РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ПИСЬМА
В
ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 111

Выпуск 1

10 января 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 111, вып. 1, с. 3 – 9 © 2020 г. 10 января

Вклады высших порядков в амплитуды КХД в реджевской кинематике (Миниобзор)

В. С. Фадин[1)]

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 13 ноября 2019 г.
После переработки 13 ноября 2019 г.
Принята к публикации 14 ноября 2019 г.

Знаменитое уравнение Балицкого–Фадина–Кураева–Липатова (БФКЛ) было получено с использованием гипотезы о том, что амплитуды неабелевых калибровочных теорий с присоединенным представлением калибровочной группы в кросс-каналах даются вкладом реджезованного калибровочного бозона. Гипотеза верна в главном логарифмическом приближении, в котором уравнение было первоначально выведено, и в следующем за ним. Но в следующем за следующим приближении это не так, поскольку в этом приближении начинают вносить свой вклад реджевские разрезы. Обсуждаются вычисления их вклада в амплитуды упругого рассеяния в квантовой хромодинамике и их роль в выводе уравнения БФКЛ.

DOI: 10.31857/S0370274X20010014

1. Введение. Одно из фундаментальных уравнений квантовой хромодинамики (КХД), уравнение Балицкого–Фадина–Кураева–Липатова (БФКЛ) [1–4], основано на замечательном свойстве КХД – реджезации глюона. КХД оказалась уникальной теорией поля, в которой реджезуются все элементарные частицы – и кварк, и глюон [5–9].

Реджезация элементарных частиц очень важна для теоретического описания высокоэнергетических процессов. Реджезация глюона особенно важна, поскольку она определяет поведение при высоких энергиях неубывающих с энергией сечений в возмущенческой КХД.

В главном логарифмическом приближении (ГЛП), когда в каждом порядке теории возмущений сохраняются только члены с высшими степенями логарифма энергии в системе центра инерции (с.ц.и.) $\sqrt{s}$, и в следующем за главным (СГЛП), где удерживаются члены с меньшими на единицу, чем главные, степенями $\ln s$, реджезация глюона означает, что амплитуды с присоединенным представлением цветовой группы в кросс- каналах и отрицательной сигнатурой (симметрией относительно замены $s \leftrightarrow u \simeq -s$) определяются вкладами глюонного полюса Редже и имеют простую факторизованную форму (полюсную реджевскую форму). Это относится не только к упругим амплитудам, но и к амплитудам в мульти-реджевской кинематике (МРК), в которой все частицы имеют фиксированные (не растущие с s) поперечные импульсы и объединяются в струи с ограниченной инвариантной массой каждой струи и большими (растущими с s) инвариантными массами любой пары струй. Реджезация глюона позволяет выразить бесконечное число таких амплитуд через несколько реджевских вершин и траекторию реджзованного глюона. Поскольку они дают доминирующий вклад в скачки амплитуд с фиксированной передачей импульса в соотношениях унитарности, это обеспечивает простой вывод уравнения БФКЛ не только в ГЛП, но также и в СГЛП.

Полюсная реджевская форма доказана во всех порядках теории возмущений как в ГЛП [10], так и в СГЛП (см. [11, 12] и ссылки в них).

Однако эта форма нарушается в ССГЛП. Впервые нарушение полюсной формы было обнаружено в [13] при рассмотрении высоко-энергетического предела двухпетлевых амплитудах gg, gq и qq рассеяния. Позднее инфракрасно сингулярные члены, нарушающие полюсную форму, были найдены в трех петлях с использованием метода инфракрасной факторизации [14–16].

Нарушение полюсной реджевской формы следовало ожидать, потому что хорошо известно, что по-

[1)]e-mail: fadin@inp.nsk.su

люса Редже в плоскости комплексных угловых моментов порождают реджевские разрезы. Более того, в амплитудах с положительной сигнатурой реджевские разрезы появляются уже в ГЛП. В частности, БФКЛ померон является двух-режеонным разрезом. Но в амплитудах с отрицательной сигнатурой реджевские разрезы должны быть, по крайней мере, трех-реджеонными и могут появляться только в ССГЛП. Поэтому было естественно ожидать, что наблюдаемое нарушение связано с вкладом разрезов.

Первое объяснение наблюдаемого нарушения было дано в [17], где было показано, что члены, нарушающие полюсную реджевскую форму, могут идти от вкладов трех-режеонного разреза. Но почти в то же самое время было дано другое объяснение [18], где вклад разреза отличается от [17] (см. также [19, 20]), и помимо разреза используется смешивание разреза и полюса.

Здесь мы представляем результаты расчета членов, нарушающих полюсную форму, и их объяснение в обоих подходах.

2. Полюсная реджевская форма амплитуд КХД и ее нарушение. Для процессов упругого рассеяния $A+B \to A'+B'$ в реджевской кинематике ($s \simeq -u \to \infty$, t фиксировано (не растет с s)) реджезация означает, что амплитуды рассеяния с квантовыми числами глюонов в t-канале и отрицательной сигнатурой записываются в виде

$$\mathcal{A}_{AB}^{A'B'} = \mathcal{A}_{AB}^{R}(s,t) = \\ = \Gamma_{A'A}^{c}\left[\left(\frac{-s}{-t}\right)^{j(t)} - \left(\frac{s}{-t}\right)^{j(t)}\right]\Gamma_{B'B}^{c}, \qquad (1)$$

где $\Gamma_{P'P}^{c}$ – вершины частица-частица-реджеон (ЧЧР), или вершины рассеяния, "c" – цветовые индексы реджеона; $j(t) = 1+\omega(t)$ – траектория реджеона.

Важным свойством полюсов Редже является факторизация их вкладов

$$\mathcal{A}_{gg}^{g'g'}\mathcal{A}_{qq}^{q'q'} = \left(\mathcal{A}_{gq}^{g'q'}\right)^2, \qquad (2)$$

являющейся следствием того, что три амплитуды выражаются через две вершины ЧЧР.

Впервые нарушение полюсной реджевской формы было обнаружено в [13] при сравнении двухпетлевых амплитуд рассеяния gg, gq и qq в пределе высоких энергий. Низшие члены ССГЛП – это нелогарифмические двухпетлевые члены. В [13] было обнаружено, что ограничения, накладываемые на них условием факторизации (2), не выполняются.

Рассмотрение нарушения полюсной реджевской формы в трех петлях было выполнено только для инфракрасно сингулярных членов с использованием методов инфракрасной факторизации в работах [14–16]. В этих работах было подтверждено нарушение двухпетлевыми нелогарифмическими членами и были найдены инфракрасно сингулярные одно-логарифмические члены, нарушающие полюсную форму, в трех петлях.

Для сравнения реджевской и инфракрасной факторизаций была введена функция нефакторизующегося остатка, и амплитуды рассеяния с присоединенным представлением цветовой группы в t-канале и отрицательной сигнатурой были записаны в виде

$$\mathcal{A}_{AB}^{A'B'} = \mathcal{A}_{AB}^{R}(s,t) + \Gamma_{A'A}^{(0)c}\,\frac{s}{t}\,\Gamma_{B'B}^{(0)c}\,\mathcal{R}_{AB}, \qquad (3)$$

где $\mathcal{A}_{AB}^{R}(s,t)$ определена в (1), верхний индекс (0) обозначает низший порядок, а $\mathcal{R}_{AB}$ представляет нефакторизующийся остаток. С трехпетлевой точностью этот остаток можно представить в ССГЛП как

$$\mathcal{R}_{AB} = \left(\frac{\alpha_s}{\pi}\right)^2\left[R_{AB}^{(0)} + \left(\frac{\alpha_s}{\pi}\right)R_{AB}^{(1)}\ln s\right]. \qquad (4)$$

Для двухпетлевого вклада с использованием [13] имеем:

$$R_{qq}^{(0)} = \frac{\pi^2}{4\epsilon^2}\left(1-\frac{3}{N_c^2}\right)\Big(1-\epsilon^2\zeta(2)\Big), \qquad (5)$$

$$R_{gg}^{(0)} = -\frac{3\pi^2}{2\epsilon^2}\Big(1-\epsilon^2\zeta(2)\Big), \qquad (6)$$

$$R_{qg}^{(0)} = -\frac{\pi^2}{4\epsilon^2}\Big(1-\epsilon^2\zeta(2)\Big), \qquad (7)$$

где $\epsilon = (D-4)/2$, D – размерность пространства-времени. В $R_{AB}^{(0)}$ опущены только члены, исчезающие при $\epsilon \to 0$. Значения $R_{AB}^{(1)}$ были получены с использованием инфракрасной факторизации, так что члены нулевого порядка по ϵ также опущены:

$$R_{qq}^{(1)} = -\left(\frac{\alpha_S}{\pi}\right)^3\frac{\pi^2}{\epsilon^3}\,\frac{2N_c^2-5}{12N_c}\left(1-\frac{3}{2}\epsilon^2\zeta(2)\right) + \mathcal{O}(\epsilon^0), \qquad (8)$$

$$R_{gg}^{(1)} = \left(\frac{\alpha_S}{\pi}\right)^3\frac{\pi^2}{\epsilon^3}\,\frac{2}{3}\,N_c\left(1-\frac{3}{2}\epsilon^2\zeta(2)\right) + \mathcal{O}(\epsilon^0), \qquad (9)$$

$$R_{qg}^{(1)} = \left(\frac{\alpha_S}{\pi}\right)^3\frac{\pi^2}{\epsilon^3}\,\frac{N_c}{24}\left(1-\frac{3}{2}\epsilon^2\zeta(2)\right) + \mathcal{O}(\epsilon^0). \qquad (10)$$

Надо сказать, что трехпетлевые результаты (8)–(10) были получены с использованием так называемой дипольной формы [21–25] матрицы инфракрасных аномальных размерностей. Оказывается, эта форма верна только до двух петель. Недавно была вычислена квадрупольная поправка, появляющаяся в трех петлях [24]. Однако в ССГЛП эта поправка оказывается существенна только для амплитуд с положительной сигнатурой [18], так что она не меняет результаты (8)–(10).

3. Вклады реджевских разрезов. Ненулевая функция остатка $\mathcal{R}_{AB}$ была объяснена с помощью трех-реджеонных разрезов в двух работах [17, 18]. Это можно было бы считать хорошей новостью, если бы объяснения были одинаковыми. К сожалению, это не так. Различия в объяснениях начинаются с используемых подходов. Подход, используемый в [17] (см. также [19, 20]), можно назвать диаграммным, поскольку он исходит из диаграмм Фейнмана. Напротив, подход, использованный в [18], не имеет отношения к диаграммам Фейнмана и основан на представлении амплитуд рассеяния при высоких энергиях вильсоновскими линиями. Оба подхода объясняют нарушение полюсной формы в трех петлях, но по-разному.

3.1. Диаграммный подход.

3.1.1. Появление разреза. Из-за сохранения сигнатуры разрез с отрицательной сигнатурой должен быть трех-реджеонным. Поскольку наш реджеон является реджезованным глюоном, трех-реджеонный разрез начинается со вклада амплитуд, отвечающих диаграммам Фейнмана с тремя глюонами в t-канале, отличающимися перестановками σ глюонных вершин (σ принимает значения a,b,c,d,e,f). Амплитуды $\mathcal{A}_{AB}^{A'B'}$ можно записать в виде суммы по перестановкам σ произведений цветовых множителей и не зависящих от цвета матричных элементов:

$$\mathcal{A}_{AB}^{A'B'} = (\chi^*_{A'})_{\alpha'}(\chi^*_{B'})_{\beta'} \times \\ \times \sum_{\sigma}\left(C_{AB}^{(0)\sigma}\right)^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta}(\chi_A)^{\alpha}(\chi_B)^{\beta}\, M_{AB}^{(0)\sigma}(s,t), \qquad (11)$$

где χ обозначает цветовую часть волновых функций, α и β (α' и β') – цветовые индексы начальных (конечных) частиц A и B соответственно.

Здесь одинаковые буквы используются для цветовых индексов кварка и глюона; однако следует помнить, что для глюонов нет разницы между верхним и нижним индексами (принимающими значения от 1 до N_c^2-1), тогда как для кварков нижний и верхний индексы (принимающие значения от 1 до N_c) относятся к взаимно сопряженным представлениям.

Цветовые множители

$$\left(C_{AB}^{(0)\sigma}\right)^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta} = (\mathcal{T}_A^{c_1}\mathcal{T}_A^{c_2}\mathcal{T}_A^{c_3})^{\alpha'}_{\ \alpha}\left(\mathcal{T}_B^{c_1^\sigma}\mathcal{T}_B^{c_2^\sigma}\mathcal{T}_B^{c_3^\sigma}\right)^{\beta'}_{\ \beta}, \quad (12)$$

где $\mathcal{T}^a$ являются генераторами цветовой группы в соответствующих представлениях, $[\mathcal{T}^a,\mathcal{T}^b] = if_{abc}\mathcal{T}^c$ для всех представлений, $(\mathcal{T}^a)^b_{\ c} = -if_{abc}$ для глюонов, $(\mathcal{T}^a)^{\alpha'}_{\ \alpha} = (t^a)^{\alpha'}_{\ \alpha}$ для кварков; $\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_P^a\mathcal{T}_P^b) = T_P\delta_{ab}$, $T_q = 1/2$, $T_g = N_c$. Цветовые множители можно разложить по неприводимым представлениям $\mathbf{R}$ цветовой группы в t-канале:

$$\left(C_{AB}^{(0)\sigma}\right)^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{R}}[\mathcal{P}_{AB}^{\mathbf{R}}]^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta}\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB}^{(0)\sigma}, \qquad (13)$$

где

$$[\mathcal{P}_{AB}^{\mathbf{R}}]^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta} = \sum_n[\mathcal{P}_A^{\mathbf{R},n}]^{\alpha'}_{\ \alpha}[\mathcal{P}_B^{\mathbf{R},n\,*}]^{\beta}_{\ \beta'}, \qquad (14)$$

$\hat{\mathcal{P}}^{\mathbf{R},n}$ является волновой функцией состояния n в представлении $\mathbf{R}$ в пространстве цветовых индексов с нормировкой

$$[\mathcal{P}_P^{\mathbf{R},n}]^{\alpha}_{\ \beta}[\mathcal{P}_P^{\mathbf{R}',n'\,*}]^{\alpha}_{\ \beta} = T_P\delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\delta_{n,n'}, \qquad (15)$$

так что

$$\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB}^{(0)\sigma} = \frac{1}{N_{\mathbf{R}}\,T_A\,T_B}\,(\mathcal{T}_A^{c_1}\mathcal{T}_A^{c_2}\mathcal{T}_A^{c_3})^{\alpha'}_{\ \alpha}\times \\ \times\left(\mathcal{T}_B^{c_1^\sigma}\mathcal{T}_B^{c_2^\sigma}\mathcal{T}_B^{c_3^\sigma}\right)^{\beta'}_{\ \beta}[\mathcal{P}_{AB}^{\mathbf{R}\,*}]^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta}, \qquad (16)$$

$N_{\mathbf{R}}$ – размерность представления $\mathbf{R}$.

В отличие от реджеона, который вносит вклад только в амплитуды с присоединенным представлением цветовой группы (цветовой октет в КХД) в t-канале, разрез может вносить вклад в амплитуды с различными представлениями.

Возможными представлениями для кварк-кваркового и кварк-глюонного рассеяния являются только синглет ($\mathbf{1}$) и октет ($\mathbf{8}$), тогда как для глюон-глюонного рассеяния существуют синглет ($\mathbf{1}$), симметричный $\mathbf{8_s}$ и антисимметричный $\mathbf{8_a}$ октеты, $\mathbf{10}$, $\mathbf{10}^*$ и $\mathbf{27}$. Учет бозе-статистики глюонов и симметрии представлений $\mathbf{1}$, $\mathbf{8_s}$ и $\mathbf{27}$ дает, что возможными представлениями в амплитудах с отрицательной сигнатурой являются $\mathbf{8_a}$, $\mathbf{10}$ и $\mathbf{10}^*$ для глюон-глюонного рассеяния, $\mathbf{1}$ и $\mathbf{8}$ для кварк-кваркового рассеяния и только $\mathbf{8}$ для кварк-глюонного рассеяния. Имеет смысл сказать, что при $N_c > 3$ ситуация существенно не меняется, поскольку появляется только дополнительное симметричное представление для двухглюонной системы.

Важным является само существование в амплитудах с отрицательной сигнатурой представлений цветовой группы, отличных от присоединенного, что означает существование особенностей, отличных от полюса Редже, в плоскости комплексных моментов импульса.

Операторы проектирования для октетного представления (далее опускаем индекс a в $\mathbf{8_a}$):

$$[\mathcal{P}_{gg}^{\mathbf{8}}]^{ab}_{\ a'b'} = -f_{aa'c}f_{bb'c} \qquad (17)$$

для глюон-глюонного рассеяния,

$$[\mathcal{P}_{gq}^{\mathbf{8}}]^{\alpha'\beta'}_{a\beta} = -if^{c}_{aa'}(t^c)^{\beta'}_{\beta} \qquad (18)$$

для глюон-кваркового рассеяния, и

$$[\mathcal{P}_{qq}^{\mathbf{8}}]^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta} = (t^c)^{\alpha'}_{\alpha}(t^c)^{\beta'}_{\beta} \qquad (19)$$

для кварк-кваркового рассеяния.

Каналы $\mathbf{10}$ и $\mathbf{10}^*$ существуют только для глюон-глюонного рассеяния. Операторы проектирования

$$[\mathcal{P}_{gg}^{\mathbf{10}}]^{ab}_{a'b''} = \frac{N_c}{4}\Bigg(\delta_{ab}\delta_{a'b'} - \delta_{ab'}\delta_{a'b} - - 2\frac{f_{aa'c}f_{bb'c}}{N_C} + if_{ba'c}d_{b'ac} + id_{ba'c}f_{b'ac}\Bigg), \qquad (20)$$

$$[\mathcal{P}_{gg}^{\mathbf{10}^*}]^{ab}_{a'b''} = \left([\mathcal{P}_{gg}^{\mathbf{10}}]^{ab}_{a'b''}\right)^*. \qquad (21)$$

И, наконец, канал $\mathbf{1}$ в отрицательной сигнатуре существует только для кварк-кваркового рассеяния; оператор проектирования

$$[\mathcal{P}_{qq}^{\mathbf{1}}]^{\alpha'\beta'}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2N_c}\delta^{\alpha'}_{\alpha}\delta^{\beta'}_{\beta}. \qquad (22)$$

Для представлений $\mathbf{R}$, отличных от присоединенного, цветовые коэффициенты $\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(0)\sigma}_{AB}$ не зависят от σ; они равны

$$\mathcal{G}(\mathbf{10}+\mathbf{10}^*)^{(0)\sigma}_{gg} = -\frac{3}{4}N_c,\ \mathcal{G}(\mathbf{1})^{(0)\sigma}_{qq} = \frac{(N_c^2-4)(N_c^2-1)}{8N_c^2}, \qquad (23)$$

для любых σ. Поэтому зависящие от импульсов множители для таких представлений суммируются в эйкональную амплитуду

$$\sum_{\sigma} M^{(0)\sigma}_{AB}(s,t) = A^{eik} = g^6\frac{s}{t}\left(\frac{-4\pi^2}{3}\right)\mathbf{q}^2\, A_2(q_\perp), \qquad (24)$$

где

$$A_2(q_\perp) = \int \frac{d^{2+2\epsilon}l_1 d^{2+2\epsilon}l_2}{(2\pi)^{2(3+2\epsilon)}\mathbf{l}_1^2\mathbf{l}_2^2(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1-\mathbf{l}_2)^2}. \qquad (25)$$

Этот результат очень важен, потому что вклад разреза должен быть калибровочно-инвариантным, тогда как $M^{(0)\sigma}_{AB}$, взятые отдельно, зависят от калибровки.

В канале реджезованного глюона цветовые коэффициенты $\mathcal{G}(R)^{(0)\sigma}_{AB}$ зависят от σ. Однако эта зависимость имеет специфическую форму. Пусть $\sigma = a$ ($\sigma = f$) относится к диаграмме без u- (s-) канальных разрезов. Обратим внимание, что, поскольку $M^{(0)a}_{AB}$ и $M^{(0)f}_{AB}$ связаны заменой $s \leftrightarrow u$, только сумма $\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)a}_{AB} + \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)f}_{AB}$ входит в амплитуды с отрицательной сигнатурой. Оказывается, что

$$\frac{1}{2}\Big[\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)a}_{AB} + \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)f}_{AB}\Big] = \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{AB} + \frac{N_c^2}{8}, \qquad (26)$$

тогда как для всех других диаграмм ($\sigma = b,c,d,e$) $\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)\sigma}_{AB} = \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{AB}$. Реджевская полюсная факторизация требует равенства

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{gg} + \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{qq} = 2\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{gq}. \qquad (27)$$

Поскольку

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{gg} = \frac{3}{2}\ ,\ \ \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{gq} = \frac{1}{4},\ \ \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{qq} = \frac{1}{4}\left(-1+\frac{3}{N_c^2}\right), \qquad (28)$$

очевидно, что полюсная факторизация нарушена.

Но видно также, что члены, нарушающие полюсную факторизацию, имеют σ-независимые цветовые коэффициенты, так что зависящие от импульсов коэффициенты для них суммируются в эйкональные амплитуды.

Однако цветовые множители (28) могут быть не полностью отнесены к вкладам разреза. В самом деле, разделение вкладов полюса и разреза невозможно в двухпетлевом приближении из-за неоднозначности выделения части амплитуд, нарушающих факторизацию: всегда можно записать

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{AB} = \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)\mathrm{cut}}_{AB} + \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)\mathrm{pole}}_{AB},$$

с $\mathcal{G}(\mathbf{8_a})^{(0)\mathrm{pole}}_{AB}$, удовлетворяющими условию факторизации, но в остальном произвольными.

3.1.2. Три петли. Разделение становится возможным в более высоких петлях, из-за различной энергетической зависимости вкладов полюса и разреза. Энергетическая зависимость вклада полюса определяется (помимо множителя s) фактором Редже $\exp(\omega(t)\ln s)$, где $1+\omega(t)$ – траектория глюона,

$$\omega(t) = -g^2N_c\mathbf{q}^2\int\frac{d^{2+2\epsilon}l}{2(2\pi)^{(3+2\epsilon)}\mathbf{l}^2(\mathbf{q}-\mathbf{l})^2}, \qquad (29)$$

в то время как для разреза с тремя реджеонами это $\exp(\hat{\mathcal{K}}\ln s)$, где

$$\hat{\mathcal{K}} = \hat{\omega}_1+\hat{\omega}_2+\hat{\omega}_3+\hat{\mathcal{K}}_r(1,2)+\hat{\mathcal{K}}_r(1,3)+\hat{\mathcal{K}}_r(2,3), \qquad (30)$$

$\hat{\omega}_i$ обозначает траекторию i-го реджеона, а $\hat{\mathcal{K}}_r(m,n)$ – реальная часть ядра БФКЛ, описывающая взаимодействие между реджеонами m и n. Явная форма реальной части ядра, описывающая взаимодействие между двумя реджеонами с поперечными импульсами $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ и цветовыми индексами c_1 и c_2

$$[\mathcal{K}_r(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2;\mathbf{k})]^{c_1'c_2'}_{c_1c_2} = \\ = -T^a_{c_1c_1'}T^a_{c_2c_2'}\tfrac{g^2}{(2\pi)^{D-1}}\left[\frac{\mathbf{q}_1^2\mathbf{q}_2'^2+\mathbf{q}_2^2\mathbf{q}_1'^2}{\mathbf{k}^2}-\mathbf{q}^2\right], \quad (31)$$

где $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2=\mathbf{q}_1'+\mathbf{q}_2'=\mathbf{q}$, $\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_1'=\mathbf{q}_2'-\mathbf{q}_2=\mathbf{k}$.

Трехпетлевой цветовой коэффициент $\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(1)\sigma}_{AB}$ просто пропорционален $\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(0)\sigma}_{AB}$. Что касается вклада траектории, то это очевидно. Это также верно для вкладов реальной части, потому что оператор $\sum_{i>j=1}^3\hat{T}^c(i)\hat{T}^c(j)$ действует на состояние $\Psi(\mathbf{R})$, для которого, благодаря сохранению цвета,

$$\left(\sum_{i=1}^3\hat{T}^c(i)+\hat{\mathcal{T}}^c(\mathbf{R})\right)\Psi(\mathbf{R})=0, \quad (32)$$

где $\hat{\mathcal{T}}^c(\mathbf{R})$ – генератор цветовой группы в представлении $\mathbf{R}$. Это дает

$$\sum_{i>j=1}^{2}\hat{T}^c(i)\hat{T}^c(j)\Psi(\mathbf{R})=\frac{1}{2}\left(C_2(\mathbf{R})-3C_2(\mathbf{8})\right)\Psi(\mathbf{R}), \quad (33)$$

где $C_2(\mathbf{R})$ – значение оператора Казимира в представлении $\mathbf{R}$; $C_2(\mathbf{8})=N_c$. Следовательно, в ССГЛП трехпетлевая поправка равна

$$\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(\text{cut})}_{AB}\, g^8\frac{s}{t}\left(\frac{-4\pi^2}{3}\right)\mathbf{q}^2\left(\left(\frac{3}{2}N_c-C_2(\mathbf{8})\right)\times \right.\\ \left.\times A_3^b(q_\perp)-\frac{1}{2}\left(3N_c-C_2(\mathbf{8})\right)A_3^c(q_\perp)\right)\ln s, \quad (34)$$

где

$$A_3^b(q_\perp)=-\int\frac{d^{2+2\epsilon}l_1\,d^{2+2\epsilon}l_2d^{2+2\epsilon}l_3}{(2\pi)^{3(3+2\epsilon)}\mathbf{l}_1^2\mathbf{l}_2^2\mathbf{l}_3^2(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1-\mathbf{l}_2-\mathbf{l}_3)^2}, \quad (35)$$

$$A_3^c(q_\perp)=\int\frac{d^{2+2\epsilon}l_1\,d^{2+2\epsilon}l_2d^{2+2\epsilon}l_3(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1)^2}{(2\pi)^{3(3+2\epsilon)}\mathbf{l}_1^2\mathbf{l}_2^2\mathbf{l}_3^2(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1-\mathbf{l}_2)^2(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1-\mathbf{l}_3)^2}. \quad (36)$$

Расчет трехпетлевых поправок [20] показывает, что нарушение полюсной реджевской формы, обнаруженное в этом приближении с помощью инфракрасной факторизации, можно объяснить вкладом полюса и разреза. Ограничения, накладываемые инфракрасной факторизацией на амплитуды партонного рассеяния с присоединенным представлением цветовой группы в t-канале и отрицательной сигнатурой, могут выполняться в ССГЛП в двух и трех петлях, если, кроме вклада полюса Редже, есть вклад реджевского разреза

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(\text{cut})}_{AB}\, g^6\frac{s}{t}\left(\frac{-4\pi^2}{3}\right)\mathbf{q}^2\times \\ \times\left(A_2(q_\perp)+g^2N_c\ln s\left(\frac{1}{2}A_3^b(q_\perp)-A_3^c(q_\perp)\right)\right), \quad (37)$$

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(\text{cut})}_{gg}=-\frac{3}{2},\quad \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(\text{cut})}_{gq}=-\frac{3}{2}, \\ \mathcal{G}(\mathbf{8})^{(\text{cut})}_{qq}=\frac{3(1-N_c^2)}{4N_c^2}. \quad (38)$$

3.2. Подход вильсоновских линий. Объяснение нарушения полюсной реджевской формы, приведенное в [18], отличается от описанного выше. Связь трехреджеонных разрезов с диаграммами Фейнмана в этой статье не была прослежена. Цветовые коэффициенты $\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(0)C}_{AB}$ для вкладов разреза в ней берутся как

$$\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(0)C}_{AB}=\frac{1}{6!N_{\mathbf{R}}\,T_A\,T_B}\left(\mathcal{T}_A^{c_1}\mathcal{T}_A^{c_2}\mathcal{T}_A^{c_3}\right)^{\alpha'}_{\ \alpha}\times \\ \times\left(\sum_\sigma\mathcal{T}_B^{c_1^\sigma}\mathcal{T}_B^{c_2^\sigma}\mathcal{T}_B^{c_3^\sigma}\right)^{\beta'}_{\ \beta}[\mathcal{P}^{\mathbf{R}\,*}_{AB}]^{\alpha\beta}_{\ \alpha'\beta'}. \quad (39)$$

Что касается зависящей от импульсов части, она принимается равной A^{eik} (24). Для представлений $\mathbf{R}$, отличных от присоединенного, это согласуется с диаграммным подходом, поскольку цветовые коэффициенты $\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(0)\sigma}_{AB}$ не зависят от σ для таких представлений (см. (23)). Поэтому в обоих подходах вклады разрезов одинаковы для этих представлений.

Но это не так для присоединенного представления, где цветовые коэффициенты $\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)C}_{AB}$ работы [18] равны

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)C}_{AB}=\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)}_{AB}+\frac{N_c^2}{24}, \quad (40)$$

$\mathcal{G}(\mathbf{R})^{(0)}_{AB}$ даются (28). Что касается зависящей от импульсов части, она также принимается равной A^{eik} (24). Это выглядит странно с точки зрения диаграммного подхода, поскольку для появления A^{eik} требуется равенство всех слагаемых в сумме по σ в (39). В двух петлях разница Δ_{AB} между двумя подходами такова, что

$$\Delta_{gg}+\Delta_{qq}=2\Delta_{gq} \quad (41)$$

и, следовательно, она может быть отнесена к вкладу полюса. Для этого достаточно изменить двухпетлевые вклады в вершины глюон-глюон-реджеон и кварк-кварк-реджеон в (1).

Но в трех петлях вклады разреза оказываются равными

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})^{(0)C}_{AB}\, g^6\frac{s}{t}\left(\frac{-4\pi^2}{3}\right)\mathbf{q}^2\times \\ \times\left(A_2(q_\perp)+g^2N_c\ln s\left(\frac{1}{2}A_3^b(q_\perp)-A_3^c(q_\perp)\right)\right)\ln s, \quad (42)$$

и объяснить нарушение полюсной формы, только разрезом невозможно. Это можно сделать только если ввести смешивание полюса и разреза [18] с цветовыми коэффициентами

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(1)\mathrm{mix}}=\frac{1}{6(N_c^2-1)\,T_A\,T_B}\sum_{\sigma}Tr\left(\mathcal{T}_g^c\mathcal{T}_g^{c_1^\sigma}\mathcal{T}_g^{c_2^\sigma}\mathcal{T}_g^{c_3^\sigma}\right)\times$$
$$\times\left[\mathcal{T}_A Tr\left(\mathcal{T}_B^c\mathcal{T}_B^{c_1}\mathcal{T}_B^{c_2}\mathcal{T}_B^{c_3}\right)+\mathcal{T}_B Tr\left(\mathcal{T}_A^c\mathcal{T}_A^{c_1}\mathcal{T}_A^{c_2}\mathcal{T}_A^{c_3}\right)\right]. \tag{43}$$

Смешивание дает вклад только начиная с трех петель.

Следует отметить, что в подходе, используемом в [18], вклад разреза не подавлен при больших N_c, т.е. он существует в планарной $N = 4$ SYM, что противоречит общему представлению, что в пределе высоких энергий четырехточечные амплитуды в этой теории даются вкладом реджезованного глюона.

3.3. Четыре петли в диаграммном подходе. Представленные выше трехпетлевые результаты не позволяют отвергнуть какой-либо из подходов. Это можно было бы сделать, сравнивая их результаты в высших петлях с результатами вычислений методом инфракрасной факторизации. К сожалению, они еще не известны. Некоторые результаты известны только в диаграммном подходе.

В четырех петлях есть три типа вкладов. Первый (самый простой) идет от реджевских траекторий каждого из трех реджеонов. Второй тип содержит поправки от произведений траекторий и реальных частей ядра БФКЛ, а третий – от реджеон-реджеонных взаимодействий. Зависимая от импульса часть всех этих поправок выражается через интегралы

$$I_i=\int\frac{d^{2+2\epsilon}l_1\,d^{2+2\epsilon}l_2\,d^{2+2\epsilon}l_3}{(2\pi)^{3(3+2\epsilon)}\mathbf{l}_1^2\mathbf{l}_2^2\mathbf{l}_3^2}F_i\delta^{3+2\epsilon}(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1-\mathbf{l}_2-\mathbf{l}_3), \tag{44}$$

где

$$F_a=f_1(\mathbf{l}_1)f_1(\mathbf{l}_2),\;\; F_b=f_1(\mathbf{l}_1)f_1(\mathbf{l}_1),\;\; F_c=f_2(\mathbf{l}_1+\mathbf{l}_2),$$
$$F_d=f_1(\mathbf{l}_1+\mathbf{l}_2)f_1(\mathbf{l}_1+\mathbf{l}_2),\;\; F_e=f_1(\mathbf{q}-\mathbf{l}_1)f_1(\mathbf{q}-\mathbf{l}_3), \tag{45}$$

$$f_1(\mathbf{k})=\mathbf{k}^2\int\frac{d^{2+2\epsilon}l}{(2\pi)^{(3+2\epsilon)}\mathbf{l}^2(\mathbf{l}-\mathbf{k})^2},$$
$$f_2(\mathbf{k})=\int\frac{d^{2+2\epsilon}l\,f_1(\mathbf{l})}{(2\pi)^{(3+2\epsilon)}\mathbf{l}^2(\mathbf{l}-\mathbf{k})^2}. \tag{46}$$

Вычисление цветовых факторов $\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB}^{(2)\sigma}$ не легко.

Конечно, это тривиально для квадратов виртуальных частей. Соответствующий цветовой множитель

$$\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB,VV}^{(2)\sigma}=\frac{N_c^2}{4}\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB}^{(0)\sigma}. \tag{47}$$

Это не сложно и для произведений виртуальных и реальных частей из-за свойства (32). Оно дает

$$\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB,VR}^{(2)\sigma}=\frac{N_c}{2}\left(C_2(\mathbf{R})-3N_c\right)\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB}^{(0)\sigma}. \tag{48}$$

Однако, это довольно сложно для квадрата реальной части. Он содержит матричные элементы

$$\langle\Psi_B^\sigma|\sum_{i\neq j=1}^{3}\hat{T}^c(i)\hat{T}^c(j)\hat{T}^d(i)\hat{T}^d(j)|\Psi_A\rangle \tag{49}$$

и

$$\langle\Psi_B^\sigma|\sum_{i\neq j\neq k=1}^{3}\hat{T}^c(i)\hat{T}^c(j)\hat{T}^d(i)\hat{T}^d(k)|\Psi_A\rangle. \tag{50}$$

Из-за (32) их разница равна

$$\frac{1}{4}\left(C_2(\mathbf{R})-3N_c\right)^2\mathcal{G}(\mathbf{R})_{AB}^{(0)\sigma}, \tag{51}$$

поэтому достаточно получить первый.

Довольно утомительные расчеты дают его вклад $\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)\sigma}$ в $\mathcal{G}(R)_{AB}^{(2)\sigma}$:

$$\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)b}=\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)c}=\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)d}=\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)e}=\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)}, \tag{52}$$

$$\frac{1}{2}\left(\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)a}+\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)f}\right)=\mathcal{G}(\mathbf{8})_{AB}^{(s)}+\left(\frac{N_c^4}{16}+\frac{3N_c^2}{8}\right). \tag{53}$$

Важно заметить, что члены, нарушающие полюсную факторизацию, имеют σ-независимые цветовые коэффициенты, что обеспечивает их калибровочную инвариантность так же, как в двух и трех петлях.

4. Обсуждение. Полюсная реджевская форма амплитуд КХД, являющаяся основой уравнения БФКЛ и справедливая в ГЛП и в СГЛП, нарушается в ССГЛП. Естественно думать, что причиной нарушения являются трех-реджеонные разрезы. Эта мысль подтверждается тем фактом, что наблюдаемое нарушение может быть объяснено реджевскими разрезами [17, 18]. Но объяснения, приведенные в [17] (см. также [19, 20]) и [18], различаются. В [17] нарушение объясняется только вкладом разреза, в то время как в [18] вводится также смешивание полюса и разреза. Подходы [17, 18] согласуются в трех петлях, но должны расходиться в более высоких петлях. Возможный выбор между ними может быть сделан в четырех петлях.

Но полное доказательство того, что амплитуды КХД с квантовыми числами глюонов в кросс-каналах и отрицательной сигнатурой даются в ССГЛП вкладами реджевского полюса и трех-режеонного разреза, со смешиванием или без него, требует или проверки в каждом порядке возмущения теория (что, очевидно, невозможно) или изобретения какого-либо метода, такого как бутстрап для доказательства реджезации глюона.

Появление реджевских разрезов в амплитудах с отрицательной сигнатурой значительно осложняет вывод уравнения БФКЛ, использующий соотношения унитарности.

Работа поддержана частично Министерством науки и высшего образования РФ, частично Российским фондом фундаментальных исследований, грант # 19-02-00690.

1. V. S. Fadin, E. A. Kuraev, and L. N. Lipatov, Phys. Lett. B **60**, 50 (1975).
2. E. A. Kuraev, L. N. Lipatov, and V. S. Fadin, ZhETF **71**, 840 (1976) [Sov. Phys. JETP **44**, 443 (1976)].
3. E. A. Kuraev, L. N. Lipatov, and V. S. Fadin, ZhETF **72**, 377 (1977) [Sov. Phys. JETP **45**, 199 (1977)].
4. I. I. Balitsky and L. N. Lipatov, Yad. Fiz. **28**, 1597 (1978) [Sov. J. Nucl. Phys. **28**, 822 (1978)].
5. M. T. Grisaru, H. J. Schnitzer, and H. S. Tsao, Phys. Rev. Lett. **30**, 811 (1973).
6. M. T. Grisaru, H. J. Schnitzer, and H. S. Tsao, Phys. Rev. D **8**, 4498 (1973).
7. L. N. Lipatov, Yad. Fiz. **23**, 642 (1976) [Sov. J. Nucl. Phys. **23**, 338 (1976)].
8. V. S. Fadin and V. E. Sherman, Pisma ZhETF **23**, 599 (1976).
9. V. S. Fadin and V. E. Sherman, ZhETF **72**, 1640 (1977).
10. Ya. Ya. Balitskii, L. N. Lipatov, and V. S. Fadin, in *Materials of IV Winter School of LNPI*, Leningrad (1979), p. 109.
11. B. L. Ioffe, V. S. Fadin, and L. N. Lipatov, *Quantum chromodynamics: Perturbative and nonperturbative aspects*, Cambridge University Press, Cambridge (2010).
12. V. S. Fadin, M. G. Kozlov, and A. V. Reznichenko, Phys. Rev. D **92**, 085044 (2015).
13. V. Del Duca and E. W. N. Glover, JHEP **0110**, 035 (2001); hep-ph/0109028.
14. V. Del Duca, G. Falcioni, L. Magnea, and L. Vernazza, Phys. Lett. B **732**, 233 (2014) .
15. V. Del Duca, G. Falcioni, L. Magnea, and L. Vernazza, PoS RADCOR **2013**, 046 (2013).
16. V. Del Duca, G. Falcioni, L. Magnea, and L. Vernazza, JHEP **1502**, 029 (2015).
17. V. S. Fadin, AIP Conf. Proc. **1819**(1), 060003 (2017).
18. S. Caron-Huot, E. Gardi, and L. Vernazza, JHEP **1706**, 016 (2017).
19. V. S. Fadin and L. N. Lipatov, Eur. Phys. J. C **78**(6), 439 (2018).
20. V. S. Fadin, PoS DIS **2017**, 042 (2018).
21. T. Becher and M. Neubert, Phys. Rev. Lett. **102**, 162001 (2009); Erratum: [Phys. Rev. Lett. **111**(19), 199905 (2013].
22. T. Becher and M. Neubert, JHEP **0906**, 081 (2009); Erratum: [JHEP **1311**, 024 (2013)].
23. E. Gardi and L. Magnea, Nuovo Cim. C **32**(5–6), 137 (2009) [Frascati Phys. Ser. **50**, 137 (2010)].
24. Ø. Almelid, C. Duhr, and E. Gardi, Phys. Rev. Lett. **117**(17), 172002 (2016).

Pis'ma v ZhETF, vol. 111, iss. 1, pp. 10 – 11 © 2020 January 10

The onset of jet quenching phenomenon

M. T. AlFiky[+1)], *O. Elsherif*[+1)], *A. M. Hamed*[+*× 1)]

[+]*Department of Physics, The American University in Cairo, 11835 New Cairo, Egypt*

[*]*Department of Physics & Astronomy, Texas A&M University, College Station, 77843 TX, USA*

[×]*Department of Physics & Astronomy, University of Mississippi, Oxford, 38677 MS, USA*

Submitted 2 November 2019
Resubmitted 16 November 2019
Accepted 17 November 2019

DOI: 10.31857/S0370274X20010026

The small size systems formed in proton-proton (p-p) collisions were simulated in order to study the onset of jet quenching measurements of the Quark Gluon Plasma (QGP) formed in large size systems (nucleus-nucleus) at top central collisions. The formation of QGP medium has been indicated via different observations such as the suppression of hadron spectra [1–5], while the electromagnetically interacting particles (direct photon) and weakly interacting particles (Z^0 and $W^{\pm}$) spectra in central nucleus-nucleus collisions compared to p-p collisions at Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) and Large Hadron Collider (LHC) [6–9], were unity. In addition to the suppression of the away-side yield per trigger particle in central A-A collisions compared to the peripheral A-A and p-p collisions [1]. However, due to the absence of different level of suppressions for light quarks vs heavy quarks [10, 11], and for quarks vs gluon jets [12], in contrast to the Quantum Chromodynamics (QCD) predictions, indicate the needs for more sensitive observables in order to better quantify and constrain the medium parameters. Moreover, observations such as long-range ridge-like structure [13, 14] and strangeness enhancement [15] in high multiplicity events in p-p collisions have stimulated the search for similar phenomena, e.g., jet quenching in the high multiplicity events regardless of the size of the colliding systems. Previous simulated data using PYTHIA [13, 16] have shown similar patterns for some of the observables as in the central heavy ion collisions, which might indicate a nontrivial contributions for the commonly adopted measured observables from the underlying particle production mechanisms in QCD.

In order to search for the onset of the jet quenching in the high multiplicity events, the two-particle azimuthal correlation functions are constructed and the associated yield per trigger particle has been extracted for the high and low multiplicity events in p-p collisions at both energies of RHIC and LHC. The associated particles yield, $D(z_T) = \frac{1}{N_{\rm trg}}\frac{dN}{d(\Delta\phi)}$, has been compared between the low and high multiplicity events as a function of the hadron fractional energy z_T where $z_T = p_T^{\rm assoc}/p_T^{\rm trig}$. In order to quantify the multiplicity effects, if any, the ratio between the near-side yields at high and low multiplicities (I^N_{HL}), and away-side yields at high and low multiplicities (I^A_{HL}), where:

$$I^N_{HL}(z_T) = \frac{D^{\text{high-mult}}_{\text{near-side}}(z_T)}{D^{\text{low-mult}}_{\text{near-side}}(z_T)};\qquad I^A_{HL}(z_T) = \frac{D^{\text{high-mult}}_{\text{away-side}}(z_T)}{D^{\text{low-mult}}_{\text{away-side}}(z_T)} \tag{1}$$

have been calculated and plotted for both energies, as a function of z_T, as shown in Fig. 1.

At both energies, the values of I^N_{HL} and I^A_{HL} were less than unity, and of trivial dependence on z_T. The values of I^A_{HL} are always less than these of I^N_{HL} at the same multiplicity and energy, and both quantities show a pattern of systematic decreases with the multiplicity. Such multiplicity dependence cannot be used neither to exclude the jet quenching nor to prove it in the high multiplicity events in p-p collisions, as the suppressions have been found at both sides, near and away of the high-p_T particle. The fact that the near-side shows a suppression in the high multiplicity events in p-p collisions is not consistent with the surface bias emission as reported by various experiments, and accordingly such suppression at both sides shown in this analysis could be due to 1) the evolution of the parton distribution functions on the trigger particle momentum, 2) parton energy loss in the high multiplicity events, or 3) a combination of both effects 1) and 2). More future studies at higher transverse momenta

[1)]e-mail: alfiky@aucegypt.edu; omartare@buffalo.edu; ahamed@comp.tamu.edu

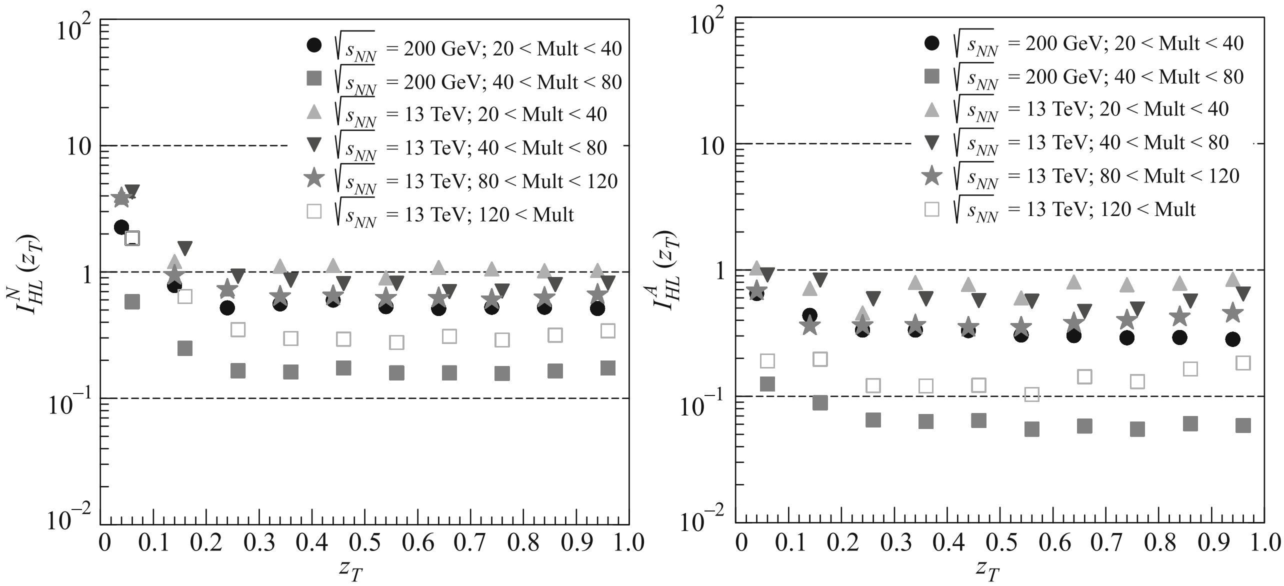

Fig. 1. (Color online) The z_T dependence of (a) I^N_{HL} and (b) I^A_{HL} for different multiplicity at $\sqrt{s_{NN}} = 200\,\text{GeV}$ and $\sqrt{s_{NN}} = 13\,\text{TeV}$

could be used to either rule out or to confirm the multiplicities dependence for the jet quenching commonly adopted observables.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020010014

1. J. Adams, M. Aggarwal, Z. Ahammed et al. (STAR collaboration), Nucl. Phys. A **757**, 102 (2005).
2. K. Adcox, S. Adler, S. Afanasiev et al. (PHENIX collaboration), Nucl. Phys. A **757**, 184 (2005).
3. I. Arsene, I. Bearden, D. Beavis et al. (BRAHMS collaboration), Nucl. Phys. A **757**, 1 (2005).
4. B. Back, M. Baker, M. Ballintijn et al. (PHOBOS collaboration), Nucl. Phys. A **757**, 28 (2005).
5. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. Sirunyan et al. (CMS collaboration), Eur. Phys. J. C **72**, 1945 (2012).
6. S. Adler, S. Afanasiev, C. Aidala et al. (PHENIX collaboration), Phys. Rev. Lett. **94**, 232301 (2005).
7. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. Sirunyan et al. (CMS collaboration), Phys. Lett. B **710**, 256 (2012).
8. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. Sirunyan et al. (CMS Collaboration), Phys. Lett. B **715**, 66 (2012).
9. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. Sirunyan et al. (CMS collaboration), Phys. Rev. Lett. **106**, 212301 (2011).
10. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. Sirunyan et al. (CMS collaboration), J. High Energy Phys. **05**, 063 (2012).
11. B. Abelev, J. Adam, D. Adamová et al. (ALICE Collaboration), J. High Energy Phys. **09**, 112 (2012).
12. B. Abelev, M. Aggarwal, Z. Ahammed et al. (STAR collaboration), Phys. Rev. C **79**, 034909 (2009).
13. B. Alver, B. Back, M. Baker et al. (PHOBOS collaboration), Phys. Rev. C **75**, 054913 (2007).
14. V. Khachatryan, A. Sirunyan, A. Tumasyan et al. (CMS Collaboration, J. High Energy Phys. **09**, 091 (2010).
15. J. Adam, D. Adamová, M. Aggarwal et al. (ALICE Collaboration), Nature Phys. **13**, 535 (2017).
16. Multiple Parton Interactions at the LHC. *Proceedings, 1st Workshop, Perugia, Italy, October 27-31, 2008.* DESY-PROC-2009-06.

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 12 – 18 © 2020 г. 10 января

Модификация эндоэдрального потенциала после мгновенной ионизации внутреннего атома

М. Я. Амусья[+*1)], *А. С. Балтенков*[×], *Л. В. Чернышева*[*]

[+]*Институт физики Рака, Еврейский университет, 91904 Иерусалим, Израиль*

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

[×]*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. Арифова, 100125 Ташкент, Узбекистан*

Поступила в редакцию 25 октября 2019 г.
После переработки 9 ноября 2019 г.
Принята к публикации 21 ноября 2019 г.

В работе исследуется изменение потенциала эндоэдрала A@C_N вследствие мгновенной ионизации внутреннего атома A. Используя подходящую модель для описания оболочки фуллерена C_N, удалось рассчитать это изменение, которое возникает следствие ее монопольной поляризации. Показано, что феноменологические потенциалы, хорошо моделирующие оболочку C_N, должны принадлежать семейству потенциалов с неплоским дном, в отличие от очень часто используемых потенциалов с дном плоским, типа прямоугольной ямы. В качестве конкретного примера мы используем модельный потенциал в форме Лоренца. Изменяя его форму, мы описываем различные степени монопольной поляризации оболочки C_N положительным электрическим зарядом в ее центре. Вычислены сечения фотоионизации атомов He, Ar и Xe, расположенных в центре оболочки C_{60}, с учетом и без учета сопровождающей этот процесс монопольной поляризации фуллереновой оболочки. Неожиданно обнаружилось, что монопольная поляризация не влияет на сечения фотоионизации этих эндоэдральных атомов, представляя очень редкий пример "маскировки" потенциала.

DOI: 10.31857/S0370274X20010038

1. Цель этого Письма – найти дополнительный потенциал, индуцированный в электронной оболочке эндоэдрала A@C_N за счет мгновенной ионизации внутреннего атома A. Мы рассматриваем этот эффект как действие дополнительного положительного заряда z, добавленного в центр C_N. Мы намерены также исследовать влияние этого дополнительного потенциала на сечение фотоионизации эндоэдрала.

Идея о том, что взаимодействие электрона с почти сферическим фуллереном C_N может быть описана феноменологическим потенциалом $U(r)$, образованным "размытыми" атомами углерода – широко используемый подход (см., например, [1–3] и ссылки там), несмотря на то, что подобный подход существенно упрощает реальное молекулярное поле. Процедура размытия атома определяет вид потенциальной функции $U(r)$. Если предположить [4], что положительный заряд ядер C вместе с отрицательным зарядом электронов равномерно "размазан" по объему между двумя концентрическими сферами, мы приходим к функции $U(r)$ в виде потенциальной ямы с плоским дном. Мы можем использовать, однако, другое, заметно более реалистическое усреднение. А именно, сначала "размажем" положительный заряд по сфере радиуса R, учитывая, что все ядра атомов углерода расположены на равных расстояниях R от центра фуллереновой оболочки. После этого определим пространственное распределение электронов в поле этой сферы. Подобный подход приводит к потенциальной яме с неплоским дном [5].

Уравнение Пуассона определяет взаимное пространственное распределение положительных и отрицательных электрических зарядов, создающих потенциал $U(r)$. Решения этого уравнения существенно различаются для указанных двух типов функции $U(r)$. Функции с плоским дном соответствуют "луковичной" молекулярной структуре с двумя пространственно-разделенными слоями двойных зарядов, тогда как функции $U(r)$ с неплоским дном соответствуют трехслойной структуре зарядов, в которой слой положительных зарядов расположен между двумя отрицательными. Такое расположение положительной и отрицательной компонент фуллереновой оболочки приводит к появлению минимума функции $U(r)$ при $r = R$.

1) e-mail: amusia@vms.huji.ac.il

В качестве конкретного примера C_N рассмотрим почти идеально сферический фуллерен C_{60}. Его внутренний объем достаточно велик, чтобы вместить отдельные атомы A или даже небольшие молекулы. Силы Ван-дер-Ваальса, действующие между оболочкой A и C_{60}, слишком слабы, чтобы исказить электронную структуру как A, так и C_{60}, а поэтому эти структуры в A@C_{60}; можно считать независимыми друг от друга. При фотоионизации атома A фотоэлектрон подвергается воздействию потенциала атомного остатка и фуллереновой оболочки и, в свою очередь, воздействует на электронную подсистему C_{60}. Под действием фотоэлектрона, когда он находится далеко от центра C_{60}, коллективизированные электроны оболочки фуллерена в целом смещаются относительно своего жесткого положительного остова. Таким образом, C_{60} приобретает индуцированный электрический дипольный момент. Ряд работ описывает влияние соответствующего дипольного поляризационного потенциала C_{60} на упругое рассеяние электронов на эндоэдральных атомах A@C_{60} и их фотоионизацию (см. [6–8]).

Наряду с дипольной поляризацией оболочки фуллерена, имеет место и ее монопольная поляризация под действием электрического заряда внутри полости C_{60}. Действительно, при фотоионизации атома A, помещенного в центр оболочки C_{60}, возникает дополнительный положительный заряд атомного остова. Этот заряд сдвигает отрицательную электронную плотность оболочки C_{60} относительно положительной плотности ионов углерода. Смещение электронной плотности в каждом элементарном объеме оболочки C_{60} под действием положительного атомного остатка A^+ приводит к созданию индуцированного электрического дипольного момента этого объема. Оси всех элементарных дипольных моментов направлены в центр сферы C_{60}. Таким образом, положительный заряд z в центре C_{60} сжимает сферическое электронное облако по направлению к центру C_{60}, вызывая дополнительный потенциал монопольной поляризации C_{60}.

В работе [9] (тот же подход недавно был повторен в [10]) анализируется влияние монопольной поляризации на процесс фотоионизации A@C_{60}. Авторы в [9] назвали это “внутренней статической поляризацией оболочки C_{60}”. Они пишут: “Квинтэссенция этого эффекта заключается в том, что ион-остаток A^+, если происходит фотоионизация и появляется фотоэлектрон, может поляризовать оболочку C_{60}... Это приводит к тому, что потенциал оболочки фуллерена $U(r)$ будет отличаться от этого потенциала без учета статической поляризации”. Чтобы учесть этот эффект, авторы [9] ввели модифицированную версию прямоугольной потенциальной ямы. Они пришли к выводу, что внутреннюю статическую поляризацию оболочки C_{60} “нельзя игнорировать при фотоионизации эндоэдральных атомов вблизи порога”.

В настоящем Письме рассматривается монопольная поляризация C_{60} в рамках модельных потенциалов другого типа – с неплоским дном, так называемых потенциалов с профилем Лоренца [11, 12]. Сначала с помощью уравнения Пуассона мы рассмотрим пространственное распределение зарядов, которые создают потенциальную яму с профилем Лоренца. Затем, изменяя толщину левого и правого крыльев потенциальной ямы, установим связь этого изменения со смещением части коллективизированных электронов относительно положительного остова фуллереновой оболочки. Далее оценим относительное число электронов, втянутых к центру остова положительным электрическим зарядом z, расположенным в его центре. Затем используем асимметричную потенциальную яму Лоренца для расчета сечений фотоионизации эндоэдральных атомов He, Ar и Xe с учетом монопольной поляризации C_{60}.

2. Модельный потенциал $U(r)$ для оболочки C_{60} должен удовлетворять двум общим требованиям. Во-первых, он должен описывать притяжение, и поддерживать, по крайней мере, один электронный уровень s-состояния с энергией связи $E_s = -2.65$ эВ, таким образом, воспроизводя значение электронного сродства, измеренное в УФ фотоэлектронной спектроскопии отрицательного иона C_{60} [2, 13]. Во-вторых, потенциал $U(r)$ должен располагаться вблизи экспериментального радиуса фуллерена R в довольно тонкой сферической оболочке с толщиной Δ порядка нескольких атомных единиц. В работах [11, 12] $U(r)$ рассчитан в рамках самосогласованной модели сферического “желе” для коллективизированных электронов. При таком подходе электростатический потенциал фуллереновой оболочки в целом представляет собой сумму положительного потенциала ядер атомов углерода, “размазанных” по сфере с радиусом R, и отрицательного потенциала, создаваемого электронными облаками атомов углерода.

Форма Лоренца для этого пузырькового потенциала имеет вид

$$U(r) = -U_{\max}\frac{d^2}{(r-R)^2+d^2}. \tag{1}$$

В [12] выбранная глубина $U_{\max}$ и толщина $\Delta = 2d$ (в середине максимальной глубины) позволили расположить в (1) электронный уровень, который соответствует экспериментальному электронному сродству молекулы C_{60}.

Соотношение $U(r) = -\varphi(r)$ позволяет связать выражение (1) с потенциалом электрического поля $\varphi(r)$, которым оболочка C_{60} воздействует на электрон. Здесь мы учитываем, что заряд электрона равен (-1). В работе использована атомная система единиц. Уравнение Пуассона [14] определяет потенциал электростатического поля $\varphi(r)$ как функцию от $\rho(r)$

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho, \qquad (2)$$

где $\rho(r)$ – плотность электрических зарядов, образующих потенциальную яму (1). В сферических координатах с центром в центре оболочки C_{60}, следующее уравнение определяет зависимость плотность заряда от радиуса:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}[rU(r)] = 4\pi\rho(r). \qquad (3)$$

Применяя (3) к потенциалу (1), мы получаем пространственное распределение электрического заряда $Q(r) = 4\pi\rho r^2$, которое создает потенциал пузырька в форме Лоренца (1). На рисунке 1 (верхняя часть) представлена функция $Q(r)$ в зависимости от радиуса r. Плотность заряда, согласно рис. 1, есть трехслойный сэндвич. Средний слой представляет собой положительно заряженные ионы C^{4+}, а внутренний и внешний слои отображают отрицательно заряженные облака коллективизированных электронов. Общий заряд оболочки C_{60} равен нулю, поскольку потенциал (1) есть потенциал короткого радиуса. Интегрирование отрицательных частей кривой $Q(r)$ показывает, что около 46 % отрицательного заряда находится во внутреннем электронном облаке. Внешнее электронное облако содержит остальной отрицательный заряд оболочки C_{60}.

Покажем, что, изменяя параметр Δ левого и правого крыльев потенциальной ямы (1), мы можем описать переход электронов из внешнего электронного облака во внутреннее через жесткий положительный остов фуллерена C_{60} и проанализировать различные степени монопольной поляризации его оболочки. Для этого заменим постоянную толщину Δ в (1) следующим выражением

$$\Delta(r) = \Delta_L + (\Delta_R - \Delta_L)\Theta(R - r). \qquad (4)$$

Здесь Δ_L и Δ_R – параметры левого и правого крыльев потенциальной ямы (1) соответственно, $\Theta(z)$ – ступенчатая функция Хевисайда

$$\Theta(z) = [1 + \exp(z/\eta)]^{-1}, \qquad (5)$$

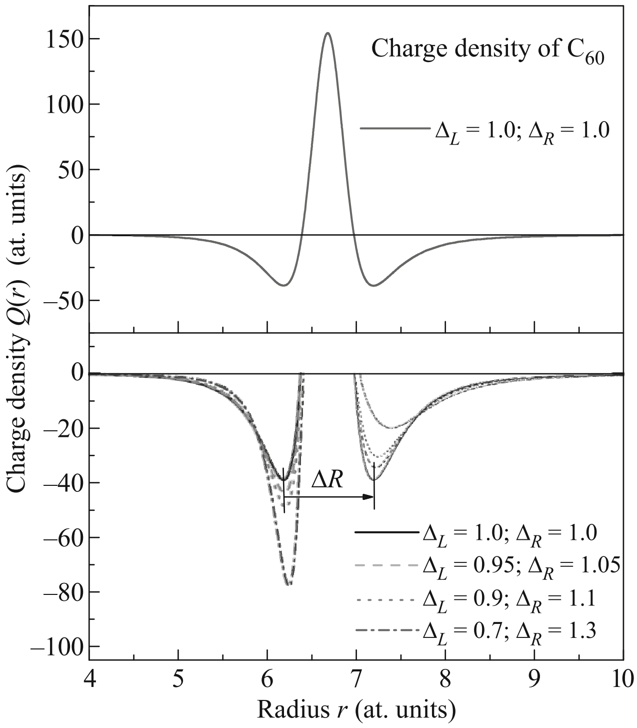

Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственное распределение электрического заряда потенциала пузырькового типа (1) в форме Лоренца с параметрами $R = 6.665$, $\Delta = \Delta_L = \Delta_R = 1.0$ и $U_{\max} = 0.4415$ (верхняя часть). Распределение заряда электронов для разных Δ_L и Δ_R из табл. 1 (нижняя часть). Зазор между сферами сферического конденсатора составляет $\Delta R \approx 1$. Все параметры приведены в атомных единицах (at. un.)

в которой параметр диффузности η является фиксированным положительным произвольно малым числом, и который, следовательно, в конечном итоге может быть положен равным нулю. В нижней части рис. 1 представлены электронные плотности левого и правого облаков в зависимости от радиуса r. В таблице 1 представлены результаты расчета отрицательных зарядов этих электронных облаков. Выбор параметров таков, что энергия сродства и в асимметричном потенциале Лоренца всегда остается близкой к $E_s = -2.65$ эВ.

Оценим в грубом приближении долю электронов, перенесенных из внешнего облака во внутреннее под воздействием положительного электрического заряда z, расположенного в центре сферической оболочки. Предположим, что электроны обоих облаков расположены на концентрических сферах с радиусами, определяемыми минимумами электронных плотностей внешнего и внутреннего облаков. Согласно рис. 1, зазор между этими сферами составляет $\Delta R \approx 1$. Рассмотрим всю систему положительных и отрицательных зарядов как сферический конденсатор, на пластинах которого отрицательные заряды размещены в пропорциях 46 и 54 %. Предполагаем, что положительный заряд между распределениями зарядов сфер стабилизирует их. Электрическое поле внутри этого конденсатора равно нулю. В противном случае электроны перешли бы с одной пластины на другую. После введения заряда z в центр такого конденсатора, некоторый заряд q переместится из внешней сферы во внутреннюю для компенсации электрического поля z/R^2. Принимая во внимание, что электрическое поле между пластинами сферического конденсатора неотличимо от поля точечного заряда, имеем $z/R^2 \approx q/\Delta R^2$. Итак, для заряда q получаем следующую оценку: $q \approx z(\Delta R/R)^2$. Таким образом, единичный заряд $z = 1$ вызывает перенос около 2 % электронов из внешнего облака во внутреннее. Это смещение заряда соответствует набору параметров Δ_L и Δ_R во втором ряду табл. 1.

Применим симметричные и асимметричные потенциальные ямы Лоренца для расчета сечений фотоионизации некоторых эндоэдральных атомов. В работе [8] представлен подход к фотоионизации эндоэдралов, который рассматривает проблему в приближении случайных фаз с обменом (RPAE), тем самым обобщая подход Хартри–Фока (HF – Hartree–Fock) путем включения в него существенной части электронных корреляций (см. [15]).

Однако в [8] монопольная поляризация не учитывается. Ее поправки должны быть четко видны уже в рамках HF. Вот почему здесь мы ограничиваемся HF-приближением. Особенностью фотоионизации эндоэдрального атома являются осцилляции в сечениях фотоионизации, широко известные как *резонансы пленения*. Сравнивая эти резонансы для двух типов потенциальных ям Лоренца, мы оценим роль монопольной поляризации оболочки C_{60} в этом процессе. Эти потенциалы мы должны добавить к атомному HF-гамильтониану, чтобы тем самым получить уравнение для электронов атома A, расположенного в центре оболочки C_{60}. Решения уравнения

$$[\hat{H}_0 + U(r)]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \qquad (6)$$

где H_0 есть атомный гамильтониан HF,дают волновые функции начальных и конечных состояний электронов атома, захваченного фуллереновой оболочкой. Они используются в расчетах сечений фотоионизации. Результаты представлены на рис. 2–4.

Кривые на этих рисунках соответствуют набору параметров Δ_L и Δ_R из четвертого ряда табл. 1. Наборы параметров во втором и третьем рядах дают кривые, которые неотличимы от тех, что соответствуют симметричной потенциальной яме. Таким образом, монопольная поляризация оболочки C_{60} начинает влиять на фотоионизацию эндоэдрального атома со сдвигом примерно 15 % коллективизированных электронов. При этом сдвиге различия между кривыми для симметричного и асимметричного потенциалов имеют порядок толщины линии. Совпадение кривых свидетельствует об отсутствии влияния монопольной поляризации на фотоионизацию эндоэдрального атома[2)]. Таким образом, утверждение, приведенное в [9] о том, что статическую монопольную поляризацию оболочки C_{60} “нельзя игнорировать при фотоионизации эндоэдральных атомов вблизи порога”, совершенно неверно.

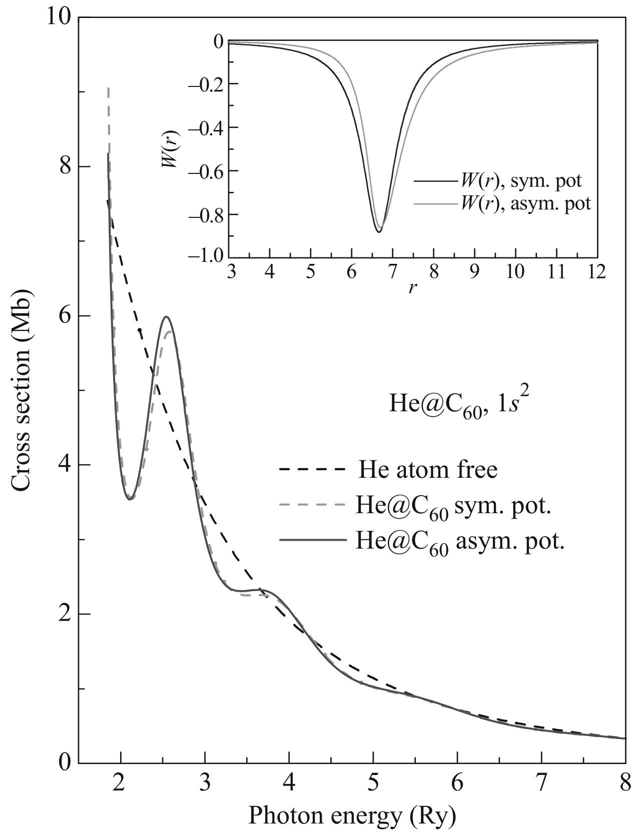

Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома He@C_{60} в зависимости от энергии фотона, и потенциал формы Лоренца (верх); sym. pot. есть симметричный потенциал Лоренца с $\Delta_L = 1.0$ и $\Delta_R = 1.0$; asym. pot. является асимметричным потенциалом с $\Delta_L = 0.7$ и $\Delta_R = 1.3$

3. В работе [9] рассматривается впервые, насколько нам известно, монопольная поляризация оболочки C_{60}. Чтобы описать этот эффект, была предложена

[2)] Отметим, что к тому же выводу мы пришли на примере другого потенциала $U(r)$ с неплоским дном [16].

Таблица 1. Заряды внутреннего (слева) и внешнего (справа) электронных облаков

Параметры Δ_L and Δ_R	Заряд левого крыла, %	Заряд правого крыла, %
$\Delta_L = 1.0$; $\Delta_R = 1.0$	45.7	54.3
$\Delta_L = 0.95$; $\Delta_R = 1.05$	48.2	51.8
$\Delta_L = 0.9$; $\Delta_R = 1.1$	50.8	49.2
$\Delta_L = 0.7$; $\Delta_R = 1.3$	61.2	38.8

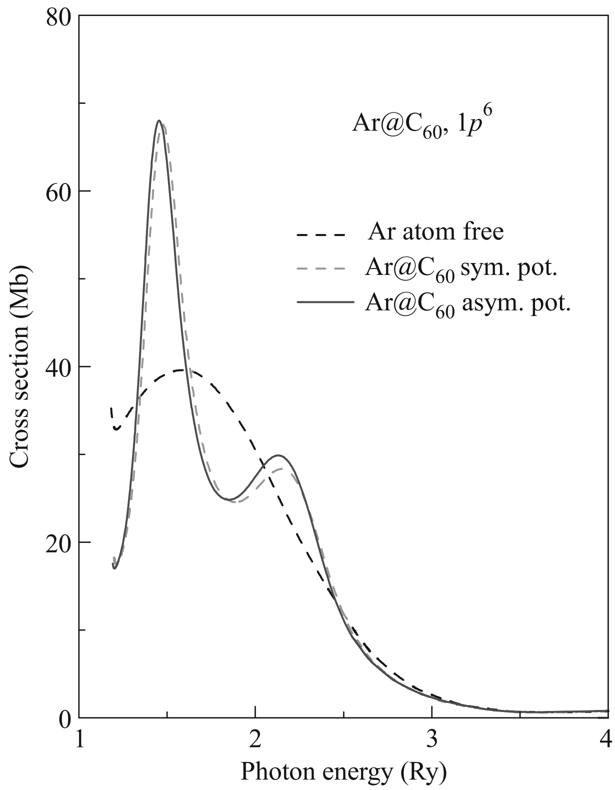

Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома Ar@C$_{60}$ в зависимости от энергии фотона. Обозначения такие же, как на рис. 2

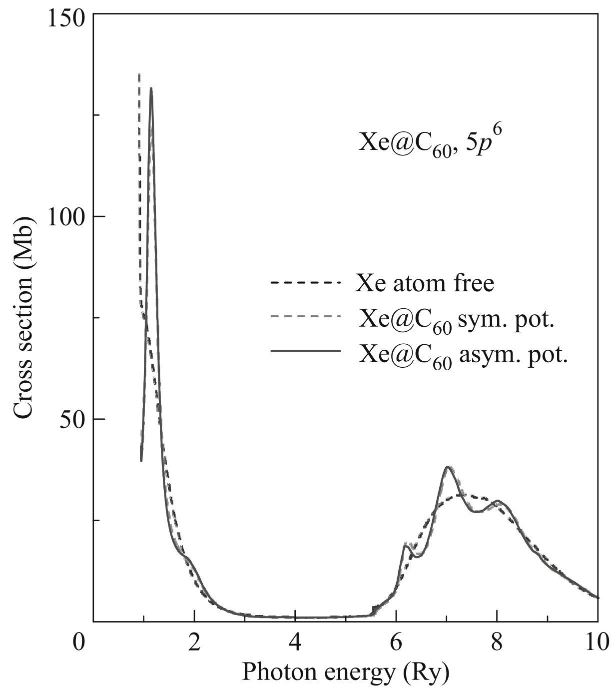

Рис. 4. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации Xe@C$_{60}$ в зависимости от энергии фотона. Обозначения такие же, как на рис. 2

модифицированная версия сферической прямоугольной потенциальной ямы:

$$U^*(r)=\begin{cases} \dfrac{\alpha}{r_0} - \dfrac{\alpha}{r_0+\Delta r}, & \text{если } r \le r_0; \\ -U_0 + \dfrac{\alpha}{r} - \dfrac{\alpha}{r_0+\Delta r}, & \text{если } r_0 \le r \le r_0+\Delta r; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \tag{7}$$

В этой формуле r_0 обозначает внутренний радиус фуллерена, Δr – его толщину, а U_0 – глубину потенциальной ямы C$_{60}$. Параметр α может изменяться от 0 до 1, причем значения, $\alpha = 0$ или 1, соответствуют тому, что статическая монопольная поляризация полностью игнорируется или включается соответственно.

Используя ступенчатую функцию Хевисайда (5), перепишем формулу (7) в следующем виде

$$U^*(r) = \left(\frac{\alpha}{r_0} - \frac{\alpha}{r+\Delta r}\right)\Theta(r-r_0) -$$

$$-\left(U_0 - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha}{r_0+\Delta r}\right)\Theta(r_0-r)\Theta(r-r_0-\Delta r). \tag{8}$$

Причины, по которым мы заменили ступенчатую функцию (7) диффузными потенциалами (8), станут ясны позже.

Применим уравнение Пуассона (3) к потенциальной функции (7), чтобы понять, какому распределению заряда соответствует эта потенциальная яма. Начнем со случая, который соответствует пространственному распределению плотностей электрических зарядов, когда статической поляризацией оболочки пренебрегается (подробности расчетов приведены в [17]). На рисунке 5 представлена функция распределения заряда $Q(r) = 4\pi\rho r^2$. Согласно рис. 5, две кон-

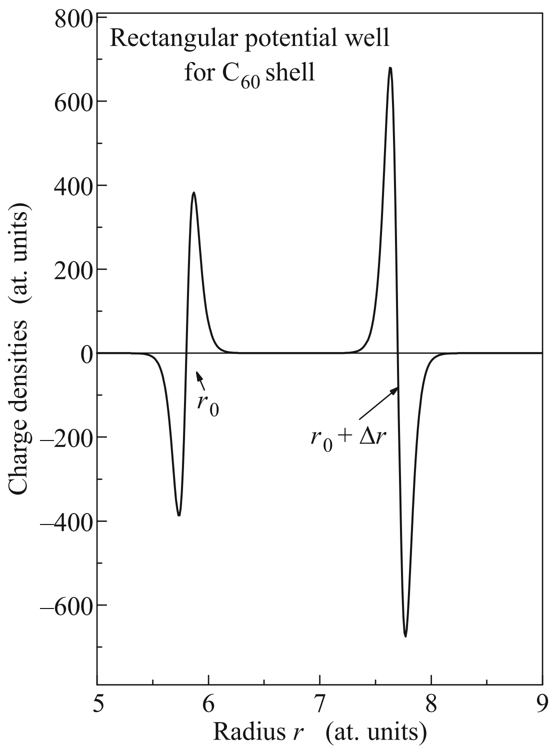

Рис. 5. (Цветной онлайн) Распределение зарядов в оболочке C_{60} при $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. Параметры потенциальных ям такие же, как в работе [9], а именно: $r_0 = 5.8$, $\Delta r = 1.9$ ат. ед., $U_0 = 8.2$ эВ $= 0.301$ ат. ед. Параметр диффузности $\eta = 0.05$. Кривые при обоих значениях α совпадают друг с другом

центрические сферы с радиусами $r = r_0$ и $r = r_0+\Delta r$, с двойными электрическими слоями, создают радиальный, неизмененной глубины потенциал прямоугольной ямы. Толщина слоев (при $\eta = 0.05$) составляет около 0.05 ат. ед. Обе сферы электрически нейтральны. На внутренней поверхности сферы находится около 36 % положительных и отрицательных зарядов. Остальные заряды оболочки C_{60} локализованы на поверхности внешней сферы. Для потенциальной ямы без диффузности ($\eta = 0$) слои зарядов имеют нулевую толщину. Функция равна нулю везде, кроме точек $r = r_0$ и $r_0 + \Delta r$, в бесконечно малой окрестности которых плотности заряда бесконечно отрицательны и положительны соответственно. Представленное на рис. 5 пространственное распределение электрических зарядов типа "луковицы" создает прямоугольный потенциал, когда монопольная поляризация C_{60} отсутствует.

Повторяя ту же процедуру с потенциальной функцией (8), мы приходим к тому же распределению заряда, что и в случае $\alpha = 0$. Причина такого неожиданного, на первый взгляд, результата заключается в следующем. Применим лапласиан Δ из уравнения Пуассона (3) к дополнительным слагаемым в уравнении (7). Для первой строки мы имеем

$$\Delta\left(\frac{\alpha}{r_0} - \frac{\alpha}{r_0+\Delta r}\right) \equiv 0. \tag{9}$$

Для второй строки, поскольку Кулоновский потенциал α/r является функцией Грина уравнения Пуассона [14], имеем

$$\Delta\left(\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha}{r_0+\Delta r}\right) = -4\pi\alpha\delta(\mathbf{r}). \tag{10}$$

В правой части (10) снова возникает нуль, потому что в этой строке нас интересуют значения $r \neq 0$. Таким образом, дополнительные члены в потенциальной функции (7) не приводят к изменениям во взаимном расположении электрических зарядов в оболочке C_{60}, а также к статической монопольной поляризации оболочки фуллерена электрическим зарядом, появляющимся в центре оболочки. Поэтому возникает вопрос: какова причина значительного изменения сечения фотоионизации, предсказанного в [9, 10]? Ответ заключается в том, что авторы [9, 10] просто ввели новый произвольный параметр (в дополнение к старым произвольным параметрам r_0 и Δr) в обычный прямоугольный потенциал. Нет оснований считать параметры r_0 и Δr потенциала модели (7), приведенные в подписи к рис. 5, хоть в какой-то мере оправданными. Заметим также, что анализ статей, в которых используется прямоугольный потенциал, показывает, что ни одна из них не содержит обоснования выбора параметров.

4. Мы обнаружили интересную особенность фотоионизации эндоэдрала, состоящую в том, что монопольная поляризация его оболочки, возникающая вследствие фотоионизации внутреннего атома, не влияет на сечение этого процесса. Это означает, что найден довольно редкий пример "маскировки" потенциала. Неожиданный результат получен, разумеется, в рамках довольно грубой модели, описывающей электронную оболочку фуллеренов. Однако в ходе исследования у нас возникло твердое убеждение, что это модельно-независимый результат, полностью основанный на малости атомного радиуса по сравнению с радиусом C_{60}.

Проблема с модельным описанием формы и параметров потенциала оболочки фуллерена в некоторой степени аналогична проблеме ядерной физики, где потенциал для нуклон-нуклонного взаимодействия неизвестен. Чтобы описать магические ядра, выбираются сложные формы потенциалов (например, потенциал "винной бутылки" Эльзассера или потенциал “мексиканской шляпы”), зависящие от большого количества параметров. На основании обширных экспериментальных данных стало возможным моделировать все магические числа ядер [18, 19]. Мы надеемся, что более подробные экспериментальные исследования самой C_N и эндоэдральных систем $A@C_N$ откроют новый путь к модификации моделей оболочек C_N, и сделают поиск модельного потенциала C_{60} более конструктивным, чем простое увеличение числа произвольных подгоночных параметров.

А. С. Балтенков выражает благодарность за поддержку Узбекского фонда ОТ-Ф2-46.

1. W. Jaskolski, Phys. Rep. **27**, 1 (1996).
2. M. Ya. Amusia, A. S. Baltenkov, and B. G. Krakov, Phys. Lett. A **243**, 99 (1998).
3. V. K. Dolmatov, in *Theory of Confined Quantum Systems: Part Two*, ed. by J. R. Sabin and E. Brändas, Advances in Quantum Chemistry, Academic Press, N.Y. (2009), v. 58, p. 13.
4. M. J. Puska and R. M. Nieminen, Phys. Rev. A **47**б 1181 (1993).
5. K. Yabana and G. F. Bertsch, Phys. Scr. **48**, 633 (1993).
6. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, JETP Lett. **101**(7), 503 (2015).
7. V. K. Dolmatov, M. Ya. Amusia, and L. V. Chernysheva, Phys. Rev. A **95**, 012709 (2017).
8. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, JETP Lett. **109**(6), 355 (2019).
9. V. K. Dolmatov and S. T. Manson, Phys. Rev. A **82**, 023422 (2010).
10. V. K. Dolmatov, e-print arXive: 1809.02898 (2018).
11. V. K. Ivanov, G. Y. Kashenock, R. G. Polozkov, and A. V. Solov'yov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **34**, L669 (2001).
12. A. S. Baltenkov, S. T. Manson, and A. Z. Msezane, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **48**, 185103 (2015).
13. L. L. Lohr and S. M. Blinder, Chem. Phys. Lett. **198**, 100 (1992).
14. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon Press, Oxford, N.-Y., Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt (1971).
15. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. G. Yarzhemsky, *Handbook of theoretical Atomic Physics, Data for photon absorption, electron scattering, and vacancies decay*, Springer, Berlin (2012), p. 812.
16. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, e-print arXive: 1905.00740 (2019).
17. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, e-print arXive: 1901.04007 (2019).
18. M. G. Mayer and H. D. Jensen, *Elementary Theory of Nuclear Shell Structure*, Wiley, N.Y. (1955).
19. E. Feenberg, *Shell Theory of the Nucleus*, NJ, Princeton University Press, Princeton (1955).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 19 – 26 © 2020 г. 10 января

Теория гиротропии полупроводниковых квантовых ям (Миниобзор)

Л. Е. Голуб[1)]

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

Поступила в редакцию 3 ноября 2019 г.
После переработки 13 ноября 2019 г.
Принята к публикации 13 ноября 2019 г.

Построена теория оптических явлений, вызванных гиротропией полупроводниковых квантовых ям. Продемонстрировано, что исследование отражения света вблизи легкого экситона позволяет зарегистрировать естественную оптическую активность квантовых ям. Коэффициенты отражения в магнитном поле, лежащем в плоскости квантовой ямы, несут информацию о магнитогиротропии, описываемой билинейными по волновому вектору света и напряженности поля вкладами в оптический отклик, обусловленными одновременно гиротропией системы и магнитным полем. Показано, что магнитогиротропные эффекты резонансно усилены вблизи тяжелого экситона. Оценки гиротропных и магнитогиротропных вкладов в отражение находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0370274X2001004X

1. Введение. Различные оптические явления удобно классифицировать, рассматривая вклады в поляризуемость $\hat{\boldsymbol{\chi}}$, связывающую диэлектрическую поляризацию $\mathbf{P}$ и электрическое поле $\mathbf{E}$ как $\mathbf{P} = \hat{\boldsymbol{\chi}}\mathbf{E}$. В наноструктурах это соотношение является нелокальным. Но в квантовых ямах сохраняется трансляционная симметрия в плоскости структуры, что позволяет вводить проекцию волнового вектора света на плоскость $\mathbf{q}$ и осуществлять разложение поляризуемости по его степеням. Если обозначить за z направление размерного квантования, то связь между амплитудами поляризации и поля примет вид

$$\mathbf{P}(z) = \int dz' \hat{\boldsymbol{\chi}}(z, z')\mathbf{E}(z'), \qquad (1)$$

где $\hat{\boldsymbol{\chi}}(z, z')$ может зависеть от $\mathbf{q}$. С учетом внешнего магнитного поля $\mathbf{B}$, в низшем порядке имеем:

$$\chi_{ij}(\mathbf{B}, \mathbf{q}) = \chi^0_{ij} + S_{ijk}B_k + i\gamma_{ijk}q_k + C_{ijkl}B_k q_l. \qquad (2)$$

Здесь первое слагаемое описывает двулучепреломление, а следующий вклад, дающийся тензором $\hat{\mathbf{S}}$, – магнитооптические эффекты Фарадея и Керра.

Слагаемое с тензором $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ ответственно за *гиротропные явления*, или естественную оптическую активность – свойство среды вращать плоскость поляризации света в отсутствие внешнего магнитного поля. Ненулевые компоненты тензора $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ разрешены симметрией только в тех системах без центра пространственной инверсии, в которых какие-либо компоненты вектора и псевдовектора принадлежат к одному представлению точечной группы. Такие системы называются гиротропными. В гиротропных системах возможна линейная связь между вектором плотности электрического тока и такими псевдовекторами, как электронный спин и угловой момент фотона, проявляющаяся в циркулярном фотогальваническом и спин-гальваническом эффектах и в ориентации спинов током [1, 2]. В структурах с квантовыми ямами естественная оптическая активность может быть вызвана объемной или структурной асимметрией [3, 4]. В экспериментах естественная оптическая активность приводит к конверсии поляризации света при отражении [5, 6].

Во внешнем магнитном поле возникает явление, называемое магнито-пространственной дисперсией. Оно заключается во вкладе в оптический отклик, линейном как по напряженности магнитного поля, так и по волновому вектору света и описывается слагаемым с тензором $\hat{\mathbf{C}}$ в (2). Магнито-пространственная дисперсия имеет место только в нецентросимметричных средах. Если же система еще и гиротропна, то возникают эффекты, обусловленные одновременно наличием магнитного поля и гиротропии. По аналогии с магнитогиротропным фотогальваническим эффектом [7] они могут быть объединены в отдельный класс магнитогиротропных оптических явлений. Такие эффекты позволяют изучать объемную и структурную асимметрию квантовых ям в магнитооптических экспериментах. Ориентируя различным обра-

[1)]e-mail: golub@coherent.ioffe.ru

зом магнитное поле и плоскость падения света, можно разделять магнитогиротропные вклады, вызванные различными видами асимметрии [8, 9].

Гиротропные явления в объемных полупроводниках и других кристаллических соединениях хорошо изучены, им посвящено большое количество оригинальных статей и монографий, см. литературу к работам [3–6, 8–10]. В данном обзоре гиротропные и магнитогиротропные явления будут исследованы в полупроводниковых квантовых ямах. Будет изучена спектральная область вблизи экситонных резонансов, где данные эффекты многократно усиливаются. Теория будет строиться с учетом того, что экспериментально гиротропные явления в структурах с квантовыми ямами в основном исследуются с помощью отражения света.

2. Учет гиротропии в экситонном оптическом отклике. Вблизи экситонных резонансов микроскопической причиной гиротропии является спин-орбитальное взаимодействие. В квантовых ямах из материалов с решеткой цинковой обманки оно может быть вызвано объемно-инверсионной асимметрией. Вместе с размерным квантованием, эта асимметрия приводит к гиротропии, даже если яма выращена из негиротропного материала типа GaAs. Соответствующий вклад в гамильтониан электронно-дырочной пары состоит из слагаемых, линейных по волновым векторам частиц:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=e,hh,lh} \beta_i [k_x^i(\sigma_x^i \cos 2\varphi + \sigma_y^i \sin 2\varphi) + \\ + k_y^i(\sigma_x^i \sin 2\varphi - \sigma_y^i \cos 2\varphi)]. \tag{3}$$

Здесь индекс $i = e, hh, lh$ нумерует основные подзоны размерного квантования электронов, тяжелых дырок и легких дырок, $\mathbf{k}^i$ – волновые вектора частиц в плоскости ямы, $\sigma_{x,y}^i$ – матрицы Паули, действующие на спин i-й частицы, x, y – произвольные оси в плоскости ямы, φ – угол между осью x и направлением [100], направление роста $z \parallel [001]$, а β_i – двумерные постоянные Дрессельхауза [11, 12]. Отметим, что гамильтониан для тяжелых дырок имеет тот же вид, что и для электронов и легких дырок, поскольку выбран базис $|hh, -3/2\rangle$, $|hh, 3/2\rangle$ [13].

Нелокальная экситонная диэлектрическая поляризация $\mathbf{P}$ в квантовых ямах зависит от координаты вдоль оси роста z

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}, z) = \Phi(z) \sum_\nu \mathbf{d}_\nu^*(\mathbf{q}) C_\nu(\mathbf{q}). \tag{4}$$

Здесь $\Phi(z)$ – огибающая волновой функции размерно-квантованного экситона при совпадающих координатах электрона и дырки, суммирование проводится по четырем экситонным состояниям $\nu = (e, s; h, m)$, $s, m = \pm 1/2$ нумеруют спиновые состояния электронов и дырок, и $\mathbf{d}_\nu = \langle e, s\,|\mathbf{d}|\,\mathcal{K}(h, m)\rangle$ – среднее значение плотности дипольного момента экситона сорта ν, где $\mathcal{K} = i\sigma_y \mathcal{K}_0$ – оператор инверсии времени, в котором $\mathcal{K}_0$ – операция комплексного сопряжения [14]. Коэффициенты разложения C_ν удовлетворяют уравнению

$$[(\hbar\omega_0 - \hbar\omega - i\Gamma)\delta_{\nu\nu'} + \mathcal{H}_{\nu\nu'}(\mathbf{q})]\, C_{\nu'} = \\ = \int dz' \Phi^*(z') \mathbf{E}(z') \cdot \mathbf{d}_\nu(\mathbf{q}). \tag{5}$$

Здесь ω_0 и Γ – резонансная частота и ширина линии экситона, $\mathbf{E}(z)$ – полное электрическое поле, а $\mathcal{H}_{\nu\nu'}$ – матричный элемент спин-орбитального взаимодействия (3), зависящий от волнового вектора света, связанного с $\mathbf{k}^{e,h}$ как $\mathbf{q} = \mathbf{k}^e + \mathbf{k}^h$. Поправка к восприимчивости (1) первого порядка по спин-орбитальному взаимодействию, описывающая линейные по $\mathbf{q}$ (т.е. гиротропные) вклады, имеет вид

$$\chi_{ij} = -\frac{\Phi(z)\Phi^*(z')\Xi_{ij}}{(\hbar\omega_0 - \hbar\omega - i\Gamma)^2}, \quad \Xi_{ij} = \sum_{\nu\nu'} \left(d_\nu^i\right)^* \mathcal{H}_{\nu\nu'} d_{\nu'}^j. \tag{6}$$

Гиротропия проявляется в экспериментах по отражению от структур с квантовыми ямами [5, 6]. Решая соответствующую задачу [14], находим тензор коэффициентов отражения (матрицу Джонса), связывающий амплитуды отраженного ($\mathbf{E}^r$) и падающего ($\mathbf{E}^0$) света:

$$\begin{pmatrix} E_s^r \\ E_p^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_s^{QW} + \Delta r_s & \mathcal{R} \\ \mathcal{R} & r_p^{QW} + \Delta r_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_s^0 \\ E_p^0 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Здесь r_s^{QW} и r_p^{QW} – стандартные коэффициенты отражения от квантовой ямы для s и p поляризованного света:

$$r_{s,p}^{QW} = \frac{i\Gamma_{s,p}^0}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega - i\Gamma}, \tag{8}$$

где $\Gamma_{p,s}^0 = \Gamma_0 (\cos\theta)^{\pm 1}$, θ – угол распространения света внутри материала барьера, Γ_0 – экситонная сила осциллятора при нормальном падении, а в случае легкого экситона нужно произвести замену $\Gamma_p^0 \to \to \Gamma_p^0(1 - 4\tan^2\theta)$, и мы пренебрегаем радиационными перенормировками резонансной частоты экситона ω_0 и ширины линии Γ [5, 14].

Поправки к диагональным коэффициентам отражения $\Delta r_{s,p}$ и коэффициент $\mathcal{R}$, описывающий конверсию поляризации при отражении, являются линейными функциями $\mathbf{q}$ и возникают в силу гиротропии системы. Выбирая плоскость падения (zx), получим:

$$\Delta r_s = -\frac{i\Gamma_s^0/D}{(\hbar\omega_0 - \hbar\omega - i\Gamma)^2}\Xi_{yy}, \quad (9)$$

$$\Delta r_p = -\frac{i\Gamma_s^0/D}{(\hbar\omega_0 - \hbar\omega - i\Gamma)^2} \times$$
$$\times [\cos^2\theta\Xi_{xx} - \sin^2\theta\Xi_{zz} + \sin\theta\cos\theta(\Xi_{zx} - \Xi_{xz})], \quad (10)$$

$$\mathcal{R} = -\frac{i\Gamma_s^0/D}{(\hbar\omega_0 - \hbar\omega - i\Gamma)^2}(\cos\theta\Xi_{yx} - \sin\theta\Xi_{yz}), \quad (11)$$

где $D = \sum_\nu |d_\nu^y|^2$ вычисляется при $q = 0$ и $B = 0$.

Из-за конверсии поляризации в отраженном свете появляются два параметра Стокса, отсутствовавшие в падающем – это степень линейной поляризации в плоскости, составляющей 45° с плоскостью падения $(\rho_{\rm lin})$, и степень круговой поляризации $(\rho_{\rm circ})$. Они связаны с коэффициентом конверсии $\mathcal{R}$ соотношениями

$$\rho_{\rm lin} = 2{\rm Re}\,(\mathcal{R}/r_i)\,, \quad \rho_{\rm circ} = 2{\rm Im}\,(\mathcal{R}/r_i)\,, \quad (12)$$

где $i = s, p$ – поляризация падающего света, а r_i – коэффициент отражения от всей структуры, содержащей квантовую яму [5].

3. Естественная оптическая активность квантовых ям. В работе [5] был исследован фундаментальный вопрос: обладают ли квантовые ямы естественной оптической активностью? Для этого были измерены параметры Стокса света, отраженного от (001) квантовых ям вблизи легкого экситона. Была обнаружена конверсия поляризации: наклонно падавший s поляризованный свет отражался частично p поляризованным и наоборот. Сопоставление экспериментальных данных с развитой теорией продемонстрировало, что этот эффект в значительной мере обусловлен именно естественной оптической активностью [5].

Феноменологически, конверсия поляризации происходит из-за эффективного магнитного поля $\mathbf{B}_{\rm eff}$, возникающего при учете спин-орбитального взаимодействия (3), которое удобно записать в виде $\mathcal{H} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}_{\rm eff}$. Поле $\mathbf{B}_{\rm eff}$, линейное по волновому вектору световой волны, воздействует на поляризацию отраженного света так же, как реальное магнитное поле в магнитооптическом эффекте Керра. Из этой аналогии ясно, что естественная оптическая активность в отражении будет наблюдаться только в том случае, если есть ненулевая проекция $\mathbf{B}_{\rm eff}$ на $\mathbf{q}$. Поэтому структурная асимметрия, приводящая к спин-орбитальному взаимодействию Рашбы с $\mathbf{B}_{\rm eff} \perp \mathbf{q}$, не проявляет себя в конверсии поляризации. В то же время объемная инверсионная асимметрия приводит к естественной оптической активности, поскольку $\mathbf{B}_{\rm eff} \parallel \mathbf{q}$, когда плоскость падения содержит одну из кубических осей $\langle 100\rangle$ [11, 12].

Микроскопическая природа конверсии состоит в том, что смешивание состояний электронов и легких дырок с противоположными спинами приводит к возбуждению легкого экситона при любой поляризации света, см. рис. 1. Подчеркнем, что конверсия поляризации запрещена на тяжелом экситоне, поскольку он не имеет компоненты дипольного момента вдоль оси роста z.

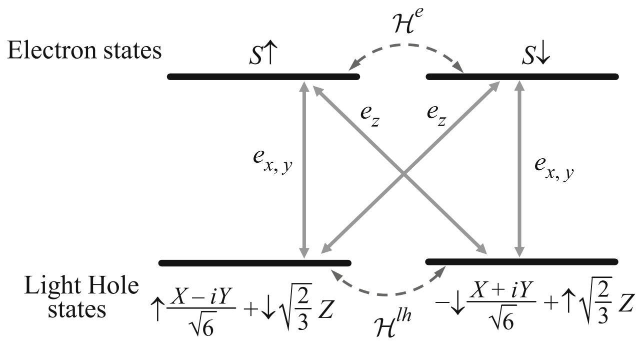

Рис. 1. (Цветной онлайн) Микроскопический механизм естественной оптической активности. S, X, Y, Z – орбитальные части блоховских амплитуд соответствующей симметрии, $\uparrow, \downarrow$ – их спиновые части. Спин-орбитальные взаимодействия $\mathcal{H}^e$ и $\mathcal{H}^{lh}$, смешивающие вырожденные состояния соответственно электронов и легких дырок, делают возможным возбуждение одного и того же состояния легкого экситона как в поляризации $\mathbf{e} \parallel z$, так и при $\mathbf{e} \perp z$

Матричные элементы дипольного момента легкого экситона $\mathbf{e}\cdot\mathbf{d}_{e,s;h,m}$ в базисе $e, \pm 1/2$, $lh, \pm 1/2$ имеют следующий вид

$$\mathbf{e}\cdot\mathbf{d} = \frac{d_{X_{lh}}}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} e_- & -2e_z \\ 2e_z & e_+ \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Здесь $e_\pm = e_x \pm ie_y$, и $d_{X_{lh}} = \langle S|d^x|X\rangle\,\langle e1|lh1\rangle$, где первый множитель – межзонный матричный элемент дипольного момента на блоховских функциях, представленных на рис. 1, а второй – перекрытие огибающих основных подзон размерного квантования электрона и легкой дырки.

Учитывая спин-орбитальное взаимодействие (3), вызванное объемной инверсионной асимметрией, из (6) получаем ненулевые компоненты тензора $\hat{\boldsymbol{\Xi}}$ в следующем виде:

$$\Xi_{xz} = -\Xi_{zx} = \frac{2}{3}|d_{X_{lh}}|^2 i\beta_{X_{lh}}(q_y \cos 2\varphi + q_x \sin 2\varphi),$$
$$\Xi_{yz} = -\Xi_{zy} = \frac{2}{3}|d_{X_{lh}}|^2 i\beta_{X_{lh}}(q_x \cos 2\varphi - q_y \sin 2\varphi). \tag{14}$$

Здесь введена экситонная постоянная Дрессельхауза $\beta_{X_{lh}}$, связанная с $\beta_{e,lh}$ из (3) следующим образом:

$$\beta_{X_{lh}} = \frac{\beta_e m_e - \beta_{lh} m_{lh}}{m_e + m_{lh}}, \tag{15}$$

где $m_{e,lh}$ – эффективные массы электрона и легкой дырки для движения в плоскости ямы.

Из (9), (10) и (11) получаем, что поправки к диагональным коэффициентам отражения имеют вид: $\Delta r_s = 0$,

$$\Delta r_p = -\frac{4\beta_{X_{lh}} q_b \Gamma_0}{(\hbar\omega_{X_{lh}} - \hbar\omega - i\Gamma)^2} \sin^2\theta \sin 2\varphi, \tag{16}$$

а коэффициент конверсии поляризации $s \leftrightarrow p$ дается выражением [5]

$$\mathcal{R} = -\frac{2\beta_{X_{lh}} q_b \, \Gamma_s^0}{(\hbar\omega_{X_{lh}} - \hbar\omega - i\Gamma)^2} \sin^2\theta \cos 2\varphi. \tag{17}$$

Здесь $\omega_{X_{lh}}$ – резонансная частота экситона с легкой дыркой, q_b – величина волнового вектора внутри материала барьера, а φ – угол между плоскостью падения и осью [100].

Зависимость $\mathcal{R} \propto \cos 2\varphi$ отражает обсуждавшуюся выше анизотропию эффективного магнитного поля $\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{q})$: эффект конверсии поляризации максимален, когда $\varphi = 0, \pi/2$, т.е. при ориентации плоскости падения вдоль кубических осей, и отсутствует при $\varphi = \pm\pi/4$. В работе [5] эта зависимость наблюдалась экспериментально.

Из (17) следует, что эффект конверсии поляризации возможен только при наклонном падении и является четным по углу падения. Количественное сопоставление экспериментальных данных [5] с выражением (17) позволило определить спин-орбитальную постоянную $\beta_{X_{lh}} \approx \beta_{lh}$ для исследованных ZnSe квантовых ям. При этом принималось во внимание многократное отражение света в реальной структуре, содержащей квантовую яму, а также то, что конверсия поляризации может произойти не только при отражении, но и при прохождении квантовой ямы: соответствующий коэффициент пропускания $\mathcal{T} = -\mathcal{R}$, см. дополнительные материалы к работе [5]. Из формулы (17) следует оценка $\mathcal{R} \sim \beta_{lh}\theta^2(\omega_{X_{lh}}/c)\Gamma_0/\Gamma^2$. Отсюда с помощью (12) получаем $\rho_{\text{lin,circ}} \sim 1\,\%$, что по порядку величины совпадает с экспериментальными данными, полученными на ZnSe квантовых ямах [5].

Несмотря на то, что коэффициенты конверсии поляризации $s \to p$ и $p \to s$ совпадают, отражение от структур с квантовыми ямами при наклонном падении различно для s и p поляризованного света. Поэтому в структурах специального дизайна удалось усилить эффект конверсии в p поляризации в несколько раз [6].

4. Магнитогиротропные эффекты. Явления, обусловленные магнитогиротропией – см. последнее слагаемое в (2), отличаются по симметрии от магнитооптических эффектов Фарадея и Керра, поскольку билинейная комбинация компонент векторов $\mathbf{q}$ и $\mathbf{B}$ инвариантна по отношению к операции инверсии времени. Это позволяет разделять соответствующие вклады в магнитооптических экспериментах. В таблице 1 представлены результаты феноменологического анализа возможных вкладов в коэффициенты отражения, линейных по магнитному полю. Сравниваются магнитогиротропные вклады, обусловленные структурной асимметрией квантовых ям, и вклады от магнитооптического эффекта Керра, который может быть существенен на тяжелом экситоне в квантовых ямах с магнитными примесями [15]. Видно, что при ориентации магнитного поля перпендикулярно плоскости падения ($\mathbf{B} \perp \mathbf{q}$) сравнимые вклады в диагональные коэффициенты отражения означают доминирование магнитогиротропии. Если же магнитное поле лежит в плоскости падения света, то линейный по $\mathbf{B}$ вклад в коэффициент конверсии поляризации $s \leftrightarrow p$ возможен из-за обоих эффектов. Однако и в этом случае данные вклады можно разделить, исследуя, например, конверсию s и p поляризованного света в циркулярно-поляризованный, как это было сделано в работе [9]. Действительно, как следует из табл. 1, полусумма и полуразность таких величин равны, соответственно, вкладам магнитогиротропии и эффекта Керра.

Таблица 1. Вклады в коэффициенты отражения при различных ориентациях магнитного поля относительно плоскости падения: магнитогиротропные, обусловленные *структурной* асимметрией, и от эффекта Керра

	Магнитогиротропия	Эффект Керра
$\mathbf{B} \perp \mathbf{q}$	$\Delta r_p \sim \Delta r_s$	Δr_p; $\Delta r_s = 0$
$\mathbf{B} \parallel \mathbf{q}$	$r_{sp} = r_{ps} = \mathcal{R}$	$r_{sp} = -r_{ps}$

В таблицах 2 и 3 приведены вклады, обусловленные объемной инверсионной асимметрией. Они зависят от ориентации магнитного поля не только относительно плоскости падения света, но и относительно кристаллографических осей. Из таблиц 2 и 3 видно, что вклад эффекта Керра в отражение не интерферирует с вкладом объемной инверсионной асимметрии ни в одной из геометрий.

Таблица 2. Вклады в коэффициенты отражения при $\mathbf{B}, \mathbf{q} \parallel \langle 100 \rangle$: магнитогиротропные, обусловленные *объемной* асимметрией, и от эффекта Керра

	Магнитогиротропия	Эффект Керра
$\mathbf{B} \perp \mathbf{q}$	$r_{sp} = r_{ps} = \mathcal{R}$	Δr_p; $\Delta r_s = 0$
$\mathbf{B} \parallel \mathbf{q}$	$\Delta r_p \sim \Delta r_s$	$r_{sp} = -r_{ps}$

Таблица 3. Вклады в коэффициенты отражения при $\mathbf{B}, \mathbf{q} \parallel \langle 110 \rangle$: магнитогиротропные, обусловленные *объемной* асимметрией, и от эффекта Керра

	Магнитогиротропия	Эффект Керра
$\mathbf{B} \perp \mathbf{q}$	$\Delta r_p \sim \Delta r_s$	$r_{sp} = -r_{ps}$
$\mathbf{B} \parallel \mathbf{q}$	$r_{sp} = r_{ps} = \mathcal{R}$	Δr_p; $\Delta r_s = 0$

В реальных образцах могут присутствовать оба вида асимметрии. Из таблиц 1–3 видно, что при ориентации плоскости падения вдоль осей $\langle 110 \rangle$ вклады структурной и объемной асимметрии складываются, а при ориентации по кубическим осям $\langle 100 \rangle$ они не интерферируют, что позволяет разделять их экспериментально.

В ближайших подразделах будут последовательно рассмотрены магнитогиротропные вклады в отражение, вызванные объемной и структурной асимметрией квантовых ям.

4.1. Объемно-асимметричные ямы. Магнитогиротропные вклады в восприимчивость (001) квантовых ям, выращенных из III-V или II-VI материалов с решеткой цинковой обманки, т.е. обладающих объемно-инверсионной асимметрией, микроскопически получаются с учетом спин-орбитального взаимодействия из (6), где магнитное поле учтено в матричных элементах дипольного момента. Поскольку компоненты поля в плоскости ямы смешивают состояния тяжелых и легких дырок, магнитогиротропные эффекты возможны на тяжелом экситоне. Учитывая магнитное поле $\mathbf{B} \perp z$ в гамильтониане Латтинжера [8], получим, что матричные элементы дипольного момента экситона $\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{e,s;h,m}$ в выбранном в (3) базисе $e, \pm 1/2$, $hh, \mp 3/2$ имеют вид

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{d} = -\frac{d_{X_{hh}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e_+ - 2\zeta B_+ e_z & e_- \zeta B_- \\ e_+ \zeta B_+ & e_- + 2\zeta B_+ e_z \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Здесь $d_{X_{hh}} = \langle S|d^x|X\rangle \langle e1|hh1\rangle$, а малый параметр ζ дается выражением

$$\zeta = \frac{\gamma_3 e\hbar}{m_0 c\sqrt{3}\, \langle e1|hh1\rangle} \sum_n \frac{\langle e1|\{ik_z z\}|lhn\rangle}{E_{hh1} - E_{lhn}}, \tag{19}$$

в котором суммирование производится по легкодырочным подзонам с четными огибающими ($n = 1, 3, 5 \ldots$). Здесь фигурные скобки обозначают антикоммутатор $\{AB\} = (AB + BA)/2$, γ_3 – параметр Латтинжера, а E_{hh1} и E_{lhn} – энергии размерного квантования основного уровня тяжелых дырок и n-го уровня легких дырок.

Выражение (18) показывает, что в магнитном поле возбуждение тяжелого экситона происходит при любой поляризации света, см. рис. 2. Из (18) и (3) получаются магнитогиротропные вклады в нелокальную восприимчивость в виде (6), где $\omega_0 = \omega_{X_{hh}}$ – резонансная частота тяжелого экситона, а ненулевые компоненты тензора $\hat{\boldsymbol{\Xi}}$ есть

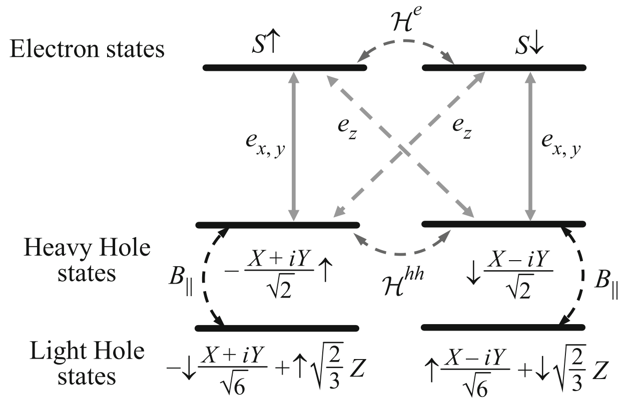

Рис. 2. (Цветной онлайн) Микроскопический механизм магнитогиротропии. Магнитное поле смешивает состояния тяжелых и легких дырок с противоположными спинами. С учетом линейных по волновому вектору спин-орбитальных взаимодействий $\mathcal{H}^e$ и $\mathcal{H}^{hh}$, становится разрешенным возбуждение одного и того же состояния тяжелого экситона при любой поляризации света $e_{x,y,z}$

$$\Xi_{xx} \pm \Xi_{yy} = 4\zeta \tilde{\beta}_{e,hh} |d_{X_{hh}}|^2 \times \\ \times \left[(q_x B_x \mp q_y B_y) \cos 2\varphi \mp (q_y B_x \pm q_x B_y) \sin 2\varphi \right], \tag{20}$$

$$\Xi_{xy} = \Xi_{yx} = -2\zeta \tilde{\beta}_{hh} |d_{X_{hh}}|^2 \times \\ \times \left[(q_x B_y - q_y B_x) \cos 2\varphi - (q_x B_x + q_y B_y) \sin 2\varphi \right]. \tag{21}$$

Здесь введены постоянные

$$\tilde{\beta}_{e,hh} = \beta_{e,hh} \frac{m_{e,hh}}{m_e + m_{hh}}, \tag{22}$$

где m_{hh} – эффективная масса тяжелой дырки в плоскости ямы. Эти выражения согласуются с требованиями симметрии, что можно проверить для случаев, когда x, y – оси $\langle 100 \rangle$ ($\varphi = 0$) и $\langle 110 \rangle$ ($\varphi = \pi/4$).

Находя далее из (9), (10) и (11) коэффициенты отражения от квантовой ямы, получим магнитогиротропный вклад в матрицу Джонса (7) вблизи тяжелого экситона в виде

$$\Delta r_{s,p} = -\frac{2\zeta q_b \sin\theta i\Gamma^0_{s,p}}{(\hbar\omega_{X_{hh}} - \hbar\omega - i\Gamma)^2} \times$$
$$\times \left[(\tilde{\beta}_e \mp \tilde{\beta}_{hh})B_\parallel \cos 2\varphi - (\tilde{\beta}_e \pm \tilde{\beta}_{hh})B_\perp \sin 2\varphi\right], \quad (23)$$

$$\mathcal{R} = \frac{2\zeta\tilde{\beta}_{hh} q_b \sin\theta (B_\perp \cos 2\varphi - B_\parallel \sin 2\varphi) i\Gamma_0}{(\hbar\omega_{X_{hh}} - \hbar\omega - i\Gamma)^2}. \quad (24)$$

Здесь φ – угол между плоскостью падения света и осью [100], а $B_{\parallel,\perp}$ – компоненты магнитного поля, параллельная и перпендикулярная плоскости падения. Данные зависимости от ориентации плоскости падения согласуются с требованиями пространственной симметрии. В рассматриваемых объемно-асимметричных квантовых ямах имеется плоскость отражения (110). Следовательно, если плоскость падения совпадает с ней ($\varphi = \pm\pi/4$), то комбинация $qB_\perp$, инвариантная при отражении, может присутствовать в Δr_s и Δr_p. В то же время вклад $\propto qB_\parallel$, меняющий знак при отражении, разрешен симметрией в коэффициенте конверсии поляризации $r_{sp} = r_{ps} = \mathcal{R}$, потому что s и p компоненты электрического поля являются соответственно нечетной и четной относительно такого отражения.

Полученные выражения показывают, что в объемно-асимметричных ямах в геометрии $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B} \parallel \langle 100\rangle$ будут максимальны поправки к диагональным коэффициентам отражения Δr_s и Δr_p, а в геометрии $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B} \parallel \langle 110\rangle$ максимален коэффициент конверсии поляризации $\mathcal{R}$, см. также табл. 2 и 3. В работе [8] исследовались магнитогиротропные поправки Δr_s и Δr_p при $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B}$ вблизи тяжелого экситона в квантовых ямах на основе GaAs и CdTe. Они резонансно усиливались вблизи $\omega \approx \omega_{X_{hh}}$. В согласии с теорией сигналы были, соответственно, максимальны и минимальны при ориентации плоскости падения и магнитного поля вдоль кубических осей и под 45° к ним.

Отношение поправок для p и s поляризованного падающего света при плоскости падения (100) согласно (23) есть

$$\left|\frac{\Delta r_p}{\Delta r_s}\right| = \cos^2\theta \left|\frac{\tilde{\beta}_e + \tilde{\beta}_{hh}}{\tilde{\beta}_e - \tilde{\beta}_{hh}}\right|. \quad (25)$$

Это соотношение позволяет определять относительный знак и отношение абсолютных величин β_e и β_{hh}, см. [8].

Выражение (23) позволяет сделать оценку для магнитогиротропных поправок: $\Delta r_{s,p} \sim (\beta q\Gamma_0/\Gamma^2)(a/l_B)^2$, где a – ширина квантовой ямы и l_B – магнитная длина. Отсюда получаем $\Delta r_{s,p} \sim 10^{-3} B\,\text{Тл}^{-1}$, что находится в количественном согласии с данными эксперимента для ям GaAs и CdTe, исследовавшихся в работе [8].

4.2. Структурно-асимметричные ямы. С точки зрения теории симметрии структурно-асимметричные ямы можно рассматривать как имеющие точечную группу симметрии $C_{\infty v}$. В этой группе, помимо обычной пропорциональности $P_+ \propto E_+$, возможна и другая связь между циркулярными компонентами поляризации и электрического поля: $P_+ \propto iB_+ q_+ E_-$. Отсюда видно, что магнитогиротропия приводит к возбуждению тяжелого экситона в обеих круговых поляризациях, рис. 3. Такая связь означает, что есть следующие вклады

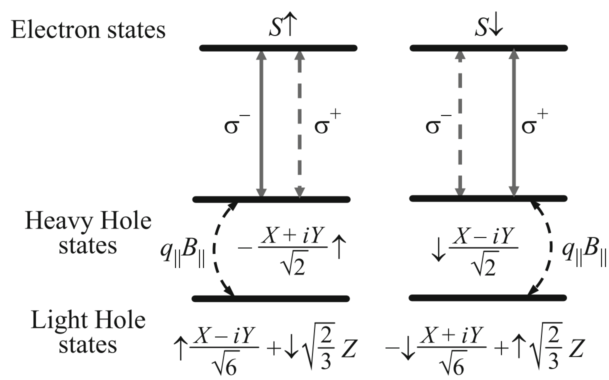

Рис. 3. (Цветной онлайн) Микроскопический механизм магнитогиротропии в структурно-асимметричных ямах. С учетом волнового вектора света и магнитного поля состояния тяжелых и легких дырок, активные в двух круговых поляризациях, смешиваются. В результате тяжелый экситон возбуждается как σ^+, так и σ^- поляризованным светом

в тензор диэлектрической восприимчивости (2), билинейные по компонентам $\mathbf{B}$ и $\mathbf{q}$ в плоскости ямы [3, 4, 9]:

$$\begin{aligned} \chi_{xy} + \chi_{yx} &= C(q_y B_y - q_x B_x), \\ \chi_{xx} - \chi_{yy} &= C(q_x B_y + q_y B_x). \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь x, y – произвольные оси в плоскости ямы, а функция $C(z, z')$ – единственная ненулевая компонента тензора 4 ранга $\hat{\mathbf{C}}$, введенного в (2). Из этих соотношений следует, что магнитогиротропия в структурно-асимметричных ямах приводит к тому, что в плоскости квантовой ямы появляется оптическая ось – биссектриса между направлениями векторов $\mathbf{q}$ и $\mathbf{B}$.

Можно было бы рассчитать функцию C, учтя, аналогично предыдущему разделу, спин-орбитальное взаимодействие Рашбы, возникающие в меру структурной асимметрии. Однако более эффективно асимметрия квантовой ямы проявляется через смешивание состояний тяжелых и легких дырок. По этому механизму матричные элементы дипольного момента тяжелого экситона имеют вид [9]

$$\mathbf{e}\cdot\mathbf{d} = -\frac{d_{X_{hh}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e_+ - i\xi B_+ k_+ e_- & -2i\xi B_- k_- e_z \\ -2i\xi B_+ k_+ e_z & e_- + i\xi B_- k_- e_+ \end{pmatrix}, \tag{27}$$

где $k_\pm = k_x \pm i k_y$ – компоненты волнового вектора дырки. Малый вещественный параметр ξ, возникающий в меру структурной асимметрии ямы, дается выражением

$$\xi = \frac{e\hbar}{m_0 c}\sum_n \frac{\langle e1|lhn\rangle}{\langle e1|hh1\rangle}\left[\frac{2\gamma_2}{\sqrt{3}}\frac{z_{lhn,hh1}}{E_{hh1}-E_{lhn}} - \right.$$
$$\left. - \frac{\gamma_3\hbar^2\varkappa}{m_0}\frac{\langle lhn|ik_z|hh1\rangle}{(E_{hh1}-E_{lhn})^2}\right], \tag{28}$$

где γ_2 и $\varkappa$ – параметры Латтинжера. Первое слагаемое в (28) получается из недиагональных $\propto k^2$ вкладов в гамильтониан Латтинжера в магнитном поле, а второе – из линейного по $\mathbf{k}$ смешивания тяжелых и легких дырок и зеемановского расщепления состояний легкой дырки [9]. Оба вклада отличны от нуля только в структурно-асимметричных ямах. Действительно, если яма симметрична, то для нечетных $n = 1, 3, 5\ldots$ равны нулю матричные элементы координаты и импульса $z_{lhn,hh1}$ и $\langle lhn|k_z|hh1\rangle$, а для четных $n = 2, 4, \ldots$ нулю равно перекрытие электронной и легкодырочной огибающих $\langle e1|lhn\rangle$. Поэтому $\xi \neq 0$ только в силу асимметрии ямы, и этот параметр меняет знак, например, при изменении знака электрического поля, приложенного перпендикулярно симметричной яме. Отношение двух вкладов в (28) можно оценить как $\sim \varkappa m/m_0$, где m имеет порядок массы тяжелой дырки для движения вдоль оси размерного квантования. Для ям на основе GaAs и CdTe это отношение меньше единицы, поэтому первый вклад сильнее [9].

Расчет экситонной диэлектрической поляризации по (4), (5) с учетом (27) дает восприимчивость в виде (26), в котором

$$C(z,z') = 4\xi\nu\frac{\Phi(z)\Phi(z')\,|d_{X_{hh}}|^2}{\hbar\omega_{X_{hh}} - \hbar\omega - i\Gamma}. \tag{29}$$

Здесь $\nu = m_{hh}/(m_e + m_{hh})$.

С учетом структурной асимметрии ($\xi \neq 0$), появляются магнитогиротропные поправки к диагональным коэффициентам отражения для s и p поляризованного света:

$$\Delta r_{p,s} = \pm 2\xi\nu q_b \sin\theta B_\perp r_{p,s}^{QW}, \tag{30}$$

а также коэффициент конверсии поляризации:

$$\mathcal{R} = -2\xi\nu q_b \sin\theta B_\parallel \cos\theta\, r_s^{QW}. \tag{31}$$

Здесь знаки $\perp$ и $\parallel$ обозначают ориентацию магнитного поля, лежащего в плоскости ямы, по отношению к плоскости падения света, а $r_{p,s}^{QW}$ даются формулой (8).

Можно оценить параметр асимметрии как $\xi \sim (e/\hbar c)a^2 z_{lh1,hh1}$, где a – ширина квантовой ямы. Степень конверсии поляризации $\mathcal{R} \approx \xi q B_\parallel$. Эта оценка совпадает по порядку величины с экспериментальными значениями $\mathcal{R} \sim 10^{-3} B\,\text{Тл}^{-1}$, полученными на тяжелом экситоне в GaAs и CdTe асимметричных квантовых ямах в магнитном поле, лежащем в плоскости падения при $z_{lh1,hh1}/a \approx 0.2$ [9].

5. Заключение. К настоящему времени магнитогиротропия в квантовых ямах исследована в геометрии поля, лежащего в плоскости падения света. Как следует из развитой теории, при поперечной ориентации поля возможна конверсия поляризации $s \leftrightarrow p$ за счет объемной асимметрии и поправки к диагональным коэффициентам отражения $\Delta r_{s,p}$, обусловленные структурной асимметрией. Исследование на одном образце при различных ориентациях магнитного поля и плоскости падения позволит определить соотношение степеней асимметрии и различных вкладов в магнитогиротропию.

Автор благодарит Е. Л. Ивченко за полезные дискуссии. Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант # 19-02-00095) и Фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. E. L. Ivchenko and S. D. Ganichev, in *Spin Physics in Semiconductors*, ed. by M. I. Dyakonov, 2nd edition, Springer International Publishing AG (2017).
2. Л. Е. Голуб, Е. Л. Ивченко, Б. З. Спивак, Письма в ЖЭТФ **105**, 744 (2017).
3. L. E. Golub, EPL (Europhysics Letters) **98**, 54005 (2012).
4. Л. Е. Голуб, Ф. В. Порубаев, ФТТ **55**, 2128 (2013).
5. L. V. Kotova, A. V. Platonov, V. N. Kats, V. P. Kochereshko, S. V. Sorokin, S. V. Ivanov, and L. E. Golub, Phys. Rev. B **94**, 165309 (2016).
6. Л. В. Котова, А. В. Платонов, В. П. Кочерешко, С. В. Сорокин, С. В. Иванов, Л. Е. Голуб, ФТТ **59**, 2148 (2017).

7. V. V. Bel'kov and S. D. Ganichev, Semicond. Sci. Technol. **23**, 114003 (2008).
8. L. V. Kotova, V. N. Kats, A. V. Platonov, V. P. Kochereshko, R. André, and L. E. Golub, Phys. Rev. B **99**, 035302 (2019).
9. L. V. Kotova, V. N. Kats, A. V. Platonov, V. P. Kochereshko, R. André, and L. E. Golub, Phys. Rev. B **97**, 125302 (2018).
10. A. V. Poshakinskiy, D. R. Kazanov, T. V. Shubina, and S. A. Tarasenko, Nanophotonics **7**, 753 (2018).
11. Л. Е. Голуб, УФН **182**, 876 (2012).
12. S. D. Ganichev and L. E. Golub, Phys. Status Solidi B **251**, 1801 (2014).
13. M. V. Durnev, M. M. Glazov, and E. L. Ivchenko, Phys. Rev. B **89**, 075430 (2014).
14. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science Int., Harrow, UK (2005).
15. F. Spitzer, A. N. Poddubny, I. A. Akimov, V. F. Sapega, L. Klompmaker, L. E. Kreilkamp, L. V. Litvin, R. Jede, G. Karczewski, M. Wiater, T. Wojtowicz, D. R. Yakovlev, and M. Bayer, Nat. Phys. **14**, 1043 (2018).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 27 – 31 © 2020 г. 10 января

Нелинейное усиление резонансного поглощения при филаментации импульса среднего инфракрасного диапазона в газах высокого давления

В. О. Компанец[+], *Д. Е. Шипило*[+*×], *И. А. Николаева*[*], *Н. А. Панов*[+*×], *О. Г. Косарева*[+*×1)], *С. В. Чекалин*[+]

[+]*Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия*

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

[×]*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119333 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 ноября 2019 г.
После переработки 22 ноября 2019 г.
Принята к публикации 23 ноября 2019 г.

В настоящей работе экспериментально обнаружено, что филаментация фемтосекундного импульса с центральной длиной волны 1.3 мкм в смеси азота при давлении 30 бар и паров воды при давлении 2 мбар приводит к длинноволновому сдвигу спектра импульса и обусловленному им усилению резонансного поглощения на линиях воды в окрестности 1.35 мкм. Реплика полосы резонансного поглощения зарегистрирована в спектральном континууме прошедшего через кювету импульса. Характерные линии поглощения воды, обнаруженные экспериментально, соответствуют результатам численного моделирования трехмерной нестационарной задачи с учетом резонансного и нерезонансного поглощения в молекулярных газах.

DOI: 10.31857/S0370274X20010051

1. Введение. Филаментация фемтосекундного лазерного излучения в атмосфере является сложной проблемой экспериментальной физики в связи с вероятностью пробоя оптики высокоинтенсивным излучением при выводе его на протяженную воздушную трассу, блуждания пучка вследствие неоднородностей фазы в турбулентной атмосфере и интенсивности пучка на выходе из решеточного компрессора [1–8]. Особый интерес представляет филаментация ультракоротких импульсов с центральной длиной волны в среднем и дальнем инфракрасном диапазоне [9–14]. В высокоинтенсивном канале такого излучения развивается эффективная генерация нечетных гармоник, переходящих с распространением в широкополосный суперконтинуум, простирающийся от ультрафиолетового до терагерцового диапазона.

Особенностью филаментации импульсов с центральной длиной волны в среднем инфракрасном диапазоне является высокая критическая мощность самофокусировки, растущая в атмосферном воздухе как квадрат длины волны. Для импульса с центральной длиной волны 3.9 мкм и длительностью около 100 фс энергия, необходимая для создания филамента на лабораторной трассе в воздухе, составляет порядка 30 мДж [15], т.е. критическая мощность самофокусировки составляет величину ~ 300 ГВт. С ростом давления критическая мощность уменьшается. Поэтому, если энергия входного импульса мала для формирования филамента на лабораторной трассе, превышение пиковой мощности импульса над критической и наблюдение филаментации может быть реализовано в кювете с газом повышенного давления. Так, авторы [16] получили формирование максимума в стоксовой области спектра импульса с центральной длиной волны 3.9 мкм в азоте и кислороде при давлении $\sim$4 бар. При атмосферном давлении такой стоксов сдвиг спектра наблюдался на воздушных трассах и в азоте атмосферного давления при филаментации импульса на длине волны 800 нм в коллимированном или слабо сфокусированном пучке [17, 18].

Основная причина стоксова сдвига в филаменте состоит в зависимости фазы импульса от интенсивности в керровской среде – атмосферных газах. Фазовый набег, пропорциональный интенсивности, обеспечивает изменение мгновенной частоты в импульсе, пропорциональное скорости роста интенсивности во времени. Таким образом, на переднем фронте импульса частота уменьшается, а на заднем – увеличивается, и спектр импульса оказывается разде-

1)e-mail: kosareva@physics.msu.ru

лен на две примерно равные по энергии стоксову и антистоксову части [19]. В условиях самофокусировки компоненты входного импульса, испытывающие максимальный стоксов сдвиг, оказываются максимально сжатыми и распространяются вдоль оси пучка. На каждом новом расстоянии вдоль филамента происходит обогащение приосевой части пучка на фронте импульса из энергии, запасенной на периферии пучка [20], которую также называют резервуаром филамента [21]. Соответственно, стоксов сдвиг накапливается с расстоянием, пока поддерживается высокая интенсивность в филаменте. Уширение спектра в высокочастотную область при этом сохраняется, однако задний фронт импульса дефокусируется в самонаведенной лазерной плазме [22]. Таким образом, локализованной и в пространстве, и в спектральной области остается лишь стоксова компонента.

Именно стоксов сдвиг спектра филаментирующего излучения является причиной усиления резонансного поглощения на молекулярных линиях воды и углекислого газа [13, 15, 23, 24]. Если стоксова часть спектра попадает в линию поглощения, теряется существенная доля энергии лазерного импульса. Это ведет к сокращению длины филамента и плазменного канала [24]. Зондирование атмосферы фемтосекундными импульсами среднего инфракрасного диапазона возможно, если центральная длина волны излучения находится в центре нелинейного окна прозрачности [24]. В лабораторных условиях определить нелинейное окно прозрачности можно при помощи широко перестраиваемых параметрических усилителей, накачиваемых лазерными системами на титан-сапфире. Энергия инфракрасного импульса в несколько сотен микроджоулей позволяет наблюдать филаментацию в газе при давлениях ниже 100 бар.

Наблюдение сверхуширения спектра фемтосекундных импульсов видимого диапазона в кюветах высокого давления [25] до 40 бар позволило установить, что критическая мощность самофокусировки газа обратно пропорциональна давлению газа в кювете. В последнее время были измерены зависимости коэффициента керровской нелинейности n_2 в ксеноне и углекислом газе от давления p до 100 бар [26] по уширению спектра основной гармоники хром-форстеритового лазера (центральная длина волны 1.24 мкм). Немонотонный характер зависимости $n_2(p)$ наиболее ярко проявлялся для CO_2 в сверхкритическом состоянии при небольшом (до 20 К или в относительных единицах до 6 %) превышении температуры над критической в короткой кювете длиной 11.6 см.

В настоящей работе экспериментально обнаружено явление усиления резонансного поглощения на молекулярных линиях воды импульса с центральной длиной волны 1.3 мкм, длительностью 100 фс и энергией от 10 до 200 мкДж. Газовая смесь состояла из водяного пара и молекулярного азота при давлении 30 бар. Парциальное давление водяного пара составляло 100–200 Па, температура кюветы 50–70 °C. В таких условиях на длине волны 1.3 мкм филаментация начинается уже при энергии 30 мкДж при давлении азота 100 бар, а при давлении 15 бар для филаментации и генерации суперконтинуума достаточно энергии 160 мкДж. Смещенный в длинноволновую часть спектр входного импульса испытывал поглощение на линии воды 1.35 мкм. Характерные линии поглощения воды явно проявились в длинноволновой части суперконтинуума, прошедшего через кювету импульса. Результаты численного моделирования филаментации в азоте с примесью водяного пара соответствуют экспериментальным данным. Получена зависимость от давления газа пороговой энергии генерации суперконтинуума и на ее основе – критической мощности самофокусировки и коэффициента керровской нелинейности n_2.

2. Эксперимент. Основой нашего экспериментального стенда является протяженная кювета высокого давления (см. рис. 1), специально сконструированная для исследования нелинейного распространения и филаментации лазерных импульсов в атомарных и молекулярных газах при давлениях от 10^{-3} до 120 бар и температурах до 150 °C. Длина кюветы составляет 75 см, перед входным окошком установлена линза с фокусным расстоянием 30 см.

Окна кюветы изготовлены из синтетического корунда, вырезанного перпендикулярно оптической оси кристалла для исключения эффекта двулучепреломления. Входное окно диаметром 13 мм, толщиной 3 мм и выходное окно диаметром 39 мм, толщиной 6.5 мм обеспечивают четырехкратный запас прочности для максимально возможного рабочего давления в кювете. Прочность и низкое температурное расширение лейкосапфира позволяют осуществлять измерения в широком диапазоне давлений и температур. Для регулировки температуры и защиты персонала от разрушения оптических окон кювета помещена в термостатированный бронешкаф.

Для управления дисперсией газов в кювете использовался резервуар для воды объемом 17 мл. Резервуар оборудован отдельной системой подогрева, его температура может на несколько десятков градусов превышать среднюю температуру кюветы. Высокая температура воды в резервуаре обеспечива-

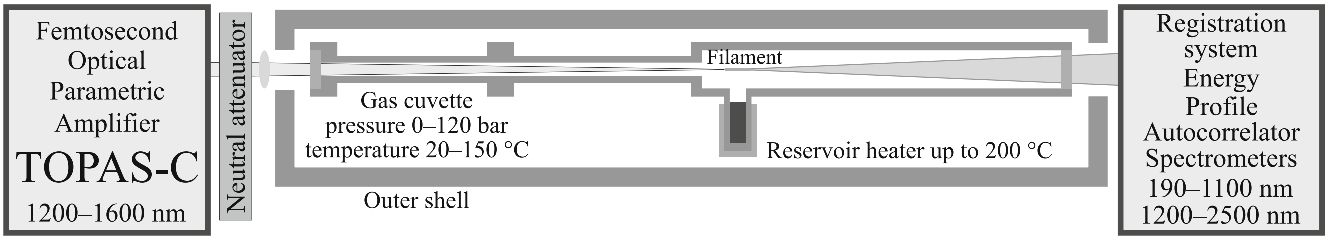

Рис. 1. (Цветной онлайн) Экспериментальная установка. Фемтосекундное излучение параметрического генератора Topas C фокусируется в кювету, заполненную газом под давлением до 120 бар. Длина кюветы 75 см. На выходе из кюветы располагается система диагностики энергии, поперечного профиля, спектра и длительности импульса

ет эффективное испарение/кипение жидкости в кювету высокого давления. Молекулы воды обладают колебательной полосой поглощения в окрестности 1.35 мкм, вследствие чего даже относительно небольшая концентрация водяного пара в воздухе существенно, вплоть до перехода в аномальный режим, меняет дисперсию газовой смеси в диапазоне 1.25–1.45 мкм. В наших экспериментах парциальное давление паров воды составляло 100–200 Па при температуре в резервуаре 50–70 °C. Давление азота в экспериментах с водяным паром устанавливалось равным 30 бар.

Для генерации фемтосекундного излучения в диапазоне 1.2–1.6 мкм использована сигнальная волна параметрического усилителя Topas-C (Light Conversion), накачиваемого титан-сапфировым лазером на базе усилителя Spitfire HP (Spectra Physics). Для измерений коэффициента керровской нелинейности выбраны длины волн 1.3–1.35 мкм, поскольку соответствующая им энергия импульса после параметрического усилителя близка к максимальной и составляет около 300 мкДж. Длительность (по половине высоты) импульса на длине волны 1.3 мкм на входе в кювету, измеренная с помощью одноимпульсного автокоррелятора ASF-20 (Авеста), составляла (105 ± 15) фс. Энергия импульса регулировалась нейтральным фильтром переменной оптической плотности и контролировалась детектором Fieldmax T0 с детектором PS10 (Coherent). Спектры на выходе из кюветы записаны с помощью волоконного спектрометра ASP-100MF (Авеста).

В целях исследования газа высокого давления как модельной среды для изучения филаментации в реальной атмосфере нами рассмотрены компрессия импульсов в филаменте [27, 28], генерация высокоэнергетичной стоксовой компоненты суперконтинуума [15, 17, 18, 24, 29] и поглощение этой компоненты на атмосферных линиях [13, 15, 23, 24] (конкретно изучена полоса воды в окрестности 1.35 мкм). Так, после распространения в кювете умеренного давления 13 бар импульс на длине волны 1.35 мкм вследствие нелинейного взаимодействия с газовой средой сжался с (90 ± 15) до (40 ± 15) фс в соответствии с исследованиями самосжатия в филаменте [28, 30].

Низкочастотная компонента суперконтинуума при филаментации в атмосфере смещается с расстоянием в длинноволновую область [17, 18] на десятки нанометров. Аналогичное смещение наблюдалось экспериментально и с ростом энергии [31]. В наших экспериментах изменение расстояния невозможно, однако при возрастании энергии фемтосекундного излучения, фокусируемого в кювету, с 10 до 190 мкДж зарегистрировано смещение низкочастотной компоненты континуума вплоть до (1.46 ± 0.05) мкм при накачке на (1.34 ± 0.02) мкм, см. рис. 2.

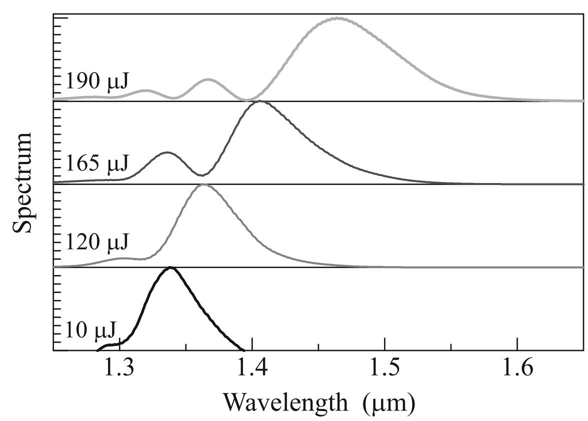

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр импульса с центральной длиной волны 1.35 мкм после филаментации в кювете, наполненной азотом под давлением 15 бар. При наименьшей энергии 10 мкДж филаментация не развивается

Низкочастотная компонента суперконтинуума хорошо локализована в спектре по сравнению с широкополосным высокочастотным континуумом [23] и несет десятки процентов энергии [18]. Поэтому, когда центральная длина волны импульса на входе в нелинейную среду оказывается несколько короче, но близко к линии поглощения газовой среды (паров воды), уширение спектра в низкочастотную область неизбежно связано с увеличением поглощения.

В эксперименте зарегистрировано резонансное поглощение излучения парами воды (полоса около 1.35 мкм) в низкочастотной области спектра (рис. 3, левая колонка) при филаментации импульса с цен-

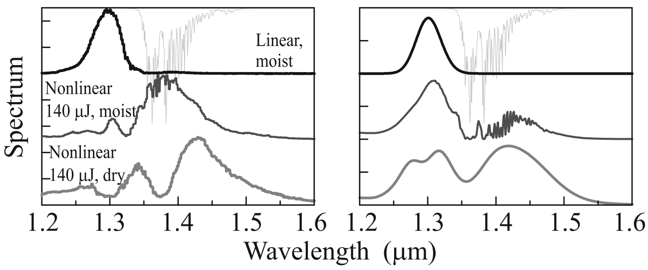

Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры импульса с центральной длиной волны 1.3 мкм на выходе из кюветы с азотом при давлении 30 бар в эксперименте (слева) и численном моделировании в условиях эксперимента (справа). Черные кривые – спектры при энергии импульса, недостаточной для развития нелинейных эффектов (менее 10 мкДж). Синие кривые – спектры импульса после филаментации в кювете с парами воды. Красные кривые – спектры импульса после филаментации в сухой кювете. Серая кривая сверху графиков — спектр поглощения водяного пара

тральной длиной волны 1.3 мкм в кювете с азотом при давлении 30 бар и температуре 70 °C. Численное моделирование, выполненное на основе модели [24], качественно воспроизводит результаты эксперимента (рис. 3, правая колонка).

Для определения зависимости коэффициента керровской нелинейности от давления газа в кювете эксперименты по филаментации проводились в аргоне и азоте. При фиксированном давлении газа и постепенном увеличении энергии импульса выше некоторого значения $W_{\rm blue}(p)$, измеренного до входного окошка кюветы, наблюдалось пороговое возникновение протяженного высокочастотного крыла на выходе из кюветы. Энергия $W_{\rm blue}$ (рис. 4a, левая ось) с учетом потерь на оптических элементах между измерителем средней мощности и средой высокого давления в кювете позволяет получить оценку критической мощности самофокусировки P_{cr}, показанную на правой оси рис. 4a.

Зависимость коэффициента керровской нелинейности $n_2 = 3.77\lambda^2/8\pi P_{cr}$ от давления (рис. 4b), где $\lambda = 1.35$ мкм – длина волны излучения, в области малых давлений прямо пропорциональна давлению $n_2(p) = n_2(p = 1\,\text{bar}) \times p$, однако насыща-

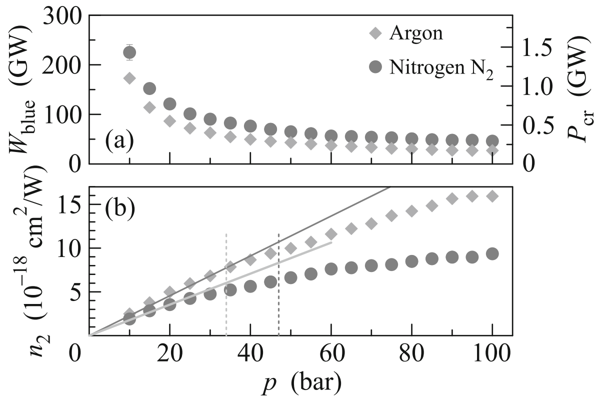

Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость от давления p пороговой энергии наблюдения высокочастотного крыла суперконтинуума $W_{\rm blue}$ (левая вертикальная ось) и соответствующей ей критической мощности самофокусировки P_{cr} (правая вертикальная ось) в азоте (зеленые точки) и аргоне (сиреневые точки). (b) – Коэффициенты керровской нелинейности азота и аргона n_2 в зависимости от давления (точки) и аппроксимации прямо пропорциональной зависимостью от давления (см. текст, сплошная линия). Вертикальные штриховые линии показывают критическое давление газов

ется с приближением давления к величине, соответствующей переходу в сверхкритическое состояние (47 бар для аргона и 34 бар для азота), что можно связать с усилением межмолекулярных взаимодействий в веществе. Полученная из экспериментальных данных оценка коэффициента керровской нелинейности при атмосферном давлении $n_2(p = 1\,\text{bar})$ составляет для аргона $(2.3 \pm 0.5) \times 10^{-19}$ см^2/Вт, для азота – $(1.8\pm0.3)\times10^{-19}$ см^2/Вт. Полученные величины $n_2(p = 1\,\text{bar})$ примерно вдвое ниже оценок [32] и вдвое выше недавних экспериментальных [33] и численных [34] результатов.

3. Заключение. При филаментации фемтосекундного импульса с длиной волны 1.3 мкм в газе высокого давления с полосой поглощения на 1.35 мкм, обусловленной примесью паров воды, получено нелинейное усиление резонансного поглощения вследствие формирования стоксова крыла спектра входного импульса. Появление эффективно поглощаемой средой стоксовой компоненты суперконтинуума при филаментации, зарегистрированное в эксперименте и подтвержденное численным расчетом, важно для определения окна прозрачности в задачах зондирования атмосферы.

В рамках апробации экспериментального стенда получены результаты по компрессии импульса в филаменте и спектральному сдвигу низкочастотного крыла континуума в соответствии с данными экспериментов на протяженных трассах в воздухе [16–18]. Измеренные коэффициенты керровской нелинейности азота и аргона при давлении 1 бар, $(1.8 \pm 0.3) \times \times 10^{-19}$ см^2/Вт и $(2.3 \pm 0.5) \times 10^{-19}$ см^2/Вт, соответствуют интерферометрическим измерениям [33].

Исследование выполнено на уникальной научной установке "Многоцелевой фемтосекундный лазерно-диагностический спектрометрический комплекс" за счет гранта Российского научного фонда (проект # 18-12-00422).

---

1. S. L. Chin, S. A. Hosseini, W. Liu, Q. Luo, F. Théberge, N. Aközbek, A. Becker, V. P. Kandidov, O. G. Kosareva, and H. Schroeder, Can. J. Phys. **83**, 863 (2005).
2. A. Couairon and A. Mysyrowicz, Phys. Rep. **441**, 47 (2007).
3. V. P. Kandidov, S. A. Shlenov, and O. G. Kosareva, Quantum Electron. **39**(3), 205 (2009).
4. S. L. Chin, T. Wang, C. Marceau, J. Wu, J. Liu, O. Kosareva, N. Panov, Y. Chen, J. Daigle, S. Yuan, A. Azarm, W. Liu, T. Seideman, H. Zeng, M. Richardson, R. Li, and Z. Xu, Laser Phys. **22**(1), 1 (2012).
5. V. P. Kandidov, O. G. Kosareva, M. P. Tamarov, A. Brodeur, and S. L. Chin, Quant. Electron. **29**(10), 911 (1999).
6. J. Kasparian, R. Sauerbrey, and S. L. Chin, Appl. Phys. B **71**, 877 (2000).
7. D. Pushkarev, E. Mitina, D. Uryupina, R. Volkov, A. Karabytov, and A. Savel'ev, Laser Phys. Lett. **15**(2), 025401 (2018).
8. S. V. Chekalin and V. P. Kandidov, Physics-Uspekhi **56**(2), 123 (2013).
9. B. Shim, S. E. Schrauth, and A. L. Gaeta, Opt. Express **19**(10), 9118 (2011).
10. D. Kartashov, S. Ališauskas, A. Pugžlys, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, and A. Baltuška, Opt. Lett. **37**(12), 2268 (2012).
11. E. O. Smetanina, V. Y. Fedorov, A. E. Dormidonov, and V. P. Kandidov, J. Phys. Conf. Ser. **541**(1), 012071 (2014).
12. A. V. Mitrofanov, A. A. Voronin, D. A. Sidorov-Biryukov, A. Pugžlys, E. A. Stepanov, G. Andriukaitis, S. Ališauskas, T. Flöry, A. B. Fedotov, A. Baltuška, and A. M. Zheltikov, Sci. Rep. **5**, 8368 (2015).
13. H. Liang, D. L. Weerawarne, P. Krogen, R. I. Grynko, C.-J. Lai, B. Shim, F. X. Kärtner, and K.-H. Hong, Optica **3**(7), 678 (2016).
14. S. Tochitsky, E. Welch, M. Polyanskiy, I. Pogorelsky, P. Panagiotopoulos, M. Kolesik, E. M. Wright, S. W. Koch, J. V. Moloney, J. Pigeon, and C. Joshi, Nat. Photonics **13**(1), 41 (2019).
15. V. Shumakova, S. Ališauskas, and P. Malevich, C. Gollner, A. Baltuška, D. Kartashov, A. M. Zheltikov, A. V. Mitrofanov, A. A. Voronin, D. A. Sidorov-Biryukov, and A. Pugžlys, Opt. Lett. **43**(9), 2185 (2018).
16. D. Kartashov, S. Ališauskas, A. Pugžlys, A. Voronin, A. Zheltikov, M. Petrarca, P. Bejot, J. Kasparian, W. Jérôme, J.-P. Wolf, and A. Baltuška, Opt. Lett. **38**(16), 3194 (2013).
17. Y. Chen, F. Théberge, C. Marceau, H. Xu, N. Aközbek, O. Kosareva, and S. L. Chin, Appl. Phys. B **91**(2), 219 (2008).
18. D. Uryupina, N. Panov, M. Kurilova, and A. Mazhorova, R. Volkov, S. Gorgutsa, O. Kosareva, and A. Savel'ev, Appl. Phys. B **110**(1), 123 (2013).
19. S. A. Akhmanov, V. A. Vysloukh, and A. S. Chirkin, *Optics of femtosecond laser pulses*, American Institute of Physics, N.Y. (1992).
20. V. P. Kandidov, O. G. Kosareva, and A. A. Koltun, Quantum Electron. **33**(1), 69 (2003).
21. M. Mlejnek, M. Kolesik, J. V. Moloney, and E. M. Wright, Phys. Rev. Lett. **83**, 2938 (1999).
22. O. G. Kosareva, V. P. Kandidov, A. Brodeur, C. Y. Chien, and S. L. Chin, Opt. Lett. **22**(17), 1332 (1997).
23. N. A. Panov, D. E. Shipilo, V. A. Andreeva, O. G. Kosareva, A. M. Saletsky, H. Xu, and P. Polynkin, Phys. Rev. A **94**(4), 041801 (2016).
24. N. A. Panov, D. E. Shipilo, A. M. Saletsky, W. Liu, P. G. Polynkin, and O. G. Kosareva, Phys. Rev. A **100**(2), 023832 (2019).
25. P. B. Corkum, C. Rolland, and T. Srinivasan-Rao, Phys. Rev. Lett. **57**(18), 2268 (1986).
26. E. Mareev, V. Aleshkevich, F. Potemkin, V. Bagratashvili, N. Minaev, and V. Gordienko, Opt. Express **26**(10), 13229 (2018).
27. C. P. Hauri, W. Kornelis, F. W. Helbing, A. Heinrich, A. Couairon, A. Mysyrowicz, J. Biegert, and U. Keller, Appl. Phys. B **79**(6), 673 (2004).
28. D. Uryupina, M. Kurilova, A. Mazhorova, N. Panov, R. Volkov, S. Gorgutsa, O. Kosareva, A. Savel'ev, and S. L. Chin, J. Opt. Soc. Am. B **27**(4), 667 (2010).
29. N. A. Panov, D. E. Shipilo, V. A. Andreeva, D. S. Uryupina, A. B. Savel'ev, O. G. Kosareva, and S. L. Chin, Appl. Phys. B **120**, 383 (2015).
30. G. Stibenz, N. Zhavoronkov, and G. Steinmeyer, Opt. Lett. **31**(2), 274 (2006).
31. M. Volkov, D. Uryupina, N. Panov, O. Kosareva, M. Kurilova, R. Volkov, and A. Savel'ev, J. Phys. B **48**(9), 094017 (2015).
32. V. Y. Fedorov and V. P. Kandidov, Laser Phys. **18**(12), 1530 (2008).
33. S. Zahedpour, J. K. Wahlstrand, and H. M. Milchberg, Opt. Lett. **40**(24), 5794 (2015).
34. J. M. Brown, A. Couairon, and M. B. Gaarde, Phys. Rev. A **97**(6), 063421 (2018).

Pis'ma v ZhETF, vol. 111, iss. 1, pp. 32 – 33

Optical Kerr nonlinearity of disordered all-dielectric resonant high index metasurfaces with negative refraction

A. V. Panov[1)]

Institute of Automation and Control Processes, Far East Branch of Russian Academy of Sciences, 690041 Vladivostok, Russia

Submitted 4 November 2019
Resubmitted 18 November 2019
Accepted 18 November 2019

DOI: 10.31857/S0370274X20010063

In recent years, nonlinear optical properties of all-dielectric high index metasurfaces have attracted a significant interest of researchers [1]. For example, silicon metasurfaces exhibited enhancement of third harmonic generation by several orders of magnitude compared to the massive material [2, 3]. The intensity-dependent refractive index is regularly used in designing all-optical compact switches. As demonstrated in [4], all-optical switching of femtosecond laser pulses passing through flat nanostructure of subwavelength silicon nanodisks at their magnetic dipolar resonance occurs owing to two-photon absorption being enhanced by a factor of 80 with respect to the unpatterned film. In [5], random monodisperse metasurfaces of gallium phosphide (GaP) spheres near Mie resonances were shown by three-dimensional finite-difference time-domain (FDTD) modeling to have an optical Kerr effect exceeding by two orders of intensity that of the bulk gallium phosphide. Moreover, being single negative metamaterials, the monodisperse metasurfaces with sphere sizes in the vicinity of the Mie resonances reveal the inversion of the sign of the second-order nonlinear refractive index [5]. The possibility of negative refraction by the disordered metasurface consisting of GaP spheres with two radii close to the first magnetic and electric Mie resonances was demonstrated in [6]. However, until now, the effective Kerr nonlinearity of the negative index metamaterials has not been evaluated.

In this work, the optical Kerr nonlinearity of random metasurfaces having the negative effective refractive index is investigated using three-dimensional FDTD simulations at the wavelength of 532 nm. The second-order nonlinear refractive index is also calculated for bidisperse mixtures with various sizes or concentrations of GaP spheres in proximity to the negative refraction regime.

The procedure of computation of the real part of the effective nonlinear refractive index of the monolayer nanocomposites is described in depth in [10]. The simulation parameters in the present study were same as given in [5]: the size of the FDTD computational domain was $4\times4\times30\,\mu$m, the space resolution of the simulations was 5 nm. The examined sample was a disordered monolayer comprising the equal numbers of GaP spheres of two radii surrounded by vacuum. As shown in [6], the densely packed bidisperse monolayer of GaP spheres with the radii r of 77 and 101 nm exhibits the negative refraction at $\lambda = 532$ nm.

The evaluation of the effective second-order nonlinear $n_{2\,\mathrm{eff}}$ refractive index for the bidisperse monolayer of the spheres with volume fraction $f = 25.7\,\%$, $r_1 = 77$ and $r_2 = 101$ nm having negative refraction index is $(6.5 \pm 0.8) \times 10^{-15}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{W}$ which is two orders of magnitude larger than that of the bulk gallium phosphide. For purposes of comparison, the bidisperse monolayer consisting of spheres of artificial material with n_0 of GaP and n_2 of gallium phosphide with negative sign was modeled: the resulting value of $n_{2\,\mathrm{eff}} = -(6.5\pm0.7)\times10^{-17}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{W}$, that is the negative index metasurface does not show the inversion of $n_{2\,\mathrm{eff}}$ sign.

Then, the optical nonlinearity of the bidisperse metasurface during the concentration transition to the negative refraction state is investigated. The behavior of $n_{0\,\mathrm{eff}}$ through the transition to negative values was studied in [6]. Figure 1 illustrates the dependency of the effective second-order nonlinear refractive index $n_{2\,\mathrm{eff}}$ on the volume fraction of nanoparticles in the bidisperse monolayer. At low concentrations of the GaP spheres ($f = 8$–$18\,\%$), the metasurface exhibits the negative value of $n_{2\,\mathrm{eff}}$ due to the inversion of optical Kerr coefficient near the electric dipole Mie resonance [5]. For the higher volume fractions of nanoparticles, $n_{2\,\mathrm{eff}}$ becomes positive and has a peak when $n_{0\,\mathrm{eff}}$ crosses zero. Further, the effective second-order nonlinear refractive in-

[1)]e-mail: andrej.panov@gmail.com

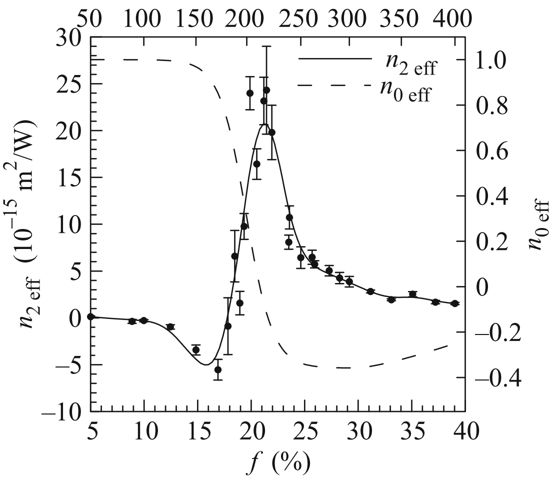

Fig. 1. Effective linear $n_{0\,\mathrm{eff}}$, second-order nonlinear $n_{2\,\mathrm{eff}}$ refractive indices of the disordered bidisperse metasurface consisting of equal numbers of GaP spheres with radii $r_1 = 77$ nm and $r_2 = 101$ nm as a function of volume concentration f. The upper abscissa axis displays the net number of the particles on $4 \times 4\,\mu$m area. The fit for effective linear refractive index $n_{0\,\mathrm{eff}}$ was taken from [6]. The error bars show the standard deviations

dex gradually decreases for the concentrations of spheres corresponding to the negative refraction. By this means, the disordered monolayer bidisperse metasurface has highest magnitudes of $n_{2\,\mathrm{eff}}$ under the conditions of zero index medium.

In conclusion, the nonlinear optical Kerr effect of bidisperse disordered monolayer nanocomposites of GaP spheres is studied numerically. It is displayed that this nanostructure possesses the maximum value of the second-order refractive index when the metasurface represents the mixture of nanoparticles with sizes just above the electric and magnetic dipole Mie resonances which results in the negative effective refractive index. The effective Kerr coefficient of the negative index all-dielectric metasurface has the same sign as that of the nanoparticle material. The bidisperse monolayer metasurfaces with different values of GaP sphere concentration exhibit a peak of the nonlinear optical Kerr effect when the effective linear index of refraction is close to zero. The monolayer metasurface shows the highest magnitudes of the second-order nonlinear refractive index as compared to that of thicker bidisperse nanocomposites.

The results were obtained with the use of IACP FEB RAS Shared Resource Center "Far Eastern Computing Resource" equipment (https://www.cc.dvo.ru).

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020010038

---

1. D. Smirnova and Y. S. Kivshar, Optica **3**, 1241 (2016).
2. M. R. Shcherbakov, D. N. Neshev, B. Hopkins, A. S. Shorokhov, I. Staude, E. V. Melik-Gaykazyan, M. Decker, A. A. Ezhov, A. E. Miroshnichenko, I. Brener, A. A. Fedyanin, and Y. S. Kivshar, Nano Lett. **14**, 6488 (2014).
3. Y. Yang, W. Wang, A. Boulesbaa, I. I. Kravchenko, D. P. Briggs, A. Puretzky, D. Geohegan, and J. Valentine, Nano Lett. **15**, 7388 (2015).
4. M. R. Shcherbakov, P. P. Vabishchevich, A. S. Shorokhov, K. E. Chong, D.-Y. Choi, I. Staude, A. E. Miroshnichenko, D. N. Neshev, A. A. Fedyanin, and Y. S. Kivshar, Nano Lett. **15**, 6985 (2015).
5. A. V. Panov, arXiv:1810.10201 (2018).
6. A. V. Panov, Optik, doi:10.1016/j.ijleo.2019.163739 (2019).
7. M. Z. Alam, I. De Leon, and R. W. Boyd, Science **352**, 795 (2016).
8. L. Caspani, R. P. M. Kaipurath, M. Clerici, M. Ferrera, T. Roger, J. Kim, N. Kinsey, M. Pietrzyk, A. Di Falco, V. M. Shalaev, A. Boltasseva, and D. Faccio, Phys. Rev. Lett. **116**, 233901 (2016).
9. E. G. Carnemolla, L. Caspani, C. DeVault, M. Clerici, S. Vezzoli, V. Bruno, V. M. Shalaev, D. Faccio, A. Boltasseva, and M. Ferrera, Opt. Mater. Express **8**, 3392 (2018).
10. A. V. Panov, Opt. Lett. **43**, 2515 (2018).
11. D. E. Aspnes and A. A. Studna, Phys. Rev. B **27**, 985 (1983).
12. A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, Comput. Phys. Commun. **181**, 687 (2010).
13. J. Kuhl, B. K. Rhee, and W. E. Bron, in *Time-Resolved Vibrational Spectroscopy*, ed. by A. Laubereau and M. Stockburger, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (1985), p. 30.
14. P. Debye, Ann. Phys. (Leipzig) **335**, 57 (1909).
15. H. C. van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*, Dover Publications, N.Y. (1981).
16. C. L. Holloway, E. F. Kuester, J. Baker-Jarvis, and P. Kabos, IEEE Trans. Antennas Propag. **51**, 2596 (2003).
17. M. G. Silveirinha, Phys. Rev. B **83**, 165104 (2011).
18. R. del Coso and J. Solis, J. Opt. Soc. Am. B **21**, 640 (2004).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 34 – 39 © 2020 г. 10 января

Фазовый переход в трехмерных неколлинеарных магнитных системах с дополнительным двукратным вырождением

А. О. Сорокин[1)]

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

Поступила в редакцию 11 ноября 2019 г.
После переработки 22 ноября 2019 г.
Принята к публикации 25 ноября 2019 г.

Методом Монте-Карло исследуется критическое поведение в трехмерном фрустрированном спиральном магнетике с дополнительным двукратным вырождением, реализованном в слоисто-J_1-J_2-J_3 модели на кубической решетке. Для случая гейзенберговских спинов ($N = 3$) найден переход первого рода. С помощью ренормгруппового подхода аналогичный результат найден также для произвольного значения числа компонент классического спина N. Из решеточной модели получен соответствующий функционал Гинзбурга–Ландау, который проанализирован в низших порядках $4 - \varepsilon$ разложения. Приводятся аргументы, что при учете старших порядков разложения качественный результат не изменится.

DOI: 10.31857/S0370274X20010075

Фрустрированные магнитные системы представляют значительный интерес в связи с реализацией в них явлений, приводящих к возникновению новых фаз и фазовых переходов. Так, в частности, фрустрация является одним из механизмов образования несоизмеримых длиннопериодических модулированных структур типа спирали [1–3]. Другое интересное явление, которое может наблюдаться во фрустрированных магнетиках, – "порядок из беспорядка", когда дополнительное бесконечное вырождение основного состояния снимается за счет квантовых или температурных флуктуаций [4–6]. Это явление вместе с возникновением неколлинеарного спинового упорядочения обеспечивают разнообразие возможных симметрийных классов, реализующихся во фрустрированных системах.

Простейший (аксиальный) спиральный магнетик, в котором конкурирующее обменное взаимодействие присутствует только в одном направлении решетки, соответствует, например, редкоземельным металлам [7] и многослойным структурам [8]. Критическое поведение в этом случае исследовано в работе [9]. В данной работе рассматривается обратная ситуация, когда спиральная структура образуется внутри слоев. Этот случай оказывается более богат феноменологически, что особенно ярко проявляется в двумерном и квазидвумерном случаях [10–12].

Очевидное обобщение аксиального спирального магнетика — введение конкурирующего обменного взаимодействия в двух направлениях простой кубической решетки. Но на самом деле эта модель является лишь частным случаем слоистой J_1-J_2-J_3 модели, в которой рассматриваются обмены первых трех порядков дальности в слое, с $J_2 = 0$. Фазовая диаграмма этой модели содержит две фазы с коллинеарным спиновым упорядочением, нефрустрированную и фрустрированную с эффектом "порядок из беспорядка", а также две различные геликоидальные фазы [13–15] (рис. 1).

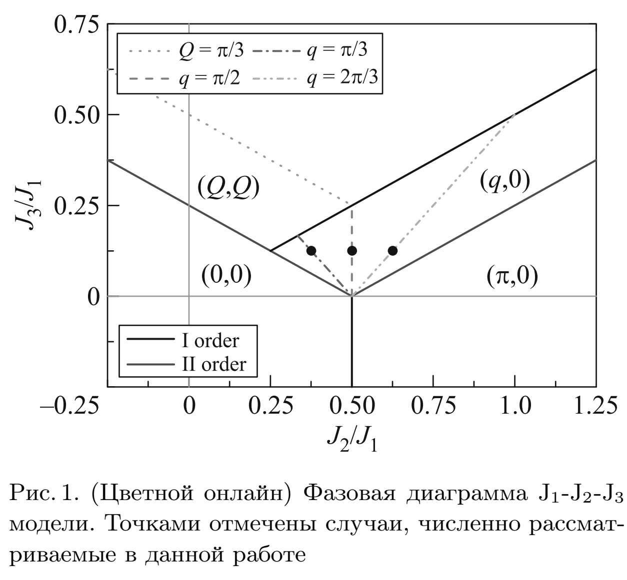

Рис. 1. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма J_1-J_2-J_3 модели. Точками отмечены случаи, численно рассматриваемые в данной работе

Обе фазы со спиральным порядком имеют одинаковые симметрийные свойства, описывающиеся пространством параметра порядка $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes$

[1)]e-mail: aosorokin@gmail.com

$O(N)/O(N-2)$, где N — размерность классического спина. В частности, это означает, что переходы по температуре в разупорядоченную фазу должны принадлежать одному классу универсальности, причем отличающемуся от класса универсальности простого спирального магнетика $G/H = O(N)/O(N-2)$ или, тем более, от класса коллинеарных магнетиков $G/H = O(N)/O(N-1)$. Класс $O(N)/O(N-2)$ подробно исследовался на протяжении нескольких десятков лет, поскольку ему же принадлежит критическое поведение антиферромагнетика на слоисто-треугольной решетке и сверхтекучего ^{3}He (для обзора см. [16]). Наиболее надежные результаты указывают, что при $N < 6$, включая физически интересные случаи $N = 2$, 3, будет наблюдаться переход первого рода, при $N \geq 6$ – второго. Класс $\mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-2)$ не исследовался ранее за исключением частного случая $J_2 = 0$ в J$_1$-J$_2$-J$_3$ модели, исследованного в работах [9, 17, 18]. В данной работе будут приведены аргументы, основанные на ренормгрупповом анализе, в пользу того, что в данном симметрийном классе будет наблюдаться переход первого рода для любого N. Мы также численно рассмотрим несколько случаев J$_1$-J$_2$-J$_3$ модели, относящихся ко второй, ранее не исследовавшейся геликоидальной фазе.

Слоисто-J$_1$-J$_2$-J$_3$ модель описывается гамильтонианом

$$H = -J\sum_{\mathbf{x}} S_{\mathbf{x}} \cdot S_{\mathbf{x}+\mathbf{e}_3} - J_1 \sum_{\mathbf{x},\mu} S_{\mathbf{x}} \cdot S_{\mathbf{x}+\mathbf{e}_\mu} + \qquad (1)$$

$$+ J_2 \sum_{\mathbf{x}} S_{\mathbf{x}} \cdot (S_{\mathbf{x}+\mathbf{e}_1+\mathbf{e}_2} + S_{\mathbf{x}+\mathbf{e}_1-\mathbf{e}_2}) + J_3 \sum_{\mathbf{x},\mu} S_{\mathbf{x}} \cdot S_{\mathbf{x}+2\mathbf{e}_\mu},$$

где $\mu = 1, 2$, S – N-компонентный классический вектор, $\mathbf{x}$ нумерует узлы простой кубической решетки, константы J выбраны положительными. Отметим, что для классической модели знаки J_1 и J несущественны, однако данная модель интенсивно исследуется в окрестности квантовых критических точек, где выбирается $J_1 < 0$ и $J < 0$ (см., например, [19]). При нашем выборе знака J_1 при малых значениях фрустрирующих обменов основным состоянием является ферромагнитный порядок с $\mathbf{q}_0 = (0,0,0)$. Данная фаза существует при $J_3 < (J_1 - 2J_2)/4$ и $J_2 < J_1/2$. При $J_2 > J_1/2$ энергетически более выгодными становятся конфигурации с $\mathbf{q}_0 = (\pi, 0, 0)$ и $(0, \pi, 0)$, при условии $J_3 < (-J_1 + 2J_2)/4$. В этой фазе возникает коллинеарный антиферромагнитный порядок, соответствующий одному из волновых векторов $\mathbf{q}_0$. И поскольку одна конфигурация не может быть приведена к другой с помощью глобальных поворотов спинов, то фазе соответствует нарушение $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-1)$ симметрии. Критическое поведение в этом случае исследовано в работах [20–24].

При $J_3 > (J_1 - 2J_2)/4$ и $J_3 > (-J_1 + 2J_2)/4$ низкотемпературная фаза содержит спиральную структуру. При $J_3 > J_2/2$ более выгодным оказывается геликоидальное состояние, описываемое одной из четырех конфигураций $\mathbf{q}_0 = (\pm Q, \pm Q, 0)$, где $\cos Q = J_1/(2J_2 + 4J_3)$. (В дальнейшем для краткости мы будем называть данную фазу (Q, Q) фазой.) Оставшаяся полуполоса фазовой диаграммы, ограниченная условиями $J_3 > (J_1 - 2J_2)/4$, $J_3 > (-J_1 + 2J_2)/4$ и $J_3 < (-J_1 + 2J_2)/4$, также соответствует спиральной структуре с четырьмя минимумами, описываемыми векторами обратной решетки $\mathbf{q}_0 = (\pm q, 0, 0)$ и $\mathbf{q}_0 = (0, \pm q, 0)$, где $\cos q = (J_1 - 2J_2)/(4J_3)$. (Эту фазу будем называть $(q, 0)$ фазой.)

Фаза $(q, 0)$, которой мы интересуемся в данной работе, обладает рядом свойств, не встречающихся у других геликоидальных фаз. Так, например, в этой фазе могут реализоваться основные состояния и с $q > \pi/2$ и с $q < \pi/2$ при фиксированных знаках констант обменных интегралов J_i, в то время как в простом спиральном магнетике и в (Q, Q) фазе в зависимости от знака J_1 реализуется только один тип основного состояния. В частности, в $(q, 0)$ фазе основным состоянием может быть конфигурация с $\mathbf{q}_0 = (\pi/2, 0)$, в то время как в (Q, Q) фазе такая конфигурация достигается лишь в пределе $J_3 \to \infty$. Наконец, хотя из-за осциллирующего характера РККИ взаимодействия вполне может возникать ситуация с $J_2 < J_3$, условие $J_1 > J_2 > J_3$ выглядит более реалистично. Поэтому фаза $(q, 0)$ представляет особый интерес.

Для обеих геликоидальных фаз справедливо, что два минимума с $\mathbf{q}_0$ и $-\mathbf{q}_0$, лежат на одной орбите, связанной с группой вращений, поэтому наблюдается лишь двукратное дополнительное вырождение основного состояния. Учитывая, что неколлинеарный спиновый порядок описывается параметром порядка из факторпространства $G/H = O(N)/O(N-2)$, получаем полное пространство параметра порядка $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-2)$.

В терминах модели (1) параметр порядка может быть сконструирован следующим образом. Для случая $N = 3$, исследуемом в данной работе, параметр порядка представляет собой пару взаимно ортогональных 3-векторов, плюс независимый дискретный параметр изинговского типа. В случае соизмеримых спиралей одним из 3-векторов удобно взять намагниченность подрешеток. Мы рассмотрели спирали с $q = \pi/3$, $\pi/2$, $2\pi/3$, для которых необходимое число подрешеток равно, соответственно, 36, 16 и 9. В качестве второго 3-вектора берется один из векторов киральности

$$k_a^{\pm} = \frac{1}{L^3 \sin q} \sum_{\mathbf{x},b,c} \epsilon_{abc} S_{\mathbf{x},b} S_{\mathbf{x}+\mathbf{e}_1 \pm \mathbf{e}_2,c}, \qquad (2)$$

где a, b, c – индексы, нумерующие компоненты спина, а L^3 – объем системы. Тогда дискретный параметр порядка есть просто

$$\sigma = k^+ \cdot k^-. \qquad (3)$$

Модель (1) исследована методом Монте-Карло, основанном на сверх-релаксационном алгоритме [25, 26]. Для изучения типа перехода использовался метод анализа гистограмм. Термализация к равновесному состоянию осуществлялась за $3 \cdot 10^5$ шагов алгоритма на спин, а набор статистики производился за $3 \cdot 10^6$ шагов. Каждый шаг алгоритма содержит один переворот спина в термостате и шесть релаксационных поворотов. Моделирование повторялось для десяти случайных стартовых конфигураций, а получаемый разброс в значениях вычисляемых средних использовался для оценки точности вычислений. Рассмотрение только соизмеримых (при нулевой температуре) спиралей позволяет использовать периодические граничные условия. Это приводит, помимо квантования шага спирали, к дополнительной напряженности в системе при конечной температуре, что оказывается существенным в окрестности точки Лифшица. Для спиралей, рассмотренных здесь (с $q = \pi/3, \pi/2, 2\pi/3$), выбор граничных условий приводит лишь к несущественному сдвигу эффективной температуры перехода $T_c(L)$. Во всех трех случаях выбирается $J_3/J_1 = 0.125$ (см. рис. 1). Для спирали $q = \pi/3$ выбирается $J_2/J_1 = 0.625$, и рассматриваются решетки размера $L = 12, 18, 24, 30, 36$. Для $q = \pi/2$ выбирается $J_2/J_1 = 0.5$ и $L = 12, 16, 20, 24, 32, 40$. Для $q = 2\pi/3$ выбирается $J_2/J_1 = 0.625$ и $L = 12, 15, 18, 21, 24, 30, 36, 42$.

Основной результат моделирования заключается в том, что в $(q, 0)$ фазе J_1-J_2-J_3 модели наблюдается переход первого рода единовременно по всем (и непрерывному, и дискретному) параметрам порядка. Так, например, внутренняя теплота перехода, характерная для переходов первого рода, наблюдается вблизи критической температуры для решеток небольшого размера $L \geq 42$. На рисунках 2, 3 показана двухпиковая структура распределения по энергии, отражающая наличие внутренней теплоты перехода. Этот результат согласуется с результатами для (Q, Q) фазы, принадлежащей тому же симметрийному классу [17].

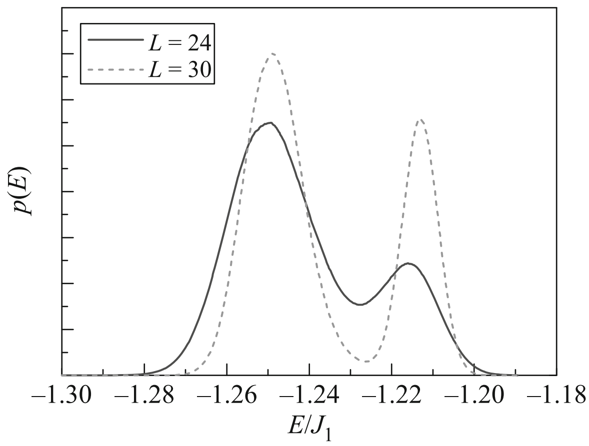

Рис. 2. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения по энергии при $J_2/J_1 = 0.5$, $J_3/J_1 = 0.125$, $q = \pi/2$ и $T/J_1 = 0.605$

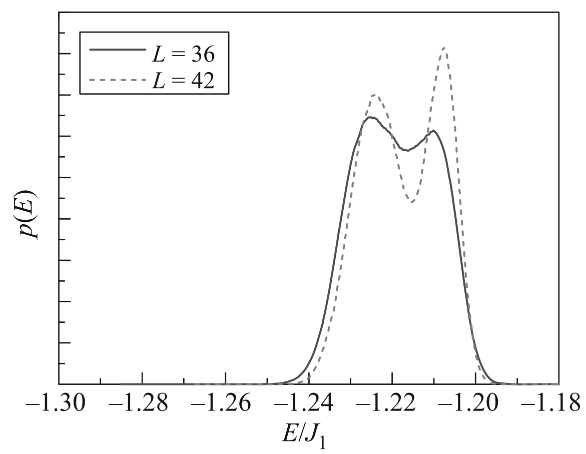

Рис. 3. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения по энергии при $J_2/J_1 = 0.625$, $J_3/J_1 = 0.125$, $q = 2\pi/3$. Для $L = 36$ выбрана температура $T/J_1 = 0.64$, для $L = 42$ – $T/J_1 = 0.6397$. В сравнении со случаем $q = \pi/2$ (рис. 2) расстояние между пиками гистограммы, отвечающее за величину внутренней теплоты перехода, значительно меньше

Строго говоря, полученный результат вполне ожидаем. Дело в том, что для случая изотропных спинов $N = 3$ пространство параметра порядка $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes SO(3) \equiv O(3)$ совпадает с симметрийным классом магнетиков с *непланарным* упорядочением $G/H = O(N)/O(N-3)$, реализующихся, например, на решетках кагоме или структурах пирохлора (см., например, [27]). Известно, что в этом классе для $N = 3$ наблюдается переход ярко выраженного первого рода [28–30]. Ренормгрупповой (РГ) анализ также показывает, что первый род перехода будет наблюдаться при $N \leq 9$ [31–33]. Разумеется, данный результат не применим к классу $\mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-2)$ при произвольных значениях N, тем не менее, он оказывается полезен. В связи с этим напомним, что переход из класса $O(N)/O(N-P)$ описывается функционалом Гинзбурга–Ландау [34, 35]

$$F = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{P} \left((\partial_\mu \phi_n)^2 + r\phi_n^2 \right) + \frac{u}{4!} \left(\sum_{n=1}^{P} \phi_n^2 \right)^2 + \frac{v}{4!} \sum_{n,m=1}^{P} \left((\phi_n \cdot \phi_m)^2 - \phi_n^2 \phi_m^2 \right) \right], \tag{4}$$

где ϕ_n – по-прежнему классический N-вектор.

Чтобы получить функционал Гинзбурга–Ландау, описывающий переход непосредственно в J_1-J_2-J_3 модели, необходимо гамильтониан (1) с дополнительным потенциалом $U(S) = m|S|^2 + \lambda |S|^4$, заменяющим условие $|S| = 1$, рассмотреть в окрестности четырех минимумов $(\pm q, 0, 0)$ и $(0, \pm q, 0)$. (Вывод для (Q,Q) фазы аналогичен.) Введем четыре вещественных N-поля

$$\phi_1 = (S|_{\mathbf{q} \simeq (q,0,0)} + S|_{\mathbf{q} \simeq (-q,0,0)})/2,$$
$$\psi_1 = (S|_{\mathbf{q} \simeq (q,0,0)} - S|_{\mathbf{q} \simeq (-q,0,0)})/(2i),$$
$$\phi_2 = (S|_{\mathbf{q} \simeq (0,q,0)} + S|_{\mathbf{q} \simeq (0,-q,0,0)})/2,$$
$$\psi_2 = (S|_{\mathbf{q} \simeq (0,q,0)} - S|_{\mathbf{q} \simeq (0,-q,0)})/(2i),$$

в терминах которых искомый функционал записывается в виде

$$F = \int d^3x \left[\sum_{i=1}^{2} \left((\partial_\mu \phi_i)^2 + (\partial_\mu \psi_i)^2 + r(\phi_n^2 + \phi_n^2) \right) + \sum_{i=1}^{2} \left(u \left(\phi_i^4 + \psi_i^4 \right) + 2v\phi_i^2 \psi_i^2 + 2w(\phi_i \cdot \psi_i)^2 \right) + 2y_1 \left(\phi_1^2 \phi_2^2 + \psi_1^2 \psi_2^2 \right) + 2z_1 \left((\phi_1 \cdot \phi_2)^2 + (\psi_1 \cdot \psi_2)^2 \right) + 2y_2 \left(\phi_1^2 \psi_2^2 + \psi_1^2 \phi_2^2 \right) + 2z_2 \left((\phi_1 \cdot \psi_2)^2 + (\psi_1 \cdot \phi_2)^2 \right) \right]. \tag{5}$$

Разумеется, искомая конфигурация основного состояния остается стабильной лишь в некотором секторе полученного многомерного пространства параметров. На самом деле таких секторов два. Планарное спиновое упорядочение в теории Ландау должно описываться парой взаимно ортогональных векторов $\Phi = (\phi, \psi)$. Мы имеем две таких пары Φ_1 и Φ_2, взаимная ориентация которых не произвольна: каждый вектор одной пары должен быть коллинеарен одному вектору и перпендикулярен другому вектору второй пары. Выбор одного из условий $\phi_1 || \phi_2$ или $\phi_1 || \psi_2$ отвечает выбору одной из четвертей пространства $z_1 < 0 < z_2$ или $z_2 < 0 < z_1$. Для дальнейшего анализа мы выберем первую альтернативу. При таком выборе в упорядоченной фазе $r < 0$ из условия минимума функционала следует

$$w > 0, \quad 2u+w+z_2 > 0, \quad 2u+v+y_1+y_2+z_1 > 0, \tag{6}$$

$$\phi_i^2 = \psi_i^2 = \frac{-r}{2(2u + v + y_1 + y_2 + z_1)} = \kappa^2. \tag{7}$$

Более полную информацию о границах стабильности выбранного нами основного состояния можно получить из условий положительности спектра возбуждений. В целом параметр порядка $\Psi = (\Phi_1, \Phi_2)$ является матрицей $4 \times N$. К счастью, матрица коррелятора разбивается на N блоков размера 4×4, диагонализация которых дает результаты:

$$m_{1,1}^2 = 8\kappa^2(2u + v + y_1 + y_2 + z_1),$$
$$m_{1,2}^2 = 8\kappa^2(2u + v - y_1 - y_2 - z_1),$$
$$m_{1,3}^2 = 8\kappa^2(-v - y_1 + y_2 - z_1),$$
$$m_{1,4}^2 = 8\kappa^2(-v + y_1 - y_2 + z_1),$$
$$m_{2,1}^2 = 8\kappa^2(w + z_2), \quad m_{2,2}^2 = 8\kappa^2(w - z_1),$$
$$m_{2,3}^2 = 8\kappa^2(z_2 - z_1), \quad m_{2,4}^2 = 0,$$
$$m_{i,1}^2 = m_{i,2}^2 = -8\kappa^2 z_1, \quad m_{i,3}^2 = m_{i,4}^2 = 0,$$

где $i = 3, \ldots, N$. Видим, что в спектре присутствуют $2N - 3$ голдстоуновских (безмассовых) мод, отвечающих $SO(N)/SO(N-2)$ нарушению симметрии.

Ренормгрупповой анализ модели (5) чрезвычайно громоздкий. К счастью, в нашем случае тип фазового перехода строго определяется даже в 1-петлевом приближении $4 - \varepsilon$ разложения. Соответствующие РГ-уравнения можно получить из известных результатов для обобщенной N-векторной модели [36, 37]:

$$\beta_u = -\varepsilon u + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (N+8)u^2 + N(v^2 + y_1^2 + y_1^2) + 2vw \\ +2y_1 z_1 + 2y_2 z_2 + w^2 + z_1^2 + z_2^2 \end{pmatrix},$$

$$\beta_v = -\varepsilon v + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (2N+4)uv + 2Ny_1 y_2 + 4v^2 \\ +2uw + w^2 + 2y_2 z_1 + 2y_1 z_2 \end{pmatrix},$$

$$\beta_{y_1} = -\varepsilon y_1 + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (2N+4)uy_1 + 2Nvy_2 + 4y_1^2 \\ +2uz_1 + z_1^2 + 2vz_2 + 2wy_1 \end{pmatrix},$$

$$\beta_{y_2} = -\varepsilon y_2 + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (2N+4)uy_2 + 2Nvy_1 + 4y_2^2 \\ +2uz_2 + 2vz_1 + 2wy_2 + z_2^2 \end{pmatrix},$$

$$\beta_w = -\varepsilon w + \frac{1}{2}\left((N+2)w^2 + 4uw + 8vw + 2z_1z_2\right),$$

$$\beta_{z_1} = -\varepsilon z_1 + \frac{1}{2}\left((N+2)z_1^2 + 4uz_1 + 8y_1z_1 + 2wz_2\right),$$

$$\beta_{z_2} = -\varepsilon z_2 + \frac{1}{2}\left((N+2)z_2^2 + 4uz_2 + 8y_2z_2 + 2wz_1\right).$$

Подробный анализ этих уравнений, включая случай мультикритического поведения, будет приведен в последующих работах. Здесь мы отметим лишь два основных результата. Во-первых, единственная притягивающая неподвижная точка, которая может описывать переход второго рода, существует (в 1-петлевом приближении) только при $N_{c_2} \gtrsim 42.8$. Данная точка лежит в плоскости $y_1 = y_2 = v = u - w$, $z_1 = z_2 = w$ и соответствует $O(N)/O(N-4)$ модели (4) при $P = 4$. Учет следующих поправок, разумеется, изменит оценочное значение N_{c_2} [31–33], но не поменяет ситуацию качественно. В любом случае, это не влияет на другой результат: неподвижные точки любого типа отсутствуют в областях стабильности нашего основного состояния $z_1 < 0 < z_2$ и $z_2 < 0 < z_1$ при всех значениях N. Таким образом, в симметрийном классе $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-2)$ должен наблюдаться переход первого рода не только при $N = 3$, что наблюдалось в данной работе методом Монте-Карло, но и при всех значениях $N \geq 2$.

Напомним, что аналогичный результат был получен для класса $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-1)$ [20, 22], где неподвижные точки также отсутствуют в области стабильности исследуемого основного состояния для любых N. При этом единственная притягивающая неподвижная точка появляется при больших значениях N ($N \gtrsim 6$, но также для вырожденного случая $N = 1$). Можно предположить, что аналогичный результат будет наблюдаться для многообразий Штифеля общего вида $V_{N,P} = O(N)/O(N-P)$. Т.е. в классе $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-P)$ будет наблюдаться переход первого рода, а в соответствующей модели Гинзбурга–Ландау может присутствовать притягивающая неподвижная точка из $O(N)/O(N-2P)$ класса.

В заключение отметим, что при моделировании случаев $q = \pi/3, 2\pi/3$ мы наблюдали псевдоскейлинговое поведение, характерное для перехода слабого первого рода, с показателями $\nu = 0.39(2)$, $\beta = 0.12(1)$, $\gamma = 0.91(5)$, $\beta_k = 0.22(3)$, $\gamma_k = 0.69(7)$, что согласуется с результатами для (Q,Q) фазы [9, 17]. Это явление трудно объяснить в рамках модели (5) в силу отсутствия точек с координатами $\mathrm{Re}z_1 < 0$ и $\mathrm{Re}z_2 > 0$, которые могли бы приводить к замедлению РГ-потока и имитации скейлинга. Более того, по аналогии с классом $G/H = \mathbb{Z}_2 \otimes O(N)/O(N-1)$ можно предположить, что с ростом N скейлинг будет становиться все более явным. Этот вопрос также станет предметом будущих исследований.

Автор выражает благодарность О. И. Утесову и А. В. Сыромятникову за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований гранта # 18-02-00706 и гранта Фонда развития теоретической физики и математики "БАЗИС".

1. J. Villain, J. Phys. Chem. Solids **11**, 303 (1959).
2. A. Yoshimori, J. Phys. Soc. Jpn. **14**, 508 (1959).
3. T. A. Kaplan, Phys. Rev. **116**, 888 (1959).
4. J. Villain, R. Bidaux, J.-P. Carton, and R. Conte, J. Physique **41**, 1263 (1980).
5. Е. Ф. Шендер, ЖЭТФ **83**, 326 (1982).
6. C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **62**, 2056 (1989).
7. R. J. Elliott, Phys. Rev. **124**, 346 (1961).
8. D. N. Aristov, Phys. Rev. B **55**, 8064 (1997).
9. А. О. Сорокин, ЖЭТФ **145**, 481 (2014).
10. А. О. Сорокин, А. В. Сыромятников, Письма ЖЭТФ **96**, 449 (2012).
11. A. O. Sorokin, Phys. Rev. B **95**, 094408 (2017).
12. A. O. Sorokin, JMMM **479**, 32 (2019).
13. M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, and D. A. Huse, Phys. Rev. B **40**, 10801 (1989).
14. A. Moreo, E. Dagotto, T. Jolicoeur, and J. Riera, Phys. Rev. B **42**, 6283 (1990).
15. A. Chubukov, Phys. Rev. B **44**, 392 (1991).
16. B. Delamotte, D. Mouhanna, and M. Tissier, Phys. Rev. B **69**, 134413 (2004).
17. А. О. Сорокин, А. В. Сыромятников, ЖЭТФ **139**, 1148 (2011).
18. А. О. Сорокин, А. В. Сыромятников, ЖЭТФ **140**, 771 (2011).
19. D. Schmalfuss, R. Darradi, J. Richter, J. Schulenburg, and D. Ihle, Phys. Rev. Lett. **97**, 157201 (2006).
20. A. O. Sorokin, Phys. Lett. A **382**, 3455 (2018).
21. А. О. Сорокин, Письма ЖЭТФ **109**, 423 (2019).
22. А. О. Сорокин, ТМФ **200**, 310 (2019).
23. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
24. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
25. F. R. Brown and T. J. Woch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2394 (1987).
26. M. Creutz, Phys. Rev. D **36**, 515 (1987).
27. J. N. Reimers, J. E. Greedan, and M. Björgvinsson, Phys. Rev. B **45**, 7295 (1992).
28. H. Kunz and G. Zumbach, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 3121 (1993).
29. H. T. Diep and D. Loison, J. Appl. Phys. **76**, 6350 (1994).

30. D. Loison, Eur. Phys. J. B **15**, 517 (2000).
31. A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Nucl. Phys. B **607**, 605 (2001).
32. P. Calabrese and P. Parruccini, Nucl. Phys. B **679**, 568 (2004).
33. M. V. Kompaniets, A. Kudlis, and A. I. Sokolov, arXiv: 1911.01091 [cond-mat.stat-mech].
34. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 2305 (1990).
35. L. Saul, Phys. Rev. B **46**, 13847 (1992).
36. E. Brezin, J. C. Le Guillou, and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. B **10**, 892 (1974).
37. Yu. M. Pis'mak, A. Weber, and F. J. Wegner, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 095003 (2009).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 40 – 44 © 2020 г. 10 января

Связанное состояние континуума магнитофотонных метаповерхностей

А. М. Черняк, М. Г. Барсукова, А. С. Шорохов, А. И. Мусорин[1], А. А. Федянин

Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 октября 2019 г.
После переработки 12 ноября 2019 г.
Принята к публикации 13 ноября 2019 г.

Исследованы механизмы усиления магнитооптических эффектов в полностью диэлектрических метаповерхностях, обусловленные возбуждением резонанса связанного состояния континуума. В квадратной решетке нанодисков из магнитного диэлектрика с воздушным отверстием, смещенным относительно оси диска, поляризационный и интенсивностный эффекты достигают 0.7° и 22 % соответственно.

DOI: 10.31857/S0370274X20010087

Резонансные диэлектрические наноструктуры представляют значительный интерес для современной нанофотоники [1]. Рассеяние света на диэлектрических наночастицах с высоким показателем преломления и малыми потерями позволяет воспроизводить оптические эффекты, продемонстрированные на плазмонных частицах, без диссипации энергии в тепло [2]. Составленные из таких нанообъектов метаповерхности позволяют управлять фазой и амплитудой проходящего или отраженного света [3]. Обычно добротность Q резонансов указанных образцов порядка 10, что является недостаточной величиной для практических приложений, например, светофильтров [4], сенсоров [5]. Такие значения добротности объясняются высокими излучательными потерями – сильной связью резонансной наночастицы с внешним полем – способностью переизлучать световую энергию. В связи с этим предлагаются различные способы увеличения добротности, вплоть до $10^2 \ldots 10^3$ [6–10]. Ключевым моментом в достижении высокой добротности является спектральное перекрытие двух резонансов, как, например, для Фано-резонансов. Сильный резонансный отклик возникает при возбуждении "захваченных" мод, известных так же, как "темные" моды [11], при их перекрытии со "светлыми" модами. Перевести их в излучательное состояние можно за счет внесения асимметричности в структуру. Степень асимметричности определяет, насколько эффективно оказываются связаны эти два резонанса. Запрещенное по симметрии состояние называют связанным состоянием континуума [12]. Оно обладает бесконечной добротностью, являясь лишь математической моделью. В реальности при незначительном нарушении симметрии оно переходит в квазисвязанное состояние, приводя к высокодобротному резонансу в спектре [13]. Применение таких резонансов к оптическим системам открывает возможности для новых компактных устройств нанофотоники.

Для того чтобы устройство было активным, оно должно реагировать на внешнее воздействие. Одним из таких воздействий может быть магнитное поле, обладающее преимуществом неинвазивности и скорости реагирования. Диэлектрические наноструктуры, поддерживающие возбуждение резонансов Ми, помещенные в магнитное поле, приводят к усилению магнитооптических (МО) эффектов [14]. В магнитофотонных и магнитоплазмонных метаповерхностях ближнепольная связь между наночастицами при спектральном перекрытии резонансов приводит к дополнительному усилению магнитооптических эффектов [15–17]. Однако в приведенных работах добротность резонансов была порядка 10. Если бы она была выше, то можно было ожидать бо́льших величин усиления. Для терагерцового диапазона рассчитано, что при возбуждении связанных состояний континуума можно добиться стопроцентных значений магнитного кругового дихроизма [18]. В связи с этим представляется перспективным использование высокодобротных асимметричных наноструктур (рис. 1) для увеличения МО эффектов на оптических частотах. В данной работе проведено численное моделирование полностью диэлектрических магнитных метаповерхностей из нанодисков с нарушенной симметрией и продемонстрировано усиление интен-

[1]e-mail: musorin@nanolab.phys.msu.ru

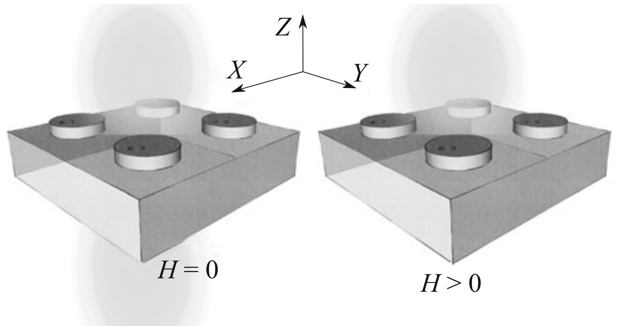

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема идеи и образца

сивностных и поляризационных магнитооптических эффектов при возбуждении резонанса связанного состояния континуума.

Численные расчеты выполнены методом конечных разностей во временной области в коммерческом программном обеспечении FDTD Solutions, Lumerical Inc. Задача решается для трехмерной модели, в которой по осям X и Y заданы периодические граничные условия, а по направлению Z установлены полностью поглощающие слои. Спектры пропускания рассчитываются для нормального падения плоской электромагнитной волны вдоль оси Z. Направление поляризации совпадает с осью X. Внешнее магнитное поле прикладывается по направлению Y для геометрии эффекта Фохта, при этом относительное изменение коэффициента пропускания рассчитывается по следующей формуле:

$$\delta = \frac{\Delta T}{T(0)} = \frac{T(H) - T(0)}{T(0)},$$

где $T(H)$ и $T(0)$ – спектры пропускания при приложении внешнего магнитного поля H и без него соответственно. Исследуемый интенсивностный эффект состоит в изменении коэффициента пропускания образца при приложении магнитного поля перпендикулярно вектору поляризации и волновому вектору падающей волны. Для определения величины эффекта Фарадея – поляризационного МО эффекта, проявляющегося во вращении плоскости поляризации θ при намагничивании образца, направление внешнего магнитного поля меняется с Y на Z и считается отношение E_y/E_x в дальней дифракционной зоне.

В качестве исследуемой модели рассматривается двумерный квадратный массив асимметричных нанодисков из магнитного диэлектрика – железо-иттриевого граната, легированного висмутом (Bi : YIG, $n = 2.09$, $g = -0.001$) высотой $h = 227$ нм, радиусом $R = 248$ нм, расположенных на кварцевой подложке SiO_2 ($n = 1.45$). В гранатовом диске

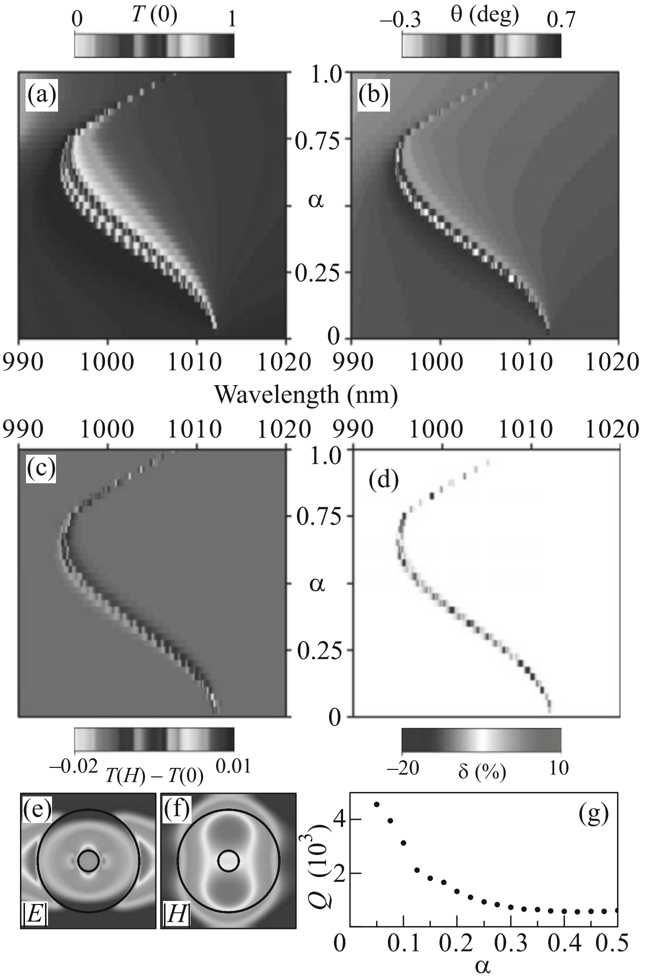

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры: (a) – пропускания, (b) – фарадеевского вращения, (c) – разностного пропускания ΔT, (d) – эффекта Фохта и (g) – добротность в зависимости от степени асимметричности α. Распределения локальных электрического (e) и магнитного (f) полей на половине высоты диска внутри одной элементарной ячейки при $\alpha = 0$

сделано воздушное отверстие радиусом $r = 62$ нм, которое смещается от центра диска вдоль оси Y в положительном направлении. Степень асимметричности определяется отношением смещения центра отверстия y_0 к радиусу диска: $\alpha = y_0/R$. Периоды по обоим направлениям $d = 679$ нм. Такие параметры выбраны, чтобы резонанс квазисвязанного состояния континуума оказался вблизи длины волны 1 мкм, а дифракционные особенности не попадали в данный спектральный диапазон.

Расчет начинается с симметричной структуры ($\alpha = 0$), в которой воздушное отверстие находится в центре гранатового диска. При облучении плоской электромагнитной волной возникает локализа-

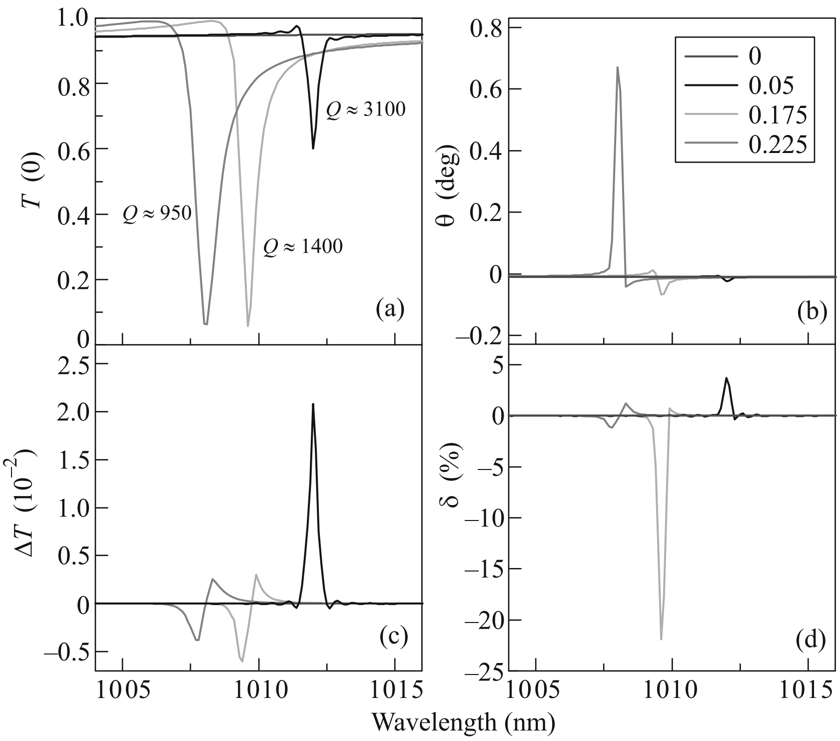

Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры: (a) – пропускания, (b) – поляризационного эффекта, (c) – разностного пропускания $\Delta T = T(H) - T(0)$, (d) – интенсивностного эффекта для моделей с параметром асимметрии $\alpha = 0$ (синяя линия), 0.05 (черная линия), 0.175 (зеленая линия), 0.225 (красная линия)

ция поля внутри диска (см. рис. 2e, f), соответствующая резонансу, однако провал в спектре пропускания не наблюдается (см. рис. 2a и синюю линию на рис. 3a). В этом случае возникает истинно связанное состояние континуума, а как было отмечено во введении, оно обладает бесконечной добротностью, поэтому провал отсутствует. При смещении отверстия резонанс становится квазисвязанным, и появляется провал в спектре пропускания (см. рис. 2a). С увеличением асимметричности происходит спектральное смещение резонанса в сторону коротковолновой области спектра, его уширение и уменьшение добротности (см. рис. 2g). После значения $\alpha \approx 0.75$ воздушное отверстие размыкает диск на верхней границе ($y = R = 248$ нм), что нарушает конфигурацию локального электромагнитного поля. Дальнейший сдвиг отверстия приводит к смещению провала в спектре пропускания в длинноволновую область спектра, поскольку геометрия диска становится все более симметричной, т.е. невозмущенной. На рисунке 2b представлены спектры фарадеевского вращения в зависимости от параметра α. При его изменении наблюдается смещение усиленного магнитооптического сигнала, следующее за положением провала в спектре пропускания. Значение угла θ максимально при $\alpha = 0.225$ и достигает $0.7°$ (см. рис. 3b, красная линия). Учитывая, что такое значение получается для толщины магнитного слоя 227 нм, то в сравнении с неструктурированной пленкой Bi:YIG аналогичной высоты ($\theta = 0.02°$) усиление эффекта составляет 35 раз. Для каждого значения α максимальный поворот плоскости поляризации соответствует наименьшей величине коэффициента пропускания. По этой причине для поляризационных эффектов подобная метаповерхность оптимальнее работает на склоне резонанса, где можно добиться как наличия пропускания, так и фарадеевского вращения.

Результаты расчета интенсивностного магнитооптического эффекта в зависимости от параметра α представлены на рис. 2d. Усиление магнитооптического сигнала коррелирует с возбуждением резонанса. Наибольшее изменение коэффициента пропускания достигает 22 % при $\alpha = 0.175$ (см. рис. 3d, зеленая линия). Для того чтобы избежать сингулярностей при расчете эффекта, возникающих при делении на близкие к нулю значения $T(0)$, построены графики разности ΔT коэффициентов пропускания при наличии и отсутствии магнитного поля (см. рис. 2c). С другой стороны, ΔT представляет собой произведение δ на коэффициент пропускания $T(0)$. В этом случае возможно определить положение одновременно и большого эффекта, и существенной величины пропускания. Для величины ΔT было установлено, что наиболее эффективной оказывается структура с параметром $\alpha = 0.05$ (см. рис. 3с, черная линия), т.е. в образце с наибольшей добротностью (Q $\approx$ 3100).

Из литературы известно, что экспериментально удалось задетектировать поляризационные МО эффекты до 0.06° в решетках из магнитных наночастиц, поддерживающих возбуждение локальных плазмонных и решеточных резонансов [19, 20]. Несмотря на то, что ферромагнитные металлы (железо, никель) обладают большими коэффициентами гирации, величина МО отклика оказывается незначительной из-за большой мнимой части диэлектрической проницаемости металлов. По этой причине магнитные диэлектрики, рассматриваемые в данной работе, представляют больший интерес. В одномерном магнитоплазмонном кристалле с волноводным гранатовым слоем авторам удалось экспериментально продемонстрировать интенсивностный магнитооптический эффект в 0.015 при коэффициенте пропускания 0.4 [21]. В схожей системе одномерной золотой решетки внутри магнитного слоя EuS экспериментально продемонстрировано фарадеевское вращение 14°. Однако такие значения были получены в магнитном поле 5 Тл и при температуре 20 К, что осложняет использование таких систем в обычных условиях [22].

Таким образом, предложенные в данной работе полностью диэлектрические магнитные метаповерхности из наночастиц с нарушенной симметрией показывают значения магнитооптических эффектов схожие, а при некоторых параметрах асимметрии даже превышающие величины, продемонстрированные в плазмонных и фотоннокристаллических образцах. Связанное состояние континуума приводит к узкому, высокодобротному резонансу, позволяющему значительно усилить магнитооптический отклик системы. Максимальная величина поляризационного эффекта, полученная в работе, составила 0.7°, а интенсивностного – 22 %. Установлено, что коэффициент усиления с увеличением параметра асимметрии снижается, так как ухудшается добротность резонанса, поэтому оптимальные значения параметра асимметрии не должны превышать величины 0.25 для эффективной работы невзаимных нанофотонных устройств.

Авторы выражают благодарность Б. С. Лукьянчуку за дискуссию и обсуждение результатов. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования (# 14.W03.008.31, моделирование спектров пропускания), гранта Российского научного фонда (# 19-72-00168, моделирование поляризационного магнитооптического эффекта) и гранта Российского фонда фундаментальных исследований (# 18-32-00225, моделирование интенсивностного магнитооптического эффекта). Часть исследований выполнена при поддержке Центра квантовых технологий МГУ.

1. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, M. L. Brongersma, Y. S. Kivshar, and B. Luk'yanchuk, Science **354**(6314), aag2472 (2016).
2. E. V. Melik-Gaykazyan, K. L. Koshelev, J. Choi, S. S. Kruk, H. Park, A. A. Fedyanin, and Y. S. Kivshar, JETP Lett. **109**(2), 131 (2019).
3. N. Yu and F. Capasso, Nat. Mater. **13**(2), 139 (2014).
4. Y. Lee, M. Park, S. Kim, J. H. Shin, C. Moon, J. Y. Hwang, J. Choi, H. Park, and H. Kim, and J. E. Jang, ACS Photonics **4**(8), 1954 (2017).
5. A. A. Grunin, I. R. Mukha, A. V. Chetvertukhin, and A. A. Fedyanin, J. Magn. Magn. Mater. **415**, 72 (2016).
6. F. Hao, Y. Sonnefraud, P. V. Dorpe, S. A. Maier, N. J. Halas, and P. Nordlander, Nano Lett. **8**(11), 3983 (2008).
7. B. Luk'yanchuk, N. I. Zheludev, S. A. Maier, N. J. Halas, P. Nordlander, H. Giessen, and C. T. Chong, Nat. Mater. **9**(9), 707 (2010).
8. Y. Yang, I. I. Kravchenko, D. P. Briggs, and J. Valentine, Nat. Commun. **5**, 5753 (2014).
9. V. R. Tuz, V. V. Khardikov, A. S. Kupriianov, K. L. Domina, S. Xu, and H. Wang, and H. Sun, Opt. Express **26**(3), 2905 (2018).
10. S. Campione, S. Liu, L. I. Basilio, L. K. Warne, W. L. Langston, T. S. Luk, J. R. Wendt, J. L. Reno, G. A. Keeler, I. Brener, and M. B. Sinclair, ACS Photonics **3**(12), 2362 (2016).
11. K. V. Baryshnikova, K. Frizyuk, G. Zograf, S. Makarov, M. A. Baranov, D. Zuev, V. A. Milichko, I. Mukhin, M. Petrov, and A. B. Evlyukhin, JETP Lett. **110**(1), 25 (2019).
12. K. Koshelev, S. Lepeshov, M. Liu, A. Bogdanov, and Y. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **121**(19), 193903 (2018).
13. Y. Plotnik, O. Peleg, F. Dreisow, M. Heinrich, S. Nolte, A. Szameit, and M. Segev, Phys. Rev. Lett. **107**(18), 183901 (2011).
14. M. G. Barsukova, A. S. Shorokhov, A. I. Musorin, D. N. Neshev, Y. S. Kivshar, and A. A. Fedyanin, ACS Photonics **4**(10), 2390 (2017).
15. A. I. Musorin, M. G. Barsukova, A. S. Shorokhov, B. S. Luk'yanchuk, and A. A. Fedyanin, J. Magn. Magn. Mater. **459**, 165 (2018).
16. M. G. Barsukova, A. I. Musorin, A. S. Shorokhov, and A. A. Fedyanin, APL Photonics **4**(1), 016102 (2019).

17. A. I. Musorin, A. V. Chetvertukhin, T. V. Dolgova, H. Uchida, M. Inoue, B. S. Luk'yanchuk, and A. A. Fedyanin, Appl. Phys. Lett. **115**, 115102 (2019).
18. G. Y. Chen, W. X. Zhang, and X. D. Zhang, Opt. Express **27**(12), 16449 (2019).
19. M. Kataja, T. K. Hakala, A. Julku, M. J. Huttunen, S. van Dijken, and P. Törmä, Nat. Commun. **6**, 7072 (2015).
20. N. Maccaferri, X. Inchausti, A. García-Martín, J. Cuevas, D. Tripathy, A. O. Adeyeye, and P. Vavassori, ACS Photonics **2**(12), 1769 (2015).
21. L. E. Kreilkamp, V. I. Belotelov, J. Y. Chin, S. Neutzner, D. Dregely, T. Wehlus, I. A. Akimov, M. Bayer, B. Stritzker, and H. Giessen, Phys. Rev. X **3**(4), 041019 (2013).
22. D. Floess, M. Hentschel, T. Weiss, H. Habermeier, J. Jiao, S. G. Tikhodeev, and H. Giessen, Phys. Rev. X **7**(2), 021048 (2017).

Неквадратичное поперечное магнетосопротивление дираковского полуметалла с узловой линией InBi

С. В. Зайцев-Зотов[1]*, И. А. Кон*

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

Поступила в редакцию 5 ноября 2019 г.
После переработки 14 ноября 2019 г.
Принята к публикации 14 ноября 2019 г.

Представлены результаты изучения поперечного магнетосопротивления дираковского полуметалла InBi с узловой линией. Обнаружено, что магнетосопротивление не является квадратичным. В области малых магнитных полей $B \lesssim 0.1$ Тл оно характеризуется повышенной кривизной, в области средних описывается суммой линейного и квадратичного вкладов, а в области больших магнитных полей $B \gtrsim 1$ Тл приближается к квадратичному закону с кривизной, в несколько раз меньшей кривизны вблизи нулевого поля. Предложено феноменологическое уравнение, позволяющее описать всю зависимость сопротивления от магнитного поля с погрешностью, не превышающей погрешность измерений в несколько процентов.

DOI: 10.31857/S0370274X20010099

Изучение материалов с нетривиальной топологией является одной из самых активно развивающихся областей в физике твердого тела. Многие явления, рассматривавшиеся в теории поля, оказались доступными для реализации и изучения в топологически нетривиальных материалах и структурах на их основе. В частности, реализация дираковских и вейлевских фермионов в твердом теле позволяет в лабораторных экспериментах изучать некоторые экзотические состояния, предсказывавшиеся в теории поля. Большой интерес вызывают попытки реализации энионов, в том числе майорановских состояний, а также киральной аномалии [1].

Квазичастицы с дираковским спектром возникают в целом ряде материалов. Хорошо известными примерами являются графен, топологические изоляторы, дираковские полуметаллы [2]. Сравнительно недавно было установлено, что существуют также и материалы, в которых вершины дираковского конуса находятся не в одной или нескольких точках зоны Бриллюэна, а образуют линию [3]. Особенностью дираковских полуметаллов с узловой линией (*Dirac node-line semimetals*) является гораздо более высокая плотность дираковских состояний, чем в материалах с дираковской точкой, что позволяет надеяться на более яркое проявление свойств, обусловленных дираковскими фермионами. В настоящее время существование таких состояний доказано для сравнительно небольшого набора материалов, таких как $PbTaSe_2$ [4], $PtSn_4$ [5], ZrSiS, ZrSiTe [6, 7], а также InBi [8], изучению поперечного магнетосопротивления которого и посвящена настоящая работа.

В магнетотранспортных измерениях проявляются многие специфические черты топологических материалов. Значительная часть работ этой области направлена на поиск и изучение киральной аномалии. Эффект возникает в параллельных электрическом и магнитном поле, проявляется в возникновении отрицательного продольного магнетосопротивления и считается одним из ключевых проявлений вейлевских фермионов в транспортных свойствах [9]. Что касается поперечного магнетосопротивления, то для него столь ярких эффектов не ожидается. Тем не менее для дираковских полуметаллов с узловой линией ряд необычных свойств был также предсказан и/или обнаружен экспериментально. Среди них экстремально большое положительное квадратичное поперечное магнетосопротивление, превышающее при гелиевых температурах 2 порядка в InBi [10] и 3 порядка в ZrSiS [7], а также наличие линейного вклада в поперечное магнетосопротивление в ZrSiSe и ZrSiTe [7].

InBi имеет тетрагональную элементарную ячейку, относящуюся к несимморфной пространственной группе симметрии P4/nmm [11]. Параметры решетки зависят от температуры и изменяются в пределах $a = 4.9589{-}5.0101$ Å, $c = 4.8396{-}4.7824$ Å при изменении температуры от 15 до 300 K [12]. Первопринципные расчеты показывают, что InBi является дираковским полуметаллом, в котором верши-

[1]e-mail: serzz@cplire.ru

ны дираковского конуса образуют линию в импульсном пространстве вдоль направлений MA и XR зоны Бриллюэна, т.е. в направлении вдоль оси c [8]. Наличие дираковской линии в энергетическом спектре подтверждается результатами ARPES [8]. Изучение магнетотранспорта показало наличие экстремально большого положительного поперечного квадратичного магнетосопротивления, которое превышает 2 порядка при гелиевых температурах в конфигурации $B \perp I \parallel ab$ [10] и не насыщается в больших магнитных полях. Отсутствие насыщения магнетосопротивления и его аномально высокая величина связываются с равенством концентраций электронов и дырок в этом соединении, подвижность которых при гелиевых температурах достигает 1.5×10^4 см^2/В$\cdot$с [10].

В настоящей работе приводятся результаты изучения поперечного магнетосопротивления в InBi в конфигурации $B \perp I \parallel ab$ с высокой точностью. Полученные результаты позволили различить особенности, не наблюдавшиеся ранее в подобных измерениях в этом материале. В частности, обнаружено, что зависимость сопротивления от магнитного поля отличается от квадратичной во всем диапазоне исследовавшихся магнитных полей. Предложено феноменологическое уравнение, которое описывает все полученные результаты с относительной погрешностью порядка нескольких процентов. Наличие линейного вклада, обнаруженное в настоящей работе, соответствует ожидаемому поведению магнетосопротивления дираковских полуметаллов с узловой линией [13].

Стехиометрическая смесь In и Bi (чистота 99.998 и 99.995 % соответственно) помещалась в кварцевую ампулу, откачивалась до давления 2×10^{-5} Торр, плавилась для обезгаживания, после чего ампула отпаивалась. После тщательного перемешивания расплава при температуре 200 °C проводилась кристаллизация в градиенте температуры как при вертикальном, так и при горизонтальном расположении ампулы при плавном охлаждении от 300 до 30 °C в течении 6 ч. В результате вырастал кристалл, в котором ось c была наклонена к оси ампулы. Рентгеноструктурный анализ показал однофазность выращенных кристаллов. Образцы для исследований получались с помощью сколов по кристаллографическим направлениям. Плоскость легкого скола соответствует направлению (001) [8, 10, 14]. Для минимизации пластической деформации скалывание проводилось при температуре жидкого азота. Контакты к образцам припаивались припоем с температурой плавления 58 °C, которая была существенно ниже температуры плавления InBi ($\sim$110 °C). В общей сложности с разной степенью подробности было исследовано 4 образца разных размеров, которые продемонстрировали аналогичное поведение. Результаты, представленные в настоящей работе, получены на образцах приблизительно прямоугольной формы с размерами $2.8 \times 3.0 \times 1.7$ мм^3 (образец 1) и $5 \times 4.5 \times 0.10$ мм^3 (образец 2, в обоих случаях последний указанный размер соответствует направлению вдоль оси c). Расположение контактов на образцах показано на вставке к рис. 1. Измерения

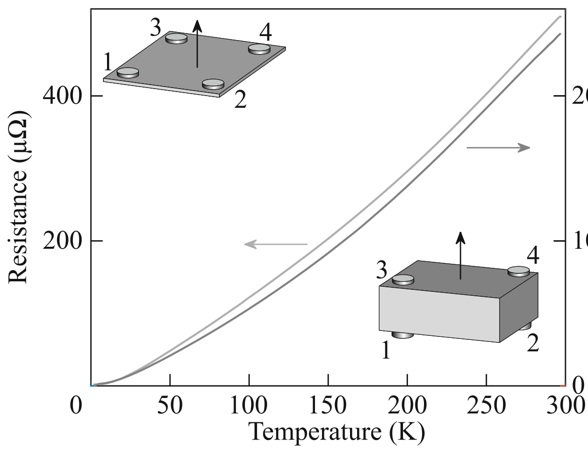

Рис.1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости сопротивления исследовавшихся образцов. Форма образцов и схемы расположения контактов показаны на вставках. Направление оси c и магнитного поля показаны черными стрелками. Образец 1 – правая шкала и правый нижний угол, образец 2 – левая шкала и левый верхний угол

сопротивления в образце 1 (нижний правый угол на рис. 1) проводились при пропускании тока через контакты 1 и 2, расположенные на одной грани образца, напряжение снималось с контактов 3 и 4, расположенных на другой грани. В случае образца 2 (верхняя левая вставка на рис. 1) ток пропускался через контакты 1 и 2, расположенные возле одного из длинных ребер образца, напряжение снималось с контактов 3 и 4, расположенных вблизи другого ребра.

На рисунке 1 показаны температурные зависимости сопротивления исследовавшихся кристаллов. Зависимости характерны для металлов и близки к наблюдавшемся ранее [10, 15]. Отношение $RRR = R(300\,\text{K})/R(4.2\,\text{K})$ для исследовавшихся образцов составляло 230 и 250.

Типичный набор зависимостей магнетосопротивления в плоскости ab от магнитного поля, перпендикулярного этой плоскости, измеренных при различных температурах, показан на рис. 2. Магнетосопротивление немного асимметрично, что связано с небольшой асимметрией расположе-

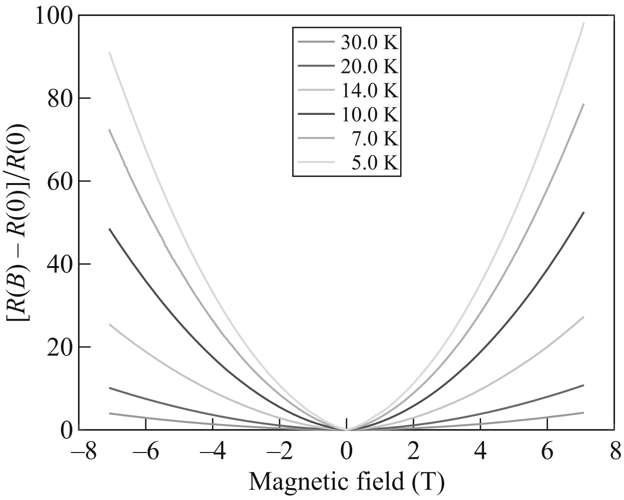

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость манетосопротивления от магнитного поля при различных температурах для образца 1

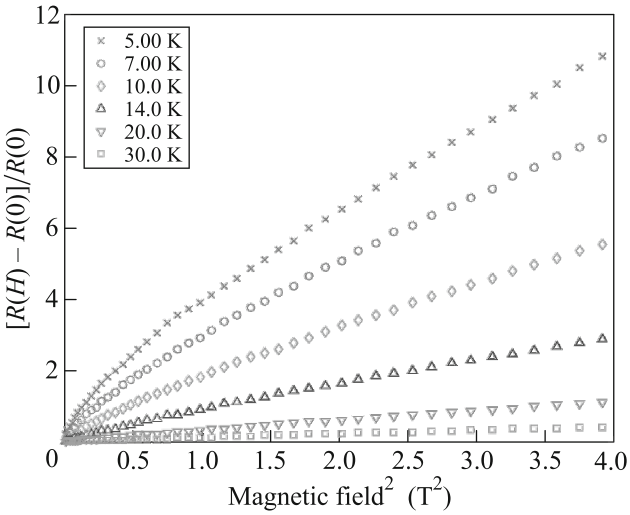

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость магнетосопротивления от квадрата магнитного поля при различных температурах. Образец 1

ния контактов и неидеальностью формы образца. Все данные, представленные ниже, соотвествуют магнетосопротивлению, симметризованному по направлению магнитного поля. Вблизи $B = 0$ магнитосопротивление квадратично, однако при понижении температуры область параболичности быстро сужается и возникает отчетливо видная тенденция к появлению V-образной формы, свидетельствующей о появлении линейного вклада, который пропорционален абсолютной величине магнитного поля. Также при понижении температуры практически исчезает температурная эволюция магнетосопротивления, что согласуется с результатами измерений [10]. Измерения в 2 и 10 раз меньшим током через образец показали, что исчезновение температурной зависимости не связано с джоулевым нагревом образца. Отсутствие параболичности в средних полях хорошо видно на рис. 3, на котором начальный участок тех же данных представлен в виде зависимости от B^2. В таком масштабе зависимость должна быть линейной, однако на практике в области малых магнитных полей наблюдается существенное отклонение от линейности, т.е. от зависимости $\Delta R/R \equiv [R(B) - R(0)]/R(0) \propto B^2$. Рост наклона зависимости в области малых полей свидетельствует о существенно большей кривизне зависимости $\Delta R(B)$ вблизи нуля.

На рисунке 4 представлены результаты измерения магнетосопротивления в двойном логарифмическом масштабе. Видно, что при всех температурах в области $B \gtrsim 2$ Тл она описывается степенным законом $\Delta R \propto B^{\alpha}$ с показателем степени $\alpha \approx 2$.

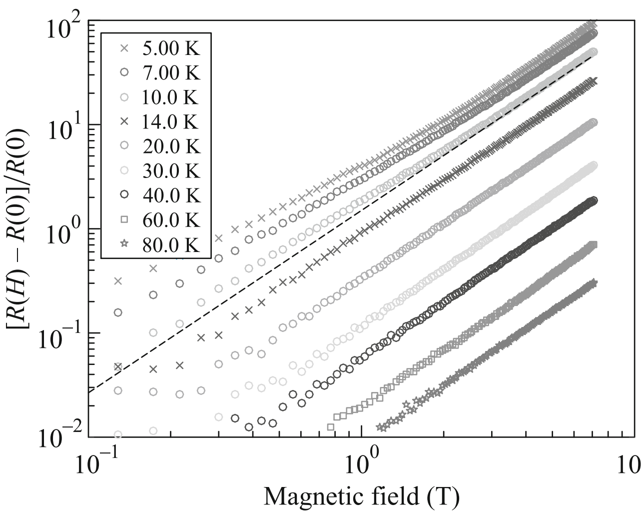

Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости магнетосопротивления от магнитного поля, измеренные при различных температурах. Образец 1. Пунктиром показана зависимость $\Delta R \propto B^{1.75}$

Представленные результаты свидетельствуют о сравнительно сложной функциональной зависимости магнетосопротивления от магнитного поля. Видно, что параболический участок большой кривизны в области совсем малых магнитных полей сменяется близким к линейному ростом. В свою очередь, в области больших полей линейный рост опять сменяется близким к параболическому степенным законом, но с меньшей кривизной.

На рисунке 5 показана зависимость $R(B,T)^{1/2}$ от магнитного поля. Эта зависимость, по крайней мере,

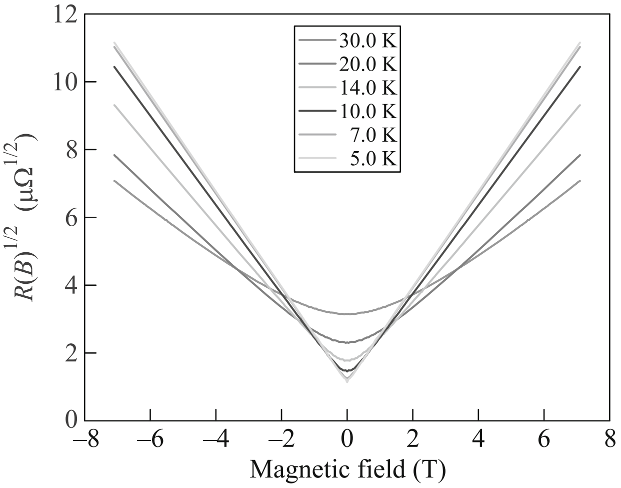

Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимости $R^{1/2}$ от магнитного поля, измеренные при различных температурах. Образец 1

для самых низких температур имеет простой вид, напоминающий гиперболу и состоящий из двух ветвей, асимптотически приближающихся к линейным зависимостям и соединенных переходной областью вблизи $B = 0$. Для образца 2 показатель степени, обеспечивающий наилучшую аппроксимацию, несколько выше и соответствует $1/\alpha = 0.55$.

Такое поведение позволяет рассмотреть аппроксимацию всей зависимости в целом с помощью уравнения

$$R(T, B) = R_0(T)\left(c(T) + \sqrt{1+\eta^2 B^2}\right)^{\alpha}, \qquad (1)$$

которое описывает перечисленные выше особенности магнетосопротивления. Здесь B – индукция магнитного поля, c — зависящий от температуры безразмерный параметр, η – параметр, имеющий размерность подвижности, $R_0(T)$ имеет размерность сопротивления и связано с сопротивлением в нулевом поле с помощью соотношения $R_0(T) = R(T,0)/(c+1)^{\alpha}$, а $\alpha \approx 2$. Для $\alpha = 2$ при $\eta B \gg 1$ магнетосопротивление, описываемое ур. (1), может быть записано как

$$\frac{\Delta R}{R} \approx \frac{2\eta c}{(c+1)^2}B + \frac{\eta^2}{(c+1)^2}B^2, \qquad (2)$$

т.е. сводится к виду $\Delta R/R = aB + bB^2$, содержащему линейный по магнитному полю член. Такое описание магнетосопротивления было предложено для дираковских полуметаллов с узловой линией ZrSiSe и ZrSiTe [7], а также получено теоретически для этого класса материалов [13]. При $c = 0$ и $\alpha = 2$ это уравнение описывает квадратичное поперечное магнетосопротивление, ожидаемое в топологически тривиальных полуметаллах с равными концентрациями электронов и дырок (см., например, [10]). Таким образом, ур. (1) представляет собой феноменологическое расширение уравнения, используемого для описания магнетосопротивления топологически тривиальных материалов. В свою очередь, при $\alpha = 2$ ур. (1) является частным случаем более общего уравнения

$$R(B) = R_0 + R_1\sqrt{1+\eta_1^2 B^2} + bB^2, \qquad (3)$$

в котором сопротивление в нулевом магнитном поле определяется суммой $R_0 + R_1$, второй член описывает линейный по магнитному полю вклад и переходный участок в окрестности $B = 0$, а третий – обычное квадратичное магнетосопротивление.

Оказалось, что ур. (1) описывает все имеющиеся данные с относительной погрешностью порядка нескольких процентов[2)]. В масштабе рис. 2, 5, аппроксимация практически неотличима от результатов измерений. На рисунке 6 показаны данные в об-

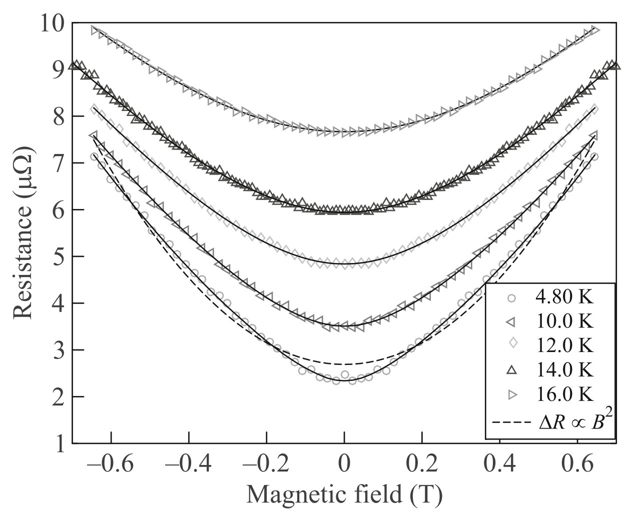

Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость магнетосопротивления в области слабых магнитных полей. Сплошными линиями показаны результаты аппроксимации с помощью ур. (1). Пунктиром для сравнения показана квадратичная аппроксимация данных, полученных при $T = 4.8$ К. Образец 2

ласти малых магнитных полей и их аппроксимация. Видно, что точность аппроксимации определяется уровнем шумов измерения сопротивления (в данном случае около 50 нОм, что составляет 1 % от характерного сопротивления 5 мкОм). Значения параметров

[2)] Наибольшее отклонение связано с поправками, возникающими ниже температуры сверхпроводящего перехода низкотемпературного припоя, использовавшегося для пайки контактов.

аппроксимации при $T = 4.8$ K составляют $c = 6.4$, $\eta = 10^5$ см^2/В·с. При повышении температуры обе величины уменьшаются.

В топологически тривиальных компенсированных полуметаллах кривизна зависимости $\Delta R(B)/R(0)$ постоянна и определяется подвижностью, причем $\Delta R(B)/R(0) = \mu_e \mu_h B^2$ (см., например, [10]). При $\eta B \ll 1$ ур. (1) приводит к $\Delta R/R = \eta^2 B^2/(c+1)$, что соответствует случаю квадратичного магнетосопротивления с подвижностью $\mu_0 = \eta/\sqrt{c+1}$. При $\eta B \gg 1$, $\mu_\infty = \eta/(c+1)$. Так как $c > 0$, то $\mu_0 = \mu_\infty \sqrt{c+1}$. Такому изменению кривизны зависимости $\Delta R(B)$ в несколько раз соответствует изменение кривых на рис. 3. Участки бóльшей кривизны зависимости $\Delta R(B)$ вблизи нулевого поля можно заметить во многих топологически нетривиальных материалах, таких как Bi [16], NbP [17], $MoTe_2$ [18], Cd_2As_2 [19], упоминавшихся выше ZrSiSe и ZrSiTe [7], InBi [10] и многих других материалах. По этой причине можно предположить, что уравнения (1), (3) описывают магнетосопротивление широкого круга топологически нетривиальных материалов.

Полученные в настоящей работе результаты свидетельствуют о реализации более сложной зависимости транспортных свойств дираковского полуметалла с узловой линией InBi от магнитного поля, чем квадратичной. Обнаруженные отклонения от квадратичной зависимости соотвествуют появлению линейного по магнитному полю вклада в магнетосопротивление, ожидаемого для систем с дираковской узловой линией [13]. Именно наличием такого вклада объясняется непараболичность магнетосопротивления в области магнитных полей порядка нескольких Тл (см. также ур. (2)). Описание магнетосопротивления с помощью предложенного в данной работе ур. (1) в настоящее время не имеет теоретического обоснования. Тем не менее, при $c = 0$ данное уравнение описывает квадратичное магнетосопротивление топологически тривиальных материалов, а при $c \neq 0$ оно позволяет описать с практической точностью все обнаруженные особенности магнетосопротивления дираковского полуметалла с узловой линией InBi.

Авторы выражают благодарность А. А. Майзлаху за помощь в росте кристаллов, В. А. Лузанову за проведение рентгеноструктурного анализа, В. В. Павловскому, Н. И. Федотову и А. А. Майзлаху за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 16-12-10335).

1. Ch.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and Sh. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).
2. S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe, Phys. Rev. Lett. **108**, 140405 (2012).
3. A. A. Burkov, M. D. Hook, and L. Balents, Phys. Rev. B **84**, 235126 (2011).
4. G. Bian, T.-R. Chang, R. Sankar et al. (Collaboration), Nature Commun. **7**, 10556 (2016).
5. Y. Wu, L.-L. Wang, E. Mun, D. D. Johnson, D. Mou, L. Huang, Y. Lee, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, and A. Kaminski, Nature Phys. **12**, 667 (2016).
6. J. Hu, Zh. Tang, J. Liu, X. Liu, Y. Zhu, D. Graf, K. Myhro, S. Tran, Ch. N. Lau, J. Wei, and Zh. Mao, Phys. Rev. Lett. **117**, 016602 (2016).
7. M. N. Ali, L. M. Schoop, Ch. Garg, J. M. Lippmann, E. Lara, B. Lotsch, and S. S. P. Parkin, Science Advances **2**, 1601742 (2016).
8. S. A. Ekahana, Sh.-Ch. Wu, J. Jiang, K. Okawa, D. Prabhakaran, Ch.-C. Hwang, S.-K. Mo, T. Sasagawa, C. Felser, B. Yan, Zh. Liu, and Yu. Chen, New J. Phys. **19**, 065007 (2017).
9. A. A. Zyuzin and A. A. Burkov, Phys. Rev. B **86**, 115133 (2012).
10. K. Okawa, M. Kanou, H. Namiki, and T. Sasagawa, Phys. Rev. Materials **2**, 124201 (2018).
11. W. P. Binnie, Acta Cryst. **9**, 686 (1956).
12. R. Kubiak and J. Janczak, J. Alloys Compd. **196**, 117 (1993).
13. H. Yang and F. Wang, arXiv:1908.01625.
14. H. U. Walter, J. Crystal Growth **19**, 351 (1973).
15. R. B. Lal, J. H. Davis, and H. U. Walter, Phys. Stat. Sol. (a) **100**, 583 (1987).
16. F. Y. Yang, K. Liu, K. Hong, D. H. Reich, P. C. Searson, and C. L. Chien, Science **284**, 1335 (1999).
17. Ch. Shekhar, A. K. Nayak, Y. Sun et al. (Collaboration), Nature Phys. **11**, 645 (2015).
18. F. C. Chen, H. Y. Lv, X. Luo, W. J. Lu, Q. L. Pei, G. T. Lin, Y. Y. Han, X. B. Zhu, W. H. Song, and Y. P. Sun, Phys. Rev. B **94**, 235154 (2016).
19. T. Liang, Q. Gibson, M. N. Ali, M. Liu, R. J. Cava, and N. P. Ong, Nature Materials **14**, 280 (2015).

Pis'ma v ZhETF, vol. 111, iss. 1, pp. 50 – 51

Capillary-induced phase separation in ultrathin jets of rigid-chain polymer solutions

A. V. Subbotin[+*1)], *A. N. Semenov*[×]

[+] *Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, 119991 Moscow, Russia*

[*] *Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, Russian Academy of Sciences, 119071 Moscow, Russia*

[×] *Institut Charles Sadron, CNRS-UPR 22, Universite de Strasbourg, 23 rue du Loess, BP 84047, 67034 Strasbourg Cedex 2, France*

Submitted 23 October 2019
Resubmitted 20 November 2019
Accepted 21 November 2019

DOI: 10.31857/S0370274X20010105

Capillary thinning and break-up of liquid jets is one of the long-standing important problems attracting wide scientific and industrial interest [1]. The problem is particularly challenging in the case of polymer liquids [2–4]. Last decades the essential progress has been attained in study of Newtonian jets [5, 6]. However experiments reveal that Newtonian and polymer liquid threads show qualitatively different types of behavior [7]. In particular the jets formed by solutions of flexible polymers can show formation of blistering patterns where solvent droplets set on micro- or nano-fibers [8–10]. The nature of these patterns is insufficiently explored. One of the approaches elucidating this phenomenon was based on the opportunity for polymer molecules to migrate in the thinner regions due to the stress-concentration coupling effect [11]. Another molecular model, which has been proposed recently, puts forward the idea of a flow induced phase separation in dilute polymer solutions under extension [12, 13]. It predicts a polymer/solvent demixing due to the flow-induced orientation of polymer chains acting to reverse their effective interactions from repulsive to attractive. As a result the elongated chains tend to micro-separate and form a network of fibrils tending to compress laterally by squeezing the solvent out to the jet surface.

Most of the above results cover solutions of flexible chains. Meanwhile solutions of stiff polymers such as polypeptides, DNA, cellulose, aromatic polyamide copolymers etc. are particularly interesting for applications. Our study is focused on capillary thinning of solutions of rigid rods in the regime of ultrathin jet when its diameter is smaller than the rod length and the rods are highly oriented along the jet axis. Such regime arises at the terminal stage of capillary thinning.

1)e-mail: subbotin@ips.ac.ru

We examined two qualitatively different mechanisms of polymer liquid jet instability arisen on long and short length-scales. For length-scales exceeding the rod length the surface tension-driven thinning develops in a conventional way (Plateau–Rayleigh mechanism [1]) which ultimately should result in breaking up of the jet. By contrast, we show that at shorter length-scales the rods get effectively trapped inside the jet core whereas the solvent drains to the surface and forms annular droplets there, Fig. 1. The latter process of capillary phase separation occurs much faster and can prevent the jet from breaking up. This mechanism works both with nonvolatile solvents and with no specific attraction between oriented polymer chains and differs from the mechanism of phase separation which is connected with a reduction of the steric repulsion of the stretched chains [12, 13]. Moreover, the described mechanism may be also at work in solutions of semiflexible polymers if the chains are highly stretched due to extension. Thereby the discovered capillary-driven phase separation effect can provide a universal mechanism of fiber formation in solutions of stretched polymers.

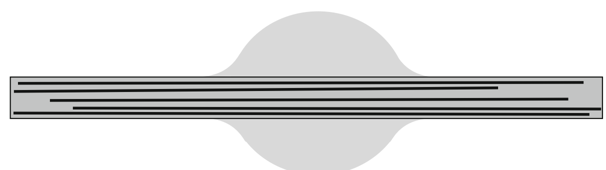

Fig. 1. (Color online) Illustration of annular droplet of solvent on the polymer solution jet

Experimental observation and identification of the predicted solvent/polymer demixing mechanism is a challenging problem. A thin quasi-uniform jet can be easily produced, for example, by stretching a liquid droplet. One option is to use solutions of DNA. These chains can be very long and form nano-thick fibers in solutions [14]. The most appropriate system to verify our results must involve very long rods. Such macromolecular rods (with length $\geq 1-10$ microns) are known, examples are given by protein polymers (F-actin, microtubules) and other self-assembling supramolecular structures (like tri-arylamine fibers) [15–19].

A. V. Subbotin acknowledges financial support from the Russian Science Foundation (Grant # 17-79-30108). A. N. Semenov acknowledges a partial support from the International Research Training Group (IRTG) "Soft Matter Science: Concepts for the Design of Functional Materials".

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020010051

1. J. Eggers and E. Villermaux, Rep. Prog. Phys. **71**, 036601 (2008).
2. G. H. McKinley, *Visco-elasto-capillary thinning and break-up of complex fluids*, in Rheological Review (The British Society of Rheology, Aberystwyth, 2005), p. 1.
3. A. Ya. Malkin, A. Arinstein, and V. G. Kulichikhin, Prog. Polym. Sci. **39**, 959 (2014).
4. V. G. Kulichikhin, I. Yu. Skvortsov, A. V. Subbotin, S. V. Kotomin, and A. Ya. Malkin, Polymers **10**, 856 (2018).
5. J. R. Castrejón-Pita, A. A. Castrejón-Pita, S. S. Thete, K. Sambath, I. M. Hutchings, J. Hinch, J. R. Lister, and O. A. Basaran, PNAS **112**, 4582 (2015).
6. Y. Li and J. E. Sprittles, J. Fluid Mech. **797**, 29 (2016).
7. A. V. Bazilevskii, S. I. Voronkov, V. M. Entov, and A. N. Rozhkov, Sov. Phys. Dokl. **26**, 333 (1981).
8. R. Sattler, S. Gier, J. Eggers, and C. Wagner, Phys. Fluids **24**, 023101 (2012).
9. A. V. Semakov, I. Yu. Skvortsov, V. G. Kulichikhin, and A. Ya. Malkin, JETP Lett. **101**, 690 (2015).
10. A. Ya. Malkin, A. V. Semakov, I. Yu. Skvortsov, P. Zatonskikh, V. G. Kulichikhin, A. V. Subbotin, and A. N. Semenov, Macromolecules **50**, 8231 (2017).
11. J. Eggers, Phys. Fluids **26**, 033106 (2014).
12. A. V. Subbotin and A. N. Semenov, J. Polym. Sci.: Part B: Phys. Ed. **54**, 1066 (2016).
13. A. N. Semenov and A. V. Subbotin, J. Polym. Sci.: Part B: Phys. Ed. **55**, 623 (2017).
14. X. Fang and D. H. Reneker, J. Macromol. Sci.: Part B: Phys. **36**, 169 (1997).
15. F. Gittes, B. Mickey, J. Nettleton, and J. Howard, J. Cell Biol. **120**, 923 (1993).
16. F. Oosawa and S. Asakura, *Thermodynamics of the Polymerization of Protein*, Acad. Press, San Diego (1975).
17. J. van Mameren, K. C. Vermeulen, F. Gittes, and C. F. Schmidt, J. Phys. Chem. B **113**, 3837 (2009).
18. E. Moulin, F. Niess, M. Maaloum, E. Buhler, I. Nyrkova, and N. Giuseppone, Angew. Chem. Int. Ed. **49**, 6974 (2010).
19. I. Nyrkova, E. Moulin, J. J. Armao IV, M. Maaloum, B. Heinrich, M. Rawiso, F. Niess, J.-J. Cid, N. Jouault, E. Buhler, A. N. Semenov, and N. Giuseppone, ACS Nano **8**, 10111 (2014).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 52 – 56 © 2020 г. 10 января

Долгоживущий сигнал индукции в железо-иттриевом гранате

Ю. М. Буньков[+1)], *П. М. Ветошко*[+], *А. Н. Кузмичёв*[+], *Г. В. Мамин*[*], *С. Б. Орлинский*[*], *Т. Р. Сафин*[*], *В. И. Белотелов*[+], *М. С. Тагиров*[*]

[+]*Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Москва, Россия*

[*]*Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия*

Поступила в редакцию 25 ноября 2019 г.
После переработки 26 ноября 2019 г.
Принята к публикации 26 ноября 2019 г.

Мы представляем результаты экспериментов на пленке железо-иттриевого граната, в которых обнаружены два типа долгоживущих сигналов свободной индукции. Первый тип хорошо соответствует сигналам, возникающим за счет сверхтекучего переноса магнонов, обнаруженным ранее в антиферромагнитном сверхтекучем ^{3}He-B. Второй, сверхдолгоживущий сигнал, также имеет ряд свойств когерентной прецессии. Однако он принципиально отличается от сверхдолгоживущего сигнала в ^{3}He-B. Механизм образования сверхдолгоживущего сигнала в железо-иттриевом гранате пока не имеет теоретического объяснения.

DOI: 10.31857/S0370274X20010117

В 1984 г. было открыто явление спиновой сверхтекучести, когерентный перенос магнитного момента за счет градиента фазы прецессии намагниченности [1]. Первым проявлением спиновой сверхтекучести явилось формирование долго живущего сигнала индукции (ДСИ) после возбуждающего резонансного радиочастотного импульса. Обычно сигнал свободной индукции затухает за время, обратное неоднородному уширению линии магнитного резонанса. В экспериментах со сверхтекучим ^{3}He-B оно составляло порядка нескольких миллисекунд. Было обнаружено, что в ^{3}He-B сигнал свободной индукции после затухания спонтанно восстанавливается и затем плавно затухает за времена порядка секунды. Образование ДСИ было объяснено перетеканием возбужденных неравновесных магнонов в область меньших полей. При этом формировалась область, в которой неоднородность магнитного поля компенсировалась динамическим сдвигом частоты за счет изменения плотности неравновесных магнонов – Однородно Прецессирующий Домен (ОПД) [2]. В дальнейшем пространственное перетекание магнонов в градиенте магнитного поля было непосредственно продемонстрировано в специально разработанном эксперименте [3]. В серии дальнейших экспериментов были обнаружены такие явления, присущие сверхтекучести, как не потенциальный ток магнонов в канале, определяемый исключительно разностью фаз волновой функции [4, 5], сброс фазы при достижении критического тока [6, 7], эффект Джозефсона [8, 9], образование квантовых вихрей [10, 11] и так далее. Подтверждением образования сверхтекучего когерентного состояния магнонов оказалось также наблюдение коллективных возбуждений магнонного конденсата – Голдстоуновских мод колебаний [12, 13].

Так как свойства магнонного газа в антиферромагнитном сверхтекучем ^{3}He и в твердотельных магнетиках не имеют принципиальных различий, была поставлена задача наблюдения спиновой сверхтекучести в последних [14]. Основной трудностью для решения этой задачи является время жизни магнонов. Если в ^{3}He постоянная затухания Гильберта α составляет порядка 10^{-8}, то для наилучшего твердотельного магнетика – железо-иттриевого граната (ЖИГ) она составляет 10^{-5}. Поэтому метод импульсного магнитного резонанса, при котором магноны, возбужденные коротким импульсом, перераспределяются и формируют ОПД, затруднителен. Магноны затухают за времена, сравнимые со временем его образования. Поэтому были разработаны новые методики наблюдения спиновой сверхтекучести – методики не резонансного возбуждения и непрерывного возбуждения магнонов [15, 16]. Этими методами была обнаружена спиновая сверхтекучесть для моды связанной ядерно-электронной прецессии в легкоплоскостных антиферромагнетиках с ионами ^{55}Mn [17, 18]. Удалось получить также долгоживущий сигнал индукции [19] и наблюдать Голдстоуновские моды колебаний [20].

1) e-mail: y.bunkov@rqc.ru

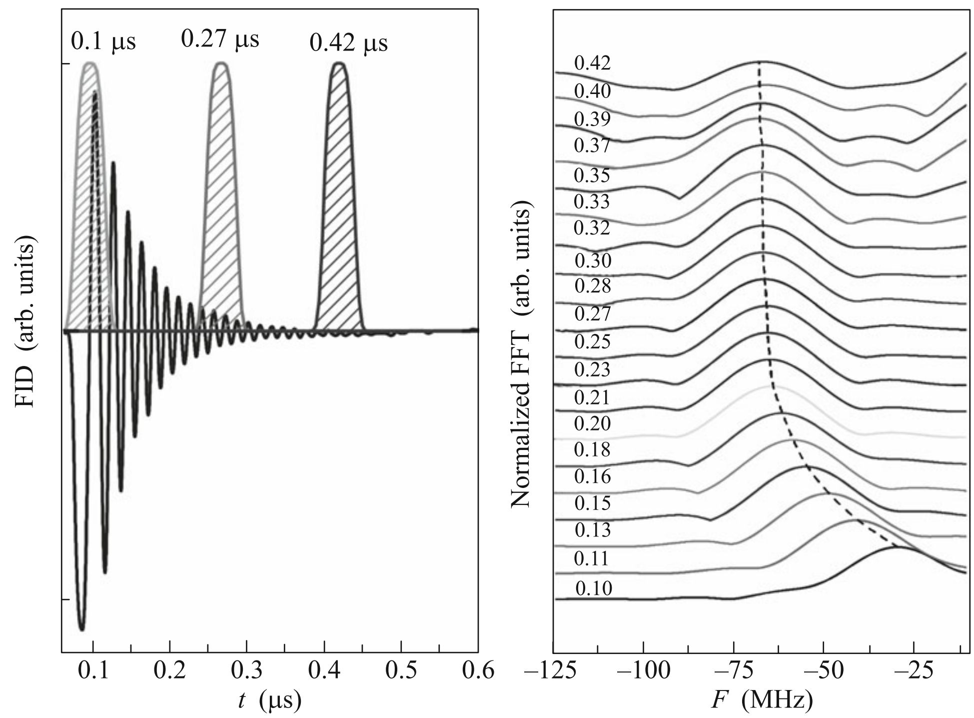

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Сигнал свободной индукции после возбуждающего РЧ импульса на частоте, превышающей частоту линейного резонанса на 70 МГц. (b) – Результаты Фурье преобразования сигнала индукции во временных интервалах, схематически показанных на рис. (a). Сдвиг частоты пропорционален амплитуде сигнала индукции в соответствующий момент времени

Фундаментальной задачей является обнаружение сверхтекучего квантового состояния, существующего при комнатной температуре. Нам удалось получить такое состояние для неравновесных магнонов в пленке ЖИГ. Исследования проводились на дисках диаметром 0.5 и 0.3 мм, вырезанных из пленки ЖИГ толщиной 6 мкм. Магнитное поле было направлено перпендикулярно плоскости пленки. При данной конфигурации частота прецессии намагниченности описывается уравнением [21]:

$$\omega = \gamma(H_0 - 4\pi M_S \cos\beta), \qquad (1)$$

где β – угол отклонения намагниченности, H_0 и M_S – локальное магнитное поле и намагниченность ферримагнитного образца. Частота прецессии увеличивается при отклонении намагниченности, что соответствует отталкиванию между магнонами. А это значит, что при пространственной неоднородности магнитного поля магноны потекут в область меньших полей, их плотность увеличится и динамический сдвиг частоты может компенсировать неоднородность.

Эксперименты проводились на импульсном спектрометре ELEXSYS E-580 X фирмы Брукер на частоте 9.73 ГГц. На образец подавался относительно длинный радиочастотный (РЧ) импульс длительностью порядка 400 нс на частоте, смещенной вверх относительно резонансной частоты. Эта методика, использованная впервые в экспериментах с ^{3}He-A [22], позволяет сформировать ОПД во время импульса. Поэтому после выключения накачки появляется сигнал индукции уже сформировавшегося домена с начальной частотой, равной частоте накачки. На рисунке 1 слева показан сигнал индукции, который затухает за время порядка 0.4 мкс. Характерной особенностью сигнала является то, что его частота меняется в процессе релаксации. На рисунке 1 справа показаны результаты Фурье анализа сигнала, проведенные в различные временные интервалы, профиль которых схематически показан на левом рисунке. В начальный момент времени частота прецессии соответствует нулевой расстройке относительно частоты возбуждающего импульса. Зафиксированный в эксперименте начальный сдвиг частоты в 25 МГц от частоты РЧ импульса возникает за счет затухания сигнала за мертвое время приемника. В дальнейшем частота сигнала уменьшается до частоты линейного магнитного резонанса. И несмотря на относительно короткое время жизни сигнала, которое определяется релаксацией магнонов, изменение частоты сигнала индукции с уменьшением числа магнонов хорошо видно. Этот сдвиг частоты является характерной особенностью ДСИ излучаемого ОПД. Образование ОПД в ЖИГ было нами подтверждено также в экспериментах с непрерывной накачкой на нерезонансной частоте [23].

Кроме долгоживущего сигнала индукции в сверхтекучем ^{3}He-B, был обнаружен сигнал другой природы, который жил гораздо дольше ДСИ, порядка десятков секунд, и обладал другими динамическими свойствами – сверхдолгоживущий сигнал индукции (СДСИ) [24, 25]. Образование состояния, излучающего столь долгоживущий сигнал индукции, было объяснено квантованием магнонов в потенциальной яме, образованной текстурой параметра порядка ^{3}He-B [26, 27]. Дело в том, что взаимодействие магнонов со стенками камеры приводило к неустойчивости ОПД при низких температурах [28–30]. Во многом аналогичная ситуация была обнаружена и в экспериментах с ЖИГ, представленных в этой статье. Возможно, прецессия намагниченности в пленке ЖИГ распадается на другие моды колебаний, как и в случае с ^{3}He-B при сверхнизких температурах [31], и только у стенок остается устойчивой.

На рисунке 2 показаны сигналы, которые возникают после релаксации основного сигнала ДСИ. Данные сигналы образуются только при возбуждении системы РЧ импульсом, сдвинутым по частоте вверх относительно частоты линейного резонанса. Причем их частота синхронизируется с частотой РЧ импульса и не меняется за время затухания. Небольшое изменение частоты наблюдается только в пределе больших расстроек. Характерной особенностью этих сигналов является на порядок меньшая скорость затухания по сравнению с сигналами ДСИ.

На рисунке 3 показано экспоненциальное затухание сигналов СДСИ на образце диаметром 0.5 мм при различной частоте возбуждения. На другом образце прямоугольной формы с размером также 0.5 мм были получены времена релаксации до 1.6 мкс с разбиением на две области (рис. 4). Возможно, сигналы СДСИ локализованы в двух различных областях и имеют разную скорость затухания.

Образование сигналов СДСИ очень устойчиво и наблюдается на всех образцах в широком диапазоне температур – от комнатной до 100 K. При более низких температурах процессы магнитной релаксации в исследованных пленках резко усиливаются. Амплитуда сигнала СДСИ составляет от 10 до 1 % при различных условиях, что также сравнимо с параметрами СДСИ в сверхтекучим ^{3}He-B. Однако частотные характеристики СДСИ в ЖИГ сильно отличаются

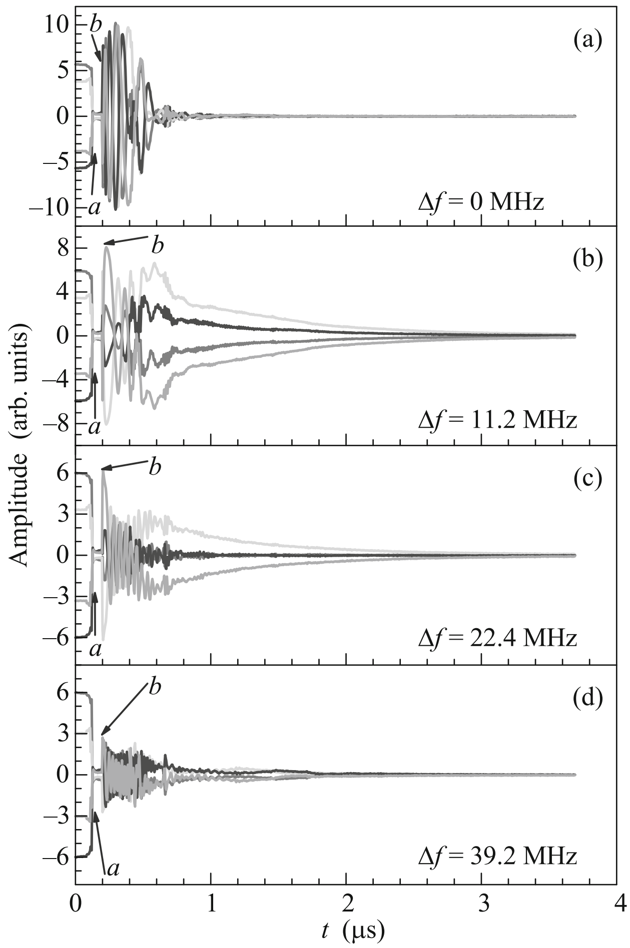

Рис. 2. (Цветной онлайн) Стробоскопическая запись сигналов неизвестной природы при разной расстройке между частотой линейного резонанса и частотой РЧ поля. (a) – Время выключения РЧ поля. (b) – Мертвое время приемника. Далее до отметки 0.6 мкс – сигнал ДСИ, ослабленный защитой приемника. Далее видны сверхдолгоживущие сигналы индукции неизвестной природы, полученные при сдвиге фазы приемника 0, 90, 180 и 270°

от СДСИ в ^{3}He-B. Обращает внимание то, что частота и даже фаза прецессии в ЖИГ не изменяется в процессе релаксации. Поэтому за образование когерентного состояния СДСИ в ЖИГ, видимо, отвечает другой механизм формирования, природа которого требует объяснения.

Зависимость амплитуды сигнала СДСИ от величины расстройки также весьма интересна. Она приведена на рис. 5. Обращает внимание то что сигнал СДСИ в резонансе не формируется. Однако он резко появляется при небольшой расстройке, и затем плавно уменьшается с ее увеличением. Возможно, сигнал СДСИ образуется на границе образца, где существу-

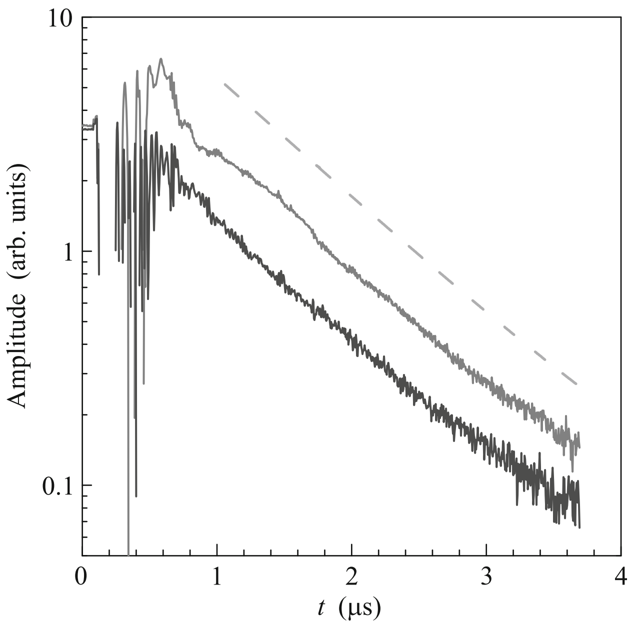

Рис. 3. (Цветной онлайн) Затухание сигналов СДСИ в образце диаметром 0.5 мм при возбуждении РЧ импульсом со сдвигом частоты в 11.2 (сверху) и 22.4 МГц. Постоянная времени затухания составляет 0.84 мкс

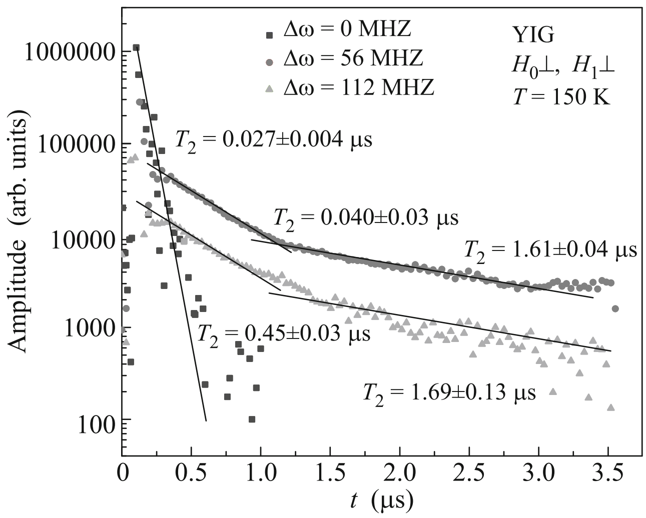

Рис. 4. (Цветной онлайн) Затухание сигналов СДСИ в образце прямоугольной формы 0.5 мм при возбуждении РЧ импульсом со сдвигом частоты в 0 МГц (ДСИ), 56 и 112 МГц. Постоянная времени затухания СДСИ составляет до 1.7 мкс

ют спины с частотой линейной прецессии, равной частоте возбуждающего РЧ поля. Вопрос о слабом затухании их прецессии остается открытым.

В заключении, мы обнаружили необычные долгоживущие сигналы свободной индукции, механизм формирования которых требует объяснения. Они об-

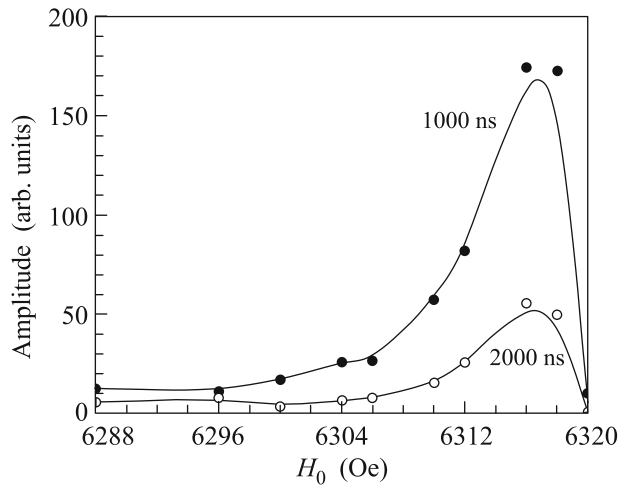

Рис. 5. Амплитуда сигналов СДСИ в образце диаметром 0.5 мм при возбуждении в нерезонансном поле, измеренная через 1 и 2 мкс после выключения РЧ импульса. Обращает внимание то, что амплитуда сигнала пропорциональна плотности магнонов с частотой резонанса, соответствующей частоте РЧ поля накачки за счет краевого эффекта размагничивания

разуются на частоте РЧ накачки, а не на частоте линейного магнитного резонанса. Образование подобных сигналов в системах с динамическим сдвигом частоты наблюдалось и ранее, например, захватное эхо [32] и ДСИ в сверхтекучем ^{3}He-B, однако их свойства принципиально отличаются от свойств полученных сигналов. Не вызывает сомнение, что полученные сигналы образуются когерентной прецессией намагниченности в локальных областях, как, например, магнонный Q-ball в ^{3}He-B, свойства которого интенсивно исследовались в последнее время [33–36]. Кроме того, Q-ball нашел свое применение в качестве сверхчувствительного термометра при сверхнизких температурах [37].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 19-12-00397).

1. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskii, JETP Lett. **40**, 1033 (1984).
2. I. A. Fomin, JETP Lett. **40**, 1037 (1984).
3. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and K. Flahbart, Sov. Phys. JETP **61**, 1199 (1985).
4. Yu. M. Bunkov, Jpn. J. Appl. Phys, **26**, 1809 (1987).
5. Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and G. K. Tvalashvily, Sov. Phys. JETP **67**, 300 (1988).
6. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskiy, JETP Lett. **45**, 124 (1987).

7. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, Phys. Rev. Lett. **62**, 1631 (1989).
8. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, V. Makroczyova, Yu. M. Mukharskii, D. A. Sergatskov, and A. de Waard, Journal de Physique **49** (C8), 2067 (1988).
9. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, A. de Waard, V. V. Dmitriev, V. Makrotsieva, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, JETP Lett. **47**, 478 (1988).
10. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, Physica B **165**, 649 (1990).
11. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, Physica C **468**, 600 (2008).
12. Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskii, JETP Lett. **43**, 131 (1986).
13. Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskii, Physica B **178**, 196 (1992).
14. Yu. M. Bunkov, Physics Uspekhi **53**, 848 (2010).
15. L. V. Abdurakhimov, M. A. Borich, Yu. M. Bunkov, R. R. Gazizulin, D. Konstantinov, M. I. Kurkin, and A. P. Tankeyev, Phys. Rev. B **97**, 024425 (2018).
16. Yu. M. Bunkov, A V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safiullin, and M. S. Tagirov, JETP Lett. **109**, 43 (2019).
17. Yu. M. Bunkov, E. M. Alakshin, R. R. Gazizulin, A. V. Klochkov, V. V. Kuzmin, V. S. L'vov, and M. S. Tagirov, Phys. Rev. Lett. **108**, 177002 (2012).
18. M. S. Tagirov, E. M. Alakshin, Yu. M. Bunkov, R. R. Gazizulin, S. A. Zhurkov, L. I. Isaenko, A. V. Klochkov, A. M. Sabitova, T. R. Safin, and K. R. Safiullin, J. Low Temp. Phys. **175**, 167 (2014).
19. E. M. Alakshin, Yu M. Bunkov, R. R. Gazizulin, L. I. Isaenko, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safiullin, M. S. Tagirov, and S. A. Zhurkov, Journal of Physics: Conference Series **568**, 042001 (2014).
20. Yu. M. Bunkov, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safiullin, and M. S. Tagirov, JETP Lett. **106**, 677 (2017).
21. Yu. V. Gulyaev, P. E. Zil'berman, A. G. Temiryazev, and M. P. Tikhomirova, Physics of the Solid State **42**, 1062 (2000).
22. P. Hunger, Yu. M. Bunkov, E. Collin, and H. Godfrin, J. of Low Temp. Phys. **158**, 129 (2010).
23. Yu. M. Bunkov, A. Farhutdinov, A. N. Kuzmichev, T. R. Safin, P. M. Vetoshko, V. I. Belotelov, and M. S. Tagirov, to be published; arxiv.1911.03708.
24. Yu. M. Bunkov, S. N. Fisher, A. M. Guenault, and G. R. Pickett, Phys. Rev. Lett. **69**, 3092 (1992).
25. Yu. M. Bunkov, J. Low Temp. Phys. **138**, 753 (2005).
26. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, Phys. Rev. Lett. **98**, 265302 (2007).
27. S. Autti, Yu. M. Bunkov, V. B. Eltsov, P. J. Heikkinen, J. J. Hosio, P. Hunger, M. Krusius, and G. E. Volovik, Phys. Rev. Lett. **108**, 145303 (2012).
28. Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, J. Nyeki, and D. A. Sergatskov, Europhysics Lett. **8**, 645 (1989).
29. Yu. M. Bunkov, V. S. L'vov, and G. E. Volovik, JETP Lett. **83**, 530 (2006).
30. Yu. M. Bunkov, V. S. L'vov, and G. E. Volovik, JETP Lett. **84**, 289 (2006).
31. Yu. M. Bunkov, J. Low Temp. Phys. **135**, 337 (2004).
32. Yu. M. Bunkov and B. S. Dumesh, Sov. Phys. JETP **41**, 576 (1975).
33. S. Autti, V. B. Eltsov, and G. E. Volovik, JETP Lett. **95**, 544 (2012).
34. V. V. Zavjalov, S. Autti, V. B. Eltsov, and P. J. Heikkinen, JETP Lett. **101**, 802 (2015).
35. S. Autti, P. J. Heikkinen, G. E. Volovik, V. V. Zavjalov, and V. B. Eltsov, Phys. Rev. B **97**, 014518 (2018).
36. S. Autti, V. B. Eltsov, and G. E. Volovik, Phys. Rev. Lett. **120**, 215301 (2018).
37. S. N. Fisher, G. R. Pickett, P. Skyba, and N. Suramlishvili, Phys. Rev. B **86**, 024506 (2012).

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 111

Выпуск 2

25 января 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. 111, iss. 2, pp. 59 – 60

Gluon evolution for the Berger–Block–Tan form of the structure function F_2

A. V. Kotikov[1)]

II Institut fur Theoretische Physik, Universitat Hamburg, 22761 Hamburg, Germany

Theoretical Physics of the Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia

Submitted 25 November 2019
Resubmitted 10 December 2019
Accepted 10 December 2019

DOI: 10.31857/S0370274X20020010

In the snall-x regime, nonperturbative effects were expected to play an important role. However, as it has been observed up to very low $Q^2 \sim 1$ GeV^2 values, considered processes are described reasonably well by perturbative OCD (pQCD) methods (see, for example, [1, 2]). It should be noted, nonetheless, that at extremely low x, $x \to 0$, the pQCD evolution provides a rather singular behavior of the parton distribution functions (PDFs) (see, e.g., [3–8] and references therein), which strongly violates the Froissard boundary [9].

In [10, 11] a new form of the deep inelastic lepton-hadron scattering (DIS) structure function (SF) $F_2(x, Q^2)$ was proposed. It will be called below as the Berger–Block–Tan (BBT) structure function. The SF $F_2^{\rm BBT}(x, Q^2)$ leads to the low x asymptotics of the (reducted) DIS cross-sections $\sim \ln^2 1/x$, which is in turn in an agreement with the Froissard predictions [9]. This parametrization is relevant in investigations of ultra-high energy processes, such as scattering of cosmic neutrino off hadrons (see [12–16]).

Following to our previous studies in [17, 18] and [19–21], recently the gluon density $f_g(x, Q^2)$ and the longitudinal DIS SF $F_L(x, Q^2)$ in the BBT form have been obtained in [22, 23] and [24, 25] at small values of x, using the SF $F_2^{\rm BBT}(x, Q^2)$. To do it, we proposed a violation of twist-two evolution of gluon density by a nonlinear term. The purpose of the present Letter to show the exact form of the violation. All the results will be done at the leading order (LO) of perturbation theory.

We show that the nonlinear term is negative at low x values and is suppressed as $1/\ln^2(1/x)$, that is in a full agreement with earlier studies in [26]. However, the Q^2-dependence is different: at large Q^2 values our nonlinear term $\sim 1/ln(Q^2)$ but the corresponding one in [26] $\sim 1/Q^2$.

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

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020020022

1. A.M. Cooper-Sarkar, R.C.E. Devenish, and A. De Roeck, Int. J. Mod. Phys. A **13**, 3385 (1998).
2. A.V. Kotikov, Phys. Part. Nucl. **38**, 1 (2007).
3. A.V. Kotikov and G. Parente, Nucl. Phys. B **549**, 242 (1999).
4. A.Y. Illarionov, A.V. Kotikov, and G. Parente Bermudez, Phys. Part. Nucl. **39**, 307 (2008).
5. G. Cvetic, A.Y. Illarionov, B.A. Kniehl, and A.V. Kotikov, Phys. Lett. B **679**, 350 (2009).
6. A.V. Kotikov and B.G. Shaikhatdenov, Phys. Part. Nucl. **44**, 543 (2013).
7. A.V. Kotikov and B.G. Shaikhatdenov, Phys. Atom. Nucl. **78**(4), 525 (2015).
8. A.V. Kotikov and B.G. Shaikhatdenov, Phys. Part. Nucl. **48**(5), 829 (2017).
9. M. Froissart, Phys. Rev. **123**, 1053 (1961).
10. E.L. Berger, M.M. Block, and C.I. Tan, Phys. Rev. Lett. **98**, 242001 (2007).
11. M.M. Block, E.L. Berger, and C.I. Tan, Phys. Rev. Lett. **97**, 252003 (2006).
12. R. Fiore, L.L. Jenkovszky, A.V. Kotikov, F. Paccanoni, A. Papa, and E. Predazzi, Phys. Rev. D **71**, 033002 (2005).
13. R. Fiore, L.L. Jenkovszky, A. Kotikov, F. Paccanoni, A. Papa, and E. Predazzi, Phys. Rev. D **68**, 093010 (2003).
14. R. Fiore, L.L. Jenkovszky, A.V. Kotikov, F. Paccanoni, and A. Papa, Phys. Rev. D **73**, 053012 (2006).
15. A.Y. Illarionov, B.A. Kniehl, and A.V. Kotikov, Phys. Rev. Lett. **106**, 231802 (2011).
16. M.M. Block, L. Durand, and P. Ha, Phys. Rev. D **89**(9), 094027 (2014).
17. A.V. Kotikov, JETP Lett. **59**, 667 (1994).
18. A.V. Kotikov and G. Parente, Phys. Lett. B **379**, 195 (1996).
19. A.V. Kotikov, JETP **80**, 979 (1995).

20. A. V. Kotikov and G. Parente, Mod. Phys. Lett. A **12**, 963 (1997).
21. A. V. Kotikov and G. Parente, JETP **85**, 17 (1997).
22. N. Y. Chernikova and A. V. Kotikov, JETP Lett. **105**, 223 (2017).
23. A. V. Kotikov, Phys. Atom. Nucl. **80**(3), 572 (2017).
24. L. P. Kaptari, A. V. Kotikov, N. Y. Chernikova, and P. Zhang, JETP Lett. **109**(5), 281 (2019).
25. L. P. Kaptari, A. V. Kotikov, N. Y. Chernikova, and P. Zhang, Phys. Rev. D **99**(9), 096019 (2019).
26. E. M. Levin and M. G. Ryskin, Phys. Rept. **189**, 267 (1990).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 61 – 64 © 2020 г. 25 января

Эффект тормозного излучения при резонансном комптоновском рассеянии фотона многоэлектронным атомом

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский[1)], *И. Д. Петров*

Ростовский государственный университет путей сообщения, 344038 Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 8 ноября 2019 г.
После переработки 29 ноября 2019 г.
Принята к публикации 6 декабря 2019 г.

Теоретически предсказана лидирующая роль эффекта тормозного излучения при резонансном комптоновском рассеянии жесткого рентгеновского фотона многоэлектронным атомом. Этот результат может оказаться важным при интерпретации $K\alpha,\beta$-спектров рентгеновской эмиссии звезд, галактик и галактических кластеров.

DOI: 10.31857/S0370274X20020022

1. Введение. Процесс резонансного неупругого (комптоновского) рассеяния фотона многоэлектронным атомом – один из фундаментальных процессов микромира. Его экспериментальному и теоретическому исследованию в области энергий порогов ионизации глубоких оболочек атома посвящено большое количество работ (см., например, [1–4] и ссылки там). В данном Письме мы исследуем дифференциальное сечение процесса в области энергий падающего фотона, намного превышающих энергию порога ионизации глубокой $1s$-оболочки атома ($\hbar\omega \gg I_{1s}$). В качестве объекта исследования взят атом неона (Ne; заряд ядра Z = 10; конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 [^1S_0]$). Выбор обусловлен сферической симметрией основного состояния Ne и его доступностью в газовой фазе [5] для проведения высокоточных экспериментов. Такие исследования необходимы, в частности, для полноты теоретического описания рентгеновского континуума (фона тормозного излучения) в наблюдаемых спектрах эмиссии от горячих астрофизических объектов (см., например, [6]).

2. Теория. Рассмотрим процесс резонансного комптоновского рассеяния фотона электронами атома Ne:

$$\omega + [0] \to Q \to 2p_j \varepsilon p + \omega_C, \tag{1}$$

$$Q: \quad 1sxp, \quad 2p_j x(s,d). \tag{2}$$

В работе [1] представлена формально математически полная теория процесса (1). Однако, насколько нам известно, состояния $np_j x(s,d)$, $n \geq 2$ исследованы лишь как причина возникновения “инфракрасной расходимости” сечений рассеяния при нулевой энергии рассеянного фотона [1, 2]. В данном Письме мы строим теорию дифференциального сечения процесса (1) с учетом состояний $2p_j x(s,d)$ и в области энергий резонансов рентгеновской эмиссии.

В (1) и далее принята атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$), $\omega\,(\omega_C)$ – энергия падающего (рассеянного) фотона, $\omega \geq I_{1s}$, I_{1s} – энергия порога ионизации $1s$-оболочки, $j = 1/2, 3/2$, Q – промежуточные (виртуальные) состояния ионизации атома и заполненные оболочки конфигураций атома не указаны. Физическая интерпретация амплитуды вероятности рассеяния (1) в представлении диаграмм Фейнмана дана на рис. 1. Амплитуды вероятности

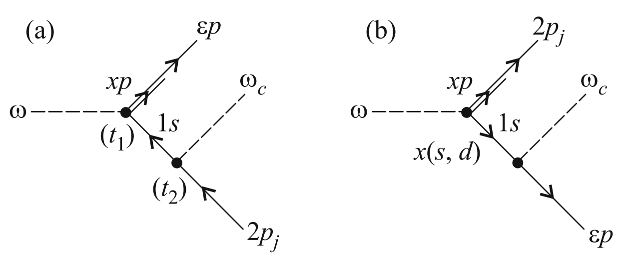

Рис. 1. Амплитуда вероятности процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона многоэлектронным атомом (Ne) в представлении диаграмм Фейнмана: (a) – амплитуда вероятности $K\alpha$-эмиссии; (b) – амплитуда вероятности тормозного излучения. Стрелка вправо – электрон сплошного спектра, стрелка влево – вакансия ($1s, 2p_j, j = 1/2, 3/2$). Двойная линия – состояние получено в хартри-фоковском поле $1s$-вакансии. Черный кружок – вершина взаимодействия по оператору радиационного перехода. $\omega\,(\omega_C)$ – падающий (рассеянный) фотон, $\omega \geq I_{1s}$. Направление времени – слева направо ($t_1 < t_2$)

[1)]e-mail: amnrnd@mail.ru

рассеяния нерезонансного типа в данном Письме не учитывались. Причина этому в следующем. Максимальная величина сечения по оператору контактного (квадратичного по электромагнитному полю) взаимодействия на три порядка меньше величины сечения рассеяния по каналам (1). Игнорирование такого сечения приводит к изотропии процесса (1) по углу рассеянного фотона. Однако заметим следующее. При расчете амплитуды вероятности тормозного излучения (рис. 1b) в разложении волновой функции xd-электрона сплошного спектра по парциальным волнам мы оставили лишь вклад углового момента $l = 0$: $|x\rangle \approx j_0(r\sqrt{2x})$, j_0 – сферическая функция Бесселя. Следует ожидать, что учет слагаемых с $l \geq 2$ приведет к угловой анизотропии рассеянного фотона. Такой учет является предметом будущих исследований. Амплитуды вероятности рассеяния, нарушающие принцип причинности на виртуальном уровне, не учтены в силу принятого нами приближения Тамма–Данкова [7, 8]. В этом приближении в нашем случае учитываются лишь диаграммы Фейнмана с числом фотонов, электронов и вакансий в рассечениях, не превышающим фиксированного значения $N = 2$ (рис. 1). Вклад состояний $1s \to np$ и $2p_j \to m(s,d)$ возбуждения ($n, m \geq 3$) в энергетических масштабах эмиссионных структур на рис. 2, 3 сосредоточен в узкой допороговой области рассеяния (например, $I_{1s} - I_{1snp} \leq 6$ эВ, I_{1snp} – энергия $1s \to np$ фотовозбуждения) и в данном Письме не учитывался. Тогда методами алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов [9], теории неприводимых тензорных операторов [10] и теории неортогональных орбиталей [11] во втором (по α-постоянной тонкой структуры) порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений, в приближении нулевой ширины распада $2p_j$-вакансии ($\Gamma_{2p_j} \to 0$) и дипольном приближении для оператора радиационного перехода для дифференциального сечения процесса (1) получаем:

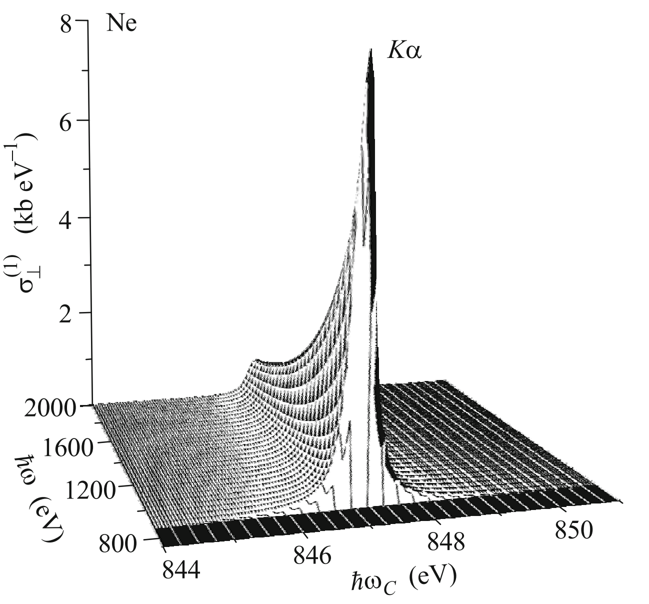

Рис. 2. Дифференциальное сечение процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne в области $\hbar\omega \in (I_{1s}; 2)$ кэВ с учетом парциальных амплитуд вероятности рассеяния на рис. 1a, b и их интерференции. $I_{1s} = 870.210$ эВ, $\Gamma_{1s} = 0.271$ эВ, $\delta_{\text{SO}} = 0.124$ эВ

$$\frac{d\sigma_\perp}{d\omega_C} \equiv \sigma_\perp^{(1)} = \frac{4}{9}\pi r_0^2 \frac{\omega_C}{\omega} \sum_j \eta_j M_j, \qquad (3)$$

$$M_j = \frac{\alpha_j\left(\frac{4}{3}\alpha_j + \gamma_{1s} A_j \Delta_j\right)}{[(\omega_C - \omega_j)^2 + \gamma_{1s}^2]} + B_j \Delta_j^2, \qquad (4)$$

$$\alpha_j = 0.82\langle 1s_0|r|2p_+\rangle\langle 1s_0|r| \in_j p\rangle \times$$
$$\times\, \omega_j(\varepsilon_j + I_{1s}), \qquad (5)$$

$$A_j = 3.90 s_j + 1.91 d_j, \qquad (6)$$

$$B_j = 2.96 s_j^2 + 2.25 s_j d_j + 1.29 d_j^2, \qquad (7)$$

$$\Delta_j = \varepsilon_j \left(\frac{\omega}{\omega_C} - 1\right). \qquad (8)$$

В (3)–(8) определено: символ “$\perp$” соответствует выбору схемы предполагаемого эксперимента – векторы поляризации (линейно поляризованных) падающего и рассеянного фотонов перпендикулярны плоскости рассеяния, проходящей через волновые векторы этих фотонов, r_0 – классический радиус электрона, $\eta_j = 2$ ($j = 3/2$), 1 ($j = 1/2$), $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$, Γ_{1s} – естественная (полная) ширина распада $1s$-вакансии, энергии резонансов эмиссии $\omega_j = I_{1s} - I_{2p_j}$, I_{2p_j} – энергия порога ионизации $2p_j$-оболочки, $s_j = \langle p_0|r|\varepsilon_j s\rangle$, $d_j = \langle 2p_0|r|\varepsilon_j d\rangle$ и $\varepsilon_j = \omega - \omega_C - I_{2p_j}$. В одноэлектронной амплитуде вероятности рождения $1s$-вакансии из (5) структура корреляционной функции

$$| \in_j\; p\rangle = N_{1s}\left(|\varepsilon_j p_+\rangle - |2p_+\rangle \frac{\langle 2p_0|\varepsilon_j p_+\rangle}{\langle 2p_0|2p_+\rangle}\right), \qquad (9)$$

$$N_{1s} = \langle 1s_0|1s_+\rangle\langle 2s_0|2s_+\rangle^2\langle 2p_0|2p_+\rangle^6, \qquad (10)$$

учитывает эффект радиальной релаксации состояний рассеяния в поле $1s$-вакансии. Индексы “0” и “+” определены для радиальных частей волновых функций электронов, полученных решением уравнений Хартри–Фока для конфигураций начального состояния атома ([0]) и однократного иона ($1s_+$), соответственно. Радиальные части волновых функций электронов сплошного спектра в матричных элементах s_j и d_j получены в хартри-фоковском поле $2p$-вакансии.

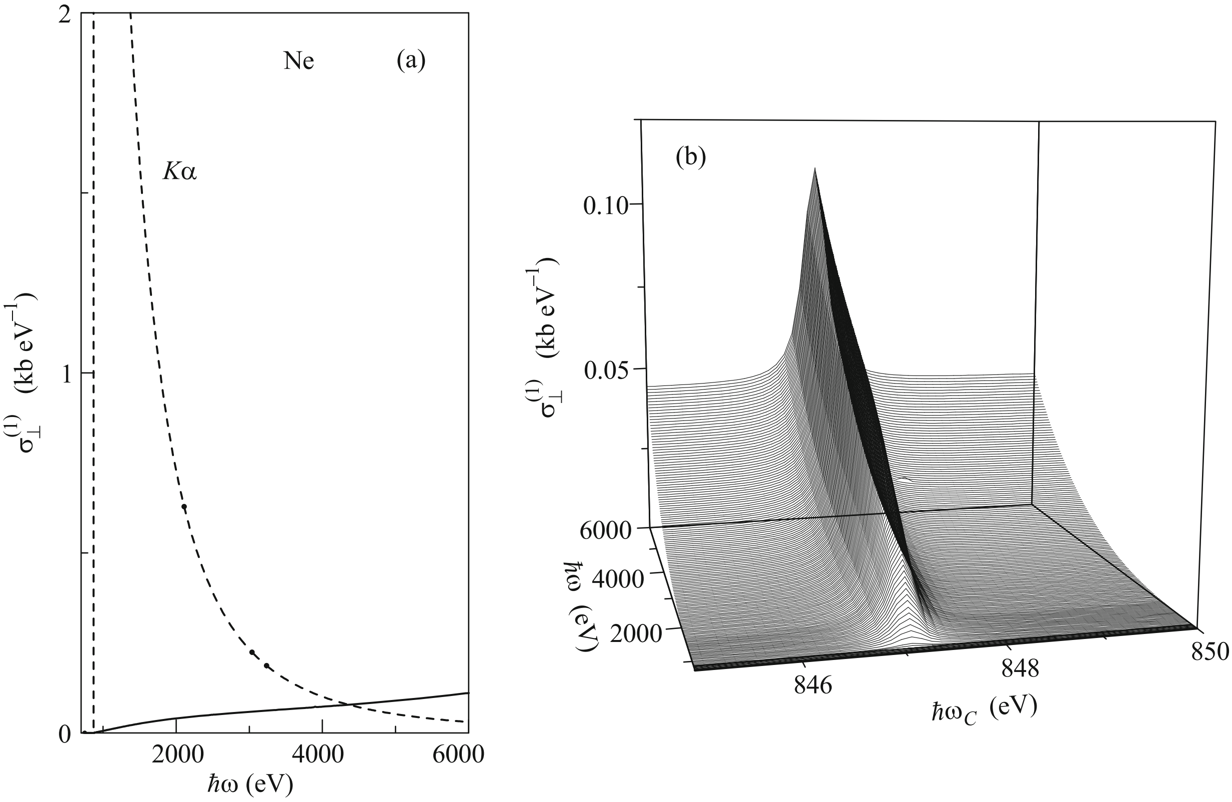

Рис. 3. Дифференциальное сечение процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne в области $\hbar\omega \in (I_{1s};\, 6)$ кэВ: (a) – $\hbar\omega_C = 847.1$ эВ (резонанс $K\alpha$-эмиссии), штриховая кривая – учтена лишь диаграмма рис. 1a, сплошная кривая – учтена лишь диаграмма рис. 1b и ее интерференция с диаграммой рис. 1a; (b) – эволюция сплошной кривой на рис. 3a для $\hbar\omega_C \in (845;\, 850)$ эВ. I_{1s}, Γ_{1s}, $\delta_{\rm SO}$ – см. рис. 2

Одноэлектронная амплитуда вероятности тормозного излучения (рис. 1b) получена в форме скорости в приближении плоских волн для волновых функций $x(s,d)$- и εp-электронов сплошного спектра [12]:

$$(s-\varepsilon)\langle xl|r|\varepsilon p\rangle \cong 2ix \cdot \delta(x-\varepsilon), \quad l = s, d, \qquad (11)$$

где δ – дельта-функция Дирака. Для интеграла перекрывания двух сплошных спектров на рис. 1a принято приближение $\langle xp_+|\varepsilon p\rangle \cong \delta(x-\varepsilon)$. Как и следовало ожидать, факт возникновения множителя Δ_j из (8) в многоэлектронной амплитуде вероятности тормозного излучения воспроизводит упомянутую выше "инфракрасную расходимость" [1, 2, 9]:

$$\lim_{\omega_C \to 0} \sigma_\perp^{(1)} = \infty. \qquad (12)$$

3. Результаты и обсуждение. Результаты расчета представлены на рис. 2, 3. Для параметров сечения рассеяния (3) приняты значения (в эВ) $I_{1s} = 870.210$ [13], $\Gamma_{1s} = 0.271$ [14] и $I_{2p_j} = 23.207$ ($j = 1/2$), 23.083 ($j = 3/2$) [15]. В силу малости константы спин-орбитального расщепления $2p_j$-оболочки ($\delta_{SO} = \omega_{3/2} - \omega_{1/2} < \Gamma_{1s}$) резонансные $K\alpha_1$- и $K\alpha_2$-структуры спектра эмиссии практически не "разрешены".

Результаты на рис. 2, 3 показывают следующее. При увеличении энергии падающего фотона от $\omega \geq I_{1s}$ (рис. 2) до $\omega \gg I_{1s}$ (рис. 3) основной вклад в сечение рассеяния (3) дает амплитуда вероятности тормозного излучения ($\sim \sqrt{B_j \Delta_j^2}$, континуум на рис. 3b). "Ребристая" структура на фоне континуума при $\omega_C \cong 847.1$ эВ обусловлена резонансной интерференцией амплитуд вероятности тормозного излучения ($\sim A_j \Delta_j$) и эмиссии ($\sim \alpha_j$, штриховая кривая на рис. 3a). При этом практическое исчезновение вклада амплитуды вероятности эмиссии обусловлено сильным подавлением амплитуды вероятности рождения глубокой $1s$-вакансии в α_j из (5).

4. Заключение. Теоретически исследовано дифференциальное сечение резонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона многоэлектронным атомом. Установлена лидирующая роль эффекта тормозного излучения в формировании не только области "инфракрасной расходимости" (12), но и структуры $K\alpha$-спектра эмиссии в жестком ($\omega \gg I_{1s}$)

диапазоне энергий падающего на атом фотона. Этот результат носит предсказательный характер и, возможно (предмет будущих исследований), допускает обобщение, в частности, на неоноподобные атомные ионы, играющие важную роль в современной астрофизике (см., например, [16, 17]). Наконец, отметим следующее. Уже для $\omega \cong 6$ кэВ (рис. 3) дипольное приближение при расчете амплитуды вероятности $2p \to x(s,d)$ фотоионизации атома Ne становится некорректным: величина параметра $\zeta = \lambda/r_{2p} = 4$ (λ – длина волны падающего фотона, r_{2p} – средний радиус $2p$-оболочки) нарушает критерий применимости дипольного приближения $\zeta \gg 1$. Однако при $\omega \gg \omega_C \cong \omega_j$ сечение рассеяния определяется практически лишь вероятностью тормозного излучения: $\sigma_{\perp}^{(1)} \sim \omega^3 \cdot B_j$. Как результат, модификация B_j-функции при учете недипольных и многочастичных эффектов [18–20] не изменит утверждения о лидирующей роли эффекта тормозного излучения при $\omega \gg I_{1s}$.

1. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum, N.Y. (1985), ch. 10, p. 419.
2. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).
3. M. A. MacDonald, S. H. Southworth, J. C. Levin, A. Henins, R. D. Deslattes, T. Lebrun, Y. Azuma, P. L. Cowan, and B. A. Karlin, Phys. Rev. A **51**, 3598 (1995).
4. M. Žitnik, M. Kavčič, K. Bučar, A. Mihelič, M. Štuhec, and J. Kokalj, Phys. Rev. A **76**, 032506 (2007).
5. R. Obaid, Ch. Buth, G. L. Dacovski, R. Beerwerth, M. Holmes, J. Aldrich, M.-F. Lin, M. Minitti, T. Osipov, W. Schlotter, L. S. Cederbaum, S. Fritzsche, and N. Berrah, J. Phys. B **51**, 034003 (2018).
6. A. C. Brinkman, E. Behar, M. Gudel et al. (Collaboration), Astron. Astrophys. **365**, L324 (2001).
7. Ig. Tamm, J. Phys. (USSR) **9**, 449 (1945).
8. S. M. Dancoff, Phys. Rev. **78**, 382 (1950).
9. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1969).
10. А. П. Юцис, А. Ю. Савукинас, *Математические основы теории атома*, Минтис, Вильнюс (1973).
11. A. P. Jucys, E. P. Našlěnas, and P. S. Žvirblis, Int. J. Quant. Chem. **6**, 465 (1972).
12. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, Phys. Rev. A **98**, 063424 (2018).
13. L. Pettersson, J. Nordgren, L. Selander, C. Nordling, and K. Siegban, J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. **27**, 29 (1982).
14. M. Coreno, L. Avaldi, R. Camilloni, K. C. Prince, M. de Simone, J. Karvonen, R. Colle, and S. Simonucci, Phys. Rev. A **59**, 2494 (1999).
15. N. Nrisimhamurty, G. Aravind, P. C. Deshmukh, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **91**, 013404 (2015).
16. E. Träbert, P. Beiersdorfer, J. K. Lepson, M. L. Reinke, and J. E. Rice, Astrophys. J. **865**, 148 (2018).
17. J. Deprince, M. A. Bautista, S. Fritzsche, A. J. Garcia, T. Kallman, C. Mendoza, P. Palmeri, and P. Quinet, Astron. Astrophys. **626**, A83 (2019).
18. M. Ya. Amusia and N. A. Cherepkov, Case Stud. Atom. Phys. **5**, 47 (1975).
19. J. W. Cooper, Phys. Rev. A **47**, 1841 (1993).
20. W. R. Johnson, A. Derevianko, K. T. Cheng, V. K. Dolmatov, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **59**, 3609 (1999).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 65 – 74

Спектры двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости

Т. А. Зиняков[+1)], *А. С. Петросян*[+*]

[+]*Институт космических исследований РАН, 117997 Москва, Россия*

[*]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия*

Поступила в редакцию 25 октября 2019 г.
После переработки 9 декабря 2019 г.
Принята к публикации 9 декабря 2019 г.

Для двумерной однородной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости показано формирование спектра Ирошникова–Крейчнана в инерционном интервале. Получено выражение для волнового числа, характеризующего границу между инерционным интервалом спектра Ирошникова–Крейчнана и областью существования волн Россби. Исследовано самоподобное затухание спектра Ирошникова–Крейчнана во времени. На больших интервалах времени обнаружено нарушение самоподобного затухания спектра полной энергии и формирование Колмогоровского спектра в инерционном интервале кинетической энергии. Обратный каскад кинетической энергии, характерный для обнаруженного спектра Колмогорова, обеспечивает зарождение зональных течений.

DOI: 10.31857/S0370274X20020034

1. Введение. Исследование магнитогидродинамической турбулентности во вращающейся плазме является фундаментальным для понимания течений в плазменной астрофизике [1, 2] и в тороидальной плазме [3–5]. Динамика таких течений существенно отличается от динамики турбулентности во вращающейся нейтральной жидкости вследствие присутствия магнитных полей. В настоящей работе исследуются спектры двумерной однородной затухающей магнитогидродинамической турбулентности в плазме при наличии вращения. Модель двумерной магнитогидродинамической турбулентности при наличии силы Кориолиса является ключевой в исследованиях астрофизической плазмы, поскольку астрофизические течения становятся плоскими благодаря быстрому вращению или действию внешнего вертикального магнитного поля [6]. Отметим также, что при наличии сильной стратификации в турбулентности формируется множество плоских структур в виде двумерных невзаимодействующих слоев. Большинство (не все) течения в плазменной астрофизике имеют сферическую геометрию, поэтому проекция угловой скорости вращения на местную вертикаль меняется с широтой. Мы используем приближение β-плоскости для линейной аппроксимации зависимости параметра Кориолиса f от координаты в направлении юг-север.

В работах [7–9] исследуются зональные течения в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости. Отметим, что зональные течения также играют определяющую роль в термоядерной плазме [10–12]. Как известно, зональные течения в нейтральной жидкости характеризуются масштабом Райнса, описывающем границу между волновой и турбулентной динамикой [13, 14]. В нашей работе [8] показано образование зональных течений в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости и предложена оценка границы между волнами Россби и магнитогидродинамической турбулентностью, а именно, масштаб, характеризующий зональные течения. Однако в работах [7, 8] не затрагивался вопрос о спектрах двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости, поскольку для анализа спектров турбулентного течения требуется моделирование с разрешением, значительно превышающим разрешение численных экспериментов в работах [7, 8]. Изучению динамики спектров двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости посвящена наша работа. Помимо самостоятельного фундаментального интереса, решение сформулированной задачи является определяющим для понимания процессов зарождения зональных течений.

Ответ на вопрос о спектрах двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости не является тривиальным, поскольку уравнения дву-

[1)]e-mail: zinyakov@iki.rssi.ru

мерной магнитной гидродинамики на β-плоскости включают моды волн Россби и магнитогидродинамическую турбулентность. В магнитогидродинамической турбулентности спектральный перенос полной энергии определяется альвеновскими волнами. Для двумерной магнитогидродинамической турбулентности без вращения, в отличие от двумерной турбулентности нейтральной жидкости [15, 16], характерен прямой каскад энергии [17]. Поток полной энергии по спектру зависит от волнового числа, спектральной плотности полной энергии E_k и скорости альвеновских волн. Перенос энергии вдоль инерционного интервала происходит из-за взаимодействия альвеновских волн, вследствие чего реализуется спектр Ирошникова–Крейчнана [18, 19]:

$$E_k = E_k^V + E_k^M = C'(\epsilon v_A)^{1/2} k^{-3/2}, \tag{1}$$

где C' – константа, $\epsilon = -\partial E/\partial t$ – скорость диссипации энергии, v_A – среднеквадратичная альвеновская скорость. В работе [20] показано, что в двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности наблюдается самоподобное затухание спектра (1).

Так как эффекты вращения в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости оказывают существенное влияние на динамику только в крупных масштабах, естественно было бы предположить, что спектры полной энергии такой турбулентности согласуются со спектром Ирошникова–Крейчнана (1) в инерционном интервале волновых векторов, лежащем справа от области доминирования волн Россби. Однако такое предположение противоречит процессу возникновения зональных течений [8, 14], поскольку для реализации зональных течений требуется обратный каскад кинетической энергии к малым волновым числам, характерный для двумерной турбулентности нейтральной жидкости. Именно разрешению этого парадокса посвящена наша работа. Отметим далее свойства двумерной турбулентности нейтральной жидкости, важные для понимания полученных в работе результатов.

Динамика двумерной турбулентности нейтральной жидкости характеризуется обратным каскадом энергии и прямым каскадом энстрофии [15, 16, 21, 22]. Простые соображения теории размерности [23] дают следующее выражение для изотропного спектра энергии E_k по модулю волнового числа k в двумерной турбулентности [24] для инерционного интервала обратного каскада энергии

$$E_k = C_1 \epsilon^{2/3} k^{-5/3} \tag{2}$$

и для инерционного интервала прямого каскада энстрофии

$$E_k = C_2 \varepsilon^{2/3} k^{-3}, \tag{3}$$

где C_1, C_2 – константы, ε – скорость диссипации энстрофии. Изотропный спектр (2) известен как спектр Колмогорова. В двумерной турбулентности на β-плоскости обратный каскад энергии останавливается на масштабах Райнса и образуются зональные течения [13–15].

В следующем разделе приводятся исходные уравнения; описывается численный алгоритм решения задачи и используемые начальные условия. В третьем разделе обсуждаются результаты численного моделирования пространственно-временной динамики двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости. В заключении приведены основные результаты работы.

2. Исходные уравнения. Для описания вращающегося двумерного течения квазинейтральной плазмы используем уравнения двумерной магнитной гидродинамики с учетом силы Кориолиса, пренебрегая эффектами сжимаемости ($\rho_0 = \mathrm{const}$) и теплопроводности,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \tau} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\,\mathbf{u} + 2\mathbf{\Omega}\times\mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{(\nabla\times\mathbf{B})\times\mathbf{B}}{4\pi\rho} + \nu\Delta\mathbf{u}, \tag{4a}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \tau} = \nabla\times(\mathbf{u}\times\mathbf{B}) + \eta\Delta\mathbf{B}, \tag{4b}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0, \tag{4c}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B} = 0, \tag{4d}$$

где $\mathbf{u}$ – вектор скорости, $\mathbf{\Omega}$ – угловая скорость вращения, $\mathbf{B}$ – магнитное поле и ν – кинематическая вязкость. Коэффициент магнитной диффузии определяется как

$$\eta = \frac{c^2}{4\pi\sigma},$$

где c – скорость света, σ – электрическая проводимость среды. При достаточно большой электрической проводимости среды σ, уравнение (4b) описывает вмороженность магнитного поля в плазму.

Далее используем уравнения (4), записанные в безразмерном виде, для получения уравнений эволюции завихренности и потенциала магнитного поля. Пространственные переменные обезразмерены на величину $L_0 = l_0/2\pi$, где l_0 – характерный масштаб самого крупного вихря. Вектор скорости $\mathbf{u}$ обезразмерен на величину

$$U_0 = \sqrt{\frac{E_0^V}{\rho_0 L_0^2}},$$

где E_0^V – начальная кинетическая энергия системы. Время обезразмерено на величину $T_0 = L_0/U_0$. Магнитное поле $\mathbf{B}$ обезразмерено на величину

$$B_0 = \sqrt{\frac{4\pi E_0^M}{L_0^2}},$$

где E_0^M – начальная магнитная энергия системы ($E_0^V = E_0^M$). Остальные безразмерные величины задаются следующим образом:

$$\hat{\mathbf{\Omega}} = \frac{2L_0}{U_0}\mathbf{\Omega} \text{ – безразмерная угловая скорость,}$$

$$\hat{p} = \frac{p}{U_0^2\rho_0} \text{ – безразмерное давление,}$$

$$\hat{\nu} = \frac{\nu}{U_0 L_0} \text{ – безразмерная вязкость,}$$

$$\hat{\eta} = \frac{\eta}{U_0 L_0} \text{ – безразмерная диффузия.}$$

При переходе от обезразмеренного уравнения (4a) к уравнению эволюции завихренности и потенциала магнитного поля используется приближение β-плоскости, в котором проекция угловой скорости на нормаль к поверхности сферы ($\Omega^z = f$) аппроксимируется по широте следующим образом:

$$f = f_0 + \beta y,$$

где β – параметр Россби. В данном случае изучается двумерная область на поверхности сферы. Ось x имеет направление вдоль азимута, а ось y – противоположна широте.

После замены переменных в (4) и при сохранении за обезразмереными переменными старых обозначений, уравнения эволюции завихренности ω и потенциала магнитного поля A двумерного магнитогидродинамического течения несжимаемой вязкой жидкости (плазмы) в приближении β-плоскости записываются в виде:

$$\partial_t \omega = J(\psi, \omega) + \beta \partial_x \psi + J(A, \Delta A) + \nu \Delta \omega \qquad (5a)$$

$$\partial_t A = J(\psi, A) + \eta \Delta A, \qquad (5b)$$

где ψ – функция тока ($\omega = -\nabla^2 \psi$), β – параметр Россби. Функция $J(a, b) = \partial_x a \cdot \partial_y b - \partial_y a \cdot \partial_x b$ – якобиан функций $a(x, y)$ и $b(x, y)$.

Завихренность и функция тока связаны с двумерным полем скорости (u^x, u^y) следующими соотношениями:

$$\omega = \partial_x u^y - \partial_y u^x; \quad u^x = \partial_y \psi; \quad u^y = -\partial_x \psi.$$

Потенциал магнитного поля связан с двумерным магнитным полем (B^x, B^y) следующими соотношениями:

$$B^x = \partial_y A; \quad B^y = -\partial_x A.$$

В работе изучается локальная двумерная область ($2\pi \times 2\pi$) на сфере с периодичными граничными условиями. В качестве начальных условий в уравнении (5) используется набор Фурье-гармоник:

$$\psi_k^0 = a k^{1/2} e^{-k^2/2k_0^2 + i\alpha_k},$$

$$A_k^0 = b k^{1/2} e^{-k^2/2k_0^2 + i\beta_k},$$

где α_k, β_k – случайные фазы, а коэффициенты a, b выбраны так, что суммарная энергия системы $E = E^V + E^M = 2$. Параметр k_0 задает значение волнового числа, при котором спектр энергии системы в начальном состоянии максимальный.

Для численного решения системы (5) используется псевдоспектральный метод, основанный на быстром преобразовании Фурье [25]. В таком методе при использовании преобразования Фурье возникают ошибки дискретизации (алиасинг), связанные с нелинейными членами в уравнениях (5). Для исключения фиктивных решений ошибки фильтруются по правилу 2/3 [26]. При использовании пространственной сетки ($N \times N$) сетка в Фурье-пространстве (набор Фурье-гармоник) ограничивается квадратной областью $-N/3 \leqslant k_x, k_y \leqslant N/3$. Для интегрирования по времени системы уравнений (5) используется схема Рунге–Кутта третьего порядка (трехшаговая схема с весами). Интегрирование по времени происходит с переменным временным шагом таким образом, чтобы шаг по времени всегда удовлетворял критерию Куранта–Фридрихса–Леви. Численное моделирование производилось на графических процессорах Nvidia с использованием параллельных вычислений программно-аппаратной архитектуры CUDA.

3. Результаты. Мы обсуждаем результаты численного моделирования системы уравнений (5) с пространственным разрешением 4096×4096 при различных параметрах Россби β. Численные эксперименты осуществлялись для течений с равными исходным гидродинамическим числом Рейнольдса и исходным магнитным числом Рейнольдса. Поясним кратко, как оцениваются соответствующие числа Рейнольдса в наших начальных условиях для обезразмеренной системы уравнений 5. Гидродинамическое число Рейнольдса через размерные величины задается как $Re = l_0 V_0/\nu$, где V_0 – начальная среднеквадратичная скорость системы, l_0 – характерный масштаб самого крупного вихря. Используя обезразмеривание, описанное в предыдущем разделе, мы получаем

$$Re = \frac{l_0 V_0}{\nu} = \frac{2\pi L_0 u_0 U_0}{\hat{\nu} U_0 L_0} = \frac{2\pi u_0}{\hat{\nu}} \simeq 10^6,$$

где u_0 – безразмерная начальная среднеквадратичная скорость, $\hat{\nu}$ – безразмерная вязкость, обозначенная в (5a) как ν. Аналогичным образом задается магнитное число Рейнольдса

$$Rm = \frac{2\pi u_0}{\hat{\eta}} \simeq 10^6,$$

где $\hat{\eta}$ – безразмерная магнитная диффузия, обозначенная в (5b) как η. Соответственно, магнитное число Прандтля исследуемых течений $Pr_m = \nu/\eta = 1$. При таком выборе числа Прандтля обеспечивается оптимальный выбор шага по времени используемого численного алгоритма. Все численные эксперименты осуществлялись до времени $T = 15 \cdot t_0$, где $t_0 = l_0/U_0$ – время оборота вихря в турбулентном течении в начальный момент времени. Основные параметры и результаты численных экспериментов приведены в табл. 1: где C' – константа в спектре Ирошникова–Крейчнана (1) и k_β^M – характерное волновое число правой границы области доминирования волн Россби при наличии магнитного поля (9), приведенное в момент времени $t = 3$, когда происходит процесс адаптации системы к начальным условиям. В процессе адаптации системы к начальным условиям происходит переход от кинетической энергии к магнитной ($E^M/E^V \approx 2$ для $t = 3$ при параметрах Россби $\beta = 10; 25; 50$) и формируется поток энергии вдоль инерционного интервала.

Таблица 1. Начальные данные и результаты численных экспериментов

#	E_V^0	E_M^0	β	ν	η	C'	k_β^M
1	1	1	10	10^{-5}	10^{-5}	1.42	5.5
2	1	1	25	10^{-5}	10^{-5}	1.36	8.4
3	1	1	50	10^{-5}	10^{-5}	1.31	12.3

Сравним спектры полной энергии для случая двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности при параметре Россби $\beta = 10$ для трех моментов времени $t = 3; 6; 9$, после адаптации системы к начальным условиям. На рисунке 1a приведены спектры полной энергии для моментов времени следующих после адаптации системы к начальным условиям ($t = 3$). Спектры полной энергии исследуются в диапазоне волновых векторов $k = 1 - 300$, который содержит область крупных масштабов, инерционный интервал и начало диссипативного интервала.

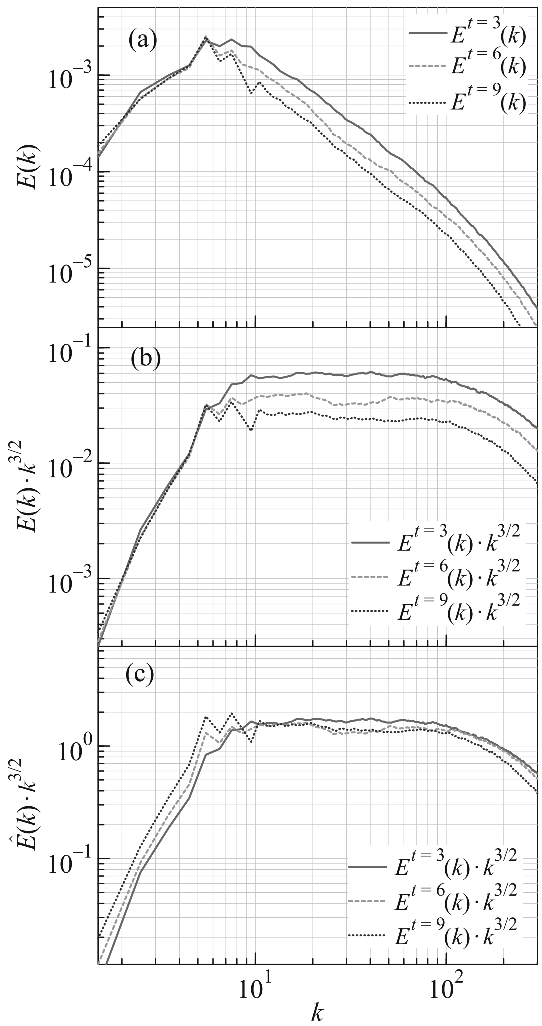

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Спектры полной энергии затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости ($\beta = 10$). (b) – Спектры полной энергии, нормированные на $k^{3/2}$. (c) – Спектры полной энергии, нормированные на $k^{3/2}$ и скомпенсированные на временную зависимость $\sqrt{\epsilon v_A}$. Сплошными линиями показаны зависимости спектров от волнового числа k для момента времени $t = 3$, штрихпунктирными линиями – для момента времени $t = 6$, точечными пунктирами – для момента времени $t = 9$

Из рисунка 1a видно, что область всех волновых векторов разделяется на область крупных масштабов ($k < 6$), в которой спектр энергии растет с ростом волнового числа k и область средних и мелких масштабов ($k > 6$), в которой спектр энергии падает с ростом волнового числа k. Спектры полной энергии в области крупных масштабов ($k = 1 - 6$) не изменяются на временном промежутке $t = 3 - 9$. Максимум спектра полной энергии во всех трех моментах времени $t = 3; 6; 9$ наблюдается на волновом числе $k = 5.5$. На рисунке 1a в диапазоне волновых чисел $10 < k < 300$ спектры полной энергии для трех моментов времени $t = 3; 6; 9$ имеют схожую зависимость от волнового числа k, но каждый последующий спектр лежит ниже предыдущего. Затухание спектра энергии в области средних и мелких масштабов ($k > 6$) происходит равномерно (спектр полной энергии самоподобно затухает в данной области). В диапазоне волновых чисел $10 < k < 100$ зависимости спектров полной энергии от волнового числа k, которые построены в логарифмических координатах на рисунке 1a, имеют схожий наклон на всех трех моментах времени $t = 3; 6; 9$. Данный диапазон является инерционным интервалом, в котором происходит перенос энергии из крупных масштабов в мелкие. Инерционный интервал распространяется в крупные масштабы с течением времени до волнового числа, соответствующего максимуму спектра энергии $k = 5.5$ в момент времени $t = 9$. Такая динамика связана с затуханием энергии в промежуточной области ($k = 6 - 10$) между крупными масштабами и начальным инерционным интервалом. В диапазоне волновых чисел $k > 100$ спектры полной энергии на рисунке 1a с ростом k затухают быстрее, чем в инерционном интервале, поскольку в диссипативном интервале преобладают эффекты вязкости и магнитной диффузии.

Исходя из полученного утверждения, что спектры полной энергии двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости имеют одинаковую зависимость от волнового числа k, мы переходим к исследованию спектров, нормированных на $k^{3/2}$. На рисунке 1b показаны нормированные спектры полной энергии $E(k)\cdot k^{3/2}$ двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости при параметре Россби $\beta = 10$.

На рисунке 1b нормализованный спектр, соответствующий моменту времени $t = 3$, масштабноинвариантен на диапазоне волновых векторов $10 < k < 100$. Таким образом, в двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости после адаптации системы к начальным условиям устанавливается спектр со степенной зависимостью $E_k \sim k^{-3/2}$. Нормализованные компенсированные спектры, соответствующие моментам времени $t = 6; 9$, являются масштабно-инвариантными на большем диапазоне волновых векторов ($k \simeq 8 - 100$ и $k \simeq 6 - 100$, соответственно). Таким образом инерционный интервал расширяется в область крупных масштабов.

На рисунке 1b в области волновых $k \gtrsim 100$ нормированные спектры не являются масштабноинвариантными. Значения нормализованного спектра $E \cdot k^{3/2}$ в данном диапазоне лежат ниже, чем в инерционном интервале. На этом интервале, который является переходной областью между инерционным и диссипативным интервалами, эффекты диссипации играют существенную роль, спектры полной энергии не согласуются со спектром $E_k \sim k^{-3/2}$.

Так как нормированные спектры на рис. 1b затухают самоподобно в инерционном интервале, мы предполагаем, что самоподобное затухание проходит по закону $\sqrt{\epsilon v_A}$ (временная зависимость спектра Ирошникова–Крейчнана (1)) и переходим к исследованию нормированных спектров, скомпенсированных на эту зависимость. На рисунке 1c показаны нормированные компенсированные спектры полной энергии $E(k)\cdot(\epsilon v_A)^{-1/2}\cdot k^{3/2} = \hat{E}\cdot k^{3/2}$ двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости при параметре Россби $\beta = 10$.

На рисунке 1c нормированные компенсированные спектры полной энергии для моментов времени $t = 3; 6; 9$ практически совпадают на инерционном интервале $k = 10 - 100$, что говорит о наличии самоподобного затухания спектров полной энергии с временным законом $\sqrt{\epsilon v_A}$. В диссипативном интервале $k > 100$ угол наклона нормированного компенсированного спектра для момента времени $t = 9$ меньше, чем для спектров на предыдущих моментах времени. Это связанно с увеличением масштаба Колмогорова $l_K = (\eta^2 v_A/\epsilon)^{1/3}$ и распространением диссипации в более крупные масштабы.

Таким образом, после адаптации системы к начальным условиям, в двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости образуются спектры Ирошникова–Крейчнана (1). Тщательное изучение всех полученных спектров на временном промежутке $t = 3 - 9$ показало, что полученый спектр самоподобно затухает, согласуясь с временной зависимостью в спектре Ирошникова–Крейчнана $\sqrt{\epsilon v_A}$, как и спектры двумерной затухающей МГД турбулентности при отсутствии вращения [20]. Аналогичные спектры Ирошникова–Крейчнана и эффекты самоподобного затухания наблюдаются в двумерной затухающей МГД турбулентности с параметрами Россби $\beta = 25; 50$.

Так как нормализованные компенсированные спектры двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости масштабно-инвариантны и практически совпадают на инерционном интервале $k \simeq 10 - 100$, мы переходим к исследованию нормализованных компенсированных спектров полной энергии, усредненных на статистически стационарном временном промежутке $t = 3 - 6$, двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости для различных параметров Россби $\beta = 10; 25; 50$. Сравнивая полученные спектры, оценим влияние вращения на динамику крупномасштабных взаимодействий и эффекты переноса. На рисунке 2 показаны скомпенсированные нормированные спектры полной энергии $\bar{E}(k) \cdot k^{3/2}$, усредненные на временном промежутке $t = 3 - 6$.

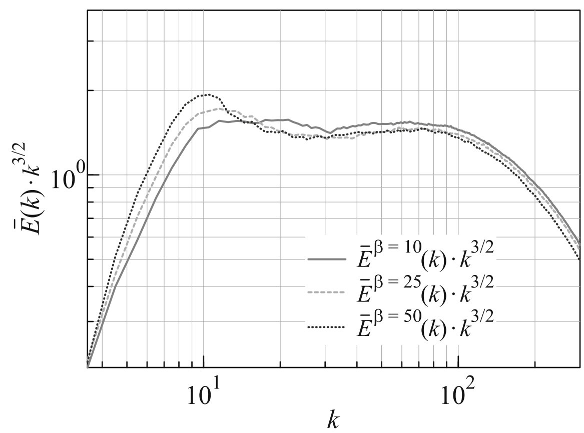

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры полной энергии, нормированные на $k^{3/2}$, скомпенсированные на временную зависимость $\sqrt{\epsilon v_A}$ и усредненные на временном промежутке $t = 3 - 6$ для различных параметров Россби. Сплошной линией показана зависимость модифицированного спектра для параметра Россби $\beta = 10$ от волнового числа k, штрихпунктирной линией – для параметра Россби $\beta = 25$, точечным пунктиром – для параметра Россби $\beta = 50$

Нормализованные компенсированные усредненные (модифицированные) спектры полной энергии двумерной вырождающейся магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости для параметров Россби $\beta = 10$, $\beta = 25$ и $\beta = 50$ (изображенные на рис. 2) масштабно-инварианты в волновых диапазонах $k \simeq 10 - 100$, $k \simeq 18 - 100$ и $k \simeq 26 - 100$ соответственно. Спектр полной энергии для данных случаев согласуется с спектральным законом Ирошникова- Крейчнана, но на разных инерционных интервалах. В крупных масштабах на волновых числах $k < 20$ модифицированные спектры для случаев $\beta = 10; 25; 50$ имеют различия, так как на данных масштабах эффекты вращения играют существенную роль. При наличии вращения в двумерной магнитогидродинамической турбулентности существуют решения в виде крупномасштабных волн Россби. Найдем волновое число, соответствующее границе между инерционным интервалом спектра Ирошникова–Крейчнана и областью доминирования волн Россби.

Используя выражение для спектра Ирошникова-Крейчнана (1), оценим характерное временя оборота вихря в магнитогидродинамическом течении в инерционном интервале как

$$\tau_k^{IK} = \frac{l_k}{v_l} = \frac{1/k}{\sqrt{E_k k}} = (v_A \epsilon)^{-1/4} k^{-3/4}. \quad (7)$$

Приравнивая выражения для $(1/\tau_k^{IK})$ и дисперсионное соотношение для волн Россби

$$\omega = \frac{\beta k_x}{k^2},$$

получим волновое число, характеризующее границу между областью доминирования волн Россби и инерционным интервалом:

$$k_\beta^{IK} = \left(\frac{\beta^4}{v_A \epsilon}\right)^{1/7}. \quad (8)$$

Заметим, что ранее в работе [8] введено характерное волновое число границы между областью доминирования волн Россби и магнитогидродинамической турбулентностью

$$k_\beta^M = \sqrt{\beta v / 2 v_A^2}, \quad (9)$$

где v – среднеквадратичная скорость турбулентного течения. Волновые числа (9) и (8) различаются, так так первое описывает границу между областью доминирования волн Россби и магнитогидродинамической турбулентности, а второе описывает границу между областью, в которой существуют волны Россби, и инерционным интервалом, в котором возникает спектр Ирошникова–Крейчнана. Диапазон волновых векторов $k_\beta^M < k < k_\beta^{IK}$ является переходной областью, где существуют и волны Россби, и магнитогидродинамическая турбулентность (нелинейные альвеновские волны).

На рисунке 2 модифицированные спектры полной энергии двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости для параметров Россби $\beta = 10$ масштабно-инвариантны на диапазоне волновых чисел $k \simeq 11 - 100$. Инерционный интервал волновых чисел лежит правее характерного волнового числа границы области доминирования волн Россби (8), который для данного случая равен $k_\beta^{IK} = 10.1$. На волновых числах $k \gtrsim 100$ происходит диссипативный спад модифицированного спектра полной энергии. Таким образом, в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости в волновом диапазоне $k < k_\beta^{IK}$ образуются волны Россби и изотропные магнитогидродинамические течения. В волновом диапазоне $k_\beta^{IK} < k < 100$ существует прямой каскад энергии и, как следствие, образуется спектр Ирошникова–Крейчнана. Усредняя значения модифицированного спектра в диапазоне волновых чисел $k = 10 - 100$, мы получаем значение $C' = 1.42$ (C' – константа, аналогичная константе Колмогорова, для спектра Ирошникова–Крейчнана (1)).

В случае МГД турбулентности на β-плоскости при параметре Россби $\beta = 25$ волны Россби образуются на волновых числах в диапазоне $k < k_\beta^{IK} = 16.4$, а при параметре Россби $\beta = 50$ в диапазоне $k < k_\beta^{IK} = 25.6$. Значение константы C' также различается для случаев с различными параметрами Россби. В случае МГД турбулентности на β-плоскости при параметре Россби $\beta = 25$ константа $C' = 1.36$, а при параметре Россби $\beta = 50$ константа $C' = 1.31$. Уменьшение константы C' с увеличением параметра Россби β связано с наличием профицита энергии в крупных масштабах для больших параметров Россби и дефицита на средних и мелких масштабах, где наблюдается спектр Ирошникова–Крейчнана.

Таким образом, численное моделирование демонстрирует следующую качественную картину спектров двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости. На рисунке 3 показано схематичное представление спектра полной энергии $E(k)$ двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β- плоскости. На оси волновых чисел k отмечены ключевые масштабы двумерной МГД турбулентности на β-плоскости. Волновое число k_β^M описывает границу между областью доминирования волн Россби и магнитогидродинамической турбулентностью. Также на данном волновом числе на более поздних моментах времени образуются зональные потоки. Волновое число k_β^{IK} описывает границу между областью, в которой существуют волны Россби, и инерционным интервалом. Волновое число k_d описывает границу между инерционным интервалом и интервалом диссипации. На волновых векторах $0 < k < k_\beta^{IK}$ образуются крупномасштабные волны Россби. В инерционном интервале $k_\beta^{IK} < k < k_d$ образуется спектр Ирошникова–Крейчнана, который самоподобно затухает. Таким образом граница между инерционным интервалом и волнами Россби (волновое число k_β^{IK} смещается вправо, так как мы не наблюдаем самоподобного затухания волн Россби. Интервал диссипации ($k < k_d$) растет в область крупных масштабов.

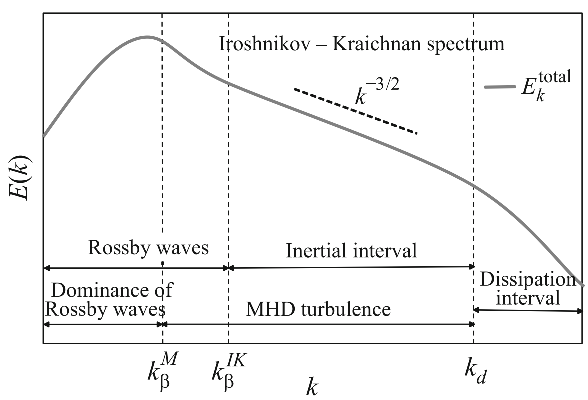

Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематическое представление спектра полной энергии двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости.

Для двумерной МГД турбулентности характерен обратный каскад среднего квадрата магнитного потенциала и слияние магнитных островов (магнитных вихрей) в более крупные (см. главы 8.2.2 и 8.2.3 в книге [27]). Наши расчеты показывают в данной работе и в работе [8], что в двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости размеры магнитных островов в квазистационарном состоянии меньше размеров зональных потоков и зависят от значения параметра Россби β. Мы предполагаем, что в такой турбулентности обратный каскад квадрата магнитного потенциала останавливается на масштабе зональных потоков $l_\beta^M = 1/k_\beta^M$ и характерный масштаб магнитных островов l^{IM} меньше, либо равен масштабу зональных потоков $l^{IM} \le l_\beta^M$ ($k^{IM} \ge k_\beta^M$), что согласуется с результатами нашей работы. Так как обратный каскад квадрата магнитного потенциала проходит в области волновых векторов, лежащей слева от инерционного интервала прямого каскада полной энергии [27], масштабы магнитных островов l^{IM} больше масштабов, на которых образуется спектр Ирошникова—Крейчнана ($l^{IM} > 1/k_\beta^{IK}$). Таким образом, волновое число, характеризующее магнитные острова, лежит в области ($k_\beta^M \le k^{IM} < k_\beta^{IK}$).

Далее изучим спектральные свойства двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости для времен $t > 9$. Проанализируем спектры полной энергии двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости ($\beta = 10$) в моменты времени t_1, t_2 и t_3, где $t_3 > t_2 > t_1$, а $t_1 \simeq 10$ – момент времени, на котором еще наблюдается наличие спектра Ирошникова–Крейчнана. На рисунке 4 показаны нормированные спектры полной энергии $E(k) \cdot k^{3/2}$ двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости при параметре Россби $\beta = 10$.

Спектр полной энергии двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-

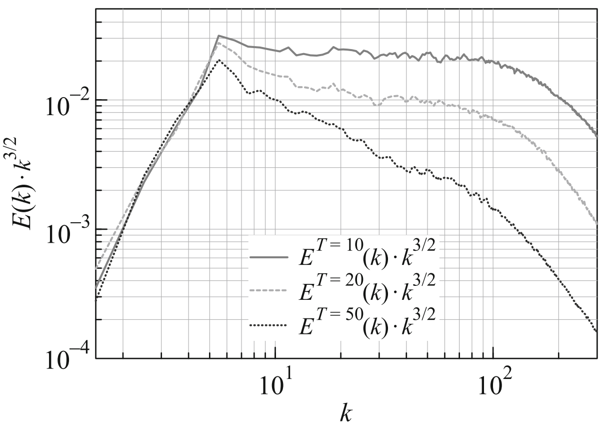

Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектры полной энергии двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости ($\beta = 10$), нормированные на $k^{3/2}$. Сплошной линией показан нормированный спектр в момент времени $t = 10$, штрихпунктирной линией – для момента времени $t = 20$, точечным пунктиром – для момента времени $t = 50$

плоскости ($\beta = 10$) для момента времени $t = 10$ согласуется с законом Ирошникова–Крейчнана на инерционном интервале. На рисунке 4 соответствующий нормированный спектр масштабно-инвариантен на диапазоне $k \simeq 10 - 100$, соответствующем инерционному интервалу. Нормированные спектры полной энергии для моментов времени $t = 25$ и $t = 50$ не являются масштабно-инвариантными. Спектр полной энергии двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости после времени $t \simeq 10$ не согласуется со спектром Ирошникова–Крейчнана. Спектры полной энергии для моментов времени $t > 10$ затухают неравномерно на волновых числах, соответствующих инерционному интервалу, а не самоподобно, как ранее ($t < 10$). При этом остаются изменения наклона всех трех спектров на моментах времени $t = 10; 20; 50$ на волновом числе $k \simeq 100$, связанные с переходом к диссипативному интервалу. Так как область перехода остается на тех же волновых числах, мы не можем сказать, что нарушение самоподобного затухания с течением времени связанно с увеличением диссипативного интервала в область крупных масштабов.

Обнаруженное нарушение самоподобного затухания спектра Ирошникова–Крейчнана означает, что на данном временном промежутке спектральный перенос энергии определяется альтернативным механизмом, а не взаимодействием нелинейных альвеновских волн. Наше численное моделирование двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости показало, что для моментов времени $t > 20$ значение магнитной энергии в несколько раз превышает значение кинетической ($E^M/E^V = 5.5$ для $t = 20$), так же, как и в случае отсутствия вращения [20, 28]. Поэтому нелинейное слагаемое, связанное с магнитным полем, в уравнении (5a) оказывает сильное влияние на кинетическую энергию, а нелинейное слагаемое, связанное с вмороженностью, в уравнении (5b) оказывает слабое влияние на магнитную энергию. Из-за отсутствия баланса между этими двумя слагаемыми нелинейные альвеновские волны исчезают вследствие затухания. Динамика течений слабо влияет на магнитные силовые линии и они остаются квазистационарными, как это было показано в работе [8]. Из-за отсутствия баланса в энергообмене между кинетической и магнитной энергиями и, как следствие, отсутствия нелинейных альвеновских волн, механизм переноса полной энергии вдоль спектра нарушается, и спектр полной энергии в такой турбулентности не демонстрирует инерционный интервал. Тем не менее результаты численных экспериментов показывают, что именно на данном временном промежутке происходит образование зональных течений.

На рисунке 5 показаны нормированные спектры кинетической энергии $E_n^V(k)$ двумерной затухаю-

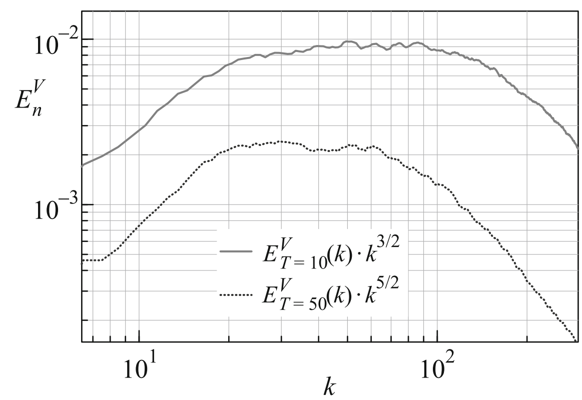

Рис. 5. (Цветной онлайн) Нормированные спектры кинетической энергии затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости ($\beta = 10$) для моментов времени $t = 10; 50$

щей МГД турбулентности на β-плоскости при параметре Россби $\beta = 10$. Сплошной линией показана зависимость спектра, нормированного на $k^{3/2}$, от волнового числа k для момента времени $t = 10$, штрихпунктирной линией – зависимость спектра, нормированного на $k^{5/3}$, для момента времени $t = 50$. Спектр, соответствующий моменту времени $t = 10$ и нормированный на $k^{3/2}$, является масштабно-инвариантным в диапазоне волновых чисел $k \simeq 25 - 100$, спектр кинетической энергии согласуется с законом Ирошникова–Крейчнана $E(k) \sim \sim k^{-3/2}$ на интервале волновых чисел $k \simeq 25 - 100$, аналогично спектру полной энергии для момента времени $t = 10$ на рис. 4. Спектр кинетической энергии, соответствующий моменту времени $t = 50$ и нормированный на $k^{5/3}$, масштабно-инвариантен в диапазоне волновых чисел $k \simeq 20 - 60$, спектр кинетической энергии на данном моменте времени согласуется со спектром Коломогорова (2) со степенной зависимостью $E_k^V \sim k^{-5/3}$. Наши численные расчеты показывают, что на диапазоне волновых векторов $k > 60$ устанавливается спектр $E_k^V \sim k^{-3}$. Такая спектральная картина характерна для двумерной турбулентности нейтральной жидкости [15, 24]. В двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости, после нарушения самоподобного затухания спектра Ирошникова–Крейчнана, на диапазоне волновых векторов $k \simeq 20 - 60$ образуется инерционный интервал обратного каскада кинетической энергии со спектром кинетической энергии $E_k^V \sim k^{-5/3}$, а на диапазоне волновых векторов $k \simeq \simeq 60 - 100$ образуется инерционный интервал прямого каскада энстрофии со спектром кинетической энергии $E_k^V \sim k^{-3}$. Таким образом, для двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости характерен обратный каскад кинетической энергии на более поздних временах. Наличие переноса кинетической энергии в область крупных масштабов обеспечивает образование зональных течений [13–16], обнаруженных в такой турбулентности [8]. Детальное исследование процессов переноса кинетической и магнитной энергии в двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости на временах, для которых спектр Ирошникова–Крейчнана трансформируется в спектр Колмогорова, будет представлено в отдельной работе.

4. Заключение. Проведено численное моделирование затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости. Моделирование проведено с высоким разрешением, достаточным для анализа спектров турбулентности. Показано, что в спектрах однородной двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости существует область волновых векторов, в которой происходит прямой каскад полной энергии и образуется спектр Ирошникова–Крейчнана. В этом случае спектр турбулентности определяется взаимодействием нелинейных альвеновских волн. Область магнитогидродинамической турбулентности примыкает к области доминирования волн Россби, оценка которой получена в работе [8]. Получено выражение для характерного волнового числа, которое определяет начало инерционного интервала прямого каскада энергии в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости. Показано наличие крупномасштабных волн Россби на диапазоне волновых векторов, который ограничен предложенным масштабом.

Обнаружено, что найденный спектр самоподобно затухает согласно выражению временной зависимости спектра Ирошникова–Крейчана. Выявлено, что на больших интервалах времени влияние нелинейных альвеновских волн уменьшается, так как значение магнитной энергии превышает значение кинетической в несколько раз. Обнаружено, что нарушается самоподобное затухание спектра полной энергии, и спектр больше не согласуется со спектром Ирошникова–Крейчнана. Показано, что на временах, когда нарушается самоподобное затухание спектра полной энергии, образуется спектр Колмогорова в инерционном интервале кинетической энергии. Именно обратный каскад кинетической энергии в инерционном интервале обеспечивает зарождение зональных течений.

Авторы признательны рецензенту за полезные замечания. Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики "Базис"; выполнена по проекту КП19-270 "Вопросы происхождения и эволюции Вселенной с применением методов наземных наблюдений и космических исследований" программы крупных проектов по проведению фундаментальных научных исследований по приоритетным направлениям, определяемым президиумом РАН; при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 19-02-00016.

1. A. Petrosyan, A. Balogh, M. L. Goldstein, J. Léorat, E. Marsch, K. Petrovay, B. Roberts, R. von Steiger, and J. C. Vial, Space Sci. Rev. **156**(1), 135 (2010)
2. J. F. Hawley and S. A. Balbus, Numerical Astrophysics **240**, 187 (1999).
3. В. И. Ильгисонис, *Классические задачи физики горячей плазмы: курс лекций*, Издательский дом МЭИ, М. (2015).
4. C. W. Horton and W. Horton, *Turbulent transport in magnetized plasmas*, World Scientific, Hackensack (2017).
5. В. П. Пастухов, Н. В. Чудин, Письма в ЖЭТФ **82**(6), 395 (2005).
6. P. A. Davidson, *Turbulence in Rotating, Stratified and Eelectrically Conducting Fluids*, Cambridge University Press, Cambridge (2013).

7. S. M. Tobias, P. H. Diamond, and D. W. Hughes, Astrophys. J. **667**, 113 (2007).
8. Т. А. Зиняков, А. С. Петросян, Письма в ЖЭТФ **108**(2), 75 (2018).
9. J. B. Parker and N. C. Constantinou, Phys. Rev. Fluids **4**(8), 083701 (2019).
10. В. И. Ильгисонис, В. П. Пастухов, Физика плазмы **22**(3), 228 (1996).
11. P. H. Diamond, S. I. Itoh, K. Itoh, and T. S. Hahm, Plasma Phys. Control. Fusion **47**, 35 (2005).
12. Ö. D. Gürcan and P. H. Diamond, J. Phys. A: Math. Theor **48**, 293001 (2015).
13. P. B. Rhines, J. Fluid Mech. **69**, 417 (1975).
14. G. K. Vallis and M. E. Maltrud, J. Phys. Ocean. **23**, 1346 (1993).
15. С. Д. Данилов, Д. Гурарий, УФН **170**(9), 921 (2000).
16. G. Boffetta and R. E. Ecke, Annu. Rev. Fluid Mech. **44**, 427 (2012).
17. A. Pouquet, J. Fluid Mech. **88**, 1 (1977).
18. Р. С. Ирошников, Астрономический журнал XL **4**, 742 (1963).
19. R. H. Kraichnan, Phys. Fluids **8**, 1385 (1965).
20. D. Biskamp and E. Schwarz, Phys. Plasmas **8**, 3282 (2001).
21. P. Tabeling, Phys. Rep. **362**, 1 (2002).
22. A. Alexakis and L. Biferale, Phys. Rep. **767**, 1 (2018).
23. А. Н. Колмогоров, Доклады Академии Наук СССР **32**, 19 (1941).
24. R. H. Kraichnan, Phys. Fluids **10**, 1417 (1967).
25. D. G. Fox and S. A. Orszag, J. Comput. Phys. **11**(4), 612 (1973).
26. S. A. Orszag, J. Atmos. Sci. **28**(6), 1074 (1971).
27. D. Biskamp, *Magnetohydrodynamic turbulence*, Cambridge University Press, Cambridge (2003).
28. R. Kinney, J. C. McWilliams, and T. Tajima, Phys. Plasmas **2**, 3623 (1995).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 75 – 79 © 2020 г. 25 января

Аномальное орто/пара отношение ядерных спиновых изомеров H_2O при низких температурах

П. Л. Чаповский[+*1)], *А. А. Мамрашев*[+]

[+]*Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

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

Поступила в редакцию 12 ноября 2019 г.
После переработки 12 ноября 2019 г.
Принята к публикации 30 ноября 2019 г.

Предложена теоретическая модель ядерных спиновых изомеров молекул H_2O, находящихся внутри фуллерена C_{60}. Модель объясняет аномально высокую стабильность ортоизомеров H_2O, обнаруженную в экспериментах B. Meier et al. (Nature Commun. **6**, 8112 (2015)) при температуре $T = 5\,K$.

DOI: 10.31857/S0370274X20020046

Введение. Молекулы воды (рис. 1) существуют в природе в виде ядерных спиновых изомеров [1].

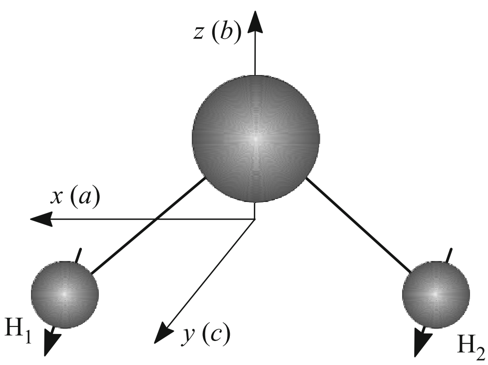

Рис. 1. Молекула H_2O и молекулярная система координат с осью квантования z, направленной по оси симметрии молекулы. Буквами отмечены главные оси инерции в порядке возрастания моментов инерции: $I_a < I_b < I_c$

Орто-H_2O имеет полный спин ядер водорода $I = 1$ (симметричная по перестановкам идентичных ядер водорода спиновая волновая функция), а пара-H_2O имеет антисимметричную спиновую функцию с $I = 0$. Квантовая статистика разрешает только антисимметричные по перестановкам комбинации спиновых и пространственных волновых функций в полной волновой функции H_2O. Это снимает вырождение по энергии орто- и парасостояний и определяет исключительно большие времена конверсии спиновых изомеров H_2O.

Молекулы воды и ее спиновые изомеры важны для многих разделов науки и практики. Например, только ортоизомеры H_2O создают сигнал в ядерном магнитном резонансе (ЯМР) воды. Параизомеры H_2O не создают сигнала ЯМР, поскольку имеют нулевой полный спин ядер водорода. В астрофизике измерения орто/пара отношений (*ortho-to-para ratio*, OPR) изомеров молекул воды позволяют понять физические условия в удаленных космических объектах [2–6].

Для задач астрофизики важны свойства спиновых изомеров воды, находящихся в условиях разреженного газа при очень низких температурах. До недавнего времени лабораторные эксперименты в таких условиях не представлялись возможными. Ситуация изменилась благодаря созданию нового вещества, в котором молекулы H_2O находятся внутри фуллерена C_{60}, сокращенно $H_2O@C_{60}$ (см. работы [7–9] и приведенную там библиографию).

Молекулы воды внутри C_{60} находятся в состоянии почти свободного вращения и имеют физические свойства, подобные свойствам молекул воды в газовой фазе, обладая, например, и ядерными спиновыми изомерами. Новое вещество, $H_2O@C_{60}$, позволяет выполнять эксперименты со спиновыми изомерами молекул воды при любых, в том числе и гелиевых температурах. В работе [9] была исследована конверсия спиновых изомеров молекул воды при низких температурах и было обнаружено, что ортомолекулы H_2O при температуре $5\,K$ не переходят полностью в парасостояние в радикальном противоречии с существующими в настоящее время физическими представлениями. В этой работе мы предлагаем объяснение обнаруженной в работе [9] аномалии.

1) e-mail: chapovsky@iae.nsk.su

Вращательные состояния H_2O. Молекула воды и молекулярная система координат представлены на рис. 1. Мы используем, как и ранее [6], молекулярную систему координат с осью квантования z, направленной по оси симметрии молекулы. Такая ориентация осей отличается от общепринятой [10], но упрощает описание спиновых изомеров H_2O, поскольку перестановка идентичных ядер водорода в этой системе координат эквивалентна повороту на угол π вокруг оси квантования z.

Расчет волновых функций и энергий H_2O в основном электронном и колебательном состоянии выполнен с помощью эффективного вращательного гамильтониана молекул воды из [11]. Необходимые для расчета вращательные постоянные H_2O в системе молекулярных координат рис. 1 определены нами с помощью экспериментальных значений энергий вращательных уровней H_2O из работы [12]. Рассчитанные таким образом энергии уровней совпадают с экспериментальными данными [12] с точностью $7 \cdot 10^{-3}\,\text{см}^{-1}$ для значений углового момента $J = 0 \dots 9$. Энергии вращательных уровней H_2O представлены на рис. 2, где для удобства сопоставления

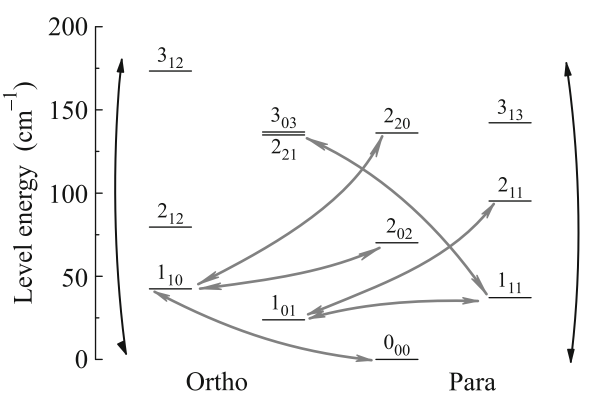

Рис. 2. (Цветной онлайн) Вращательные состояния молекулы H_2O. Указана стандартная систематика вращательных состояний H_2O: J_{K_a,K_c} [12]. Изогнутыми красными стрелками отмечено смешивание нижних орто и пара состояний. Вертикальные стрелки указывают вращательную релаксацию внутри орто и пара состояний

с данными [12], указана традиционная систематика вращательных уровней J_{K_a,K_c}, использующая молекулярную систему координат с осью квантования по главной оси инерции a. Вращательные состояния на рис. 2 разделены на четыре колонки: по принадлежности к орто- и параизомерам H_2O и по пространственной четности. В систематике J_{K_a,K_c} ортоизомеры имеют нечетные значения $K_a + K_c$, параизомеры имеют четные значения $K_a + K_c$, пространственная четность состояний определяется четностью квантового числа K_c. Изогнутые стрелки на рис. 2 указывают смешивание нижних вращательных состояний H_2O внутримолекулярным спин-вращательным взаимодействием (см. ниже). Такое смешивание осуществляется между состояниями с одинаковой четностью и с правилом отбора по угловому моменту $|\Delta J| \leq 1$. Вертикальные стрелки символизируют релаксацию H_2O по вращательным состояниям молекул воды с сохранением спинового состояния ядер водорода.

Традиционно принято считать (см., например, [2]), что концентрации орто- (ρ_o) и пара- (ρ_p) изомеров молекул воды (и других молекул) в состоянии теплового равновесия определяются соотношениями

$$\rho_o = \rho Z_o/(Z_o + Z_p); \quad \rho_p = \rho Z_p/(Z_o + Z_p); \quad \rho_o/\rho_p = Z_o/Z_p. \tag{1}$$

Здесь $\rho = \rho_o + \rho_p$ – полная концентрация молекул. Статистические суммы для орто- (Z_o) и пара- (Z_p) изомеров имеют вид

$$Z_o = \sum 3 \cdot (2J+1) e^{-E_\alpha/k_B T}, \quad \alpha \in \text{ortho}; \qquad Z_p = \sum (2J'+1) e^{-E_{\alpha'}/k_B T}, \quad \alpha' \in \text{para}. \tag{2}$$

Здесь J, E_α и J', $E_{\alpha'}$ – угловой момент и энергия орто- и парасостояний H_2O соответственно, k_B – постоянная Больцмана, T – температура газа. Дополнительный фактор 3 для Z_o в (2) возникает из-за вырождения по направлению полного спина ядер водорода ($I = 1$) в орто-H_2O.

Равновесное орто/пара отношение при низких температурах по традиционной теории (1) представлено на рис. 3 (жирная красная линия). Мы видим, что традиционная теория (1) предсказывает "вымораживание" ортоизомеров молекул воды при низкой температуре. При температуре $T = 5$ K орто/пара отношение согласно (1) составляет $\simeq 0.01$. Это в 10 раз меньше значения OPR = 0.12, измеренного в работе [9].

Квантовая релаксация спиновых изомеров. Последовательный расчет концентраций орто- и параизомеров молекул воды должен быть основан на теории взаимных превращений спиновых изомеров H_2O. Такой теорией может служить квантовая релаксация ядерных спиновых изомеров молекул [13, 14]. Качественную картину этого процесса поясним на примере молекул воды в газовой фазе, предполагая смешанными только два состояния H_2O: m (орто) и n (пара). Пусть в начальный момент времени молекула воды помещена в ортосостояние. В результате столкновений с "немагнитными" окружающими

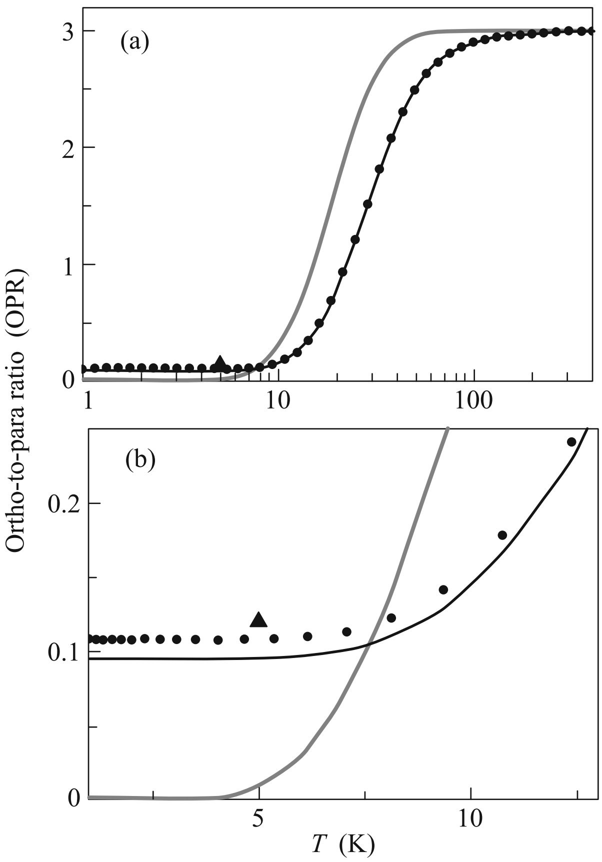

Рис. 3. (Цветной онлайн) Орто/пара отношение (OPR) ядерных спиновых изомеров молекул воды. (a) – Температуры $T = 1{-}400$ K; (b) – $T = 1{-}13$ K. Жирная (красная) линия – OPR по традиционной теории (1). Тонкая (черная) линия – расчет в модели квантовой релаксации при $\Gamma = 8.2 \cdot 10^9\,\text{c}^{-1}$. Точки – расчет с $\Gamma = 1 \cdot 10^{12}\,\text{c}^{-1}$. ▲ – экспериментальное значение из [9]

частицами молекула воды будет совершать переходы между вращательными состояниями без изменения своего спинового состояния. Так будет продолжаться до тех пор, пока молекула не окажется на уровне m. После этого, во время свободного пролета между столкновениями, внутримолекулярное взаимодействие подмешает состояние n к состоянию m, и следующее столкновение уже будет иметь вероятность перевести молекулу в другие парасостояния. Так осуществляется конверсия спиновых изомеров в модели квантовой релаксации.

Модель квантовой релаксации проверена для изомеров в газовой фазе при комнатной температуре в многочисленных работах (см. [15–17] и приведенные там ссылки). Наиболее убедительное доказательство справедливости квантовой релаксации получено в экспериментах по резонансам пересечения уровней в конверсии спиновых изомеров молекул CH_3F [18, 19]. Новое вещество $H_2O@C_{60}$ делает возможным сопоставление квантовой релаксации изомеров с экспериментом и при низких температурах.

Представим полный гамильтониан молекул H_2O в C_{60} в виде суммы двух частей

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hbar\hat{V}. \tag{3}$$

Здесь $\hat{H}_0$ – основная часть гамильтониана H_2O, имеющая своими собственными состояниями чистые орто- и парасостояния, представленные на рис. 2; $\hbar\hat{V}$ – слабое внутримолекулярное взаимодействие, смешивающее орто- и парасостояния H_2O.

Квантовое кинетическое уравнение для матрицы плотности молекул H_2O с гамильтонианом (3) в представлении собственных состояний $\hat{H}_0$ имеет стандартный вид [20]

$$\partial\hat{\rho}/\partial t = -i[\hat{V}, \hat{\rho}] + \hat{S}. \tag{4}$$

Здесь $\hat{S}$ – интеграл столкновений, описывающий взаимодействие молекулы H_2O с окружающей ее оболочкой C_{60}. Будем предполагать, как это принято в модели квантовой релаксации спиновых изомеров, что окружение молекулы воды не создает в ней орто-пара переходы “напрямую”. В этом приближении для интеграла столкновений справедливы соотношения

$$\sum S_{\alpha\alpha} = \sum S_{\alpha'\alpha'}; \quad \alpha \in \text{ortho}, \quad \alpha' \in \text{para}, \tag{5}$$

которые означают сохранение концентрации каждого спинового изомера H_2O при взаимодействии с C_{60}. Представление (5) является приближением, справедливым при очень медленных орто-пара переходах в H_2O, индуцированных прямым взаимодействием с C_{60}.

Общее решение задачи (3)–(5) для слабого сверхтонкого взаимодействия $\hbar\hat{V}$ и невырожденных орто- и парасостояний молекулы приведено, например, в [6, 14]. Уравнение, описывающее изменение во времени полной концентрации, например, ортоизомеров, $\rho_o = \sum \rho_{\alpha\alpha}$, $\alpha \in$ ortho имеет вид

$$\partial\rho_o/\partial t = -\gamma_{op}\rho_o + \gamma_{po}\rho_p;$$
$$\gamma_{op} = \sum_{\alpha\in o;\ \alpha'\in p} \gamma_{\alpha\alpha'}; \quad \gamma_{po} = \sum_{\alpha\in o;\ \alpha'\in p} \gamma_{\alpha'\alpha}. \tag{6}$$

Частоты $\gamma_{\alpha\alpha'}$ и $\gamma_{\alpha'\alpha}$ имеют смысл парциальных скоростей конверсии изомеров по каналам $\alpha \to \alpha'$ и $\alpha' \to \alpha$, соответственно, и имеют вид

$$\gamma_{\alpha\alpha'} = \frac{2\Gamma_{\alpha\alpha'}|V_{\alpha\alpha'}|^2}{\Gamma^2_{\alpha\alpha'} + \omega^2_{\alpha\alpha'}} W_\alpha; \quad \gamma_{\alpha'\alpha} = \frac{2\Gamma_{\alpha'\alpha}|V_{\alpha'\alpha}|^2}{\Gamma^2_{\alpha'\alpha} + \omega^2_{\alpha'\alpha}} W_{\alpha'}. \tag{7}$$

Здесь $\Gamma_{\alpha\alpha'}$ – скорость релаксации недиагонального элемента матрицы плотности $\rho_{\alpha\alpha'}$ (скорость декогеренции); $\omega_{\alpha'\alpha}$ – частота соответствующего орто-пара перехода; W_α и $W_{\alpha'}$ – больцмановские факторы орто- и парасостояний,

$$W_\alpha = Z_o^{-1} e^{-E_\alpha/k_B T}; \quad W_{\alpha'} = Z_p^{-1} e^{-E_{\alpha'}/k_B T}. \tag{8}$$

Уравнение (6) позволяет выразить отношение стационарных концентраций орто- и парамолекул (OPR) через скорости орто-пара конверсии

$$\mathrm{OPR} \equiv \overline{\rho}_o/\overline{\rho}_p = \gamma_{po}/\gamma_{op}. \tag{9}$$

Для расчета параметра OPR с помощью уравнения (9) необходимо знать скорости декогеренции $\Gamma_{\alpha\alpha'}$. В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением приближенной модели квантовой релаксации изомеров H_2O, в которой все $\Gamma_{\alpha\alpha'}$ принимаются равными между собой, $\Gamma_{\alpha\alpha'} \equiv \Gamma$, со значением $\Gamma = 8.2 \cdot 10^9$ с$^{-1}$. При такой величине Γ модель квантовой релаксации воспроизводит время конверсии изомеров H_2O, равное 12 ч при температуре $T = 3.5$ K [7].

Для расчета необходимо также знать матричные элементы $V_{\alpha'\alpha}$ сверхтонкого взаимодействия, смешивающего орто- и парасостояния молекулы H_2O. В молекуле воды есть два наиболее сильных сверхтонких взаимодействия: спин-спиновое взаимодействие ядер водорода между собой и спин-вращательное взаимодействие спинов ядер водорода с магнитным полем, возникающим из-за вращения молекулы. Спин-спиновое взаимодействие ядер водорода не смешивает состояния орто- и параизомеров H_2O [6]. Спин-вращательное взаимодействие, $\hat{V}_{SR}$, смешивает спиновые изомеры H_2O и может быть представлено в виде [21]

$$\hat{V}_{SR} = \frac{1}{2}\left(\sum_n \hat{\mathbf{I}}^{(n)} \bullet \mathbf{C}^{(n)} \bullet \hat{\mathbf{J}} + h.c.\right); \quad n = 1, 2. \tag{10}$$

Здесь $\hat{\mathbf{I}}^n$ и $\mathbf{C}^n$ – оператор спина и тензор спин-вращательного взаимодействия n-го протона, соответственно. $\hat{\mathbf{J}}$ – оператор углового момента молекулы. Расчет компонентов спин-вращательного тензора молекул воды выполнен в работе [22]. Сферические компоненты тензора спин-вращательного взаимодействия, осуществляющие смешивание орто- и парасостояний H_2O, имеют такие значения (согласно определению [1] связи декартовых и сферических компонент тензора второго ранга):

$$C_{2,\pm 1} = \mp 35.2 \text{ кГц}; \quad C_{1,\pm 1} = 14.1 \text{ кГц}. \tag{11}$$

Результат расчета орто/пара отношения для изомеров молекул H_2O в диапазоне температур $T = 1{-}400$ K представлен на рис. 3 (тонкая черная линия, $\Gamma = 8.2 \cdot 10^9$ с$^{-1}$). При высоких температурах, когда заселено много вращательных состояний молекул воды, OPR = 3 и определяется отношением ядерных статистических весов орто- и параизомеров H_2O. В высокотемпературном пределе квантовая релаксация дает значение OPR, совпадающее с традиционной моделью (1).

Низкотемпературное значение орто/пара отношения в модели квантовой релаксации составляет OPR = 0.1 и практически не изменяется в области температур $T = 1{-}8$ K. Такая зависимость OPR от температуры радикально отличается от предсказаний традиционной модели (1): OPR $\to 0$ при $T \to 0$. При температуре $T = 5$ K традиционная модель (1) дает OPR = 0.01, что на порядок меньше значения OPR = 0.1 согласно теории квантовой релаксации.

В работе [9] исследованы спиновые изомеры H_2O в C_{60} при низких температурах. Детектирование изомеров осуществлялось двумя способами: по величине диэлектрической восприимчивости $H_2O@C_{60}$ и по величине ЯМР-сигнала протонов в молекуле воды. При $T = 5$ K оба метода детектирования обнаруживают значительную концентрацию ортомолекул, не релаксирующую в парасостояние. Эта неисчезающая концентрация ортомолекул существенно превышает концентрацию ортомолекул H_2O по традиционной теории (1) при $T = 5$ K.

Авторы [9] оперируют долей (Φ) ортомолекул воды в образце, поскольку ЯМР сигнал пропорционален Φ. Этот параметр просто связан с OPR: $\Phi = \mathrm{OPR}/(1 + \mathrm{OPR})$. Для температуры $T = 5$ K, в [9] измерено стационарное значение $\Phi = 0.13$, что соответствует OPR = 0.15. Процедура измерения стационарного значения Φ при $T = 5$ K в [9] использует референтное значение Φ при $T = 25$ K. Квантовая релаксация дает меньшие значения Φ при $T = 25$ K, чем традиционная теория (1), использованная авторами [9]. Соответственно, измеренное в [9] стационарное значение доли ортомолекул должно быть пропорционально уменьшено и приведет к значению измеренного орто/пара отношения OPR = 0.12. Это значение указано на рис. 3 (черный заполненный треугольник).

Обсуждение и выводы. В работе выполнен расчет орто/пара (OPR) отношения концентраций спиновых изомеров молекул воды в модели квантовой релаксации в диапазоне температур $T = 1{-}400$ K. При высоких температурах квантовая релаксация дает значение OPR = 3 в полном согласии с традиционной моделью, основанной на статистических суммах орто- и параизомеров молекул H_2O.

При низких температурах традиционная теория предсказывает "вымораживание" ортомолекул H_2O: OPR $\to 0$ при $T \to 0$. В радикальном противоречии с этим результатом квантовая релаксация предсказывает существование неисчезающей фракции ортомолекул H_2O: OPR $= 0.1$ в диапазоне температур $T = 1{-}8$ K. Этот результат оказывается малочувствительным к параметру модели, скорости декогеренции Γ. Так, увеличение Γ в 120 раз приводит к увеличению низкотемпературного значения OPR только на $\simeq 10\,\%$ (черные точки на рис. 3). Слабую чувствительность OPR к величине Γ при низких температурах просто понять. При низких температурах каждая из скоростей спиновой конверсии воды γ_{op} и γ_{po} определяется в основном смешиванием только одной пары уровней. Поэтому величина OPR $= \gamma_{po}/\gamma_{op}$ практически не зависит от Γ.

Результаты расчета орто/пара отношения для спиновых изомеров H_2O в модели квантовой релаксации объясняют существование неисчезающей концентрации ортоизомеров молекул воды, обнаруженной в работе [9] при низких температурах. По-видимому, это состояние является метастабильным, и существенно более длительное наблюдение изомеров H_2O при низкой температуре привело бы к переходу всех изомеров H_2O в парасостояние. Такие эксперименты пока не выполнены.

Авторы признательны Е. В. Подивилову и А. М. Шалагину за полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект # 17-12-01418).

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М. (1989).
2. T. Hama, A. Kouchi, and N. Watanabe, Science **351**, 65 (2016).
3. K. Willacy, C. Alexander, M. Ali-Dib, C. Ceccarelli, S. B. Charnley, M. Doronin, Y. Ellinger, P. Gast, E. Gibb, S. N. Milam, O. Mousis, F. Pauzat, C. Tornow, E. S. Wirström, and E. Zicler, Space Sci. Rev. **197**, 151 (2015).
4. T. Hama, A. Kouchi, and N. Watanabe, Astrophys. J. Lett. **857**, L13 (2018).
5. D. C. Lis, T. G. Phillips, P. F. Goldsmith, et al. (Collaboration), Astron. Astrophys. **521**, L26 (2010).
6. P. L. Chapovsky, Quantum Electron. **49**, 473 (2019).
7. C. Beduz, M. Carravettab, J. Y. Chenc, et al. (Collaboration), Proc. Natl. Acad. Sci. USA **109**, 12894 (2012).
8. S. Mamone, M. Concistre, E. Carignani, B. Meier, A. Krachmalnicoff, O. G. Johannessen, X. Lei, Y. Li, M. Denning, M. Carravetta, K. Goh, A. J. Horsewill, R. J. Whitby, and M. H. Levitt, J. Chem. Phys. **140**, 194306 (2014).
9. B. Meier, S. Mamone, M. Concistre, et al. (Collaboration), Nat. Commun. **6**, 8112 (2015).
10. I. E. Gordon, L. S. Rothman, C. Hill et al. (Collaboration), J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **203**, 3 (2017).
11. F. Matsushima, H. Nagase, T. Nakauchi, H. Odashima, and K. Takagi, J. Mol. Spectrosc. **193**, 217 (1999).
12. J. Tennyson, N. F. Zobov, R. Williamson, O. L. Polyansky, and P. F. Bernath, J. Phys. Chem. Ref. Data **30**, 735 (2001).
13. R. F. Curl, Jr., J. V. V. Kasper, and K. S. Pitzer, J. Chem. Phys. **46**, 3220 (1967).
14. P. L. Chapovsky, Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 3624 (1991).
15. P. L. Chapovsky and L. J. F. Hermans, Annu. Rev. Phys. Chem. **50**, 315 (1999).
16. Z. Sun, K. Takagi, and F. Matsushima, Science **310**, 1938 (2005).
17. Z. D. Sun, M. Ge, and Y. Zheng, Nat. Commun. **6**, 6877 (2015).
18. B. Nagels, N. Calas, D. A. Roozemond, L. J. F. Hermans, and P. L. Chapovsky, Phys. Rev. Lett. **77**, 4732 (1996).
19. P. Cacciani, J. Cosléou, F. Herlemont, M. Khelkhal, and J. Lecointre, Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys. **69**, 032704 (2004).
20. S. G. Rautian and A. M. Shalagin, *Kinetic Problems of Nonlinear Spectroscopy*, Elsevier Sci. Publ., Amsterdam (1991), 439 p.
21. E. Ilisca and K. Bahloul, Phys. Rev. A. **57**, 4296 (1998).
22. G. Cazzoli, C. Puzzarini, M. E. Harding, and J. Gauss, Chem. Phys. Lett. **473**, 21 (2009).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 80 – 85

Электронно-дырочная жидкость в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов

П. Л. Пех[+1)], *П. В. Ратников*[*], *А. П. Силин*[+×]

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

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

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

Поступила в редакцию 1 октября 2019 г.
После переработки 19 ноября 2019 г.
Принята к публикации 5 декабря 2019 г.

Монослойные пленки дихалькогенидов переходных металлов (в частности, MoS_2, $MoSe_2$, WS_2 и WSe_2) могут считаться идеальной системой для исследования высокотемпературной электронно-дырочной жидкости. Квазидвумерная природа электронов и дырок обеспечивает более сильное взаимодействие по сравнению с объемными полупроводниками. Экранирование кулоновского взаимодействия в монослойных гетероструктурах существенно ослаблено, поскольку определяется диэлектрическими проницаемостями окружения (например, вакуума и подложки), которые значительно меньше, чем у пленок дихалькогенидах переходных металлов. Многодолинная структура энергетического спектра носителей заряда в дихалькогенидах переходных металлов многократно уменьшает кинетическую энергию, что приводит к увеличению равновесной плотности и энергии связи электронно-дырочной жидкости. В работе найдена энергия связи электронно-дырочной жидкости и ее равновесная плотность. Показано, что в расчетах электронно-дырочной жидкости следует пользоваться двумерным кулоновским потенциалом.

DOI: 10.31857/S0370274X20020058

1. Введение. Повышенный интерес к исследованию графена в качестве перспективного материала для наноэлектроники [1] привел к появлению новых двумерных (2D) материалов, таких как монослои гексагонального нитрида бора, черного фосфора и дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) [2]. В последнее время активно исследуются вертикальные (ван-дер-ваальсовые) гетероструктуры, в которых в заданной последовательности комбинируются различные 2D материалы [3].

Особый интерес представляют мономолекулярные слои ДПМ, описываемых формулой MX_2, где M – переходный металл, X – халькоген. Наиболее изученными являются полупроводники с атомами металла VI группы ($M =$ Mo, W) и S, Se, Te в качестве халькогена. В объемной форме слоистые ДПМ (например, MoS_2, WS_2, $MoSe_2$, WSe_2) имеют непрямую энергетическую щель $E_g \sim 1$ эВ [4, 5], в то время как их мономолекулярные слои являются прямозонными полупроводниками с E_g около 2 эВ [6].

Многие объемные образцы ДПМ были получены еще в 1960-х гг. [7]. Их электронные свойства уже тогда интенсивно исследовались [8, 9]. В частности, некоторые ДПМ ($M =$ Nb, Ta, Ti, Mo; $X =$ S, Se) при низких температурах переходят в сверхпроводящее состояние. Структура, синтез, свойства и применение ДПМ детально описаны в недавно опубликованном обзоре [10].

Оптические свойства мономолекулярных слоев ДПМ определяются в значительной степени экситонами и трионами. Энергия связи экситона E_x в ДПМ составляет сотни мэВ (например, в монослоях MoS_2 $E_x = 420$ мэВ [11]), а триона – десятки мэВ [6].

Эти обстоятельства позволяют считать структуры с использованием монослоев ДПМ идеальными системами для исследования высокотемпературной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ). Энергия одной электрон-дырочной пары в ЭДЖ $|E_{\mathrm{EHL}}| \sim \sim E_x$, а критическая температура фазового перехода газ – жидкость $T_c \sim 0.1\,|E_{\mathrm{EHL}}|$ [12–17], поэтому можно ожидать, что в монослоях ДПМ ЭДЖ будет наблюдаться даже при комнатных температурах. В монослоях MoS_2 уже наблюдалась высокотемпературная сильносвязанная ЭДЖ с $T_c \simeq 500$ K [18].

В настоящей работе мы исследуем возможность образования ЭДЖ в монослоях многодолинных полупроводников [9, 19]. Мы рассмотрим тонкую пленку модельного многодолинного полупроводника на

[1)]e-mail: pavel.pekh@phystech.edu

диэлектрической подложке в вакууме. Считаем, что полупроводник обладает достаточно широкой энергетической щелью $E_g \gg |E_{\rm EHL}|$ и используем однозонное приближение. Полупроводник имеет большое одинаковое число эквивалентных электронных ν_e и дырочных ν_h долин $\nu_e = \nu_h = \nu \gg 1$ с электронными m_e и дырочными m_h эффективными массами. Многодолинность может обеспечиваться за счет наличия нескольких мономолекулярных слоев в пленке.

Как было показано в работе [20], при $\nu \gg 1$ энергия взаимодействия носителей заряда из разных долин является определяющей в такой системе. Равновесная плотность ЭДЖ $n_{\rm EHL}$ и соответствующая этой плотности энергия $E_{\rm EHL}$ резко возрастают. Такое возрастание плотности оправдывает применение приближения хаотических фаз (ПХФ) для вычисления корреляционной энергии.

2. Модель. Мы исследуем модельную 2D электронно-дырочную систему с гамильтонианом [21, 22]

$$\begin{aligned}\widehat{H} = &\sum_{\mathbf{p}sk}^{\nu_e} \varepsilon_{sk}^e(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}sk}^\dagger a_{\mathbf{p}sk} + \sum_{\mathbf{p}sl}^{\nu_h} \varepsilon_{sl}^h(\mathbf{p}) b_{\mathbf{p}sl}^\dagger b_{\mathbf{p}sl} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}ss'} V(\mathbf{q}) \left\{ \sum_{kk'}^{\nu_e} a_{\mathbf{p}sk}^\dagger a_{\mathbf{p}'s'k'}^\dagger a_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'k'} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sk} + \right. \\ &+ \sum_{ll'}^{\nu_h} b_{\mathbf{p}sl}^\dagger b_{\mathbf{p}'s'l'}^\dagger b_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'l'} b_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sl} - \\ &\left. - 2 \sum_{kl}^{\nu_e\nu_h} a_{\mathbf{p}sk}^\dagger b_{\mathbf{p}'s'l}^\dagger b_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'l} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sk} \right\}.\end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $a_{\mathbf{p}sk}$ $(a_{\mathbf{p}sk}^\dagger)$ и $b_{\mathbf{p}sl}$ $(b_{\mathbf{p}sl}^\dagger)$ – фермиевские операторы уничтожения (рождения) электрона и дырки с квазиимпульсом $\mathbf{p}$ и спином s в долинах k и l соответственно. Законы дисперсии электрона и дырки

$$\varepsilon_{sk}^e(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2(1+\sigma)m}, \ \varepsilon_{sl}^h(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2(1+1/\sigma)m}, \quad (2)$$

где $\sigma = m_e/m_h$ и $m = m_e m_h/(m_e + m_h)$ – приведенная масса электрона и дырки. Обычно $\sigma \le 1$.

Кулоновское взаимодействие в пленках конечной толщины описывается потенциалом Келдыша [23, 24]

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi\widetilde{e}^2}{|\mathbf{q}|(1 + r_0|\mathbf{q}|)}, \quad (3)$$

где $\widetilde{e}^2 = e^2/\epsilon_{\rm eff}$ и $\epsilon_{\rm eff} = (\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$ – эффективная диэлектрическая проницаемость сред, окружающих пленку (например, $\epsilon_1 = 1$ – диэлектрическая проницаемость вакуума, ϵ_2 – диэлектрическая проницаемость подложки), $r_0 = d/2\delta$ – длина экранирования, $\delta = \epsilon_{\rm eff}/\epsilon$ (ϵ – диэлектрическая проницаемость материала пленки), d – толщина пленки.

Для монослойной пленки ($d \to 0$) формула (3) дает стандартное выражение для кулоновского взаимодействия носителей заряда в 2D системе

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi\widetilde{e}^2}{|\mathbf{q}|}. \quad (4)$$

С точки зрения макроскопической электродинамики экранировка кулоновского взаимодействия носителей заряда определяется диэлектрическими проницаемостями сред, окружающих пленку, поскольку силовые линии идут вне пленки. Введение диэлектрической проницаемости ϵ для монослойных пленок ДПМ, как и для графена [1], не имеет физического смысла.

Использование отличного от нуля члена $r_0|\mathbf{q}|$ в знаменателе в скобках формулы (3) продиктовано необходимостью объяснения значительного отклонения энергии нескольких первых экситонных уровней от ридберговской серии [6].

Вначале мы используем потенциал (4) (начало раздела 3, подразделы 3.1 и 3.2). Затем для проверки оправданности использования потенциала (4), а также для сравнения с экспериментом, проводим вычисления с применением потенциала Келдыша (подраздел 3.3). Сравнение результатов расчетов с использованием обоих потенциалов приведено в разделе 5 для монослойной пленки MoS_2.

3. Энергия основного состояния. Энергия основного состояния 2D ЭДЖ, приходящаяся на одну электрон-дырочную пару, записывается как [21, 22]

$$E_{\rm gs} = E_{\rm kin} + E_{\rm exch} + E_{\rm corr}. \quad (5)$$

Первое слагаемое – средняя кинетическая энергия ($n_{\rm 2D}$ – 2D плотности электронов и дырок)

$$E_{\rm kin} = \frac{\hbar^2\pi n_{\rm 2D}}{2m\nu} = \frac{1}{r_s^2}. \quad (6)$$

Второе слагаемое – обменная энергия

$$E_{\rm exch} = -\frac{8\sqrt{2}\widetilde{e}^2}{3\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{n_{\rm 2D}}{\nu}} = -\frac{8\sqrt{2}}{3\pi r_s}. \quad (7)$$

Третье слагаемое – корреляционная энергия (ее определим ниже). Мы ввели безразмерное расстояние между частицами $r_s = \sqrt{\nu/\pi n_{\rm 2D}}$. Волновой вектор Ферми равен $q_F = \sqrt{2\pi n_{\rm 2D}/\nu} = \sqrt{2}/r_s$. Здесь и далее мы пользуемся системой единиц, в которой энергия связи и радиус 2D экситона положены единице: $E_x = 2m\widetilde{e}^4/\hbar^2 = 1$, $a_x = \hbar^2/2m\widetilde{e}^2 = 1$.

Главную проблему при вычислении энергии основного состояния ЭДЖ представляет расчет корреляционной энергии. В простейшем случае однодолинного полупроводника $E_{\rm corr}$ была расчитана в работах [21, 22] по методу Нозьера–Пайнса. Показано, что в отличие от трехмерного случая 2D ЭДЖ оказывается более энергетически выгодной, чем газ экситонов уже в изотропном случае, пр‘ичем основной вклад в $E_{\rm corr}$ дает вклад передаваемых импульсов, больших импульса Ферми.

Расчеты энергии ЭДЖ были недавно проведены в работе [25]. Корреляционная энергия электронного газа в узкощелевых многодолинных и слоистых полупроводниках была рассчитана в работах [26, 27]. Экситоны Ванье–Мотта в гетероструктурах узкощелевых полупроводников рассмотрены в работе [28].

В работе [29] рассмотрена ЭДЖ в двойных квантовых ямах с пространственно разделенными электронами и дырками в многодолинных полупроводниках. Была рассчитана энергия ЭДЖ и ее равновесная плотность при различных расстояниях между слоями электронов и дырок. Методика расчета корреляционной энергии 2D ЭДЖ при пространственном разделении электронов и дырок изложена в работе [30].

3.1. Вычисление корреляционной энергии при конечном числе долин. Корреляционную энергию представим в виде интеграла по передаваемому импульсу [21, 22, 31, 32]

$$E_{\rm corr} = \int\limits_0^\infty I(q)dq. \tag{8}$$

При малых (по сравнению с q_F) q функция $I(q)$ определяется в рамках ПХФ, а при больших q – суммой диаграмм второго порядка по взаимодействию.

Для произвольного значения σ разложение функции $I(q)$ при малых q получается весьма громоздким. Мы приведем здесь ответ для частного случая равных масс электрона и дырки ($\sigma = 1$)

$$I(q) = \begin{cases} -\frac{2\sqrt{2}}{\pi r_s} q + \frac{2^{1/4}}{r_s^{3/2}\nu^{1/2}} q^{3/2} - \frac{\pi+2}{2\pi r_s^2 \nu} q^2 + \\ + \frac{3}{2^{13/4} r_s^{5/2}\nu^{3/2}} q^{5/2} + \frac{r_s^2\nu^2 - 1}{6\pi\sqrt{2} r_s^3 \nu^2} q^3, q \ll 1, \\ -2(4\nu - 1)/q^3, \qquad q \gg 1. \end{cases} \tag{9}$$

В промежуточной области $q_1 \le q \le q_2$ функция $I(q)$ приближается отрезком касательной, как в работах [21, 22]. Интегрируя разложение (9) при $q \ll 1$ от нуля до точки сшивания $q_1 \approx q_0$ (q_0 – точка минимума функции $I(q)$), а асимптотику при $q \gg 1$ – от точки сшивания q_2 до бесконечности. Добавляя вклад в интеграл от промежуточной области $(I(q_1) + I(q_2))\,(q_2 - q_1)/2$, находим

$$\begin{aligned} E_{\rm corr} = &\left(-\frac{\sqrt{2}}{\pi r_s} q_0 + \frac{1}{2^{3/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} q_0^{3/2} - \frac{\pi + 2}{4\pi r_s^2 \nu} q_0^2 \right) q_2 + \\ &+ \left(\frac{3}{2^{17/4} r_s^{5/2} \nu^{3/2}} q_2 - \frac{1}{5 \cdot 2^{3/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} \right) q_0^{5/2} + \\ &+ \left(\frac{r_s^2 \nu^2 - 1}{12\pi\sqrt{2} r_s^3 \nu^2} q_2 + \frac{\pi + 2}{12\pi r_s^2 \nu} \right) q_0^3 - \frac{r_s^2 \nu^2 - 1}{24\pi\sqrt{2} r_s^3 \nu^2} q_0^4 - \\ &- \frac{9}{7 \cdot 2^{17/4} r_s^{5/2} \nu^{3/2}} q_0^{7/2} - \frac{2(4\nu - 1)}{q_2^2} \left(1 - \frac{q_0}{2q_2} \right), \end{aligned} \tag{10}$$

где

$$q_2 = 2 \left(\frac{4\nu - 1}{|I(q_0)|} \right)^{1/3}.$$

Точка q_0 при не слишком больших ν ($\nu \le 3$) и $1 \lesssim r_s \lesssim 2$ находится вблизи 1 ($\widetilde{r}_s = \nu r_s$)

$$q_0 = \frac{9 \cdot 2^{1/4} \widetilde{r}_s^2 - 3\pi \widetilde{r}_s^{3/2} + \frac{15\pi}{2^{7/2}} \widetilde{r}_s^{1/2} - 2^{1/4}}{2^{5/4} \widetilde{r}_s^2 + 3\pi \widetilde{r}_s^{3/2} - 2^{7/4}(\pi + 2)\widetilde{r}_s + \frac{45\pi}{2^{7/2}} \widetilde{r}_s^{1/2} - 2^{5/4}}. \tag{11}$$

Из формулы (10) можно получить оценку снизу для корреляционной энергии при больших ν

$$E_{\rm corr} \gtrsim -4 \left(\frac{6}{\pi} \right)^{1/3} n_{\rm 2D}^{1/3}. \tag{12}$$

Мы учли, что при $\nu \gg 1$ положение минимума функции $I(q)$ существенно отклоняется от 1 ($q_0 \to 2\sqrt{2}$).

Сравнение численных расчетов зависимости корреляционной энергии от числа долин по формуле (10) и с учетом поправок первого и второго порядков по отклонению точки q_1 от точки q_0 приведено на рис. 1 для случая $\sigma = 1$ и $n_{\rm 2D} = 1/\pi$ ($r_s = \sqrt{\nu}$). Примечательно, что учет поправок к $E_{\rm corr}$ почти не меняет результат (красные звездочки и черные точки практически совпадают). При больших ν корреляционная энергия стремится к оценке (12). На этом же рисунке приведен результат численного расчета зависимости энергии основного состояния $E_{\rm gs}$ от ν.

3.2. Вычисление корреляционной энергии в пределе большого числа долин. При $\nu \gg 1$, когда $n_{\rm 2D}$ удовлетворяют неравенствам [20, 21]

$$1 \ll q_F \ll n_{\rm 2D}^{1/4}, \tag{13}$$

корреляционная энергия дается выражением

$$E_{\rm corr} = -\frac{1}{n_{\rm 2D}} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int\limits_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \mathcal{F}(\mathbf{q}, \omega; \lambda), \tag{14}$$

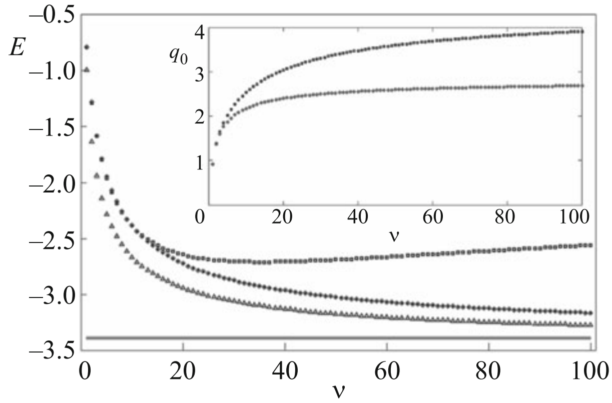

Рис. 1. (Цветной онлайн) Численные расчеты зависимости корреляционной энергии и энергии основного состояния от числа долин: синие квадратики – расчет $E_{\rm corr}$ по формулам (10) – (11); красные звездочки – расчет $E_{\rm corr}$ по формуле (10) с численным решением уравнения на q_0; черные точки – расчет $E_{\rm corr}$ с учетом поправок первого и второго порядков по отклонению точки q_1 от точки q_0 (точка q_0 находилась численно); зеленая горизонтальная прямая внизу соответствует оценке (12); фиолетовые треугольники – расчет $E_{\rm gs}$ по формулам (5) – (7) и (10). На вставке показаны q_0 по формуле (11) (синие квадратики) и численно полученные значения q_0 (красные звездочки), причем $q_0 \to 2\sqrt{2}$ при $\nu \gg 1$

где

$$\mathcal{F}(\mathbf{q},\,\omega;\,\lambda) = \frac{\lambda V(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega)}{1-\lambda V(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega)} - \lambda V(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega),$$

$\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega)$ – поляризационный оператор в нулевом приближении по взаимодействию при больших передаваемых импульсах ($q \gg q_F$) и частотах ($\omega \gg E_F$)

$$\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega) = -2n_{\rm 2D}\sum_{j=e,h}\frac{\varepsilon_j(\mathbf{q})}{\varepsilon_j^2(\mathbf{q})+\omega^2}. \tag{15}$$

Законы дисперсии $\varepsilon_j(\mathbf{q})$ те же, что и в формулах (2).

Выражение (14) легко обезразмеривается заменой переменных $q = (4\pi n_{\rm 2D}\lambda)^{1/3}\xi$, $\omega = (4\pi n_{\rm 2D}\lambda)^{2/3}\zeta$. Корреляционная энергия для произвольного отношения масс электрона и дырки σ выражается как

$$E_{\rm corr} = -A(\sigma)n_{\rm 2D}^{1/3}, \tag{16}$$

где введена функция

$$A(\sigma) = \frac{3}{(4\pi)^{2/3}}\int_0^\infty d\xi\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\xi^3\left(\frac{\eta_e}{\xi^4+\eta_e^2\zeta^2}+\frac{\eta_h}{\xi^4+\eta_h^2\zeta^2}\right)^2}{1+\xi\left[\frac{\eta_e}{\xi^4+\eta_e^2\zeta^2}+\frac{\eta_h}{\xi^4+\eta_h^2\zeta^2}\right]}.$$

Численный расчет функции $A(\sigma)$ представлен на рис. 2. Ее удобно аппроксимировать выражением

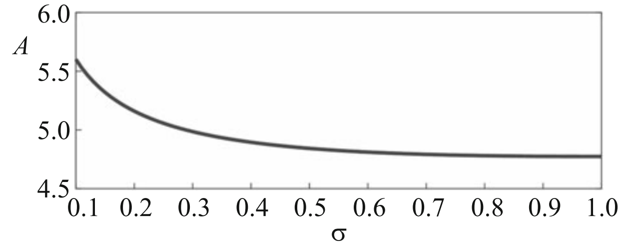

Рис. 2. (Цветной онлайн) Численный расчет $A(\sigma)$

$$A(\sigma) \approx \frac{0.23}{\sigma^{2/3}}e^{-4\sigma} - 0.098\sigma^3 + 0.378\sigma^2 - 0.442\sigma + 4.932.$$

Для $\sigma = 1$ имеем

$$A(1) = \frac{3\cdot 2^{1/3}}{\pi^{1/6}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)\Gamma\left(\frac{5}{6}\right) \approx 4.774,$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера.

Это значение близко к коэффициенту в оценке (12): $4\sqrt[3]{6/\pi} \approx 4.963$. Отметим, что и в пределе $\nu \to \infty$ оценка (12) остается оценкой снизу для $E_{\rm corr}$. Уменьшение константы $A(1)$ по сравнению с коэффициентом в оценке (12) связано с тем, что не полностью учтен вклад малых импульсов и частот при использовании асимптотического выражения (15).

3.3. Вычисление энергии основного состояния с использованием потенциала Келдыша. Средняя кинетическая энергия (6) остается той же. Обменная энергия выразится как ($\rho_0 = r_0 q_F$)

$$E_{\rm exch}^K = -\frac{\sqrt{2}}{\pi r_s}\left[\frac{8}{3} - J(\rho_0)\right], \tag{17}$$

где введена функция

$$J(\rho_0) = \int_0^1 xdx\int_0^1 ydy\int_0^{2\pi}\frac{\rho_0 d\varphi}{1+\rho_0\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}}.$$

При характерных плотностях $n_{\rm 2D} \sim 10^{13} - 10^{14}$ см$^{-2}$ безразмерная величина $\rho_0 \simeq 2 - 9$ для $\nu = 2$. Поэтому представляет интерес численный расчет функции $J(\rho_0)$ в интервале $0 < \rho_0 < 10$. В пределе больших ρ_0 она стремится к $8/3$ (см. рис. 3).

Корреляционную энергию найдем по методу, изложенному в подразделе 3.1. Теперь вместо функции $I(q)$ в интеграле (8) стоит функция

$$\widetilde{I}(q) = \begin{cases} -\frac{2\sqrt{2}}{\pi r_s(1+\rho_0 q)}q + \frac{2^{1/4}}{r_s^{3/2}\nu^{1/2}\sqrt{1+\rho_0 q}}q^{3/2} - \\ -\frac{\pi+2}{2\pi r_s^2\nu}q^2 + \frac{3\sqrt{1+\rho_0 q}}{2^{13/4}r_s^{5/2}\nu^{3/2}}q^{5/2} + \\ +\frac{r_s^2\nu^2-1}{6\pi\sqrt{2}r_s^3\nu^2(1+\rho_0 q)}q^3, & q \ll 1, \\ -\frac{2(4\nu-1)}{q^3(1+\rho_0 q)^2}, & q \gg 1. \end{cases} \tag{18}$$

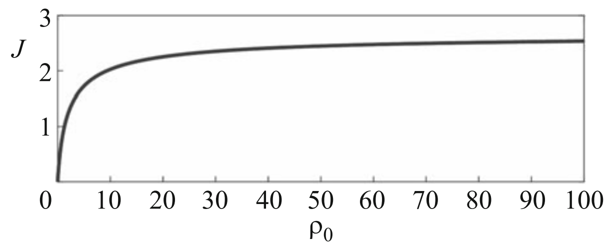

Рис. 3. (Цветной онлайн) Численный расчет $J(\rho_0)$

В промежуточной области волновых векторов q функция $\widetilde{I}(q)$ также приближается отрезком прямой. Интегрируя $\widetilde{I}(q)$ по q, получаем выражение для корреляционной энергии $E^K_{\rm corr}$. Оно весьма длинное и ради краткости мы его не приводим. Однако отметим, что при больших ν, когда можно считать $\rho_0 q_1 \ll 1$ и $\rho_0 q_2 \ll 1$ (q_1 и q_2 – точки сшивания, причем $q_1 \approx q_0$, q_0 – точка минимума функции $\widetilde{I}(q)$), это выражение может быть разложено по степеням ρ_0 как

$$E^K_{\rm corr} = E_{\rm corr} + \delta E^K_{\rm corr}, \qquad (19)$$

где $E_{\rm corr}$ дается выражением (10), а поправка $\delta E^K_{\rm corr}$ в линейном приближении по ρ_0 равна

$$\delta E^K_{\rm corr} = \rho_0 \left[-\frac{\sqrt{2}}{3\pi r_s} q_0^3 + \frac{3}{7 \cdot 2^{7/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} q_0^{7/2} + \right.$$
$$\left. + \frac{2(4\nu - 1)}{q_2} \left(3 - \frac{q_0}{q_2} \right) + \left(\frac{\sqrt{2}}{\pi r_s} - \frac{\sqrt{q_0}}{2^{7/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} \right) q_0^2 q_2 \right].$$

4. Равновесные плотность и энергия ЭДЖ. Равновесная плотность ЭДЖ $n_{\rm EHL}$ находится как положение минимума энергии основного состояния. Подставляя в (5) корреляционную энергию для системы с многими долинами (16) и дифференцируя по $n_{\rm 2D}$, получаем уравнение на $n_{\rm EHL}$

$$\left.\frac{\partial E_{\rm gs}}{\partial n_{\rm 2D}}\right|_{n_{\rm EHL}} = \frac{\pi}{\nu} - \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi\nu}} n_{\rm EHL}^{-1/2} - \frac{1}{3} A(\sigma) n_{\rm EHL}^{-2/3} = 0. \qquad (20)$$

Чтобы решить уравнение (20), заметим, что для $\nu \gg 1$ обменная энергия (7) по модулю существенно меньше, чем кинетическая и корреляционная (по модулю) энергии. Поэтому сначала можно пренебречь вторым слагаемым в (20), а затем найти поправку к равновесной плотности на обменную энергию:

$$n_{\rm EHL} = \left(1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/4} \nu^{1/4} A^{3/4}} \right) \left(\frac{\nu A}{3\pi} \right)^{3/2}, \qquad (21)$$

$$E_{\rm EHL} = -\frac{2}{3} \left(\frac{\nu}{3\pi} \right)^{1/2} A^{3/2} - \frac{2^{7/2} \nu^{1/4}}{3^{7/4} \pi^{5/4}} A^{3/4}. \qquad (22)$$

Перспективными на наш взгляд являются многослойные многодолинные системы (число слоев l, расстояние между слоями c). Если $d = lc \lesssim a_x$, то можно пренебречь вторым слагаемым в знаменателе (3). В этом случае можно использовать формулу (4). Эффективная многодолинность $\nu_{\rm eff} = l\nu$ существенно возрастает.

Сравнение расчетов равновесных плотности и энергии ЭДЖ в зависимости от отношения масс электрона и дырки с использованием формулы для корреляционной энергии (10) или (16) для системы с 10 разделенными монослоями ДПМ ($\nu_{\rm eff} = 20$) приведено на рис. 4.

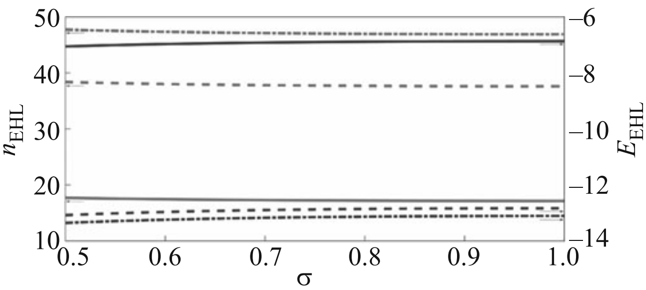

Рис. 4. (Цветной онлайн) Результаты расчетов $n_{\rm EHL}$ (выделено красным цветом) и $E_{\rm EHL}$ (выделено синим цветом) в 10-слойной системе с использованием формулы (10) (непрерывные линии) или (16) (пунктирные линии – с аналитическими зависимостями (21) и (22), штрих-пунктирные линии – с численным решением уравнения (20))

5. Сравнение результатов расчетов с экспериментом. Сравним результаты вычислений по формулам (5)–(7) и (10) с экспериментальными значениями $n_{\rm EHL}$, $|E_{\rm EHL}|$ и T_c для монослойной пленки MoS_2 [18]. С хорошей точностью можно положить $m_e \approx m_h$ [33]. Если $\nu = 2$, то $|E_{\rm EHL}| = 700$ мэВ, $n_{\rm EHL} = 10^{14}$ см$^{-2}$ и $T_c \simeq 800$ К. Экспериментальные значения: $|E_{\rm EHL}| = 480$ мэВ, $n_{\rm EHL} = 4 \cdot 10^{13}$ см$^{-2}$ и $T_c \simeq 500$ К [18]. Мы считаем, что возможны два объяснения этого расхождения.

Первое объяснение: число долин уменьшается. Возникающие в монослойной пленке напряжения могут привести к снятию вырождения долин [16, 17]. Кроме того, снятие спинового вырождения носителей заряда также равносильно уменьшению числа долин вдвое. Это возможно вследствие большого спин-орбитального расщепления валентной зоны $\Delta_{vb} \approx 148$ мэВ [25]. Для $\nu = 1$ мы получаем хорошее согласие с экспериментом: $|E_{\rm EHL}| = 450$ мэВ, $n_{\rm EHL} = 3.3 \cdot 10^{13}$ см$^{-2}$ и $T_c = 520$ К.

Второе объяснение: необходимо использовать потенциал Келдыша, который содержит подгоночный параметр r_0. При $r_0 = 0.7$ Å и $\nu = 2$ обеспечивается наилучшее согласие расчетного значения энергии ЭДЖ $|E_{\mathrm{EHL}}| = 480$ мэВ с экспериментальным значением, однако при этом мы получаем завышенное значение $n_{\mathrm{EHL}} = 5.4 \cdot 10^{13}\,\text{см}^{-2}$.

При количественном описании положения экситонных линий в спектре фотолюминесценции монослоя MoS_2 $r_0 = 41.47$ Å [34]. Большое отличие в r_0 определяется тем, что при расчете экситона и ЭДЖ учитываются существенно различные диаграммы – лестничные и петлевые, соответственно.

Мы склоняемся в пользу первого объяснения.

6. Заключение. В данной работе получены аналитические и численные результаты для энергии связи ЭДЖ и ее равновесной плотности в 2D системах с монослоями ДПМ при произвольном числе долин.

Нами также проведен расчет характеристик ЭДЖ с использованием потенциала Келдыша. Оказалось, что использование только одного параметра r_0 не позволяет одновременно согласовать энергию связи ЭДЖ и ее равновесную плотность с экспериментальными результатами. Это обстоятельство указывает на сильную ограниченность применимости потенциала Келдыша в этих расчетах.

Отличие теоретических результатов от экспериментальных связано с недостаточной точностью используемых параметров монослойных гетероструктур и использованием в качестве единиц экспериментальных значений E_x и a_x, а также возможной неоднородностью образца.

П. В. Ратников благодарит за финансовую поддержку Фонд развития теоретической физики и математики "БАЗИС", грант # 17-14-440-1 (в части общей формулировки задачи) и Российский научный фонд, грант # 16-12-10538-П (в части вычисления корреляционной энергии, раздел 3).

1. П. В. Ратников, А. П. Силин, УФН **188**, 1249 (2018).
2. P. Miró, M. Audiffred, and T. Heine, Chem. Soc. Rev. **43**, 6537 (2014).
3. A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature **499**, 419 (2013).
4. Л. Н. Булаевский, УФН **116**, 449 (1975).
5. Л. Н. Булаевский, УФН **120**, 259 (1976).
6. М. В. Дурнев, М. М. Глазов, УФН **188**, 913 (2018).
7. J. A. Wilson and A. D. Yoffe, Adv. Phys. **18**, 193 (1969).
8. В. Л. Калихман, Я. С. Уманский, УФН **108**, 503 (1972).
9. А. П. Силин, ФТТ **20**, 3436 (1978).
10. Л. А. Чернозатонский, А. А. Артюх, УФН **188**, 3 (2018).
11. Yiling Yu, Yifei Yu, Y. Cai, W. Li, A. Gurarslan, H. Peelaers, D. E. Aspnes, Ch. G. van de Walle, Nh. V. Nguyen, Y.-W. Zhang, and L. Cao, Sci. Rep. **5**, 16996 (2016).
12. Е. А. Андрюшин, Л. В. Келдыш, А. П. Силин, ЖЭТФ **73**, 1163 (1977).
13. Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, *Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках*, Мир, М. (1980).
14. *Электронно-дырочные капли в полупроводниках*, ред. К. Д. Джеффрис, Л. В. Келдыш, Наука, М. (1988).
15. С. Г. Тиходеев, УФН **145**, 3 (1985).
16. Н. Н. Сибельдин, ЖЭТФ **149**, 678 (2016).
17. Н. Н. Сибельдин, УФН **187**, 1236 (2017).
18. Y. Yu, A. W. Bataller, R. Younts, Y. Yu, G. Li, A. A. Puretzky, D. B. Geohegan, K. Gundogdu, and L. Cao, ACS Nano **13**, 10351 (2019).
19. Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, ФТТ **21**, 839 (1979).
20. Е. А. Андрюшин, В. С. Бабиченко, Л. В. Келдыш, Т. А. Онищенко, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ **24**, 210 (1976).
21. Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, ФТТ **18**, 2130 (1976).
22. E. A. Andryushin and A. P. Silin, Solid State Comm. **20**, 453 (1976).
23. Н. С. Рытова, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3, Физ. Астрон. **3**, 30 (1967).
24. Л. В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ **29**, 716 (1979).
25. A. Rustagi and A. F. Kemper, Nano Lett. **18**, 455 (2018).
26. Л. Е. Печеник, А. П. Силин, КСФ **5–6**, 72 (1996).
27. Е. А. Андрюшин, Л. Е. Печеник, А. П. Силин, КСФ **7–8**, 68 (1996).
28. А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **42**, 25 (2000).
29. В. С. Бабиченко, И. Я. Полищук, Письма в ЖЭТФ **97**, 726 (2013).
30. А. П. Силин, КСФ **5**, 30 (1983).
31. M. Combescot and P. Nozières, J. Phys. C **5**, 2369 (1972).
32. Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, ФТТ **19**, 1405 (1977).
33. T. Eknapakul, P. D. C. King, M. Asakawa, P. Buaphet, R.-H. He, S.-K. Mo, H. Takagi, K. M. Shen, F. Baumberger, T. Sasagawa, S. Jungthawan, and W. Meevasana, Nano Lett. **14**, 1312 (2014).
34. T. C. Berkelbach, M. S. Hybertsen, and D. R. Reichman, Phys. Rev. B **88**, 045318 (2013).

Pis'ma v ZhETF, vol. 111, iss. 2, pp. 86 – 87

Metamorphoses of electron systems hosting a fermion condensate

V. A. Khodel[+*1)], *J. W. Clark*[*×], *M. V. Zverev*[+○]

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

[*]*McDonnell Center for the Space Sciences & Department of Physics, Washington University, St. Louis, MO 63130, USA*

[×]*Centro de Investigação em Matema'tica e Aplicações, University of Madeira, 9020-105 Funchal, Madeira, Portugal*

[○]*Moscow Institute of Physics and Technology, 141700 Dolgoprudny, Russia*

Submitted 31 October 2019
Resubmitted 3 December 2019
Accepted 4 December 2019

DOI: 10.31857/S0370274X2002006X

We present a theory of interaction-induced flat bands, emergent in strongly correlated electron systems beyond a critical point, at which the topological stability of the Landau state breaks down, and apply this theory to analysis of phenomena that, seemingly, have little in common, including: (i) a specific metal-insulator transition with formation of the so-called quantum electron solid state in two-dimensional electron liquid, residing in MOSFETs and SiGe/Si/SiGe quantum wells, (ii) a second-order high-temperature superconducting phase transition in copper oxides, whose critical temperature T_c turns out to be proportional to the Fermi energy $T_F = p_F^2/2m_e$ and (iii) non-Fermi-liquid low-temperature chaotic-like behavior of many strongly correlated electron systems, documented in experimental studies of their resistivity $\rho(T)$ for two last decades. We propose that both these transitions are triggered by a *spontaneous* topological rearrangement of the conventional Landau state that consists in formation of a so-called *fermion condensate* (FC) [1–3], an interaction-induced flat portion $\epsilon(\mathbf{p}) = 0$ of the single-particle spectrum $\epsilon(\mathbf{p})$. The analogy with a boson condensate (BC) is evident from the respective densities of states $\rho_{\rm FC}(\varepsilon) = n_{\rm FC}\delta(\varepsilon)$ and $\rho_{\rm BC}(\varepsilon) = n_{\rm BC}\delta(\varepsilon)$, where $n_{\rm FC}$ and $n_{\rm BC}$ denote the fermion and boson condensate densities. A distinctive feature of electron systems, harboring such flat bands, is the presence of a finite *classical-like* entropy excess $S_0 = S(T = 0) \propto n_{\rm FC}$ obtained upon substituting a zero-temperature FC momentum distribution $0 < n_*(\mathbf{p}) < 1$ into the textbook Landau formula.

The original model of fermion condensation was introduced and analyzed in [1–3] more than 25 years ago. With further theoretical development, evidence for its essential role in coherent explanation of diverse non-Fermi-liquid behavior across a broad range of strongly correlated Fermi systems at low temperatures, has since been presented in numerous works, notably [1–10]. A significant advance toward a self-consistent theory of fermion condensation has been made in microscopic calculations based on a Hubbard model, performed in [11, 12] using well-established renormalization-group methods. In addition, the original FC formalism was recently updated [13] to properly account for interactions between the FC and normal quasiparticles that has made it possible to explain the topological nature of the metal-insulator transition in two-dimensional high-mobility electron systems of SiGe/Si/SiGe quantum wells [14–16].

The recent "second wind" of the original FC scenario has received specific impetus from the rapid progress in experimental (e.g., see [17–20]) and theoretical [21, 22] studies of doped monolayer graphene and, especially, twisted bilayer graphene, where flattening of the single-particle spectrum $\epsilon(\mathbf{p})$ can be *engineered*. In particular, in a recent experimental paper [23], the manifestation of interaction-induced flat bands in the electron system of monolayer graphene has been documented for the first time. It is also expected [24, 25] that the dispersionless FC spectrum with singular density of states is the trigger for possible granular room-temperature superconductivity in highly oriented pyrolitic graphite [26, 27] (and references therein).

In dealing with 2D strongly correlated low-density homogeneous electron liquid of MOSFETs we focus on a specific metal-insulator transition uncovered long ago in [28, 29], the nature of which remains unexplained yet. We demonstrate that proper accounting for interactions between normal quasiparticles and the FC, emergent at densities n, lower than the critical density n_t, at which the topological stability of the original Landau state breaks down, results in formation of a specific non-BCS gap $\Upsilon(\mathbf{p})$ in the single-particle spectrum, whose magnitude changes linearly with variation of the difference $n_t - n$. It is such a behavior of the activation energy that has been uncovered in measurements of the electrical resistivity of MOSFETs just in this density region [15] that reveals the topological nature

1)e-mail: vak@wuphys.wustl.edu

of this transition. Since none of Pomeranchuk stability conditions breaks down, homogeneity of systems under consideration *persists*, in agreement with the structure of the so-called quantum-electron-solid state uncovered in [14–16]. One might expect that these behaviors, revealed in MOSFETs, will be verified experimentally for SiGe/Si/SiGe quantum wells in near future.

Turning to high-T_c superconductors, the two-gap structure (Δ, Υ) of their single-particle spectra has been discussed. The gap Δ associated with Cooper pairing is distinguished by a non-BCS *linear* relation between the critical temperature T_c and Fermi energy T_F. Comparison of theoretical results with available ARPES data [30] demonstrates that our theory properly describes the angular structure of both the gaps $\Delta(\mathbf{p})$ and $\Upsilon(\mathbf{p})$. Moreover, it properly explains the interplay between the two gaps on different sides of the $T-x$ phase diagram of cuprates, including emergence of an optimal doping x_o at which the BCS critical temperature $T_c(x)$ reaches maximum.

A linear in temperature T behavior of the normal-state resistivity $\rho(T)$ of high-T_c superconductors, uncovered more than 20 years ago and still defying theoretical explanation, is attributed to scattering of light carriers by the FC. Because the properties of superconducting states of systems having a FC are unambiguously related to those of normal states, it is not surprising that such seemingly antagonistic characteristics as the critical temperature $T_c(x)$ and the coefficient $A_1(x)$ specifying the linear-in-T part of the normal-state resistivity $\rho(T)$, show similar behavior, as experiment demonstrates [31].

It is worth stressing that exhibitions of quantum chaos, discussed in our article, have the topological nature, associated with the respective spontaneous rearrangement of the Landau state. This is quite in contrast to a model [32] in which, despite something in common with the scenario of fermion condensation [33], the chaotic element is introduced *deliberately* in terms of the respective distribution of interaction matrix elements.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020020010

1. V. A. Khodel and V. R. Shaginyan, JETP Lett. **51**, 553 (1990).
2. G. E. Volovik, JETP Lett. **53**, 222 (1991).
3. P. Nozières, J. Phys. I France **2**, 443 (1992).
4. G. E. Volovik, Springer Lecture Notes in Physics **718**, 31 (2007).
5. V. A. Khodel, V. R. Shaginyan, and V. V. Khodel, Phys. Rep. **249**(1), 86 (1994).
6. V. A. Khodel, J. W. Clark, and M. V. Zverev, Phys. Rev. B **78**, 075120 (2008).
7. V. R. Shaginyan, A. Z. Msezane, K. G. Popov, J. W. Clark, M. V. Zverev, and V. A. Khodel, Phys. Rev. B **86**, 085147 (2012).
8. G. E. Volovik, JETP Lett. **59**, 830 (1994).
9. M. Ya. Amusia, K. G. Popov, V. R. Shaginyan, and V. A. Stephanovich, *Theory of Heavy-fermion Compounds*, Springer, Berlin, Germany (2014).
10. G. E. Volovik, JETP Lett. **107**, 516 (2018).
11. V. Yu. Irkhin, A. A. Katanin, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. Lett. **89**, 076401 (2002).
12. D. Yudin, D. Hirschmeier, H. Hafermann, O. Eriksson, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. Lett. **112**, 070403 (2014).
13. V. A. Khodel, J. Low Temp. Phys. **191**, 14 (2018).
14. P. Brussarski, S. Li, S. V. Kravchenko, A. A. Shashkin, and M. P. Sarachik, Nat. Commun. **9**, 3803 (2018).
15. M. Yu. Mel'nikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgopolov, Amy Y. X. Zhu, S. V. Kravchenko, S.-H. Huang, and C. W. Liu, Phys. Rev. B **99**, 081106 (R) (2019).
16. A. A. Shashkin and S. V. Kravchenko, Appl. Sci. **9**, 1169 (2019).
17. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 80 (2018).
18. M. Yankovitz, S. Chen, H. Polshyn, Y. Zhang, K. Watanabe, T. Taniguchi, D. Graf, A. F. Young, and C. R. Dean, Science **363**, 1059 (2019).
19. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigord, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthil, and P. Jarillo-Herrero, arXiv:1901.03710.
20. S. L. Tomarken, Y. Cao, A. Demir, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, and R. C. Ashoori, Phys. Rev. Lett. **123**, 046601 (2019).
21. V. Y. Irkhin and Y. N. Skryabin, JETP Lett. **107**, 651 (2018).
22. T. J. Peltonen, R. Ojärvi, and T. T. Heikkilä, Phys. Rev. B **98**, 220504(R) (2018).
23. S. Link, S. Forti, A. Stöhr, K. Küuster, M. Rösner, D. Hirschmeier, C. Chen, J. Avila, M. C. Asensio, A. A. Zakharov, T. O. Wehling, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, and U. Starke, Phys. Rev. B **100** 121407(R) (2019).
24. P. Esquinazi, JETP Lett. **100**, 336 (2014).
25. G. E. Volovik, JETP Lett. **107**, 516 (2018).
26. Y. Kopelevich, V. V. Lemanov, S. Moehlecke, and J. H. S. Torres, Phys. Solid State **41**, 2135 (1999).
27. T. Scheike, P. Esquinazi, A. Setzer, and W. Böhlmann, Carbon **59**, 140 (2013).
28. T. N. Zavaritskaya and E. I. Zavaritskaya, JETP Lett. **45**, 609 (1987).
29. S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio, Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994).
30. A. Kaminski, T. Kondo, T. Takeuchi, and G. Gu, Philos. Mag. **95**, 453 (2015).
31. R. A. Cooper, Y. Wang, B. Vignolle, O. J. Lipscombe, S. M. Hayden, Y. Tanabe, T. Adachi, Y. Koike, M. Nohara, H. Takagi, C. Proust, and N. E. Hussey, Science **323**, 603 (2009).
32. A. A. Patel and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **123**, 066601 (2019).
33. G. E. Volovik, JETP Lett. **110**, 352 (2019).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 88 – 92 © 2020 г. 25 января

Универсальный сценарий узкого горла в тепловой релаксации разупорядоченных металлических пленок

Э. М. Баева[+*], Н. А. Титова[*], А. И. Кардакова[*×], С. В. Петруша[+], В. С. Храпай[+*1)]

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

[*]Московский педагогический государственный университет, 119435, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 27 ноября 2019 г.
После переработки 4 декабря 2019 г.
Принята к публикации 4 декабря 2019 г.

В данной работе представлены результаты исследования тепловой релаксации в металлических пленках, смещенных по току и характеризующихся сильной электрон-фононной связью. В работе предсказано возникновение градиента тепла в направлении, перпендикулярном к пленке, с пространственным профилем температуры, определяемым зависящей от температуры теплопроводностью. В случае сильного электрон-фононного рассеяния теплопроводность определяется электронной системой, а профиль температуры является параболическим. Этот режим приводит к линейной зависимости шумовой температуры как функции напряжения, несмотря на то, что все размеры пленки велики по сравнению с длиной электрон-фононной релаксации. Данный режим отличается от общепринятого сценария тепловой релаксации, где тепловое ограничение обусловлено скоростью рассеяния электронов на фононах. Предварительное экспериментальное исследование NbN пленки толщиной 200 нм указывает на актуальность нашей модели для материалов, используемых в сверхпроводниковых однофотонных детекторах.

DOI: 10.31857/S0370274X20020071

1. Введение. Кинетика процессов энергетической релаксации определяет временные характеристики детекторов излучения на основе тонких металлических пленок при низких температурах [1–6]. Согласно передовым теоретическим моделям [5, 7], внутренняя эффективность детектирования сверхпроводниковых однофотонных детекторов (Superconducting Nanowire Single Photon Detectors – SNSPDs) критически зависит от масштабов времени электрон-фононной релаксации $\tau_{\text{e-ph}}$ и времени ухода фонона в подложку τ_{esc}. Качественно, $\tau_{\text{e-ph}}$ наряду с коэффициентом диффузии электронов, определяет характерный размер горячего пятна, которое возникает при поглощении фотона, тогда как τ_{esc}, если оно достаточно длинное, может ограничить по времени последующую релаксацию горячего пятна [8–10]. Кроме того, важным параметром также является соотношение электронной и фононной теплоемкостей, $C_{\text{e}}/C_{\text{ph}}$, которое определяет долю энергии фотона, поступающей в электронную систему [7, 11].

Сопоставление некоторых микроскопических временных масштабов и времени релаксации, которое может быть исследовано в экспериментах по амплитудно- модулированному поглощению излучения [12–15], не всегда является простой задачей. Для интерпретации результатов, полученных в таких экспериментах, используются модели энергетического баланса различной сложности. В некоторых случаях, требуется включение в модель определенного "узкого горла" в релаксации [14, 15], которое может объяснить времена релаксации, намного превышающие $\tau_{\text{e-ph}}$, несмотря на подобную температурную зависимость. Вместе с тем проблема еще более нетривиальна, поскольку для материалов, подходящих для SNSPD, обычно характерно $C_{\text{e}}/C_{\text{ph}} \gtrsim 1$ вблизи температуры сверхпроводящего перехода [7]. В уравнении теплового баланса это соответствует условию $\tau_{\text{e-ph}} \gtrsim \tau_{\text{ph-e}}$, где $\tau_{\text{ph-e}}$ – время поглощения фононов электронами. Последнее неравенство, по сути, является условием режима сильной связи электронной и фононной подсистем, которая проявляется в локальном тепловом равновесии между ними, когда $\tau_{\text{esc}} \gg \tau_{\text{ph-e}}$. В этом режиме следует ожидать, что времена $\tau_{\text{e-ph}}$ и $\tau_{\text{ph-e}}$ не будут индивидуально управлять процессом релаксации.

В этой статье мы сосредоточимся на тепловом транспорте в неупорядоченной металлической плен-

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

ке, смещенной по току, которая находится в режиме сильной связи электронов и фононов. Мы исследуем предел толстой пленки, в котором длина свободного пробега как электронов, так и фононов мала по сравнению с толщиной пленки. В этом случае из-за ухода тепла в подложку устанавливается температурный градиент поперек пленки с пространственным профилем температуры, который определяется температурной зависимостью теплопроводности $\kappa(T)$. Примечательно, что в ситуации, когда доминирует электронный вклад в теплопроводность, пространственный профиль является параболическим и нечувствительным к параметрам электрон-фононной релаксации. Здесь мы предсказываем ненулевой дробовой шум пленки с Фано- фактором $F = \sqrt{3}/2(d/l)$, который определяется исключительно соотношением толщины пленки d и длины образца l. Такое универсальное выражение подчеркивает тот факт, что узкое место в тепловой релаксации обусловлено теплопроводностью Видемана–Франца в направлении поперек пленки, при этом электрон-фононные параметры из релаксации выпадают. Наши предварительные измерения в нормальном состоянии разупорядоченной пленки NbN толщиной 200 нм согласуются с этим результатом.

Рассматривается типичный эксперимент с релаксацией тепла в металлической пленке на подложке. Электрический ток I протекает через пленку толщиной d, длиной $l \gg d$, шириной $w \gg d$ и проводимостью σ (см. рис. 1). Распределение тока предполагается равномерным по сечению пленки, так что плотность тока равна $j = I/(wd)$. Для эксперимента важно чтобы длина образца намного превышала длину электрон-фононной релаксации $l_{\text{e-ph}} \ll l$, таким образом мы рассчитываем теплоотдачу, которая происходит полностью благодаря фононной проводимости в подложку. Мы также рассматриваем случай сильносвязанных электронной и фононной подсистем, который позволяет определить единственную локальную равновесную температуру T. Это предположение требует, чтобы толщина пленки была намного больше, чем длина электрон-фононной и фонон-электронной релаксаций $l_{\text{e-ph}}$, $l_{\text{ph-e}} \ll d$. Таким образом, мы пренебрегаем градентом T в плоскости и допускаем, что температура является функцией поперечной координаты x (см. оси на рис. 1). Отметим, что градиент температуры между верхней и нижней поверхностями пленки не рассматривается в большинстве исследований по тепловому транспорту, поскольку электрон-фононное взаимодействие или теплосопротивление на границе раздела пленка-подложка

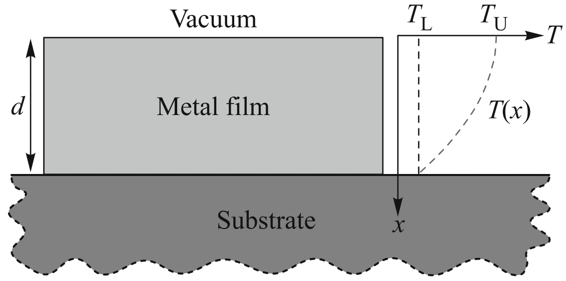

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическое изображение экспериментальной модели, обсуждаемой в статье. Проводящая пленка толщиной d расположена на подложке и равномерно нагревается за счет джоулева тепла. Тепловая релаксация за счет теплопроводности к подложке приводит к градиенту температуры поперек пленки вдоль направления x. Оси демонстрируют параболический температурный профиль $T(x)$ для случая электронной теплопроводности согласно закону Видемана–Франца. (T_U) и (T_L) – температуры на верхней и нижней поверхностях пленки, соответственно

считаются главными процессами, ограничивающими теплоотдачу [14].

Уравнение теплового баланса:

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial}{\partial x}T\right) = \sigma^{-1}j^2, \tag{1}$$

связывает релаксацию джоулева тепла $\sigma^{-1}j^2$ с суммарной теплопроводностью $\kappa = \kappa_\mathrm{e} + \kappa_\mathrm{ph}$. Очевидно, что уравнение (1) подразумевает поперечный градиент температуры с пространственным профилем, определяемым функциональной зависимостью $\kappa(T)$. Ниже мы сконцентрируемся на частном случае с пренебрежимо малой фононной теплопроводностью κ_ph, который мог бы реализовываться в сильно разупорядоченных металлических пленках. По аналогии с аморфными материалами [16], мы ожидаем, что κ_ph уменьшается при повышении температуры вследствие рассеяния Рэлея, что приводит к быстрому затуханию длины свободного пробега акустического фонона $l_\mathrm{ph} \propto \omega^{-4}$ как функции его частоты ω. Поскольку электронная теплопроводность определяется законом Видемана–Франца $\kappa_\mathrm{e} = \mathcal{L}T\sigma$, где $\mathcal{L} = \pi^2 k_B^2/3e^2$ – число Лоренца, это приводит к стандартному решению с параболическим профилем для $T(x)$ [17]:

$$T^2(x) = T_\mathrm{L}^2 + \left(T_\mathrm{U}^2 - T_\mathrm{L}^2\right)\left(1 - \frac{x^2}{d^2}\right), \tag{2}$$

где температуры на верхней и нижней поверхностях пленки обозначены как $T_\mathrm{U} \equiv T(x=0)$ и $T_\mathrm{L} \equiv T(x = d)$, соответственно. Отметим, что в данном случае мы учли граничное условие нулевого теплового потока на верхней поверхности, которая предполагается помещенной в вакуум, см. рис. 1.

Подстановка решения (2) в уравнение (1) приводит к соотношению:

$$T_{\mathrm{U}}^2 - T_{\mathrm{L}}^2 = \frac{j^2 d^2}{\mathcal{L}\sigma^2}. \tag{3}$$

Это решение удовлетворяет второму граничному условию для теплового потока на нижней поверхности, а именно, что плотность теплового потока совпадает с джоулевым теплом, рассеиваемым на единицу площади пленки.

В качестве следующего шага мы предполагаем, что выход фонона в объем подложки обеспечивает эффективный путь тепловой релаксации в тонком ($\sim l_{\text{ph-e}}$) слое вблизи нижней поверхности пленки, так что $T_{\mathrm{L}} \approx T_{\mathrm{bath}}$. Следовательно, рассматривая случай сильного нагрева $T_{\mathrm{U}} \gg T_{\mathrm{bath}}$, мы получаем решение $T_{\mathrm{U}} = jd/\sigma\mathcal{L}^{1/2}$.

Линейная зависимость $T_{\mathrm{U}} \propto I$ напоминает поведение дробового шума в металлических диффузионных проводниках в отсутствие электрон-фононной релаксации [17, 18]. Такое же качественное поведение имеет место для шумовой температуры T_{N} всего образца. T_{N} определяется как средняя температура, связанная с локальным джоулевом нагревом [19], что в данном случае соответствует простому пространственному усреднению:

$$T_{\mathrm{N}} = d^{-1}\int T(x)dx \approx \frac{\sqrt{3}}{4}\frac{ejd}{k_{\mathrm{B}}\sigma} = \frac{\sqrt{3}}{4}\frac{d}{l}\frac{eV}{k_{\mathrm{B}}}, \tag{4}$$

где $V = lI/dw\sigma$ – приложенное к образцу напряжение смещения. При сравнении результата (4) с классическим решением для металлического диффузионного проводника, охлаждаемого за счет электронной теплопроводности через контакты [17, 18], $T_{\mathrm{N}} = \sqrt{3}eV/8k_{\mathrm{B}}$, можно увидеть, что сильная электрон-фононная связь приводит к резкому уменьшению шумовой температуры на геометрический фактор $l/2d \gg 1$. Примечательно, что хотя в последнем случае ожидается подавление дробового шума [20], линейная зависимость $T_{\mathrm{N}} \propto V$ в пределе $l, d, w \gg l_{\text{e-ph}}$ необычна и указывает на узкое горло в теплоотдаче, которая осуществляется за счет теплопроводности Видемана–Франца поперек пленки. Наконец, мы даем строгое выражение для T_{N}, справедливое для произвольного отношения между T_{U} и T_{L} и полученное путем интегрирования (2):

$$T_{\mathrm{N}} = \frac{1}{2}\left(T_{\mathrm{L}} + \frac{T_{\mathrm{U}}^2}{\sqrt{T_{\mathrm{U}}^2 - T_{\mathrm{L}}^2}}\arccos\frac{T_{\mathrm{L}}}{T_{\mathrm{U}}}\right). \tag{5}$$

В дальнейшем мы сконцентрируемся на предварительном экспериментальном исследовании тепловой релаксации в разупорядоченной пленке NbN толщиной 200 нм. Такой выбор материала естествен для целей достижения режима сильной электрон-фононной связи. Гораздо более тонкие пленки NbN аналогичного качества обычно используются в SNSPDs [11, 21] и характеризуются временами $\tau_{\text{e-ph}} \sim \tau_{\text{ph-e}} \sim 10$ пс вблизи температуры сверхпроводящего перехода $T \approx 10$ К. Это, в свою очередь, хорошо соответствует вышеуказанному критерию: $l_{\text{e-ph}}$, $l_{\text{ph-e}} \ll d$. Ситуация с фононной теплопроводностью более неоднозначна [14], однако мы ожидаем, что рэлеевское рассеяние акустических фононов станет ограничивающим фактором в этом сильно разупорядоченном материале, по крайней мере, при более высоких температурах.

Пленка NbN напылена на подложку SiO_2-Si при комнатной температуре из чистой ниобиевой мишени 99.9999 % с использованием магнетронной системы напыления. Предварительный вакуум в камере составлял $7 \cdot 10^{-7}$ Торр. Осаждение происходило в режиме стабилизации по мощности при установленном значении 200 Вт, а соотношение газовой смеси составляло Ar:N_2 = 40 : 7. Таким образом, была получена сильно разупорядоченная пленка NbN с удельным сопротивлением при комнатной температуре около 800 мкОм $\cdot$ см, измеренным методом ван дер Пау. Пленка NbN была дополнительно структурирована в мостик шириной $w = 0.99$ мкм и длиной $l = 27.5$ мкм. До формирования мостика были изготовлены металлические контакты Ti/Au(5 нм/200 нм) методом взрывной литографии. Затем на образце была сформирована защитная алюминиевая маска толщиной 250 нм с использованием электронно-лучевой литографии и электронно-лучевого испарения. После этого пленка травилась в смеси газов Ar и SF_6 с последующим удалением маски в растворе KOH.

Экспериментальная установка для шумовой термометрии была собрана в ^{4}He откачной вставке с резонансной схемой на частоте 40 МГц на входе высокоимпедансного малошумящего усилителя, который находится в парах ^{4}He (с усилением ≈ 6 дБ и шумом входного тока усилителя $\approx 3 \times 10^{-27}$ А^2/Гц). Сигнал дополнительно усиливается цепочкой малошумящих усилителей при $T = 300$ К, фильтруется и измеряется с помощью детектора мощности (подробности о методике измерения дробового шума см. в дополнительном материале [22] и в недавнем обзоре [23]).

В данном эксперименте к NbN образцу прикладывается напряжение, которое приводит к джоулеву нагреву электронной подсистемы и последующему увеличению флуктуаций тока. Шумовая температура $T_{\rm N}$ определяется из соотношения Джонсона–Найквиста $S_{\rm I} = 4k_{\rm B}T_{\rm N}/R$.

На панели рис. 2a изображена зависимость сопротивления образца от температуры. Переход в

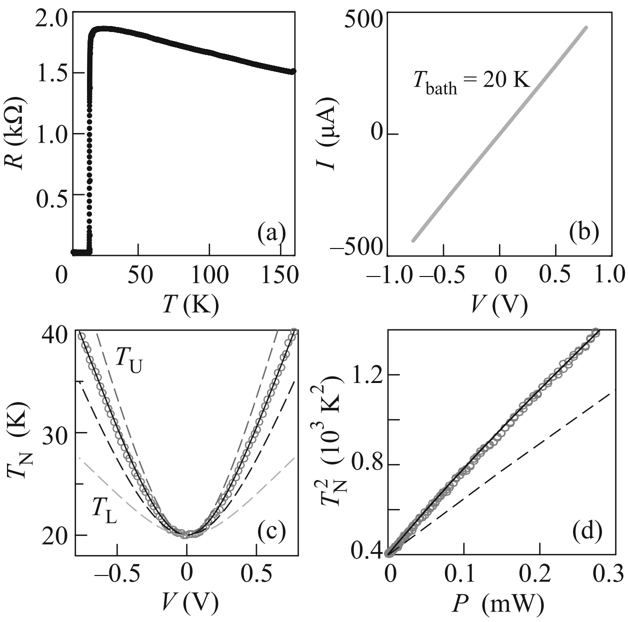

Рис. 2. (Цветной онлайн) Экспериментальные данные для образца NbN толщиной 200 нм. Образец переходит в сверхпроводящее состояние при 16 K, (a) ширина сверхпроводящего перехода составляет около 2 K. (b) – Вольт-амперная характеристика образца в нормальном состоянии при $T_b = 20$ K. (c) – Шумовая температура T_N как функция напряжения смещения V. Символы представляют собой экспериментальные данные, пунктирная линия – результат модели в предположении идеальной тепловой связи между пленкой и подложкой и $T_{\rm L} = T_{\rm bath}$. Разница между экспериментом и моделью может быть улучшена, если учесть дополнительное узкое место в релаксации тепла в виде сопротивления Капицы (см. текст). Соответствующие зависимости $T_{\rm N}$ и $T_{\rm L}$, $T_{\rm U}$ показаны соответственно сплошной линией и двумя пунктирными линиями. (d) – Те же самые данные для шумовой температуры, как в (c), представлены как $T_{\rm N}^2$ в зависимости от джоулевой мощности P. Данные результаты подтверждают соответствие модели, описывающей ограничение в теплоотводе пленки вследствие теплопроводности Видемана–Франца (см. текст)

сверхпроводящее состояние происходит при $T_{\rm C} = 16$ K. На панели рис. 2b показана I-V характеристика при $T_{\rm bath} = 20$ K значительно выше $T_{\rm C}$, которая линейна до 5 % во всем диапазоне измерений. Эти данные демонстрируют общепринятый характер низкотемпераутрного транспортного отклика в нашем образце NbN.

Основной экспериментальный результат представлен на панели рис. 2c. Символами представлены экспериментальные данные, а штриховой линией – шумовая температура согласно уравнениям (3) и (5) с соответствующими l, d и $T_{\rm L} = T_{\rm bath}$. Как и ожидалось, шумовая температура является низкой по сравнению со случаем охлаждения через контакты [17, 18](не показано), что свидетельствующим о сильной тепловой релаксации в подложку. В то же время абсолютное значение $T_{\rm N}$ и его функциональная зависимость от напряжения смещения V близки к нашему теоретическому предсказанию. На рисунке 2d представлены те же данные в форме $T_{\rm N}^2$ в зависимости от джоулева нагрева P, что также следует из нашей модели. Здесь мы также наблюдаем, что основное узкое место в тепловой релаксации близко к ожидаемому результату с учетом теплопроводности Видемана-Франца поперек пленки.

Стоит отметить, что скорость роста $T_{\rm N}$ с напряжением в эксперименте сильнее по сравнению с моделью. Мы связываем это различие с эффектом дополнительного процесса, слабо ограничивающего тепловую релаксацию в пленке или в подложке. Далее мы показываем, как один из возможных механизмов, а именно, сопротивление Капицы вследствие акустического рассогласования между пленкой и подложкой, мог бы объяснить экспериментальные данные. В этом сценарии температура на нижней поверхности пленки превышает температуру ванны $T_{\rm L} > T_{\rm bath}$, так что $P/A = A_{\rm K}(T_{\rm L}^4 - T_{\rm bath}^4)$, где $A = wl$ – площадь поверхности образца, а $A_{\rm K} \sim 100 \div 1000$ Вт м$^{-2}$ K^{-4} – сопротивление Капицы в модели акустического рассогласования [24]. Используя значение 120 Вт м$^{-2}$ K^{-4}, мы получаем зависимости $T_{\rm L}$ и $T_{\rm U}$ от напряжения смещения, с учетом которых уравнение (5) достаточно близко описывает экспериментальную зависимость шумовой температуры $T_{\rm N}$. На рисунке 2c эти зависимости показаны соответственно нижней и верхней пунктирными линиями и сплошной линией (последняя также показана на рис. 2d). Несмотря на существенное отличие температуры $T_{\rm L}$ от температуры ванны, обусловленное сопротивлением Капицы, имеет место сильный градиент температуры поперек пленки. Тем не менее, мы хотели бы подчеркнуть, что для того, чтобы сделать определенный вывод, необходимо независимое измерение ограничения теплоотвода, обусловленного релаксацией тепла за счет теплопроводности подложки, что выходит за рамки данной работы.

В заключение, мы представляем модель тепловой релаксации в неупорядоченных металлических пленках в режиме сильной электрон-фононной связи. Мы предсказываем значительный температурный градиент поперек пленки, смещенной постоянным током, с пространственным профилем распределения температуры, который определяется теплопроводностью материала. В пределе доминирующей электронной теплопроводности профиль температуры является параболическим, а шумовая температура пленки линейно зависит от напряжения смещения. Это напоминает универсальное поведение дробового шума в диффузионных проводниках с пренебрежимо малым электрон- фононным взаимодействием, но с шумовой температурой, сильно подавленной геометрическим фактором $l/2d \gg 1$. Предварительные экспериментальные данные для толстой и сильно неупорядоченной пленки NbN согласуются нашим предсказанием.

Мы благодарим за плодотворные обсуждения И. В. Третьякова и А. В. Семенова.

Теоретическая модель была разработана при поддержке проекта Российского фонда фундаментальных исследований # 19-32-80037. Изготовление образцов и исследование транспортных характеристик было выполнено при поддержке Российского научного фонда проекта # 17-72-30036. Шумовые измерения были проведены при поддержке Российского научного фонда проекта # 19-12-00326. А. И. Кардакова и Э. М. Баева благодарят Грант Президента РФ МК-1308.2019.2 за финансовую поддержку. Анализ данных проводился в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

1. C. M. Natarajan, M. G. Tanner, and R. H. Hadfield, Supercond. Sci. Technol. **25**(6), 063001 (2012).
2. I. Holzman and Y. Ivry, Advanced Quantum Technologies **2**(3–4), 1800058 (2019).
3. F. Marsili, M. J. Stevens, A. Kozorezov, V. B. Verma, C. Lambert, J. A. Stern, R. D. Horansky, S. Dyer, S. Duff, D. P. Pappas, A. E. Lita, M. D. Shaw, R. P. Mirin, and S. W. Nam, Phys. Rev. B **93**(9), 094518 (2016).,
4. L. Zhang, L. You, X. Yang, J. Wu, C. Lv, Q. Guo, W. Zhang, H. Li, W. Peng, Z. Wang, and X. Xie, Sci. Rep. **8**(1), 1486 (2018).
5. T. M. Klapwijk and A. V. Semenov, IEEE Trans. Terahertz Sci. Technology **7**(6), 627 (2017).
6. I. Tamir, A. Benyamini, E. J. Telford, F. Gorniaczyk, A. Doron, T. Levinson, D. Wang, F. Gay, B. Sacépé, J. Hone, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. R. Dean, A. N. Pasupathy, and D. Shahar, Science Advances **5**(3), eaau3826 (2019).
7. D. Yu. Vodolazov, Phys. Rev. Appl. **7**, 034014 (2017).
8. A. J. Annunziata, O. Quaranta, D. F. Santavicca, A. Casaburi, L. Frunzio, M. Ejrnaes, M. J. Rooks, R. Cristiano, S. Pagano, A. Frydman, and D. E. Prober, J. Appl. Phys. **108**, 084507 (2010).
9. F. Marsili, F. Najafi, C. Herder, and K. K. Berggren, Appl. Phys. Lett. **98**, 093507 (2011).
10. L. Zhang, L. You, X. Yang, Y. Tang, M. Si, K. Yan, W. Zhang, H. Li, H. Zhou, W. Peng, and Z. Wang, Appl. Phys. Lett. **115**, 132602 (2019).
11. E. Baeva, M. Sidorova, A. Korneev, K. Smirnov, A. Divochy, P. Morozov, P. Zolotov, Y. Vakhtomin, A. Semenov, T. Klapwijk, V. Khrapai, and G. Goltsman, Phys. Rev. Appl. **10**, 064063 (2018).
12. D. Rall, P. Probst, M. Hofherr, S. Wünsch, K. Il'in, U. Lemmer, and M. Siegel, J. Phys. Conf. Ser. **234**, 042029 (2010).
13. A. Kardakova, M. Finkel, D. Morozov, V. Kovalyuk, P. An, C. Dunscombe, M. Tarkhov, P. Mauskopf, T. M. Klapwijk, and G. Goltsman, Appl. Phys. Lett. **103**, 252602 (2013).
14. M. V. Sidorova, A. G. Kozorezov, A. V. Semenov, Y. P. Korneeva, M. Y. Mikhailov, A. Y. Devizenko, A. A. Korneev, G. M. Chulkova, and G. N. Goltsman, Phys. Rev. B **97**, 184512 (2018).
15. M. Sidorova, A. Semenov, H.-W. Hübers, K. Ilin, M. Siegel, I. Charaev, M. Moshkova, N. Kaurova, G. N. Goltsman, X. Zhang, and A. Schilling, arXiv:1907.05039.
16. R. C. Zeller and R. O. Pohl, Phys. Rev. B **4**, 2029 (1971).
17. K. E. Nagaev, Phys. Rev. B **52**, 4740 (1995).
18. V. I. Kozub and A. M. Rudin, Phys. Rev. B **52**, 7853 (1995).
19. S. U. Piatrusha, V. S. Khrapai, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky, and E. S. Tikhonov, Phys. Rev. B **96**, 245417 (2017).
20. K. Nagaev, Phys. Lett. A **169**, 103 (1992).
21. K. Smirnov, A. Divochiy, Y. Vakhtomin, P. Morozov, P. Zolotov, A. Antipov, and V. Seleznev, Supercond. Sci. Technol. **31**, 035011 (2018).
22. E. S. Tikhonov, M. Y. Melnikov, D. V. Shovkun, L. Sorba, G. Biasiol, and V. S. Khrapai, Phys. Rev. B **90**, 161405 (2014).
23. S. U. Piatrusha, L. V. Ginzburg, E. S. Tikhonov, D. V.'Shovkun, G. Koblmüller, A. V. Bubis, A. K. Grebenko, A. G. Nasibulin, and V. S. Khrapai, JETP Lett. **108**, 71 (2018).
24. T. Elo, P. Lähteenmäki, D. Golubev, A. Savin, K. Arutyunov, and P. Hakonen, J. Low Temp. Phys. **189**, 204 (2017).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 93 – 100 © 2020 г. 25 января

Фуллерен-графеновые слоистые структуры с полимеризованными компонентами: моделирование их образования и механических свойств

А. А. Артюх[+], *Л. А. Чернозатонский*[+*1)]

[+]*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, 119334 Москва, Россия*

[*]*Школа химии и технологии полимерных материалов,*
Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова, 117997 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2019 г.
После переработки 5 декабря 2019 г.
Принята к публикации 5 декабря 2019 г.

Рассмотрен новый класс нанокомпозитов: фуллерен-графен соединения, компоненты которых частично полимеризованы. В работе исследованы различные 2D и 3D ковалентные и молекулярные соединения монослоев графена и фуллеренов C_{60} от бислоя до многослойной сверхрешетки, в том числе с частичной полимеризацией фуллеренов между собой и прилегающими листами графена. Показано, что все рассмотренные соединения энергетически более стабильны при формировании ковалентных связей между компонентами. Проведено сравнение структур ряда рассмотренных соединений с имеющимися в литературе экспериментальными данными. Ковалентные соединения компонентов упрочняют структуру: модуль Юнга для нее более чем на порядок величины превышает упругие модули молекулярного фуллерита.

DOI: 10.31857/S0370274X20020083

Введение. В последнее время возрос интерес к новым структурам из молекулярно связанных графеновых (G) слоев с промежуточными слоями из C_{60} фуллеренов [1–3]. Последние считаются перспективными, например, в полностью углеродном суперконденсаторе в качестве материала для накопления электрической энергии [4], в качестве электронных C_{60} акцепторов в трехмерных графеновых сетях [5], как элементы с высоким коэффициентом преобразования солнечной энергии в электрическую [6].

Впервые многослойная структура, состоящая из графенов и слоев фуллеренов, была получена путем интеркалирования оксида графита при смешении компонент в толуоле с последующей их термообработкой в 2010 г. [7]. Недавно были получены пленки, состоящие из слоя плотноупакованных фуллеренов, заключенного между двумя слоями графена [8]. Наблюдение с помощью трансмиссионного электронного икроскопа показало, что в такой структуре расстояние между молекулами C_{60}, равное 0.96 нм, оказалось на 4–5 % меньше, чем в кристаллической форме фуллерита, а также наблюдалось формирование химических ковалентных связей между некоторыми фуллеренами. Было предположено, что в системе присутствуют три типа таких связей: 1) присоединение фуллеренов к графену, 2) формирование димеров C_{60}–C_{60}, 3) димеры C_{60}–C_{59} (образование C_{59} идет за счет ударного повреждения C_{60} электронным лучом). Ранее были получены и исследованы теоретически [9] C_{60} димеры, образованные путем [2 + 2] и [2 + 4] цикло-присоединения двух молекул. По всей видимости, все они в наблюдались и в эксперименте [10].

В данной работе мы рассматриваем различные энергетическую стабильность и свойства новых графен-фуллерен структур: 1) монослои C_{60} на графене и 2) [2 + 2] и [2 + 4] цикло-присоединенные к графену фуллерены; 3) полимеризованные цепочки фуллеренов на графене; 4) кристаллические сверхрешетки из полимеризованных фуллеренов между графенами, с частичным или полным ковалентным присоединением фуллеренов к графенам. Такие цикло-присоединения фуллерена к фуллерену или графену можно получить при одновременном воздействии давления и температуры [10], а также при электронном или ультрафиолетовом облучении [11]. Ниже показано, что данные соединения всегда более энергетически выгодны и прочны по сравнению с аналогами из молекулярно-связанных слоев, кроме того, обладают проводящими свойствами. Для

1)e-mail: cherno@sky.chph.ras.ru

обозначения структуры используем упрощенную запись: Mon (или Ort укладка) – N (количество слоев графена) – K_G (или M_G) G-C_{60} связь – K_f (или M_f) C_{60}–C_{60} связь, где; G-C_{60} связь и C_{60}–C_{60} связь отображает наличие молекулярной (**M**) или ковалентной (**K**) связи между графеном и C_{60} или между фуллеренами, построенными в моноклинной (Mon) или орторомбической (Ort) конфигурации.

Выбор структур и методы их расчетов. Моделирование атомных структур и их оптимизация проводилась с помощью методов молекулярной динамики (МД) в рамках программного продукта GULP [12] с использованием потенциалов Бреннера [13] для внутримолекулярных взаимодействий и Леннарда–Джонса [14] – для описания межмолекулярных взаимодействий. Во всех расчетах используются периодические граничные условия. Энергия образования всех соединений оценивалась по формуле [15]:

$$\Delta E_f = (E_s - E_G - N_f E_f)/N_f, \qquad (1)$$

где E_s – энергия расчетной ячейке E_G – энергия графена, N_f – количество фуллеренов в расчетной ячейки и E_f – энергия одной молекулы фуллерена. Данная формула позволяет нормировать энергию относительно числа фуллеренов в системе, нивелируя вклад атомов графена, число которых меняется для различных расчетных ячеек.

Молекулярные структуры и энергетика. Рассмотрим различные случаи расположения фуллеренов и графенов. Для исследования динамической стабильности структуры графена с лежащими на ней фуллеренами, нами было проведено МД моделирование с временным шагом 1 фс при температурах 260 К (температура фазового перехода 1-го рода в фуллерите [12]) и 300–400 К. Время моделирования составило 5 пс (5000 МД шагов), т.е. достаточного для установления стабильного состояния системы, поскольку ранее было показано в эксперименте [16], что графену достаточно 1.7 пс для релаксации его геометрии до оптимальной конфигурации. Структура из двух фрагментов графена с семью фуллеренами между ними (рис. 1a) оставалась стабильной при 250 и 300 К без значительных изменений в течение всего времени моделирования, при 400 К происходило движение фуллеренов между слоями биграфена, но они не выходили из биграфенного промежутка. Структура с одним фрагментом графена и семью фуллеренами на нем (рис. 1b), подобно наноостровкам из молекулярно связанных C_{60} в эксперименте [17], оставалась стабильной только до 260 К, в то время как при $T \geq 300$ К наблюдались колебания отдельных фуллеренов, происходило движение фуллеренов, но они не покидали поверхности графена.

Из-за того, что размеры элементарной ячейки (ЭЯ) фуллереновых двумерных структур близки к некоторому числу периодов графеновой ячейки ($a =$ $= 0.246$ нм – параметр элементарной ячейки графена), то мы организовали C_{60}/G периодическую структуру с параметрами суперячейки $D_{x,y}$: $D_x = 1$ нм $\approx na$ вдоль зигзагного (zigzag – Z) направления X ($n = 4$) и $D_y \approx ma\sqrt{3}$ – вдоль креслообразного (armchair – A) направления Y ($m = 4$ для “гексагональной” on укладки фуллеренов в слое и $m = 5$ – для Ort “орторомбической”), как это рассматривалось для слоев C_{60} в графите [18]. Проведем оптимизацию молекулярных периодических 2D структур с листом графена, на котором расположены фуллерены с двумя типами укладок Mon (рис. 1c) и Ort (рис. 1d). Расстояние между листом графена и центром фуллерена оказалось равно 0.64 нм, т.е. расстояние между ближайшими С-атомами в графене и C_{60} составило всего 0.29 нм, меньше, чем рассчитанное тем же методом расстояние 0.305 нм между молекулами C_{60} в fcc фуллерите.

Для представленного выше “моноклинного” 2D кристалла (размер расчетной ячейки 1.97×1.70 нм^2, $N_f = 4$, число С-атомов $N_C = 368$) было получено: $\Delta E_f = -0.88$ эВ/фуллерен. Это значение отличается всего на 0.01 эВ/фуллерен от энергии конечной, рассчитанной нами ненапряженной молекулярной структуры с шестнадцатью фуллеренами на 5.9×5.4 нм^2 графеновом фрагменте ($\Delta E_f =$ $= -0.89$ эВ/фуллерен). Таким образом, выбранное нами соразмерное соответствие элементарных ячеек для компонент структуры C_{60}/G мало отличается от энергетической стабильности несоразмерной структуры конечного размера. Для Ort укладки (размер расчетной ячейки 1.97×2.13 нм^2, $N_f = 4$, $N_C = 400$) величина ΔE_f равна -0.67 эВ/фуллерен. Разница энергий образования Mon и Ort структур обусловлена разным числом молекулярных связей: в “моноклинной” укладке каждый фуллерен имеет 6 ближайших соседей, а для “орторомбической” только 4.

Была также рассмотрена Ort структура слоя фуллеренов между двумя листами графена с теми же размерами суперячейки, что и в предыдущем случае. Полученная для нее энергия образования $\Delta E_f =$ $= -8.16$ эВ/фуллерен показала, что эта структура оказалась также стабильнее по сравнению с кристаллом fcc фуллерита из плотноупакованных C_{60} молекул ($\Delta E_{fo} = -6.71$ эВ/фуллерен, расчет аналогичен предыдущим).

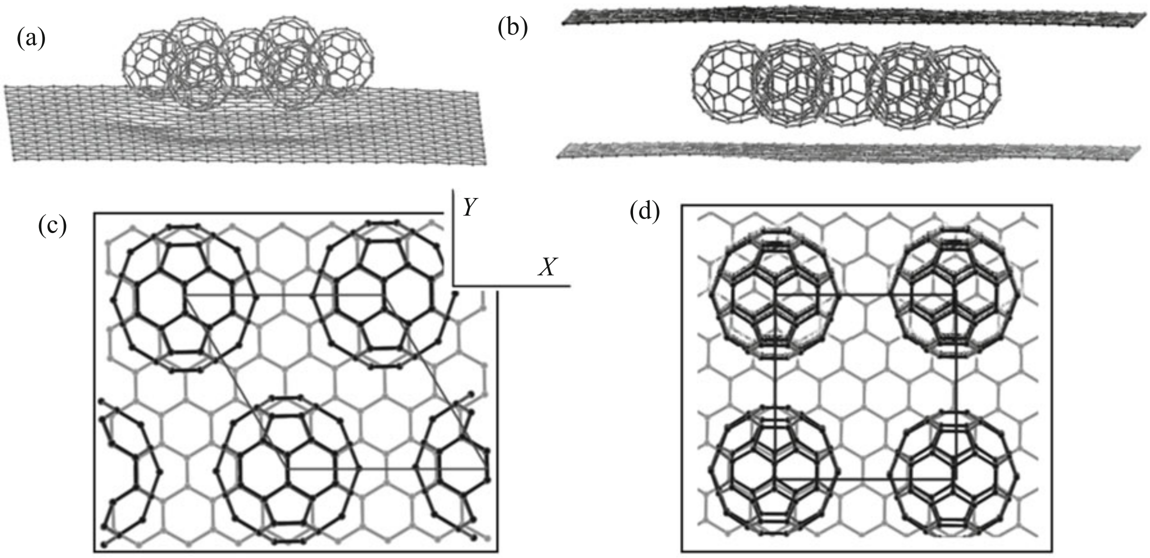

Рис. 1. (Цветной онлайн) Структуры графена с молекулярно связанными фуллеренами: семь фуллеренов на графеновой чешуйке (a) и между двумя листами графена AA упаковки (b). Квази-двумерные кристаллы Mon-1-M_G-M_f (c) и Ort-1-M_G-M_f (d). Расчетные ячейки выделены черными линиями

Ковалентно соединенные компоненты в $\mathbf{C_{60}/G}$ системах. При наличии внешних температурно-механических (T-P) воздействий на молекулярные C_{60}/G структуры, в них первыми, вероятнее всего, будут образовываться димеры C_{60}–C_{60} или длинные цепочки C_{60}–C_{60} [19] за счет бóльшей кривизны фуллерена по сравнению со случаем присоединения фуллеренов к плоскому графену, а уже потом при бóльших (по величине или по времени) воздействиях будет происходить уже полимеризация фуллеренов и с графеновыми слоями.

Основным механизмом ковалентного соединения фуллеренов обычно является образование [2 + 2] цикло-присоединенных пар атомов соседних фуллеренов C_{60}. Он связан с трансформацией двойной связи между гексагонами в каждом из двух соседних молекул C_{60} в одинарные, так что все четыре атома из двух пар атомах на соседях становятся sp^3-гибридизированными, образуя C_{60}–C_{60} димер. Разрыву и перестройке этих связей способствует как фотохимическое воздействие [19], так и действие давления и температуры, при котором в молекулярном фуллерите образуются цепочки ($P = 1$ ГПа $T = 500$ К) или слои ($P = 1$ ГПа $T = 500$ К) из ковалентно соединенных фуллеренов, образуя "орторомбическую-O", "тетрагональную-T" или "ромбоэдрическую-R" фазы [20]. Энергия барьера активации для разрыва $[2+2]$ цикло-присоединения была нами оценена в 1.5 эВ NEB методом [21], что оказалось близко к оценкам (в приближении Хартри–Фока) барьеров образования и разрыва 3.3 и 1.5 эВ соответственно [22]. В некоторых случаях наблюдалось также формирование небольшого количества [2 + 4] цикло-присоединений [22–24], поэтому их можно не учитывать и рассматривать структуру со слоем $[2+2]$ C_{60} димеров на графене – рис. 2.

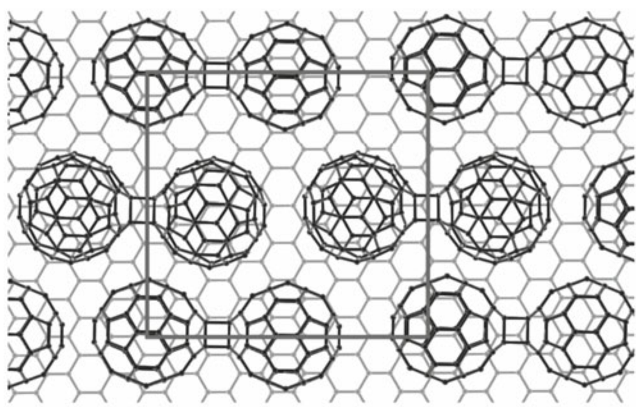

Рис. 2. (Цветной онлайн) Полимеризованные димеры C_{60}–C_{60} на графене – структура Ort-1-M_G-K_{f-f}. Красным выделена прямоугольная элементарная ячейка структуры

Из условия наиболее плотной упаковки димеров в слое была выбрана расчетная ячейка: 1.2×3.8 нм^2, $N_f = 4$, $N_C = 420$. Полная энергия такой системы оказалась равной $\Delta E_f = -12.69$ эВ/фуллерен, что говорит о ее большей устойчивости, чем предыдущих структур.

Для сравнения с предыдущими рассмотрим еще периодические G/C_{60} структуры с [2 + 2] и [2 + 4] присоединенными фуллеренами к графену – рис. 3. Размер расчетной прямоугольной ячейки 2.4×2.5 нм^2 был выбран таким образом, чтобы один присоединенный фуллерен не оказывал влияние на другой.

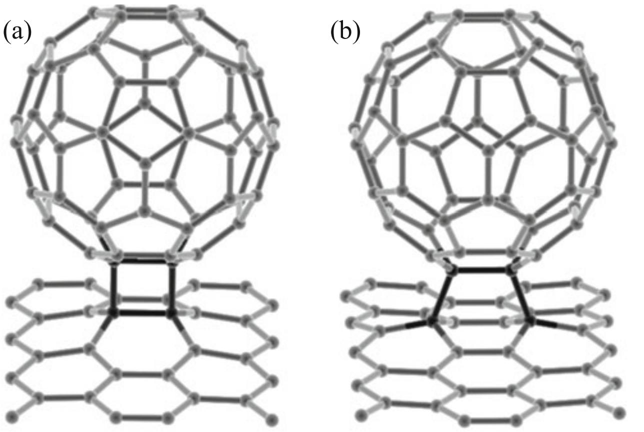

Рис. 3. Схемы [2 + 2] (a) и [2 + 4] (b) цикло-присоединения фуллерена к графену

Энергии образования обоих [2 + 2]C_{60}/G и [2+4]C_{60}/G структур (-0.785 и -0.935 эВ/фуллерен) отличаются друг от друга менее чем на 0.15 эВ/фуллерен. Отметим, что ранее [24] полуэмпирическим методом Хартри–Фока была рассчитана энергия образования C_{60}/G структуры при [2 + 2] присоединении фуллерена к наночешуйке (1.2×1.2 нм), которая составила меньшую величину -0.53 эВ/фуллерен из-за искривления графена столь малого размера. Поскольку энергии образования [2 + 2] и [2 + 4] цикло-присоединений ненамного отличаются друг от друга, в дальнейшем будем рассматривать полимерные структуры только с [2 + 2] присоединением фуллеренов к графену.

Как известно, для графена характерно наличие дефектов, таких как вакансия (отсутствие одного C-атома в графеновой решетке) или Стоун–Уэйлса (Stone-Wales – SW), который представляет собой конфигурацию двух пентагонов и двух гептагонов, возникающих при локальном повороте одной C–C связи между четырьмя гексагонами на угол $\pi/2$ [25]. Ранее было показано, что присутствие таких дефектов увеличивает энергетическую выгоду молекулярного присоединения фуллеренов к углеродной нанотрубке [26]. Мы расчетами энергии образования подобных периодических структур с той же расчетной прямоугольной ячейкой 2.4×2.5 нм^2 показали, что наличие подобных дефектов также может способствовать прикреплению фуллерена к графену вблизи дефекта (см. рис. 3 и табл. 1). Так, наличие вакансии увеличивает энергию образования в четыре раза по сравнению со структурами [2 + 2] (или [2 + 4])C_{60}/G.

Рассмотрим теперь аналоги молекулярных структур (рис. 1c, d) с "моноклинным" или "орторомбическом" расположением фуллеренов в ЭЯ (как на рис. 1c, d): Mon-1-K_G-M_f или Ort-1-K_G-M_f с несвязанными друг с другом фуллеренами, но [2 + 2] цикло-присоединенными к графену, как на рис. 3a. Энергия образования структуры Mon-1-K_G-M_f оказалась равной $\Delta E_f = -11.90$ эВ/фуллерен, а для Ort-1-K_G-M_f равной -11.70 эВ/фуллерен, что говорит об их бóльшей устойчивости из-за ковалентных связей между компонентами, чем системы с чисто ВдВ взаимодействием молекул и графена между собой (-0.88 и -0.67 эВ/фуллерен соответственно).

Квази-двумерные кристаллы – полимеризованные цепочки фуллеренов, молекулярно прикрепленные к графену. Подобные соединения могут быть получены при приложении давления, нагрева и обработки ультрафиолетом молекулярной C_{60}/G структуры [7, 19]. Мы рассмотрим различные варианты таких структур. Некоторая малая несоразмерность периодов плотно упакованных в слое полимеризованных фуллеренов и листа графена заставляет нас рассматривать периодические системы из них с не совсем плотной упаковкой C_{60} молекул. Однако, как будет показано ниже, это не приводит к меньшей устойчивости полимерных структур по сравнению с их молекулярными аналогами.

Нас заинтересовал процесс постепенного образования C_{60}/G структуры с последовательной полимеризацией фуллеренов между собой и графеном – рис. 4. Начиная от несоединенных между собой фуллеренов до полностью полимеризованных цепочек рассмотрим поочередное образование отдельных димеров, а затем и цепочек из них, т.е. различных ковалентно-связанных пар соседних фуллеренов, а потом и их объединений.

На рисунке 4 представлено четыре последовательных образования C_{60}/G структуры с первоначальной моноклинной укладкой из 4-х фуллеренов (рис. 2a). Энергия образования структуры с одной парой [2 + 2] димера вдоль X-оси, показанной на рис. 5a, оказалась равной $\Delta E_f = -12.33$ эВ/фуллерен. В случае двух димеров в ЭЯ, соединение которых произошло в направлении оси X (рис. 4b, структура, аналогичная рис. 3, но с [2 + 2] связями, расположенными перпендикулярно поверхности графена), энергия связи несколько возросла: $\Delta E_f = -12.72$ эВ/фуллерен. При образовании цепочки в "верхнем" ряду с сохранением димеров в "нижнем" ряду (рис. 4c) оказалось,

Таблица 1. Энергии образования различных соединений графена с фуллеренами

Структура	Кол-во атомов в ЭЯ	Энергия E_s, эВ	Энергия образования ΔE_f, эВ
Графен	240	-1774.826	
Графен с дефектом вакансия	239	-1760.523	
Графен с дефектом SW	240	-1769.658	
C_{60}	60	-410.508	
Графен с присоединенным $[2+2]$ фуллереном C_{60}	300	-2186.119	-0.785
Графен с присоединенным фуллереном C_{60}, $[2+4]$ цикло-присоединение	300	-2186.269	-0.935
Графен с дефектом вакансия с присоединенным C_{60}, $[2+2]$ цикло-присоединение	299	-2172.702	-1.671
Графен с дефектом вакансия с присоединенным C_{60}, $[2+4]$ цикло-присоединение	299	-2175.372	-4.341
Графен с дефектом SW с присоединенным C_{60}	300	-2181.633	-1.467

что $\Delta E_f = -12.88$ эВ/фуллерен. Наконец в случае двух полностью полимеризованных цепочек (рис. 5d) энергия образования данной структуры Mon-1-M_G-K_{4f} приняла наибольшее значение $\Delta E_f = -13.13$ эВ/фуллерен. Таким образом, в зависимости от количества полимеризованных пар C_{60} энергетическая устойчивость структуры существенно увеличилась, а в случае 2D кристалла Mon-1-M_G-$K_{\text{chain, chain}}$ с двумя цепочками $[2+2]$ связанных фуллеренов возросла до значения $\Delta E_f = -13.88$ эВ/фуллерен. Этот 2D кристалл Mon-1-M_G-$K_{\text{chain, chain}}$ оказался самой энергетически выгодной 2D структурой.

Такая же ситуация наблюдается для другого взаимного расположения фуллереновб как в 2D C_{60}/G Ort кристалле рис. 2a: с увеличением количества связей между фуллеренами энергия образования ΔE_f растет. Величина этой энергии равна -12.19 эВ/фуллерен при одной полимеризованной паре в ячейке, при полимеризованных двух парах – $\Delta E_f = -12.44$ эВ/фуллерен. Для ЭЯ с цепочкой и димером ΔE_f равна -12.93 эВ/фуллерен.

Таким образом, полимеризованные фуллерены посредством $[2+2]$ цикло-присоединения в цепочки, молекулярно связанные с листом графена, являются энергетически наиболее выгодным соединением из выше рассмотренных 2D структур.

Слоистые 3D кристаллы: полимерные цепочки фуллеренов между графенами, с частичным или полным ковалентным присоединением фуллеренов к графенам. Рассмотрим теперь кристаллы C_{60}/G(PI) и C_{60}/G(PII) из полимеризованных фуллеренов между слоями графена (рис. 5). С учетом повторяющихся слоев в упаковке AB была выбрана расчетная ячейка $(a, b, c) = (1.9, 1.7, 2.1)$ нм, $N_f = 8$, $N_C = 736$. Вид сверху на разрез кристалла XY плоскостью ($Z = 0$) представлен на рис. 5c. Симметрия кристаллов – простая ромбическая сингония.

Для случая кристалла C_{60}/G(PI), когда все фуллерены в каждой полимеризованной цепочке прикреплены $[2 + 2]$ связями к листу графена (рис. 5a), энергия образования получилась равной: -13.54 эВ/фуллерен. Для аналогичного кристалла C_{60}/G(PII), где каждый второй фуллерен в одной полимерной цепочке не присоединен к графену (рис. 5b), энергия образования оказалась равной -13.42 эВ/атом. Это говорит о том, что кристаллы C_{60}/G(I) и C_{60}/G(PII) являются самыми энергетически выгодными, т.е. могут не разрушаться при достаточно высоких температурах.

Механические свойства C_{60}/G структур. Приведем результаты расчетов эффективных модулей Юнга, вычисленных по стандартной формуле $Y = F/S\varepsilon$, где $F = 2\Delta E/\Delta L$ – сила, действующая на структуру, $\varepsilon = \Delta L/L$ – относительное удлинение, E – энергия деформации, L – длина структуры в выбранном направлении, ΔL – изменение длины и S –

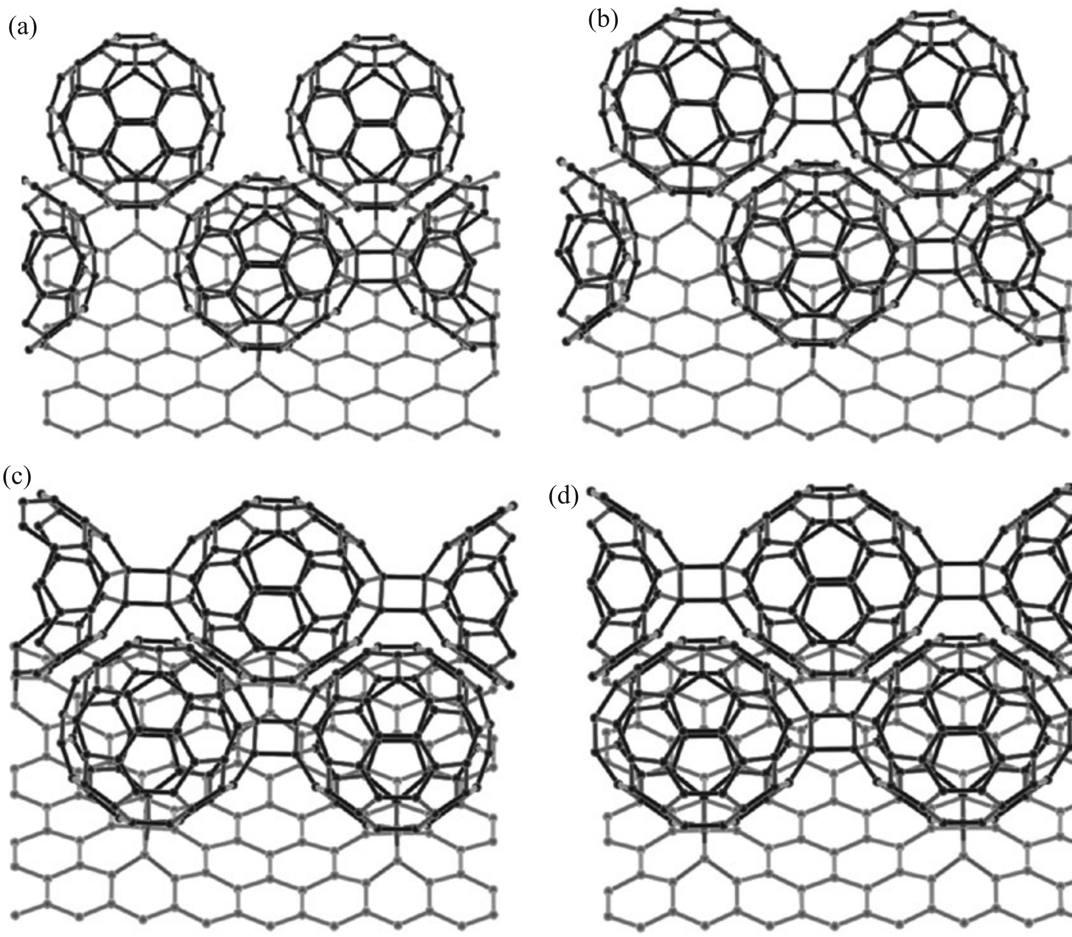

Рис. 4. Схема поочередного соединения фуллеренов между собой в C_{60}/G моноклинном 2D кристалле. Виды элементарной ячейки атомных структур в различных случаях полимеризации: кристалл Mon-1-M_G-$K_{2f,1d}$ с одной полимеризованной парой фуллеренов (a), Mon-1-M_G-K_d с двумя димерами (b), Mon-1-M_G-$K_{\mathrm{chain},d}$ с полимерной цепочкой и димером (c), структура Mon-1-M_G-$K_{\mathrm{chain,\,chain}}$ с двумя цепочками (d)

площадь поперечного сечения выбранной ЭЯ структуры.

Примеры рассчитанных значений модулей Юнга 2D и 3D моноклинных структур приведены в табл. 1. Показано, что в 2D кристаллах по мере полимеризации фуллеренов между собой величина модулей возрастает вплоть до 0.192 ТПа для кристалла Mon-1-M_G-$K_{\mathrm{chain,\,chain}}$. Все рассмотренные структуры обладают анизотропией в плоскости XY.

Отметим наличие нанопор в данных структурах (0.5–0.7 нм), достаточных для допирования атомами металла (аналогично фуллеритам) с целью повышения их проводимости, или проникновения ионов Li^+ при использовании их в литиевых суперконденсаторах.

Таблица 2. Модули Юнга для полимеризованных C_{60}/G структур и их компонент

Модуль Юнга, ТПа		
Направление	X	Y
Mon-1-M_G-M	0.101	0.146
Mon-1-M_G-$K_{2f,1d}$	0.132	0.144
Mon-1-M_G-K_d	0.130	0.143
Mon-1-M_G-$K_{\mathrm{chain},d}$	0.166	0.148
Mon-1-M_G-$K_{\mathrm{chain,\,chain}}$	0.192	0.152
3D кристалл (рис. 5a)	0.170	0.160
Фуллерит fcc [27]	0.055	0.055

Выводы. В работе рассмотрен новый класс ковалентных соединений графена и фуллеренов в виде устойчивых форм 2D и 3D кристаллов. Показано, что фуллеренам энергетически выгодно из молекулярных соединений с графеном преобразоваться в полимерные структуры с ковалентными связями. Рассчитаны геометрические параметры, энергии образования 2D и 3D кристаллов из графена и фуллеренов. Рассмотренные структуры являются

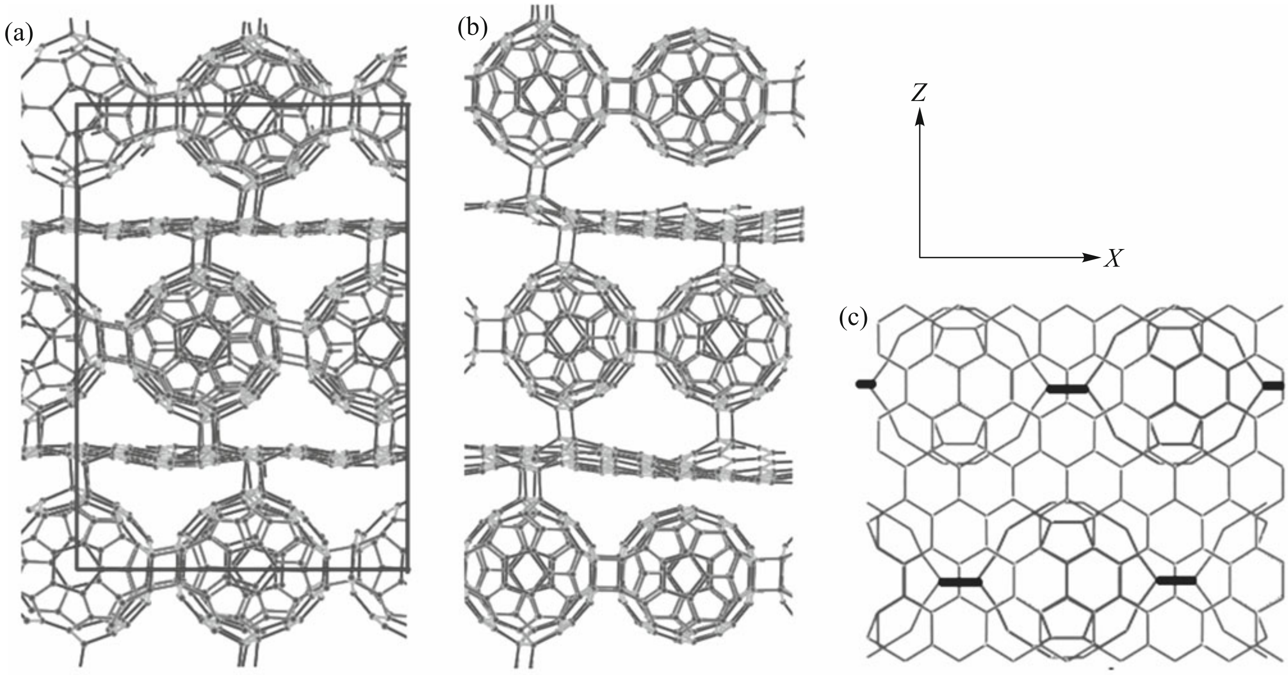

Рис. 5. (Цветной онлайн) Два 3D кристалла: (a) – C_{60}/G(PI) с полностью полимеризованными фуллеренами в 2-х направлениях (по X – между фуллеренами и по Z – между фуллеренами и графенами) и (b) – C_{60}/G(PII) с частично полимеризованными фуллеренами через одну молекулу вдоль оси X, (c) – вид на разрез ЭЯ ($Z = 0$)

стабильными объектами при нормальных условиях. Исследуемые кристаллы обладают бóльшими модулями Юнга по сравнению с фуллеритами, что открывает перспективу использования данных материалов как проводящих полностью углеродных твердотельных структур.

Поскольку известно, что фуллерены легко полимеризуются [20], данные структуры могут быть получены из синтезированных ранее молекулярных C_{60}/G соединений путем воздействия на них ультрафиолетового излучения, давления и температуры. Благодаря комбинации свойств фуллеренов и графенов в рассмотренных C_{60}/G структурах, сочетающих достаточную пористость, высокую емкость накопления заряда фуллеренов с электропроводностью графеновой составляющей, свойства, отмеченные в одном из последних обзоров по гибридам фуллеренов с 2D материалами [28] как весьма перспективные для различных применений. Предсказанные соединения смогут найти свое использование в суперконденсаторах и солнечных элементах, а также как твердые композитные материалы, стабильные в большом диапазоне температур.

Работа выполнена в рамках проекта Российского фонда фундаментальных исследований # 16-29-06201 с использованием ресурсов межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. M. R. Ceron, C. Zhan, P. G. Campbell, M. C. Freyman, C. Santoyo, L. Echegoyen, B. C. Wood, J. Biener, T. A. Pham, and M. Biener, ACS Appl. Mater. Interfaces **11**(32), 28818 (2019).
2. M. R. Ceron, V. I. Vedharathinama, P. G. Campbella, T. A. Phama, B. C. Wooda, J. Bienera, L. Echegoyen, and M. M. Biener, ECS Meeting Abstracts http://ma.ecsdl.org/content/MA2019-01/12/832.short.
3. J. M. Devi, Bulletin of Materials Science **42**, 75 (2019).
4. Z. Xu, M. Wu, Z. Chen, C. Chen, J. Yang, T. Feng, E. Paek, and D. Mitlin, Adv. Sci. **6**, 1802272 (2019).
5. G. Jnawali, Y. Rao, J. H. Beck, N. Petrone, I. Kymissis, J. Hone, and T. F. Heinz, ACS Nano **9**, 7175 (2015).
6. R. Chen, L. Cheng, Y. Huan, T. Yuting, S. Chao, Y. Lihui, L. Hai, X. Xiaoji, W. Lianhui, and H. Wei Huang, Chem. Mater. **28**, 4300 (2016).
7. M. Ishikawa, S. Kamiya, S. Yoshimoto, M. Suzuki, D. Kuwahara, N. Sasaki, and K. Miura, Journal of Nanomaterials **2010**, 891514 (2010).
8. R. Mirzayev, K. Mustonen, M. Monazam, A. Mittelberger, T. Pennycook, C. Mangler, T. Susi, J. Kotakoski, and J. Meyer, Sci. Adv. **3**, e1700176 (2017).
9. G.-W. Wang, K. Komatsu, Y. Murata, and M. Shiro, Nature **387**, 583 (1997).
10. C. Pei and L. Wanga, Matter and Radiation At Extremes **4**, 028201 (2019).

11. E. Alvarez-Zauco, H. Sobral, E. Basiuk, J. Saniger, and M. Villagran-Muniz, Applied Surface Science **248**, 243 (2005).
12. J. D. Gale and A. L. Rohl, Mol. Simul. **29**, 291 (2003).
13. D. W. Brenner, Phys. Rev. B **42**, 15 (1990).
14. J. E. Jones, Proc. R. Soc. Lond. A **106**, 463 (1924).
15. S. Okada, M. Otani, and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **67**, 205411 (2003).
16. J. M. Dawlaty, S. Shivaraman, M. Chandrashekhar, F. Rana, and M. G. Spencer, Appl. Phys. Lett. **92**, 042116(3) (2008).
17. A. Hashimoto, H. Terasaki, A. Yamamoto, and S. Tanaka, Diam. & Relat. Mater. **18**, 388 (2009).
18. S. Saito and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **49**, 17413 (1994).
19. P. C. Eklund and A. M. Rao (editors), *Fullerene polymers and fullerene polymer composites*, Springer, Berlin (2000).
20. M. Alvarez-Murga and J. L. Hodeau, Carbon **82**, 381 (2015).
21. G. Mills, H. Jonsson, and G. K. Schenter, Surface Science **324**, 305 (1995).
22. J. Mestres, M. Duran, and M. Sola, J. Phys. Chem. **100**, 7449 (1996).
23. V. M. Rotello, J. B. Howard, T. Yadav, M. M. Conn, E. Viani, L. M. Giovane, and A. L. Lafleur, Tetrahedron Lett. **34**, 1561 (1993).
24. E. F. Sheka and L. Kh. Shaymardanova, J. Mater. Chem. **21**, 17128 (2011).
25. F. Banhart, J. Kotakoski, and A. V. Krasheninnikov, ACS Nano **5**, 26 (2011).
26. Л. А. Чернозатонский, А. А. Артюх, В. А. Демин, Письма в ЖЭТФ **97**, 119 (2013).
27. L. Kh. Rysaeva, J. A. Baimova, D. S. Lisovenko, V. A. Gorodtsov, and S. V. Dmitriev, Phys. Status Solidi B **256**, 1800049 (2019).
28. M. Chen, R. Guan, and S. Yang, Adv. Sci. **6**, 1800941 (2019).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 101 – 106

Моделирование взаимодействия графена с поверхностью меди с помощью модифицированного потенциала Морзе

С. В. Колесников[1)], *А. В. Сидоренков*, *А. М. Салецкий*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 ноября 2019 г.
После переработки 5 декабря 2019 г.
Принята к публикации 5 декабря 2019 г.

Предложен новый потенциал взаимодействия углерод-медь, позволяющий моделировать муаровую структуру графена на поверхности меди. Показано, что получающаяся в результате моделирования муаровая структура качественно согласуется с изображениями, полученными с помощью сканирующего туннельного микроскопа. Толщина муаровой структуры и энергия связи графена с поверхностью в пределах погрешности совпадают с известными на сегодняшний день экспериментальными данными. Предложенный потенциал может быть использован и для моделирования диффузии атомов меди по поверхности графена. Исследована диффузия атома и димера меди в широком интервале температур. Обнаружено, что при моделировании диффузии необходимо учитывать вклад колебательной свободной энергии атомов меди.

DOI: 10.31857/S0370274X20020095

Графен известен своими уникальными свойствами [1–5], благодаря которым он является одним из наиболее перспективных материалов для технического применения. Одним из наиболее перспективных методов получения графена высокого качества является метод химического осаждения паров на металлических подложках [6, 7], в частности, на поверхности меди [8]. Графен на поверхности Cu(111) обладает муаровой структурой [9–11], появление которой связано с небольшим различием в межатомных расстояниях Cu–Cu и C–C [6]. Период и толщина муаровой структуры графена зависит от угла поворота Θ, который определяется как угол между направлением [110] в кристалле меди и направлением "зигзаг" в графене. Экспериментально обнаружены муаровые структуры с углами поворота 0°, 7° [9] и 10.4° [10]. При напылении на графен атомов металла в углублениях муаровой структуры могут образовываться нанокластеры, выстроенные в упорядоченную сверхрешетку [12].

Для изучения взаимодействия графена с поверхностью металлов широко используются методы компьютерного моделирования, такие как метод молекулярной динамики (МД). Для исследования свойств небольших участков графена можно использовать первопринципную МД, основанную на теории функционала плотности (ТФП) [13, 14]. Однако для исследования муаровой структуры графена и роста нанокластеров необходимо моделирование системы большого числа атомов, что на сегодняшний день возможно только в классическом приближении [10, 15, 16]. При этом точность моделирования существенно зависит от выбора потенциала взаимодействия углерод-медь.

В данной работе мы предлагаем использовать модифицированный потенциал Морзе для моделирования взаимодействия графена с атомами меди. Ниже мы покажем, что использование данного потенциала при МД моделировании позволяет адекватно воспроизвести как муаровую структуру графена, так и диффузию атомов меди на поверхности графена.

Моделирование графена на поверхности Cu(111) проводилось методом классической МД с использованием цепочки термостатов Нозе–Гувера [17, 18]. Для моделирования взаимодействия атомов углерода между собой был использован потенциал Терсоффа–Бреннера [19]. В этом приближении энергия связи атомов углерода равна

$$E_{\mathrm{C-C}} = \sum_i \sum_{j>i} (V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} \cdot V_A(r_{ij})), \qquad (1)$$

$$V_R(r_{ij}) = \frac{A^{\mathrm{C-C}}}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r_{ij} - r_0^{\mathrm{C-C}})} f_c(r_{ij}), \qquad (2)$$

$$V_A(r_{ij}) = \frac{A^{\mathrm{C-C}} S}{S-1} e^{-\sqrt{2/S}\beta(r_{ij} - r_0^{\mathrm{C-C}})} f_c(r_{ij}), \qquad (3)$$

где r_{ij} – расстояние между атомами i и j, а $A^{\mathrm{C-C}}$, $r_0^{\mathrm{C-C}}$, S и β – подгоночные параметры. Для ограни-

[1)]e-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

чения области взаимодействия атомов используется функция обрезания

$$f_c(r_{ij})=\begin{cases} 1 & r_{ij} < R^{(1)}, \\ \frac{1}{2}\left\{1+\cos\left[\frac{\pi(r_{ij}-R^{(1)})}{(R^{(2)}-R^{(1)})}\right]\right\} & R^{(1)}<r_{ij}<R^{(2)}, \\ 0 & r_{ij} > R^{(2)}, \end{cases} \quad (4)$$

где $R^{(1)}$ и $R^{(2)}$ – радиусы обрезания. Многочастичный характер взаимодействия между атомами углерода учитывается с помощью функции $\bar{B}_{ij} = (B_{ij} + B_{ji})/2$, где

$$B_{ij} = \left[1 + \sum_k G(\theta_{ijk}) f_c(r_{ik})\right]^{-\delta}, \quad (5)$$

где θ_{ijk} – угол между связями $i-j$ и $i-k$. Функция $G(\theta_{ijk})$ задается формулой

$$G(\theta_{ijk}) = a_0\left(1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + [1+\cos\theta_{ijk}]^2}\right). \quad (6)$$

Параметры потенциала Терсоффа–Бреннера взяты из статьи [19]: $A^{\text{C–C}} = 6.325$ эВ, $S = 1.29$, $\beta = 1.5$ Å^{-1}, $r_0^{\text{C–C}} = 1.315$ Å, $R^{(1)} = 1.7$ Å, $R^{(2)} = 2$ Å, $\delta = 0.805$, $a_0 = 0.0113$, $c_0 = 19.0$, $d_0 = 2.5$.

В качестве потенциала взаимодействия атомов меди между собой использован потенциал [20], полученный в приближении сильной связи

$$E_{\text{Cu–Cu}} = \quad (7)$$

$$= \sum_i \left[A^{\text{Cu–Cu}} \sum_{j>i} \exp\left(-p\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\text{Cu–Cu}}} - 1\right)\right) f_c(r_{ij}) - \right.$$
$$\left. - \xi\left(\sum_j \exp\left(-2q\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\text{Cu–Cu}}} - 1\right)\right) f_c(r_{ij})\right)^{1/2}\right],$$

где $A^{\text{Cu–Cu}}$, ξ, p, q, $r_0^{\text{Cu–Cu}}$ – параметры потенциала. Функция обрезания $f_c(r_{ij})$ была взята в форме (4) с радиусами обрезания, равными $R^{(1)} = 6.5$ Å и $R^{(2)} = 7.5$ Å. Параметры потенциала Cu–Cu взяты из работы [20]: $A^{\text{Cu–Cu}} = 0.0854$ эВ, $\xi = 1.224$ эВ, $p = 10.94$, $q = 2.28$, $r_0^{\text{Cu–Cu}} = 2.556$ Å. Использование потенциалов (7) хорошо зарекомендовало себя при моделировании поверхностных свойств меди [21–23].

Для моделирования муаровой структуры графена на поверхности Cu(111) были использованы вычислительные ячейки следующих размеров. Вычислительная ячейка для угла $\Theta = 0°$ имела размер 63.9 Å × 110.7 Å (8 слоев по 1250 атомов меди и 2704 атома углерода), а для угла $\Theta = 10.4°$ – 93.9 Å × 162.7 Å (8 слоев по 2702 атома меди и 5844 атома углерода). Атомы двух нижних слоев меди были зафиксированы. На движение остальных атомов были наложены периодические граничные условия в плоскости поверхности. Для моделирования диффузии атома и димера меди по поверхности графена была использована вычислительная ячейка размером 34.4 Å × 34.1 Å (448 атомов углерода). На движение атомов были наложены периодические граничные условия в плоскости листа графена.

Использование центрально-симметричных потенциалов для моделирования взаимодействия углерод-медь приводит к неправильной муаровой структуре графена [15] на поверхности Cu(111). Муаровая структура оказывается инвертированной по отношению к той, что наблюдается в эксперименте [9, 11], т.е. вместо “холмов” на поверхности графена образуются “впадины”. Это связано с тем, что атому углерода оказывается энергетически выгодно иметь как можно больше ближайших соседей меди. Для того, чтобы при моделировании получилась правильная муаровая структура графена, необходимо, чтобы атому углерода было энергетически выгодно находиться в положении над атомом меди [6]. Это означает, что взаимодействие графена с поверхностью Cu(111) осуществляется в основном за счет электрона, находящегося на p_z орбитали атома углерода и не участвующего в образовании связей углерод-углерод. Поскольку волновая функция электрона на p_z орбитали зависит от угла $\phi = (\widehat{\mathbf{r},\mathbf{n}})$ между радиус-вектором электрона $\mathbf{r}$ и нормалью к поверхности графена $\mathbf{n}$, как $\cos\phi$, то притягивающая часть потенциала взаимодействия углерод-медь должна тоже зависеть от $\cos\phi$.

Если центрально-симметричный потенциал имеет вид $\sum_{ij}(V_A(r_{ij}) + V_R(r_{ij}))$, где слагаемые V_A и V_R отвечают за притяжение и отталкивание атомов, то мы можем модифицировать его следующим образом:

$$E_{\text{C–Cu}} = \sum_i \sum_{j>i} \left(V_A(r_{ij})|\cos(\phi_{ij})|^{\delta} + V_R(r_{ij})\right), \quad (8)$$

где r_{ij} – расстояние между атомами i и j, ϕ_{ij} – угол между нормалью к поверхности графена и радиус-вектором, соединяющем атомы i и j. Параметр δ должен быть подобран таким образом, чтобы графен имел правильную муаровую структуру. При этом толщина муаровой структуры Δz при различных углах поворота Θ и энергия связи графена с поверхностью меди E должны совпадать с экспериментально измеренными величинами (см. табл. 1).

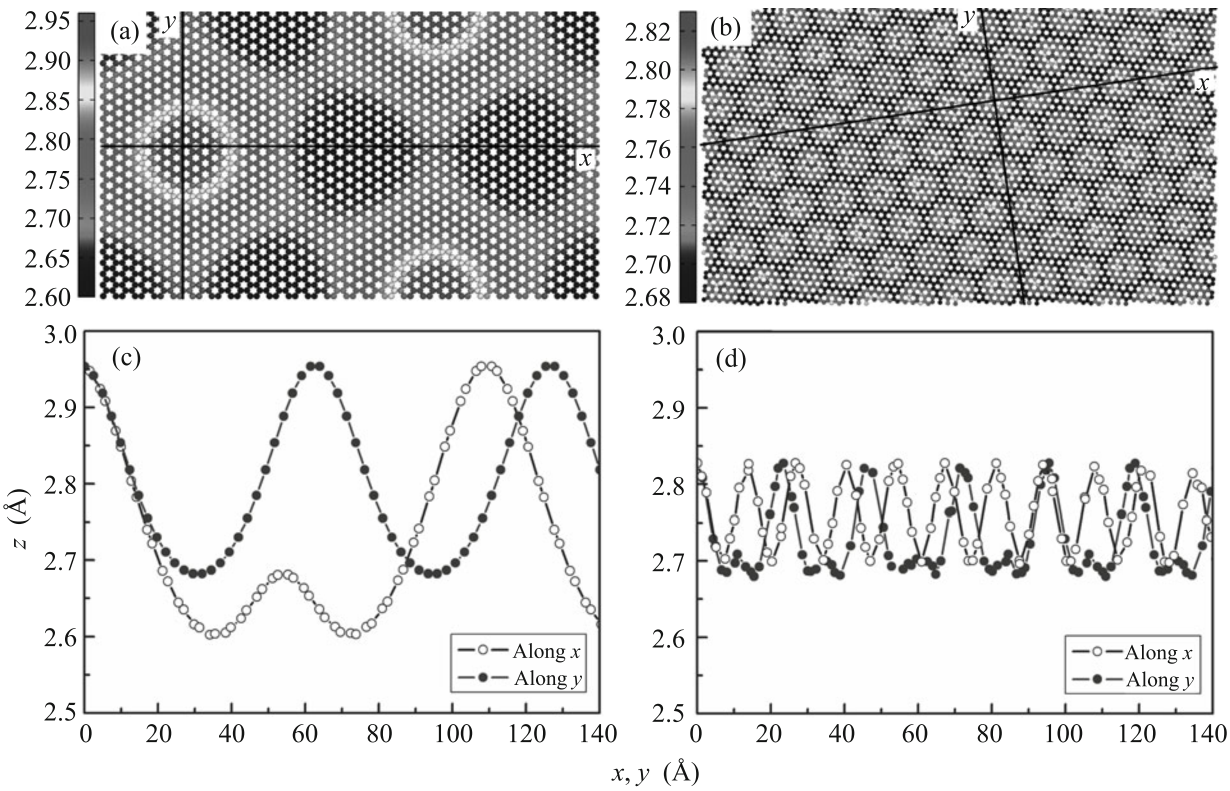

Рис. 1. (Цветной онлайн) Муаровые структуры графена на поверхности Cu(111), полученные с использованием модифицированного потенциала Морзе: (a), (c) – $\Theta = 0°$, (b), (d) – $\Theta = 10.4°$. Цвета на рисунках (a), (b) обозначают расстояния в ангстремах между графеном и поверхностью меди в соответствии с цветовой шкалой слева от рисунков. На рисунках (c), (d) показаны профили графена вдоль линий, показанных на рисунках (a), (b)

Таблица 1. Сравнение вычисленных значений энергии связи графена с поверхностью меди E, толщины муаровой структуры графена Δz, энергии связи графена с атомом меди E_1 и диффузионного барьера для прыжка атома меди по поверхности графена E_D с экспериментальными данными и результатами ТФП расчетов. В скобках указан угол поворота муаровой структуры Θ

Величина	Вычисленное значение	Данные из литературы
E, мэВ	110 (0°) 110 (10.4°)	110 ± 11 [24]
Δz, Å	0.351 (0°) 0.149 (10.4°)	0.35 ± 0.10 [11] 0.15 ± 0.05 [10]
E_1, мэВ	182.1	227.3 [12]
E_D, мэВ	1.81	3.7 [12]

Попытка модифицировать таким образом потенциал Леннарда–Джонса привела к неудовлетворительному результату: "холмы" муаровой структуры оказываются слишком узкими по сравнению с тем, что наблюдается в эксперименте [9, 11]. Более адекватным для описания ковалентной связи является потенциал Морзе. Поэтому далее мы используем в качестве потенциала взаимодействия углерод-медь модифицированный потенциал Морзе

$$E_{\text{C–Cu}} = \sum_i \sum_{j>i} A^{\text{C–Cu}} \left(e^{-2\alpha(r_{ij} - r_0^{\text{C–Cu}})} - \right.$$
$$\left. - 2e^{-\alpha(r_{ij} - r_0^{\text{C-Cu}})} |\cos(\phi_{ij})|^{\delta} \right) f_c(r_{ij}), \tag{9}$$

где $A^{\text{C–Cu}} = 0.120$ эВ, $r_0^{\text{C-Cu}} = 2.054$ Å, $\alpha = 1.05$, $\delta = 6.75$, а функция обрезания $f_c(r_{ij})$ имеет такие же параметры, как в случае взаимодействия медь-медь. Из таблицы 1 и рис. 1 видно, что при данных значениях параметров потенциала величины энергии связи графена с поверхностью меди E и толщины муаровой структуры графена Δz совпадают в пределах погрешности с экспериментально измеренными величинами, а вид муаровой структуры и профили графена вдоль линий, соединяющих "холмы" муаровой структуры, качественно согласуются с СТМ изображениями графена [9–11].

Итак, модифицированный потенциал Морзе (9) позволяет правильно моделировать муаровую структуру графена на поверхности Cu(111). Теперь можно попробовать расширить область его применения и проверить, можем ли мы его использовать для моделирования диффузии атомов меди по поверхности графена. Ниже рассматривается диффузия одиночного атома и димера меди по поверхности свободного графена. Данное исследование необходимо для демонстрации возможности использования потенциала (9) при решении более сложных задач, связанных с диффузией атомов.

Из соображений симметрии очевидно, что равновесные положения атома меди на поверхности графена могут находиться в точках одного из трех типов: над атомом углерода (T), над серединой ковалентной связи C–C (B) или над центром шестиугольника, образованного атомами углерода (H)[2]. Энергия связи атома меди с графеном максимальна в положении (T) и равна $E = 182.1$ мэВ. В положениях (B) и (H) энергия связи оказывается ниже на 1.81 и 13.44 мэВ соответственно. Таким образом, диффузионный барьер для прыжка атома меди по поверхности графена равен $E_D = 1.81$ мэВ. Эти результаты хорошо согласуются с результатами ТФП расчетов (см. табл. 1).

Характер диффузии атома меди по поверхности графена существенно зависит от температуры. Согласно приведенным выше величинам энергии связи мы ожидаем, что при температуре ниже 1.81 мэВ$/k_{\mathrm{B}} \approx 21$ K диффузия будет иметь прыжковый характер. В этом случае коэффициент диффузии атома может быть вычислен по формуле [25]

$$D = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{h}\frac{nl^2}{4}\exp\left(-\frac{\Delta F}{k_{\mathrm{B}}T}\right), \qquad (10)$$

где $n = 3$ – количество направлений диффузии атома, $l = 2.46$ Å – расстояние между устойчивыми положениями атома, $\Delta F = E_D + \Delta f_{\mathrm{vib}}$ – разница свободных энергий атома в равновесном положении и в седловой точке, f_{vib} – колебательная свободная энергия атома.

Коэффициент диффузии атома может быть вычислен методом МД согласно формуле Эйнштейна

$$D = \frac{\left\langle \Delta x(t)^2 + \Delta y(t)^2 \right\rangle}{4t}, \qquad (11)$$

где $\Delta x(t)$ и $\Delta y(t)$ – смещения атома относительно начального положения в плоскости графена. Усреднение проводится по различным траекториям атома меди. Зависимость величины $\ln\alpha \equiv \ln(4D/T)$ от обратной температуры $1/T$ представлена на рис. 2. На вставках изображены примеры траекторий атома меди при температурах 7 и 50 K. Видно, что точки, отвечающие прыжковому механизму диффузии атома лежат вдоль прямой линии, проведенной методом наименьших квадратов. Из угла наклона этой прямой следует, что $\Delta F = 1.28 \pm 0.04$ мэВ, откуда $\Delta f_{\mathrm{vib}} = -0.53$ мэВ. Мы видим, что разность колебательных свободных энергий Δf_{vib} оказывается одного порядка величины с диффузионным барьером E_D, поэтому ей нельзя пренебрегать при моделировании диффузии атомов меди по поверхности графена[3].

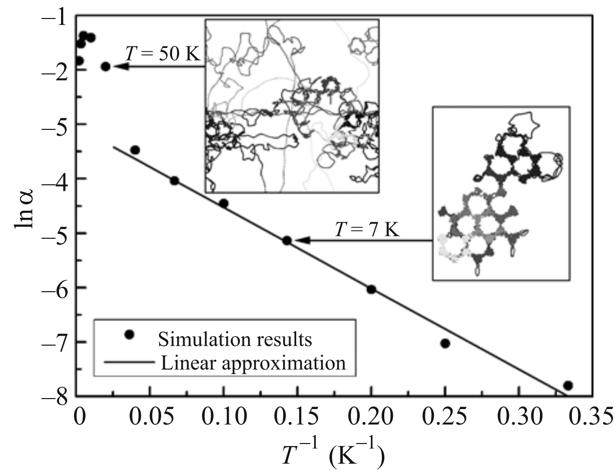

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость натурального логарифма величины $\alpha = 4 \cdot 10^8 \frac{D}{[\mathrm{m}^2/\mathrm{s}]}\frac{[K]}{T}$ от обратной температуры T^{-1} для диффузии атома меди по поверхности свободного графена. На вставках изображены траектории атома меди при температурах 7 и 50 K

Аналогичные вычисления были выполнены для диффузии димера меди по поверхности графена. Результаты представлены на рис. 3. Движение димера складывается из перемещения его центра масс и вращения атомов вокруг центра масс. При низких температурах (3–7 K) преобладает вращательное движение димера. При повышении температуры до 15–100 K происходит диффузия почти свободно вращающегося димера. Поэтому на зависимости величины $\ln\alpha$ от обратной температуры $1/T$ можно выделить два прямолинейных участка, отвечающих поступательному и вращательному движению димера. Из линейной аппроксимации этих участков зависимости находим величины ΔF для поступательного 4.32 ± 0.13 мэВ и вращательного 0.33 ± 0.04 мэВ движения димера.

[2] Обозначения T, B, H происходят от английских слов "*top*", "*bond*" и "*hollow*".

[3] Отметим, что грубая оценка по формуле Аррениуса без учета вклада колебательной свободной энергии приводит к неправильной температурной зависимости коэффициента диффузии. Кроме того, как видно из рис. 2, существенные отклонения от закона Аррениуса начинаются при температуре выше 25 K.

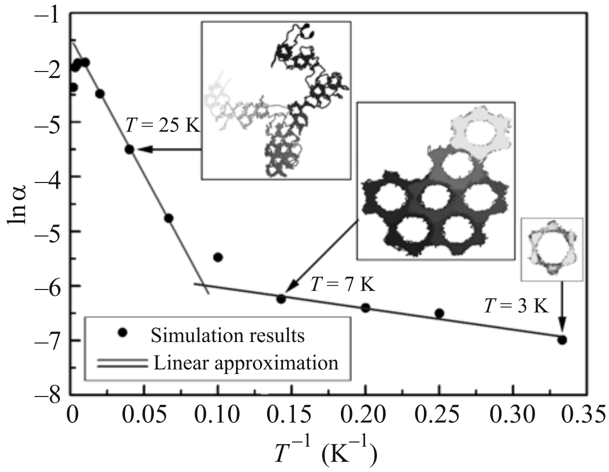

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость натурального логарифма величины $\alpha = 4 \cdot 10^8 \frac{D}{[\mathrm{m}^2/\mathrm{s}]} \frac{[K]}{T}$ от обратной температуры T^{-1} для диффузии димера меди по поверхности свободного графена. На вставках изображены траектории атомов меди при температурах 3, 7 и 25 К

Итак, мы показали, что использование модифицированного потенциала Морзе (9) приводит к правильному моделированию муаровой структуры графена на поверхности меди. Муаровая структура качественно согласуется с изображениями, полученными экспериментально с помощью сканирующего туннельного микроскопа [9–11], а толщина муаровой структуры и энергия связи графена с поверхностью меди в пределах погрешности совпадают с экспериментальными данными [10, 11, 24]. Кроме того, модифицированный потенциал Морзе дает адекватные значения энергии связи и диффузионного барьера для атома меди на поверхности графена. При этом оказывается, что энергия связи атома меди с графеном максимальна, если он находится в положении над атомом углерода (Т). Согласно результатам ТФП вычислений [12] положение (Т) энергетически выгодно также для атомов свинца и золота. Поэтому мы ожидаем, что потенциал (9) с другими параметрами может быть использован для моделирования диффузии этих атомов по поверхности графена.

Другим важным результатом нашей работы является оценка разностей свободных энергий ΔF для диффузии атома и димера меди по поверхности графена. Показано, что в случае диффузии одиночного атома вклад от разности колебательных свободных энергий Δf_{vib} оказывается одного порядка с диффузионным барьером E_D. Поэтому при моделировании диффузии величиной Δf_{vib} нельзя пренебрегать.

При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета М.В.Ломоносова (НИВЦ МГУ) [26].

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Nature **438**, 197 (2005).
3. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
4. M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, and F. Guinea, Phys. Rep. **496**, 109 (2010).
5. E. Nakhmedov, E. Nadimi, S. Vedaei, O. Alekperov, F. Tatardar, A. I. Najafov, I. I. Abbasov, and A. M. Saletsky, Phys. Rev. B **99**, 125125 (2019).
6. J. Wintterlin and M.-L. Bocquet, Surf. Sci. **603**, 1841 (2009).
7. H. Tetlow, J. P. de Boer, I. J. Ford, D. D. Vvedensky, J. Coraux, and L. Kantorovich, Phys. Rep. **542**, 195 (2014).
8. И. В. Антонова, УФН **183**, 10 (2013).
9. L. Gao, J. R. Guest, and N. P. Guisinger, Nano Lett. **10**, 3512 (2010).
10. P. Süle, M. Szendrö, C. Hwang, and L. Tapasztó, Carbon **77**, 1082 (2014).
11. L. Zhao, K. T. Rim, H. Zhou, R. He, T. F. Heinz, A. Pinczuk, G. W. Flynn, and A. N. Pasupathy, Solid State Comm. **151**, 509 (2011).
12. X. Liu, Y. Han, J. W. Evans, A. K. Engstfeld, R. J. Behm, M. C. Tringides, M. Hupalo, H.-Q. Lin, L. Huang, K.-M. Ho, D. Appy, P. A. Thiel, and C.-Z. Wang, Prog. Surf. Sci. **90**, 397 (2015).
13. I. Hamada and M. Otani, Phys. Rev. B **82**, 153412 (2010).
14. T. Olsen, J. Yan, J. J. Mortensen, and K. S. Thygesen, Phys. Rev. Lett. **107**, 156401 (2011).
15. X. Shi, Q. Yin, and Y. Wei, Carbon **50**, 3055 (2012).
16. A. V. Sidorenkov, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, Eur. Phys. J. B **89**, 220 (2016).
17. W. G. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 3 (1985).
18. G. J. Martyna, M. E. Tuckerman, D. J. Tobias, and M. L. Klein, Mol. Phys. **87**, 5 (1996).
19. D. W. Brenner, Phys. Rev. B **42**, 9458 (1990).
20. F. Cleri and V. Rosato, Phys. Rev. B **48**, 22 (1993).
21. T. Siahaan, O. Kurnosikov, H. J. M. Swagten, B. Koopmans, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, Phys. Rev. B **94**, 195435 (2016).
22. S. A. Dokukin, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, J. Alloys Compd. **763**, 719 (2018).

23. S. V. Kolesnikov and A. M. Saletsky, JETP Lett. **108**, 18 (2018).
24. T. Yoon, W. C. Shin, T. Y. Kim, J. H. Mun, T.-S. Kim, and B. J. Cho, Nano Lett. **12**, 1448 (2012).
25. U. Kürpick and T. S. Rahman, Surf. Sci. **383**, 137 (1997).
26. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale (Boca Raton, United States), Chapman Hall/CRC Computational Science*, Boca Raton, United States (2013), p. 283307.

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 107 – 111

Микроволновое фотосопротивление двумерного топологического изолятора в HgTe квантовой яме

А. С. Ярошевич[+1)], *З. Д. Квон*[+*], *Г. М. Гусев*[×], *Н. Н. Михайлов*[+*]

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

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

[×] *Instituto de Fisica da Universidade de Sao Paulo, 135960-170 Sao Paulo, SP, Brazil*

Поступила в редакцию 6 ноября 2019 г.
После переработки 6 декабря 2019 г.
Принята к публикации 6 декабря 2019 г.

Проведено экспериментальное исследование вызванного воздействием излучения в диапазоне частот 110–169 ГГц микроволнового фотосопротивления двумерного топологического изолятора в HgTe квантовой яме с инверсным спектром. Установлено два механизма формирования этого фотосопротивления: первый связан с переходами между дисперсионными ветками краевых токовых состояний, второй – с воздействием излучения на объем квантовой ямы.

DOI: 10.31857/S0370274X20020101

Двумерный топологический изолятор (ТИ) в квантовых ямах с инверсным зонным спектром на основе HgTe вот уже более десяти лет является наиболее надежной и поэтому интенсивно исследуемой экспериментальной реализацией двумерного топологического изолятора. К настоящему времени в нем изучен целый ряд явлений, начиная с транспортных и шумовых [1–7] и заканчивая фотоэлектрическими, такими как фотогальванический эффект, вызванный возникновением киральных спиновых фототоков, и терагерцовое фотосопротивление (ФС), обусловленное оптическими переходами между краевыми геликоидальными состояниями [8, 9].

В данной работе впервые исследовано фотосопротивление двумерного ТИ, возникающее при облучении микроволновым излучением в диапазоне частот 110 –169 ГГц. Экспериментальные образцы представляли собой микроструктуры специальной холловской геометрии, снабженные полупрозрачным TiAu затвором (см. рис. 1a), изготовленные на основе HgTe квантовых ям толщиной 8–8.2 нм, в которых реализуется инверсный энергетический спектр. Подробное описание структур было дано ранее [9]. Образцы освещались микроволновым излучением в диапазоне частот 110–169 ГГц через волновод. Интенсивность излучения на выходе волновода лежала в пределах (10–100) мВт / см^2. Фотосопротивление измерялось с помощью методики двойного синхронного детектирования на частоте модуляции излучения 22 Гц при пропускании через образец тока частотой 1.1 Гц и величиной 10–100 нА, исключающей разогрев электронов. Отметим также, что возможный емкостный вклад в фотосигнал и соответствующее искажение его фазы были ничтожно малы при измеряемых в эксперименте сопротивлениях (меньше 1 МОм) и используемых частотах модуляции (22 Гц) вследствие малой емкости структуры (около 0.1 пФ). Эксперименты проводились в диапазоне температур 1.5–30 К. Было изучено две разных группы образцов: с диффузионным и квазибаллистическим транспортом. Обе группы изготавливались на основе одной и той же исходной квантовой ямы и по одной и той же технологии. Подвижность электронов в яме при их концентрации $n_s = 1 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ была равна $\mu = 3 \cdot 10^4$ см^2/Вс. Разделение образцов на диффузионные и квазибаллистические происходило на основе измерений величины локального сопротивления $R^L_{14,65}$ (т.е. сопротивления самого короткого мостика с длиной $L = 3.2$ мкм, когда ток I пропускается между контактами 1 и 4, а падение напряжения V измеряется между контактами 6 и 5) в максимуме его зависимости от затворного напряжения V_g. Если $R^{\max}_{14,65} = \mathrm{h}/2\mathrm{e}^2$, то реализуется баллистический режим, а если $R^{\max}_{14,65} \gg \mathrm{h}/2\mathrm{e}^2$, то диффузионный. И здесь следует отметить, что даже образцы, изготовленные на основе одной и той же квантовой ямы и по одной и той же технологии, демонстрируют и баллистический, и диффузионный режим. Это является свидетельством того, что в реальных двумерных

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

топологических изоляторах отсутствует универсальная топологическая защита от обратного рассеяния.

Начнем описание эксперимента с результатов, полученных для образцов, характеризующихся диффузионным транспортом, точнее с анализа их транспортного отклика. На рисунке 1b показаны зависимости от эффективного затворного напряжения $V_g^{\rm eff} = V_g - V_g^{\max}$ (V_g – затворное напряжение, $V_g^{\max}$ – величина затворного напряжения, соответствующая максимуму сопротивления) локального $R^L_{14,65}(V_g^{\rm eff})$ и нелокального $R^{nL}_{62,53}(V_g^{\rm eff})$ ($I = 6,2$; $V = 5,3$) сопротивления, измеренного на самой короткой части холловского мостика (см. рис. 1a). Наблюдается кар-

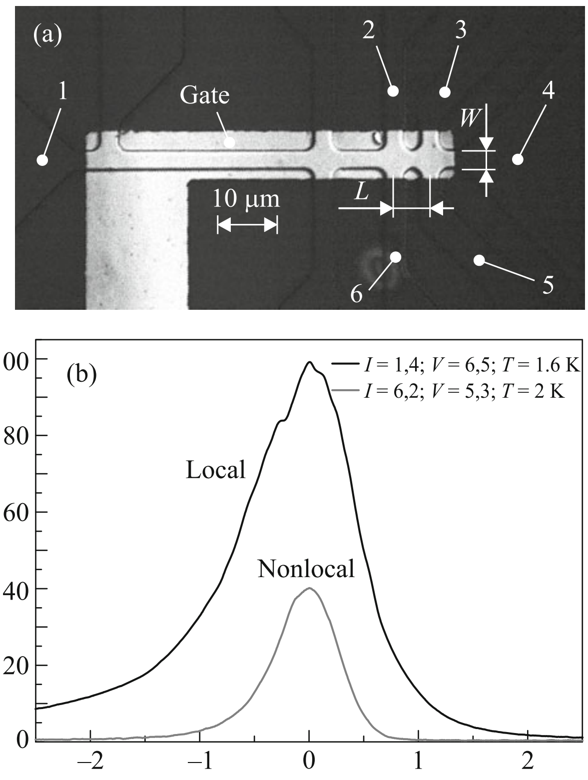

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Фотография микроструктуры специальной холловской геометрии. (b) – Зависимости локального $R^L_{14,65}(V_g^{\rm eff})$ и нелокального $R^{nL}_{62,53}(V_g^{\rm eff})$ сопротивления от эффективного затворного напряжения

тина, качественно совпадающая с той, что получается для всех двумерных ТИ в HgTe квантовых ямах, находящихся в указанном выше режиме [10]. Сопротивление мало при смещениях, соответствующих положению уровня Ферми (E_F) в зоне проводимости, проходит через максимум, равный 100 кОм для локального и 40 кОм для нелокального сопротивления в точке зарядовой нейтральности (ТЗН), в этот момент уровень Ферми проходит середину щели. Отметим, что, когда он попадает в разрешенные зоны, значение нелокального сопротивления становится, как и должно быть, ничтожно малым в сравнении с локальным. На рисунке 2 представлены эти же

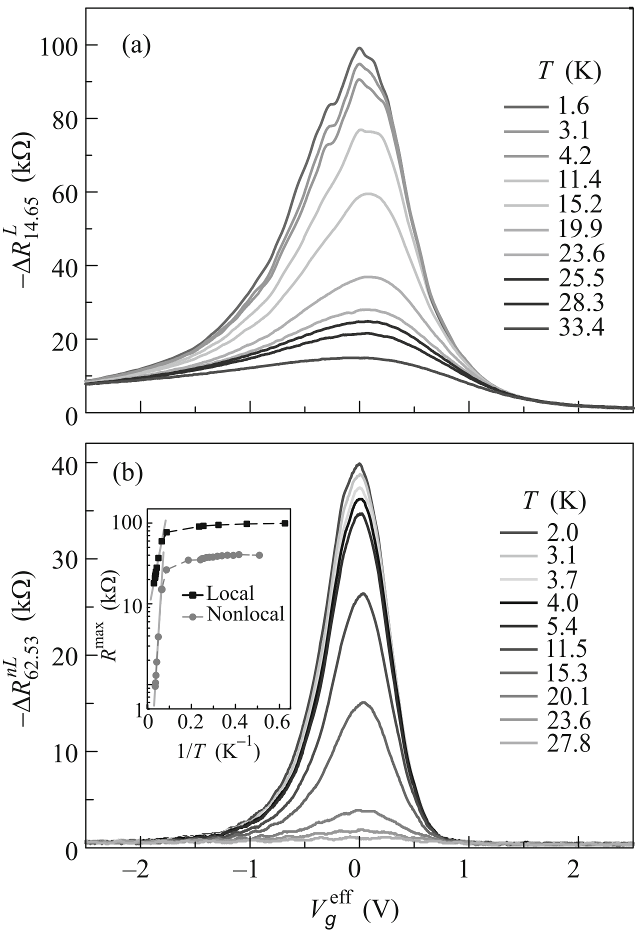

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости локального $R^L_{14,65}(V_g^{\rm eff})$ и нелокального $R^{nL}_{62,53}(V_g^{\rm eff})$ сопротивления от эффективного затворного напряжения при различных температурах. На вставке показаны зависимости величины пика $R^{\max}_{14,65}$ и $R^{\max}_{62,53}$ от температуры

зависимости при различных температурах. Хорошо видно, что при понижении температуры, сопротивление растет для обеих транспортных конфигураций. На вставке показаны зависимости от температуры в точке максимума величин локального и нелокального сопротивления. Хорошо видно, что в диапазоне температур 10–30 К они носят экспоненциальный характер, отражающий вымораживание объема, причем величина энергии активации оказалась разной: для локальной геометрии – 80 К, а для нелокальной – 200 К. Скорее всего, этот факт отражает неоднородность объемной щели в плоскости квантовой ямы, которая может быть связана с неоднородностью как толщины квантовой ямы, так и степени беспорядка. При $T < 10\,\mathrm{K}$ рост сопротивления становится значительно более медленным и описывается уже степенной функцией. Такое поведение краевого сопротивления было обнаружено и описано ранее [11] и обусловлено обратным рассеянием, индуцированным электрон-электронным взаимодействием [12].

На рисунке 3 представлены результаты измерения зависимости ФС от затворного напряжения как в локальной $\triangle R^L_{14,65}(V_g^{\mathrm{eff}})$, так и в нелокальной $\triangle R^{nL}_{62,53}(V_g^{\mathrm{eff}})$ геометрии. Хорошо видно, что ФС существует в обеих геометриях, причем величина нелокального сигнала сравнима с величиной локального, что однозначно свидетельствует о том, что наблюдаемый микроволновый отклик связан с изменением именно характера краевого транспорта. Знак наблюдаемого ФС отрицателен, т.е. под воздействием излучения сопротивление уменьшается. Рисунок 3 также ясно показывает, что максимумы зависимостей $\triangle R^L(V_g^{\mathrm{eff}})$ и $\triangle R^{nL}(V_g^{\mathrm{eff}})$ совпадают с максимумами зависимостей $R^L(V_g^{eff})$ и $R^{nL}(V_g^{\mathrm{eff}})$, и, таким образом, максимальный сигнал ФС наблюдается, когда уровень Ферми лежит в середине запрещенной зоны, т.е. когда транспорт полностью обусловлен краевыми состояниями. Более того, сравнение полуширины кривых ФС и сопротивления показывает, что для локального отклика затворные зависимости ФС в два раза уже, чем такие же зависимости сопротивления. Все это указывает на тот факт, что наблюдаемое ФС не связано с эффектами разогрева системы, а вызвано именно фотовозбужденными одномерными дираковскими фермионами, возникающими при переходах между краевыми ветками. Тот факт, что интенсивные дипольные переходы между ними возможны, был теоретически доказан в недавней работе [13]. Для того чтобы продемонстрировать неразогревный характер обнаруженного ФС, на рис. 3 показано сравнение зависимостей ФС от затворного напряжения с такими же зависимостями уже разогревной добавки к сопротивлению, определенной из температурной зависимости локального и нелокального сопротивлений исследуемого ТИ (рис. 2). Хорошо видно, что в локальной конфигурации полуширина кривых для ФС заметно (в два раза) уже, чем для разогревной добавки, а в нелокальной, когда обе зависимости отражают именно краевой транспорт, их полуширины совпадают. Фактически, разогревная добавка повторяет затворную зависимость для сопротивления. Описанный анализ позволяет сделать уже однозначный вывод о том, что

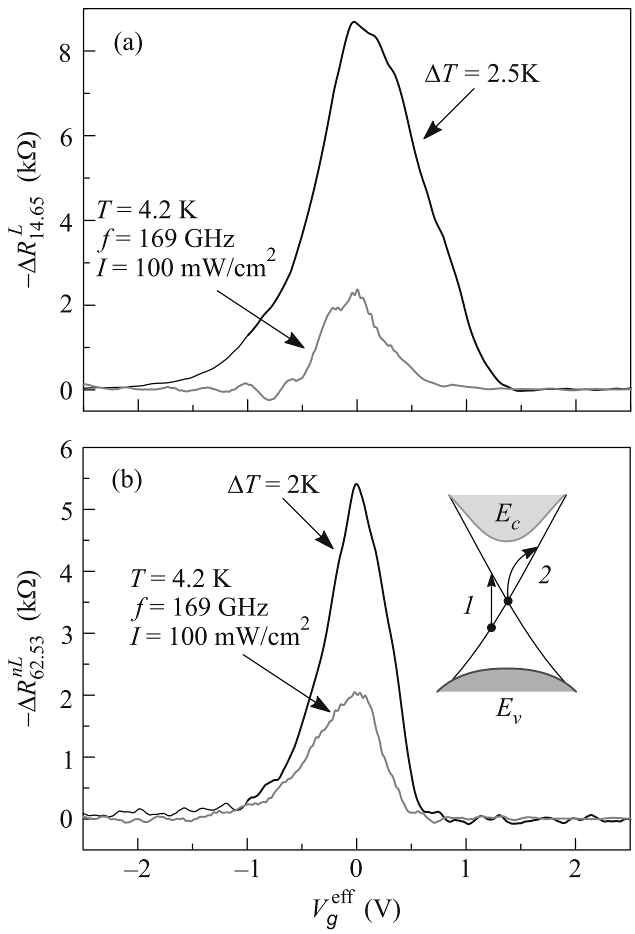

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости от эффективного затворного напряжения: (a) – локального $\triangle R^L_{14,65}(V_g^{\mathrm{eff}})$ и (b) – нелокального $\triangle R^{nL}_{62,53}(V_g^{\mathrm{eff}})$ ФС. Для сравнения приведены аналогичные зависимости для разогревной добавки к сопротивлению $\triangle R^{\triangle T}(V_g^{\mathrm{eff}})$. На вставке: *1* – прямые переходы, *2* – переходы, обусловленные друдевским поглощением

найденное ФС двумерного топологического изолятора определяется возбуждением неравновесных дираковских фермионов при переходах между краевыми геликоидальными ветками.

Перейдем теперь к анализу результатов, полученных для образцов с квазибаллистическим транспортом. Их транспортные характеристики в локальной и нелокальной конфигурации показаны на рис. 4a. Локальное сопротивление показывает в максимуме величину даже немного ниже, чем $\mathrm{h}/2\mathrm{e}^2$, что указывает на реализацию баллистического транспорта, однако при наличии небольшой объемной утечки. Измерения в нелокальной геометрии подтверждают отмеченный факт (на рис. 4c и d показано распределение токов в образце при измерениях в локальной и нелокальной геометрии соответственно). Видно, что

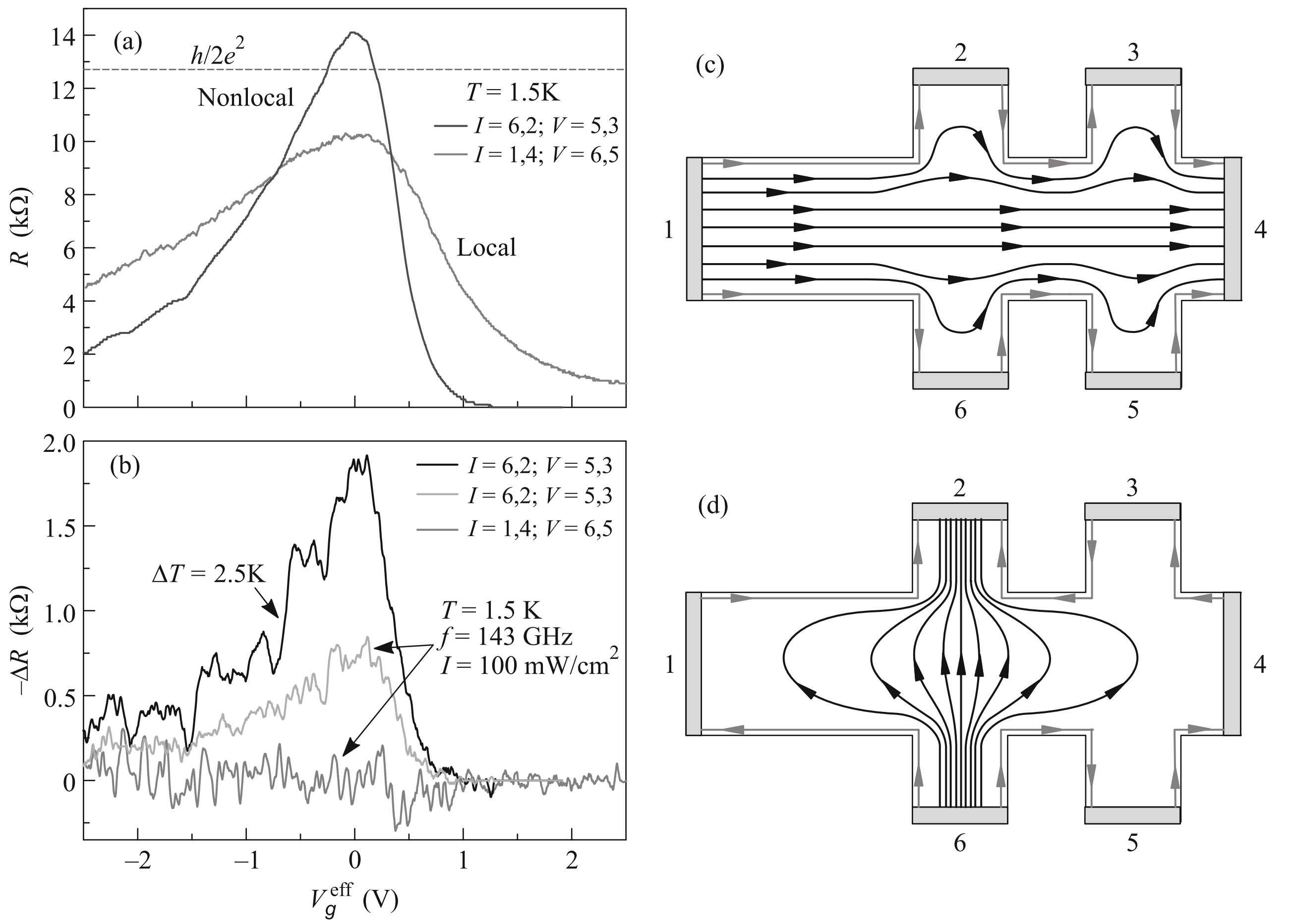

Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости локального $R^L_{14,65}(V_g^{\mathrm{eff}})$ и нелокального сопротивления $R^{nL}_{62,53}(V_g^{\mathrm{eff}})$ от эффективного затворного напряжения. (b) – Зависимости локального $\triangle R^L_{14,65}(V_g^{eff})$ и нелокального $\triangle R^{nL}_{62,53}(V_g^{eff})$ ФС от эффективного затворного напряжения. Для сравнения приведена аналогичная зависимость для разогревной добавки к нелокальному сопротивлению $\triangle R^{\triangle T}_{62,53}(V_g^{\mathrm{eff}})$. (c) и (d) – распределение токов в образце с объемной утечкой при измерениях в локальной и нелокальной геометрии соответственно. Черным цветом выделены линии тока через объем, красным – ток краевых состояний; отметим, что в отсутствие объемной утечки ток идет только по краевым состояниям

величина нелокального сопротивления в максимуме лишь слегка превышает значение такого же локального сопротивления, тогда как, если бы транспорт осуществлялся только краевыми состояниями, $R^{nL}_{\max}(\mathrm{V}_g^{\mathrm{eff}})/R^L_{\max}(V_g^{\mathrm{eff}}) = 4$. На рисунке 4b показаны результаты измерения микроволнового сопротивления, также измеренного в локальной и нелокальной геометриях. По этому рисунку хорошо видно, что для описываемых образцов наблюдается картина, отличная для образцов первой группы. Как ясно показывает указанный рисунок, микроволновое сопротивление (знак которого также отрицателен) наблюдается только в нелокальной геометрии. В локальном отклике реакция образца на излучение отсутствует на уровне имеющихся шумов. Подобное поведение микроволнового сопротивления для образцов с баллистическим транспортом свидетельствует о своеобразной реакции топологического изолятора, у которого имеется небольшая объемная утечка. Его можно объяснить следующим образом. Падающее на образец излучение в основном меняет объемную проводимость за счет разогревного эффекта. Тем самым оно изменяет величину объемной утечки, но это изменение столь мало, что его вклад при измерении в локальной геометрии не наблюдается, так как просто складывается с сопротивлением краевого канала. Реакция же нелокального сопротивления на изменение объемной проводимости должна быть значительно более сильной. Попросту говоря, в локальной геометрии $\triangle R^L \approx \triangle\rho_{xx}(R_{\mathrm{edge}}/\rho_{xx})^2$. В нелокальной же геометрии $\triangle R^{nL} \approx \triangle\rho_{xx}\cdot\exp(-\pi L/W)$, т.е. на порядок больше. R_{edge} – краевое сопротивление, ρ_{xx} – удельное сопротивление объема, $\triangle\rho_{xx}$ – изменение объемного сопротивления под действием излучения, W – ширина микромостика, L – расстояние между потенциометрическими контактами (см. рис. 1a). Именно подобный эффект и наблюдается в образцах с баллистическим транспортом. Отметим, что вклад, вызванный переходами между краевыми ветками, определить не удалось. Скорее всего, это вызвано тем, что он значительно слабее наблюдаемого объемного. Обсудим в заключение микроскопические механизмы ФС нашего топологического изолятора, вызванного переходами с участием краевых веток. Они могут быть связаны с двумя процессами: первый, как было уже отмечено выше, с поглощением, обусловленным переходами между краевыми ветками [13], а второй с друдевским поглощением этими же ветками (см. вставку рис. 3b) [14]. Максимум поглощения, вызванного первым из указанных выше механизмов, очевидным образом соответствует положению уровня Ферми, совпадающему с дираковской точкой, т.е. ТЗН. Именно так ведет себя ФС в эксперименте. Друдевское поглощение будет пропорционально плотности состояний одномерных дираковских электронов и дырок [14], которая постоянна и не зависит от энергии. Это должно привести к тому, что когда уровень Ферми будет проходить через щель, ФС не должно зависеть от его положения и, как следствие, от затворного напряжения, что полностью противоречит эксперименту. Таким образом, эксперимент однозначно свидетельствует, что наблюдаемое в эксперименте микроволновое ФС, обусловленное взаимодействием излучения с дираковскими ветками, вызвано оптическими переходами между дираковскими ветками, которые, как показано в [13], имеют дипольный характер и разрешены вследствие нарушения пространственной симметрии на границе HgTe/CdHgTe.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # РНФ 16-12-10041-П) и Исследовательского фонда Сан-Паулу FAPESP (Бразилия).

1. M. König, H. Buhman, L. M. Molencamp, T. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 031007 (2008).
2. A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and Sh.-Ch. Zhang, Science **325**, 294 (2009).
3. G. M. Gusev, E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, A. D. Levin, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretsky, Phys. Rev. B **85**, 045310 (2014).
4. E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, G. M. Gusev, A. Levin, O. E. Raichev, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretsky, Phys. Rev. Lett. **114**, 126802 (2015).
5. E. S. Tikhonov, D. V. Shovkun, V. S. Khrapai, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretsky, Письма в ЖЭТФ **101**, 787 (2015).
6. A. Kononov and E. V. Deviatov, Письма в ЖЭТФ **104**, 831 (2016).
7. S. U. Piatrusha, E. S. Tikhonov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky, and V. S. Khrapai, Phys. Rev. Lett. **123**, 056801 (2019).
8. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr, S. Gebert, J. Bärenfänger, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky, Z. D. Kvon, J. Ziegler, D. Weiss, and S. D. Ganichev, Phys. Rev. B **95**, 201103 (R) (2017).
9. Z. D. Kvon, K.-M. Dantscher, M. T. Scherr, A. S. Yaroshevich, and N. N. Mikhailov, Письма в ЖЭТФ **101**, 787 (2015).
10. G. M. Gusev, Z. D. Kvon, E. B. Olshanetsky, and N. N. Mikhailov, Solid State Commun. **302**, 113701 (2019).
11. G. M. Gusev, Z. D. Kvon, A. D. Levin, E. B. Olshanetsky, O. E. Raichev, and N. N. Mikhailov, Sci. Rep. **9**, 831 (2019).
12. N. Kainaris, I. V. Gornyi, S. T. Carr, and A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **90**, 075118 (2014).
13. M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 035301 (2019).
14. M. M. Mahmoodian and M. V. Entin, Phys. Status Solidi B **256**, 1800652 (2019).

Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 112 – 114 © 2020 г. 25 января

Точные решения стационарного аксиально симметричного уравнения Шредингера

А. Г. Кудрявцев[1)]

Институт прикладной механики РАН, 125040 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 ноября 2019 г.
После переработки 9 декабря 2019 г.
Принята к публикации 9 декабря 2019 г.

Рассматривается стационарное уравнение Шредингера в случае аксиальной симметрии. На основе формул обобщенного преобразования Мутара получены примеры двумерных потенциалов и точных решений уравнения Шредингера.

DOI: 10.31857/S0370274X20020113

Стационарное уравнение Шредингера в безразмерном виде $(\Delta - u\,(x,y,z))\,Y\,(x,y,z) = 0$ является математической моделью различных физических явлений. В случае $u = -E + V\,(x,y,z)$ это уравнение описывает нерелятивистскую квантовую систему с энергией E [1]. В случае $u = -\omega^2/c\,(x,y,z)^2$ уравнение описывает распространение акустических волн, имеющих частоту ω в неоднородной среде со скоростью звука c, и под именем уравнения Гельмгольца широко используется в теории волн [2]. Случай фиксированной частоты ω интересен при моделировании в акустической томографии [3]. Случай фиксированной энергии E для двумерного уравнения интересен в многомерной теории обратного рассеяния в связи с двумерными интегрируемыми нелинейными системами [4, 5].

В случае аксиальной симметрии стационарное уравнение Шредингера в цилиндрических координатах имеет вид

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - u\,(r,z)\right) Y\,(r,z) = 0. \qquad (1)$$

Эффективным инструментом для нахождения точных решений одномерного уравнения Шредингера является преобразование Дарбу [6]. Обобщением одномерного преобразования Дарбу на случай двумерного уравнения Шредингера в декартовых координатах является преобразование Мутара [7]. В работах [8, 9] рассмотрено нелокальное преобразование Дарбу двумерного стационарного уравнения Шредингера в декартовых координатах, показано, что специальный случай нелокального преобразования Дарбу совпадает с преобразованием Мутара. В работе [10] на основе подхода статей [8, 9] рассмотрено стационарное аксиально симметричное уравнение Шредингера и получены формулы обобщенного преобразования Мутара для указанного уравнения.

Формулы обобщенного преобразования Мутара для уравнения (1) имеют вид [10]:

$$\tilde{u}\,(r,z) = u\,(r,z) - 2\,\frac{\partial^2}{\partial r^2}\ln\left(Y_0\,(r,z)\right) + \frac{1}{r^2} - 2\,\frac{\partial^2}{\partial z^2}\ln\left(Y_0\,(r,z)\right), \qquad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(Y_0\,(r,z)\,\tilde{Y}\,(r,z)\right) - \left(Y_0\,(r,z)\right)^2\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{Y\,(r,z)}{Y_0\,(r,z)}\right) = 0, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(Y_0\,(r,z)\,\tilde{Y}\,(r,z)\right) + \frac{1}{r}\,Y_0\,(r,z)\,\tilde{Y}\,(r,z) + \left(Y_0\,(r,z)\right)^2\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{Y\,(r,z)}{Y_0\,(r,z)}\right) = 0. \qquad (4)$$

Здесь u – исходный потенциал уравнения (1), Y_0, Y – решения уравнения (1) с исходным потенциалом, $\tilde{u}$ – новый потенциал. Функция $\tilde{Y}$ определяется как решение совместной системы уравнений (3), (4). Функция $\tilde{Y}$ является решением уравнения (1) с новым потенциалом $\tilde{u}$.

Формулы обобщенного преобразования Мутара могут быть проверены прямыми вычислениями.

Отметим, что $Y = Y_0$, $\tilde{Y} = (r\,Y_0)^{-1}$ дает простой пример решения уравнений (3), (4).

Используем обобщенное преобразование Мутара для получения потенциалов и точных решений уравнения (1). В качестве первого примера рассмотрим $u = 0, Y_0 = r^2 - 2\,z^2, Y = z$. Из уравнений (2), (3), (4) получаем потенциал

[1)]e-mail: kudryavtsev_a_g@mail.ru

$$\tilde{u}_1 = \frac{4\,z^4 + 13\,r^4 + 20\,r^2 z^2}{\left(r^2 - 2\,z^2\right)^2 r^2}, \tag{5}$$

и решение уравнения (1) с этим потенциалом

$$\tilde{Y}_1 = \frac{4\,r^2 z^2 + r^4 + C_1}{r\left(r^2 - 2\,z^2\right)},$$

где C_1 – произвольная константа. Полученный потенциал (5) имеет сингулярности в точках обращения в нуль его знаменателя.

Для двумерного стационарного уравнения Шредингера в декартовых координатах эффективным методом получения несингулярных потенциалов является двукратное применение преобразования Мутара [9, 11]. Продолжим наш пример и применим обобщенное преобразование Мутара второй раз. Для этого возьмем $u = \tilde{u}_1$, $Y_0 = \tilde{Y}_1$. Из уравнения (2) получаем потенциал

$$\tilde{\tilde{u}}_1 = \frac{-8\left(r^2\left(\left(r^2 - 5\,z^2\right)^2 - 33\,z^4\right) + C_1\left(5\,r^2 + 2\,z^2\right)\right)}{\left(4\,r^2 z^2 + r^4 + C_1\right)^2}. \tag{6}$$

У этого потенциала знаменатель не обращается в нуль, если $C_1 > 0$.

В качестве иллюстрации получения точных решений стационарного аксиально симметричного уравнения Шредингера с помощью обобщенного преобразования Мутара получим точное решение уравнения (1) с потенциалом (6) из решения $Y_s = \frac{1}{\sqrt{r^2+z^2}}$ с потенциалом $u = 0$. Рассмотрим $Y_0 = r^2 - 2\,z^2$, $Y = Y_s$. Из уравнений (3), (4) получаем следующее решение уравнения (1) с потенциалом (5)

$$\tilde{Y}_s = \frac{rz}{\left(r^2 - 2\,z^2\right)\sqrt{r^2 + z^2}}. \tag{7}$$

Далее выбираем $Y_0 = \tilde{Y}_1, Y = \tilde{Y}_s$ и получаем из уравнений (3), (4) искомое решение уравнений (1) с потенциалом (6)

$$\tilde{\tilde{Y}}_s = \frac{3\,r^4 - C_1}{\sqrt{r^2 + z^2}\left(4\,r^2 z^2 + r^4 + C_1\right)}. \tag{8}$$

Возникающая константа интегрирования положена равной нулю.

В случае $u < 0$ уравнение (1) совпадает с уравнением Гельмгольца для неоднородной среды с аксиальной симметрией. В качестве второго примера применения обобщенного преобразования Мутара рассмотрим $u = -k^2$, $Y_0 = \sin(kz)$, $Y = \cos(kz)$. Из уравнений (2)–(4) получаем потенциал

$$\tilde{u}_2 = -k^2 + \frac{1}{r^2} + \frac{2\,k^2}{\left(\sin(kz)\right)^2} \tag{9}$$

и решение уравнения (1) с этим потенциалом

$$\tilde{Y}_2 = \frac{r^2 + C_2}{r\sin(kz)},$$

где C_2 – произвольная константа. Проведем второе обобщенное преобразование Мутара полагая $u = \tilde{u}_2, Y_0 = \tilde{Y}_2$. Из уравнения (2) получаем потенциал

$$\tilde{\tilde{u}}_2 = -k^2 + \frac{4}{\left(r^2 + C_2\right)} - \frac{8\,C_2}{\left(r^2 + C_2\right)^2}. \tag{10}$$

Этот потенциал заведомо удовлетворяет условию $\tilde{\tilde{u}}_2 < 0$ если $C_2 > 4\,k^{-2}$. Простой пример решения $\left(r\,Y_0\right)^{-1}$ для потенциала (10) имеет вид

$$\tilde{\tilde{Y}}_2 = \frac{\sin(kz)}{r^2 + C_2}.$$

Дифференциальный оператор в уравнении (1) допускает сдвиг по z. Поэтому во всех ранее полученных формулах для потенциалов и точных решений вместо z можно подставить $z + z_0$. В качестве следующего примера рассмотрим $u = -k^2$ и

$$Y_0 = \frac{\sin\left(k\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right)}{\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}},$$

$$Y = \frac{\cos\left(k\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right)}{\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}}.$$

Из уравнений (2)–(4) получаем потенциал

$$\tilde{u}_3 = -k^2 + \frac{1}{r^2} + \frac{2\,k^2}{\left(\sin\left(k\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right)\right)^2} - \frac{2\,k\cot\left(k\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right)}{\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}} \tag{11}$$

и решение уравнения (1) с этим потенциалом

$$\tilde{Y}_3 = \frac{z + z_0 + C_3\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}}{\sin\left(k\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right) r},$$

где C_3 – произвольная константа. Проводим второе преобразование, полагая $u = \tilde{u}_3, Y_0 = \tilde{Y}_3$, и получаем потенциал

$$\tilde{\tilde{u}}_3 = -k^2 + 2\left(z + z_0 + C_3\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right)^{-2} + \frac{2\,C_3\left(z + z_0\right)}{\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\left(z + z_0 + C_3\sqrt{r^2 + \left(z + z_0\right)^2}\right)^2}. \tag{12}$$

Этот потенциал для $z \geq 0$ удовлетворяет условию $\tilde{\tilde{u}}_3 < 0$, если $\frac{2}{{z_0}^2(1+C_3)} < k^2$. Простой пример решения $(r\,Y_0)^{-1}$ для потенциала (12) имеет вид

$$\tilde{\tilde{Y}}_3 = \frac{\sin\left(k\sqrt{r^2+(z+z_0)^2}\right)}{z+z_0+C_3\sqrt{r^2+(z+z_0)^2}}.$$

Рассмотренные примеры иллюстрируют, что повторное применение обобщенного преобразования Мутара может приводить к потенциалам, которые более интересны с точки зрения физической интерпретации, чем полученные при однократном преобразовании потенциалы. Для удобства построения многократных обобщенных преобразований Мутара удобно использовать формулу суперпозиции двух преобразований. Пусть Y_1 и Y_2 являются решениями уравнения (1) с потенциалом u. Применяя последовательно формулы обобщенного преобразования Мутара, получаем следующую формулу суперпозиции двух преобразований:

$$\begin{aligned}\tilde{\tilde{u}} &= u - 2\,\frac{\partial^2 \ln(F)}{\partial r^2} - 2\,\frac{\partial^2 \ln(F)}{\partial z^2} = \\ &= u + 2\left(\frac{\partial Y_2}{\partial z}\right)\left(2\,r\frac{\partial Y_1}{\partial r} + Y_1\right)F^{-1} - \\ &- 2\left(\frac{\partial Y_1}{\partial z}\right)\left(2\,r\frac{\partial Y_2}{\partial r} + Y_2\right)F^{-1} + \\ &+ 2\,r^2\left(\frac{\partial Y_2}{\partial r}Y_1 - Y_2\frac{\partial Y_1}{\partial r}\right)^2 F^{-2} + \\ &+ 2\,r^2\left(\frac{\partial Y_2}{\partial z}Y_1 - Y_2\frac{\partial Y_1}{\partial z}\right)^2 F^{-2},\end{aligned} \tag{13}$$

где F удовлетворяет совместной системе уравнений

$$\frac{\partial}{\partial z}F = r\left(\frac{\partial Y_2}{\partial r}Y_1 - Y_2\frac{\partial Y_1}{\partial r}\right), \tag{14}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}F = -r\left(\frac{\partial Y_2}{\partial z}Y_1 - Y_2\frac{\partial Y_1}{\partial z}\right). \tag{15}$$

Формулы (13)–(15) инвариантны относительно замены $Y_1 \to Y_2, Y_2 \to Y_1, F \to -F$, что отражает свойство коммутативности обобщенных преобразований Мутара, результат не зависит от порядка выбора функций Y_1, Y_2 для преобразования. Примеры решений для уравнения (1) с потенциалом (13) можно получить по формулам $\tilde{\tilde{Y}}_1 = Y_1 F^{-1}$, $\tilde{\tilde{Y}}_2 = Y_2 F^{-1}$.

Из формулы (13) видно, что в случае отсутствия особенностей у исходного потенциала u и у числителей дробей, содержащих Y_1, Y_2 и их производные (заведомо реализуется, если решения имеют вид полиномов), особенности потенциала $\tilde{\tilde{u}}$ возникают за счет нулей функции F. Так как функция F задается уравнениями (14), (15) с точностью до прибавления произвольной константы, иногда возможно сделать функцию F знакопостоянной и получить потенциал $\tilde{\tilde{u}}$ без особенностей. Как раз в рассмотренном нами первом примере $u = 0$, $Y_1 = r^2 - 2\,z^2$, $Y_2 = z$, что дает знакопостоянную при $C_1 > 0$ функцию $F = -\left(4\,r^2 z^2 + r^4 + C_1\right)/4$ и результирующий потенциал (6) не имеет особенностей. Примеры решений для этого случая:

$$\frac{r^2 - 2\,z^2}{4\,r^2 z^2 + r^4 + C_1},\ \frac{z}{4\,r^2 z^2 + r^4 + C_1}.$$

В заключение отметим, что обобщенное преобразование Мутара может быть инициировано любым точным решением стационарного аксиально симметричного уравнения Шредингера и проведено произвольное число раз. С помощью обобщенного преобразования Мутара может быть получено множество новых примеров потенцтиалов и точных решений, в том числе варианты, интересные для описания физических процессов.

1. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory,* Pergamon Press, Oxford (1977), p. 75.
2. M. B. Vinogradova, O. V. Rudenko, and A. P. Sukhorukov, *The Wave Theory,* Nauka Publishers, M. (1990), p. 168.
3. A. C. Kak and M. Slaney, *Principles of Computerized Tomographic Imaging*, Society of Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (2001), p. 205.
4. A. P. Veselov and S. P. Novikov, Soviet Math. Dokl. **30**, 705 (1984).
5. P. G. Grinevich, A. E. Mironov, and S. P. Novikov, Russ. Math. Surv. **65**, 580 (2010).
6. V. B. Matveev and M. A. Salle, *Darboux Transformations and Solitons*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1991), p. 7.
7. T. Moutard, J. Ecole Polyt. **45**, 1 (1878).
8. A. G. Kudryavtsev, Phys. Lett. A **377**, 2477 (2013).
9. A. G. Kudryavtsev, Theor. Math. Phys. **187**, 455 (2016).
10. A. G. Kudryavtsev, arXiv:1911.05023 (2019).
11. I. A. Taimanov and S. P. Tsarev, Theor. Math. Phys. **157**, 1525 (2008).

Авторский указатель томов 109–110 за 2019 г.

Содержание
Том 111, выпуск 1
Поля, частицы, ядра

Оптика, лазерная физика

Конденсированное состояние

Содержание
Том 111, выпуск 2
Поля, частицы, ядра

Оптика, лазерная физика

Плазма, гидро- и газодинамика

Конденсированное состояние

Методы теоретической физики