. Kim, B. Park, Ch.-L. Lee, J. K. Kim, K.-S. Lee, I. Y. Choi, J. K. Kim, K. Zhang, S. H. Oh, and J. H. Park, Nano Lett. **18**, 4257 (2018).
13. А. А. Миннеханов, Е. В. Вахрина, Е. А. Константинова, П. К. Кашкаров, Письма в ЖЭТФ **107**(4), 270 (2018).
14. Y. Wei, Y. Huang, Y. Fang, Y. Zhao, D. Luo, Q. Guo, L. Fan, and J. Wu, Mater. Res. Bull. **119**, 110571 (2019).

15. M. Yan, G. Li, C. Guo, W. Guo, D. Ding, S. Zhanga, and S. Liu, Nanoscale **8**, 17828 (2018).
16. E. A. Konstantinova, A. A. Minnekhanov, G. V. Trusov, and V. G. Kytin, Nanotechnology **31**, 345207 (2020).
17. A. Tarasov, A. Minnekhanov, G. Trusov, E. Konstantinova, A. Zyubin, T. Zyubina, A. Sadovnikov, Y. Dobrovolsky, and E. Goodilin, J. Phys. Chem. C **119**(32), 18663 (2015).
18. W. Wedland and H. Hecht, *Reflectance Spectroscopy*, Intersci. Publ., N.Y. (1966), p. 306.
19. К. И. Замараев, Ю. Н. Молин, К. М. Салихов, *Спиновый обмен*, Наука, Новосибирск (1977), с. 320.
20. E. A. Konstantinova, A. A. Minnekhanov, A. I. Kokorin, T. V. Sviridova, and D. V. Sviridov, J. Phys. Chem. C **122**, 10248 (2018).

Информация для авторов

Журнал “Письма в ЖЭТФ” (и его англоязычная версия “JETP Letters”) публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.
- Мини-обзоры на наиболее актуальные “горячие” темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.
- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

“Письма в ЖЭТФ” является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках[1)]. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В “JETP Letters” все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК “Наука/Интерпериодика”. Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двухколоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер мини-обзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи[2)], с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF-8[3)], кодировка KOI8-R[4)]).

Статьи в редакцию можно направлять

- по электронной почте letters@kapitza.ras.ru – направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (..ps), EncapsulatedPostScript (..eps) или PaintBrush (..pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроенными рисунками.
- по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, “Письма в ЖЭТФ” – два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или USB-флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, также направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

---

1) http://www.jetpletters.ac.ru/ru/info.shtml#sub1
2) http://www.jetpletters.ac.ru/tex/utf8/example.tex
3) http://www.jetpletters.ac.ru/tex/utf8/jetpl.cls
4) http://www.jetpletters.ac.ru/tex/koi/jetpl.cls

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала "JETP Letters", наш журнал "Письма в ЖЭТФ" с середины 2016 года лишен возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в "Письмах в ЖЭТФ" расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале "JETP Letters".

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ
Инициалы и фамилии авторов
Обязательно — *Учреждения, где работают авторы* (*включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов*)
Дата поступления
Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. B. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP **71**, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать $P_{\rm opt}$, а не $P_{\rm опт}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из "Писем в ЖЭТФ" в "JETP Letters" все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторов, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются "on-line" в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно найти на WWW-странице "Писем в ЖЭТФ" (http://www.jetpletters.ac.ru/).

Дополнительный материал

Журнал "Письма в ЖЭТФ" предоставляет авторам возможность публикации **Дополнительного материала**. **Дополнительный материал**, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В **Дополнительный материал** помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. **Дополнительный материал** не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается **на английском языке** в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы **Дополнительного материала** могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано "Дополнительный материал". В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла **Дополнительного материала** совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано "Дополнительный материал к статье {название статьи}". Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами **Дополнительный материал** рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка Дополнительного материала ответственность ложится на авторов.

Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес **Дополнительного материала** приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}

Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

Дополнительный материал не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение **Дополнительного материала** должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

Комментарии в журнале "Письма в ЖЭТФ"

Журнал "Письма в ЖЭТФ" публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария – если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)[5].

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его ошибочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

[5] http://www.jetpletters.ac.ru/ru/supp.shtml

Мини-обзоры

Журнал "Письма в ЖЭТФ" в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал "заказные" мини-обзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РНФ. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению мини-обзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров – см. на

http://www.jetpletters.ac.ru/ru/info.shtml

Мини-обзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

Содержание
Том 112, выпуск 7
Поля, частицы, ядра

Оптика, лазерная физика

Плазма, гидро- и газодинамика

Конденсированное состояние

Биофизика

Дискуссия

Содержание
Том 112, выпуск 8

Разное