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 114

Выпуск 3

10 августа 2021

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.ru

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

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 147 – 153

Абляция кристаллических пластин ориентации (111) и (001) ультракороткими лазерными импульсами с вращаемой линейной поляризацией

Г. К. Красин[+1)], *М. С. Ковалев*[+*], *П. А. Данилов*[+], *Н. Г. Сцепуро*[+], *Е. А. Олейничук*[+], *С. А. Бибичева*[+*], *В. П. Мартовицкий*[+], *С. И. Кудряшов*[+]

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

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

Поступила в редакцию 24 июня 2021 г.
После переработки 25 июня 2021 г.
Принята к публикации 25 июня 2021 г.

Впервые проведены исследования зависимости пороговой плотности энергии абляции поверхности таких кристаллических материалов, как кремний и алмаз (с ориентациями (001) и (111)) от направления линейной поляризации ультракоротких импульсов различной длительности (0.3–3.3 пс) с длиной волны 515 нм. Полученные значения пороговой плотности энергии абляции $F_{\rm abl}$ демонстрируют для всех ориентированных пластин заметную зависимость от азимута поляризации лазерных импульсов для всех трех длительностей. Азимутальная модуляция величины $F_{\rm abl}$ составляет от 30 до 90 % и связывается с шириной зонной щели для разных кристаллографических направлений этих кристаллических материалов, проявляющейся, когда лазерная поляризация совпадает с этими направлениями. Полученные результаты позволят оптимизировать параметры поляризации ультракоротких лазерных импульсов для обработки различных кристаллических материалов.

DOI: 10.31857/S1234567821150015

1. Поверхностное и объемное структурирование различных материалов ультракороткими лазерными импульсами находит широкое применение в разнообразных приложениях науки и техники [1], в том числе для записи волноводов [2], производства двулучепреломляющих элементов [3, 4], формирования метаповерхностей и наноструктур [5–8], активно развивающейся 5D optical data storage, в которой генерируются массивы нанополостей или периодических нанорешеток [9, 10]. Очевидно, что одной из эффективных технологий нано- и микроструктурирования различных материалов является прямая нано-, пико- и фемтосекундная лазерная запись [11–15] при различных геометриях фокусировки, формирующая большое количество разнообразных поверхностных структур, каждая из которых может быть связана с различными механизмами взаимодействия лазерного излучения с материалом.

Ранее были проведены многочленные исследования, связанные, в том числе, и со средой, в которой происходит обработка материала, например, воздух, вода, CS_2 [16, 17]. Поверхностная и объемная модификация в жидкой среде позволяет обеспечить лучшее рассеяние тепла, что приводит к лучшему охлаждению образца и, следовательно, уменьшает связанные с нагревом повреждения, а также позволяет уменьшить загрязнение поверхности продуктами абляции [18–20]. Другим применением абляции в жидких средах под действием ультракоротких импульсов (УКИ) является получение коллоидных растворов наночастиц различных материалов [21, 22].

С другой стороны, основными параметрами взаимодействия УКИ с материалом выступают сами характеристики лазерного излучения – длина волны, длительность импульсов, их энергия и частота следования [23, 24]. В то же время поглощение излучения материалом зависит и от состояния его поляризации [25–27]. Как известно, порог разрушения материала будет разным для линейной и круговой поляризаций воздействующего на материал ультракороткого лазерного импульса [28], что объясняется различным "сечением поглощения" для данных состояний поляризаций [29, 30]. В работах [25–27] сообщается, что для многофотонного поглощения использование линейно-поляризованного излучения наиболее оптимально. Эксперименты показали, что при использовании в качестве фокусирующей системы объективов с числовыми апертурами $\mathrm{NA} < 0.4$ порог модифика-

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

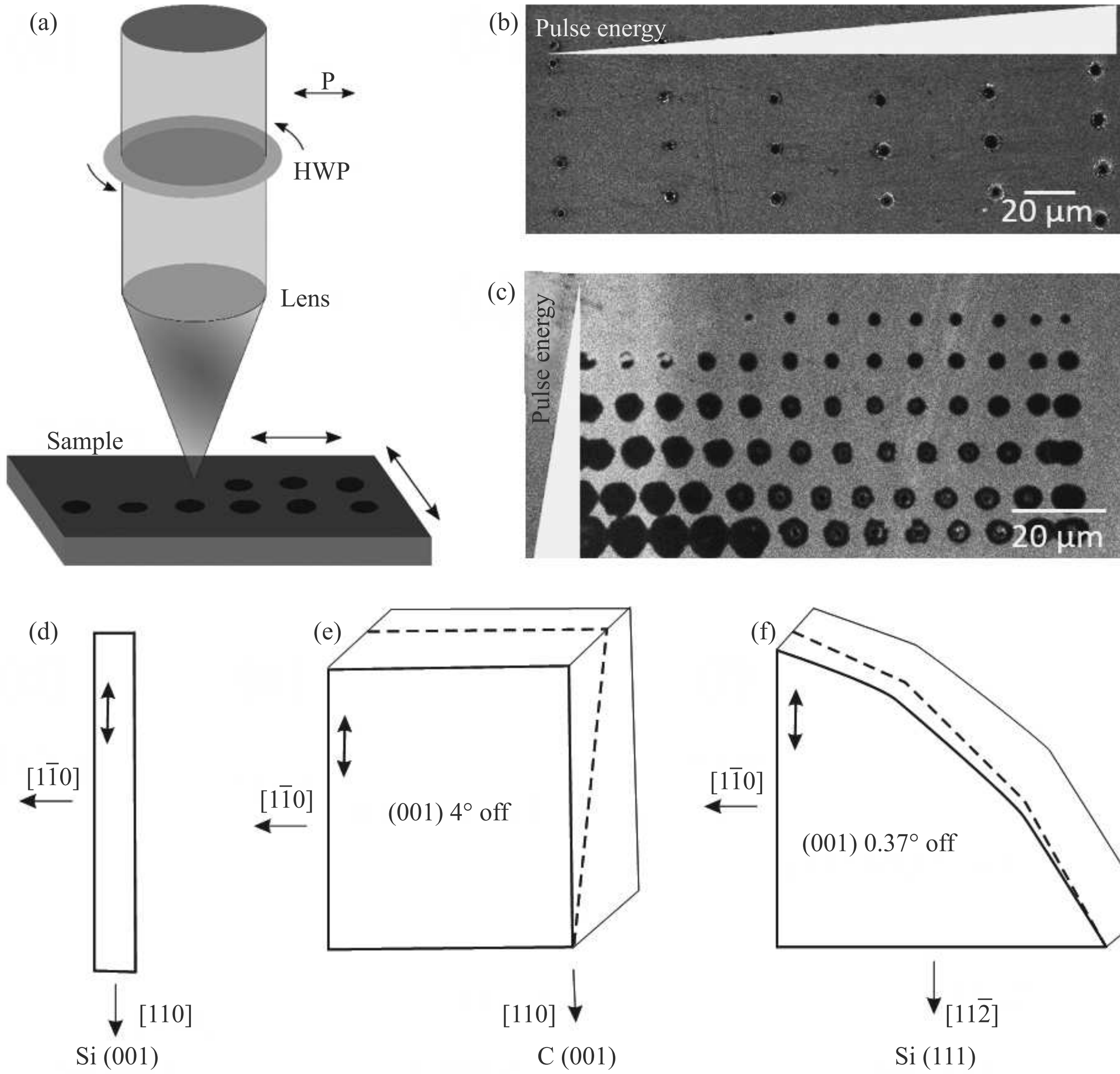

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Экспериментальная схема для создания кратеров на поверхности образцов. СЭМ снимки кремниевой (b) и алмазной (c) пластин (001) (вид сверху) с полученными кратерами при постоянном азимуте линейной поляризации и различных энергиях лазерных импульсов. (d) и (e) – Кристаллографические плоскости и направления пластин с ориентацией (001) для кремния и алмаза соответственно. Двойной стрелкой показано направление сканирования поверхности

ции ниже для круговой поляризации, а для NA > 0.4 для линейной [28]. Также были проведены исследования по обработке кристаллических материалов, в том числе сапфира и кремния, с различными ориентациями плоскостей [31, 32]. Однако не был проведен систематический анализ влияния взаимной ориентации кристаллографических плоскостей и осей материала и состояния поляризации падающего излучения на процесс его модификации.

В данной статье представлен систематический анализ абляции пластин кремния и алмаза с ориентациями (111) и (001) под воздействием УКИ с различным азимутом линейной поляризации. Исследование, предложенное в работе, позволяет повысить эффективность абляции кристаллических материалов путем оптимизации параметров лазерного излучения.

2. В качестве источника излучения использовался фемтосекундный лазер Satsuma с длиной волны второй гармоники $\lambda_{\mathrm{las}} = 515$ нм, линейной горизонтальной поляризацией излучения на выходе, варьируемой длительностью импульса $\tau \approx 0.3{-}3.3$ пс и максимальной энергией в импульсе $E_{\max} = 3.3$ мкДж в TEM00. Лазерное излучение фокусировалось на по-

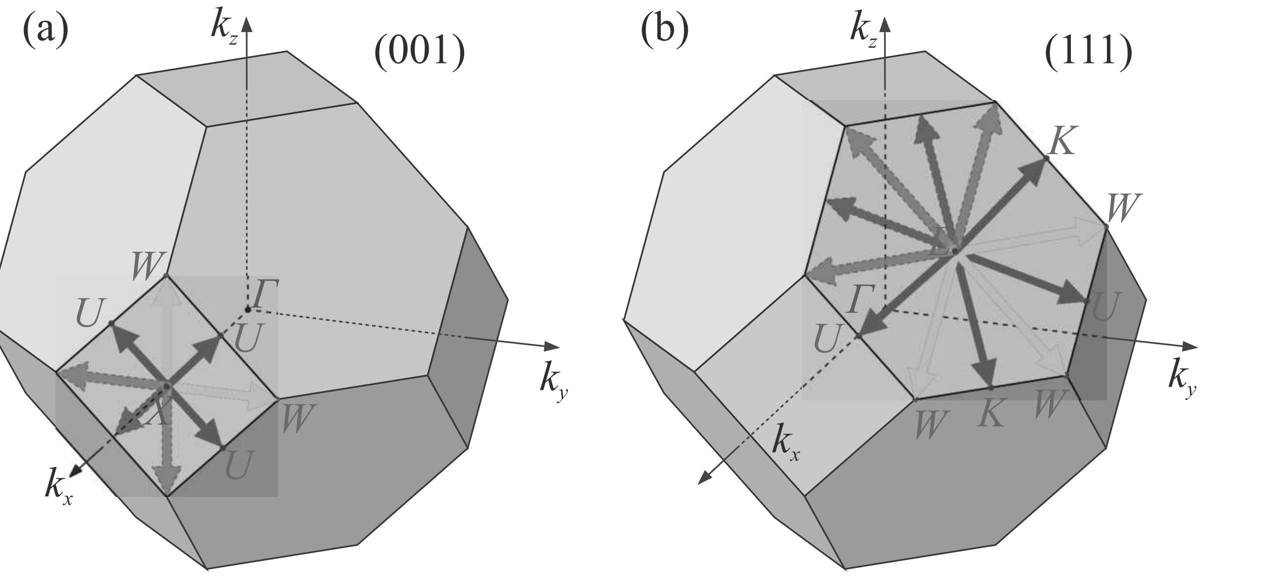

Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Первая зона Брюллиэна для кубической решетки кристалла, показывающая возможные направления для плоскости (001) (a) и для плоскости (111) (b). Сплошными линиями показаны различные кристаллографические направления, вдоль которых была ориентирована поляризация падающего излучения. Пунктиром показаны остальные направления, не задействованные в данной работе. Сиреневым цветом обозначены направления с минимальной шириной зонной щели, оранжевым – с максимальной шириной

верхность кремниевых и алмазных пластин с кристаллографическими ориентациями (111) и (001) толщиной 500 мкм и полированной передней поверхностью с помощью микрообъектива с числовой апертурой NA $= 0.65$ в пятно с радиусом $R_{1/e} \approx 0.6$ мкм (рис. 1a). Образец размещался на трехкоординатной моторизированной платформе (Standa) и в рамках одной серии (участка рис. 1b, c) перемещался линейно со скоростью 12 мкм/с и шагом перемещения 0.6 мкм. Облучение поверхности кремния происходило с частотой следования импульсов, равной 1 Гц (локальная экспозиция 1 импульс в точку) и энергией импульсов в диапазоне 0.02–1 мкДж. Для управления состоянием поляризации излучения, падающего на образец, в схему была введена фазовая линейная пластинка $\lambda/2$ (рис. 1a). С помощью пластинки осуществлялся поворот азимута поляризации возбуждающего излучения в диапазоне $0-180°$ для анализа влияния состояния поляризации на поверхностные эффекты в кремниевых и алмазных пластинах различных кристаллографических ориентаций.

Предварительно перед проведением экспериментов с помощью рентгеноструктурного анализа были определены кристаллографические плоскости и направления осей образов кремния и алмаза на установке рентгеновской дифракции Panalytical X'Pert Pro MRD Extended. В начале эксперимента направление поляризации лазерного излучения было ориентировано вдоль оси $[1\bar{1}0]$ (азимутальный угол $0°$), которое являлось общим для всех образцов (рис. 1d, e, f). Таким образом, изначальное направление поляризации было ориентировано параллельно направлению сканирования при обработке всех образцов. Дополнительно на рис. 2 представлена первая зона Бриллюэна кубической гранецентрированной решетки для граней алмаза и кремния (001) и (111). Различные кристаллографические направления, вдоль которых была ориентирована поляризация падающего излучения во время эксперимента, показаны сплошными линиями, остальные возможные, но не использованные направления отражены пунктиром.

3. На основании сделанных на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) снимков для одноимпульсных кратеров на поверхности пластин кремния и алмаза были проанализированы их характерные размеры и соответствующие пороги абляции. Для этого использовалась методика Лиу для зависимости R^2–$\ln E$ [33], где наклон кривой R^2_{abl} показывает квадрат радиуса фокального пятна по уровню 1/e, тогда как смещение кривой по оси абсцисс эквивалентно логарифму пороговой энергии абляции E_{abl}. Пороговая плотность энергии абляции может быть рассчитана

$$F_{\text{abl}} = E_{\text{abl}}/\pi R^2_{\text{abl}}. \qquad (1)$$

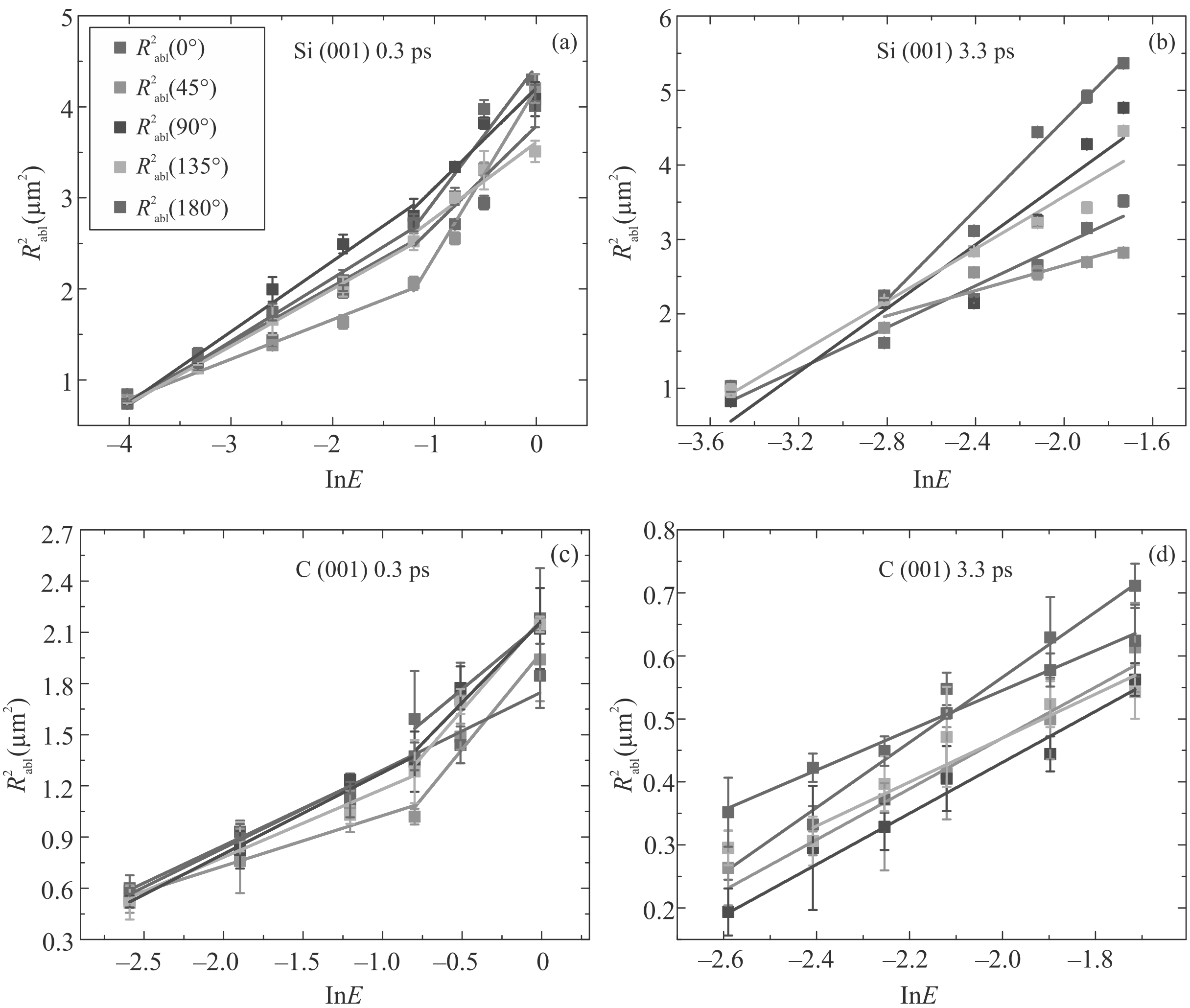

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости $R^2_{\text{abl}} - \ln E$ для пластины Si (001) для длительностей УКИ $\tau \approx 0.3$ пс (a) и 3.3 пс (b). Аналогичные зависимости для пластины C (001) для длительностей УКИ $\tau \approx 0.3$ пс (c) и 3.3 пс (d) соответственно. Цветными линиями показаны зависимости $R^2_{\text{abl}} - \ln E$ для разных ориентаций азимута поляризации падающего излучения

Полученные зависимости квадрата радиуса кратеров от логарифма энергии лазерных импульсов варьируемой длительности (рис. 3), а также различный наклон этих экспериментальных кривых для разных направлений азимута поляризации падающего излучения позволяют говорить о том, что для каждого из состояний поляризации в механизме абляции возможно преобладание различных нелинейных эффектов (появление плазмы на поверхности, ионизация среды и т.д.) [34].

Так, например, для абляции пластин (001) под воздействием УКИ фемтосекундной длительности ($\tau \approx 0.3$ пс) прослеживаются 2 различных интервала кривых $R^2 - \ln E$ (рис. 3a, c), говорящие о различном механизме процессов абляции поверхности. Так, при абляции пластины кремния (001), с азимутом линейной поляризации, равным $\alpha = 30°$, импульсами с малой энергией (18–150 нДж) наклон кривых составил $R^2_{\text{abl}} = 0.44 \pm 0.03$ мкм^2, в то время как для области с более высокой энергией импульсов (300–960 нДж) $R^2_{\text{abl}} = 0.7 \pm 0.1$ мкм^2. Для пикосекундной длительности импульсов ($\tau \approx 1.0$ и 3.3 пс) наблюдалась только одна кривая (рис. 3b, d).

Далее в ходе работы была определена пороговая плотность энергии абляции F_{abl} по формуле (1) для различных направлений азимута поляризации возбуждающего излучения. Измеренные значения F_{abl} демонстрируют для всех пластин заметную зависимость от азимута поляризации УКИ для трех длительностей лазерных импульсов (рис. 4). Для минимальных длительностей 0.3 и 1.0 пс в случае кремниевой пластины (рис. 4a, b) эти пороги довольно

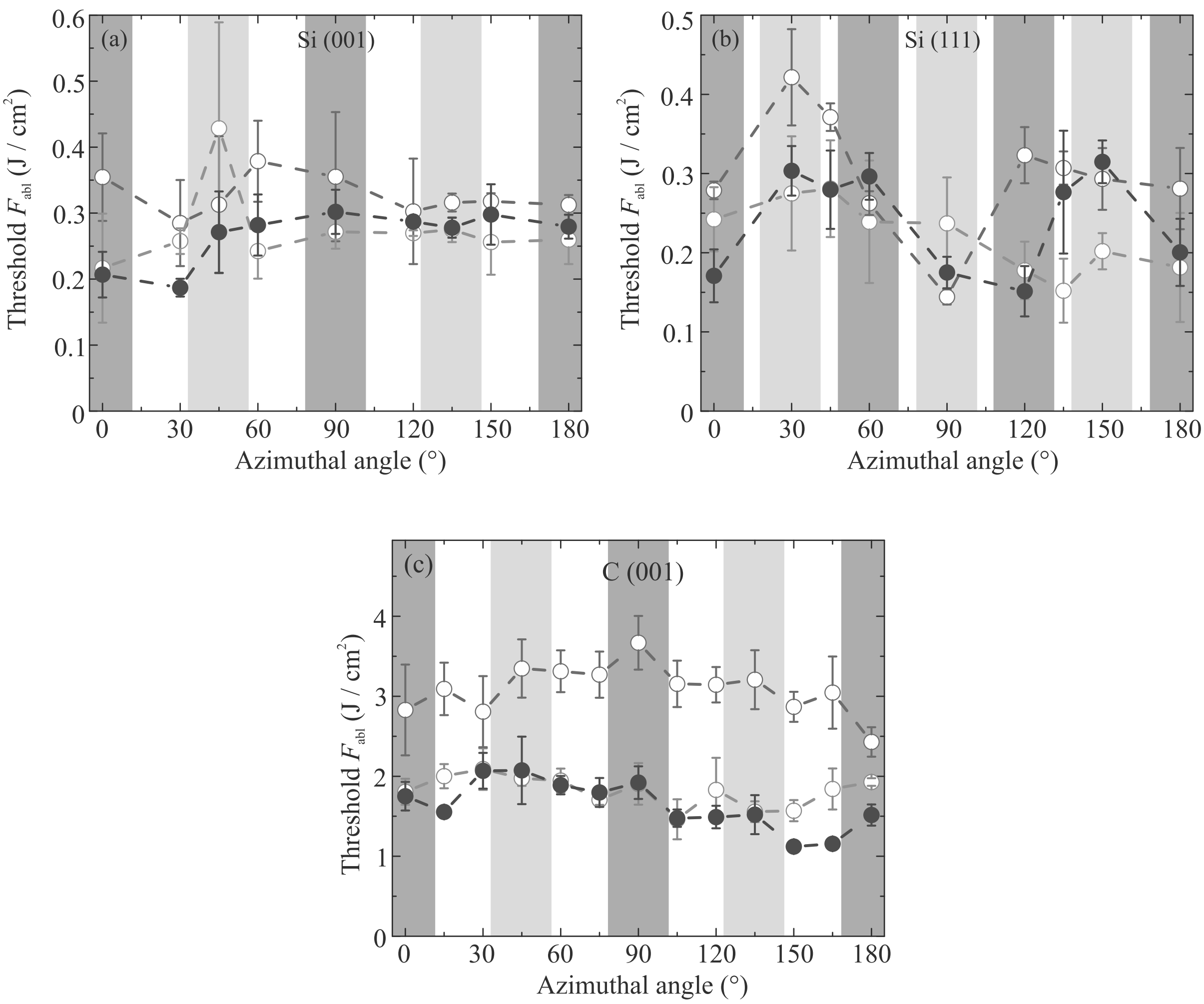

Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости пороговой плотности энергии абляции $F_{\rm abl}$ от направления азимута поляризации УКИ для трех длительностей лазерных импульсов для пластин Si (001) (a), Si (111) (b) и C (001) (c), соответственно. Синими линиями показаны зависимости для $\tau \approx 0.3$ пс, зелеными – для $\tau \approx 1.1$ пс, красными – для $\tau \approx 3.3$ пс. Вертикальные области сиреневого ($E_{\rm U,K}$) и оранжевого ($E_{\rm W}$) цветов показывают ширину зонной щели в зависимости от поворота азимута поляризации

немонотонно меняются как функция азимута поляризации УКИ в зависимости от их длительности – от значения $F_{\rm min} = 0.15 \pm 0.03$ Дж/см^2 до $F_{\rm max} = 0.30 \pm 0.03$ Дж/см^2. В случае $\tau \approx 3.3$ пс эти пороги возрастают/убывают на всем промежутке изменения азимута поляризации от $F_{\rm max} = 0.42 \pm 0.06$ Дж/см^2 (30°) до $F_{\rm min} = 0.14 \pm 0.01$ Дж/см^2 (90°) для Si (111) и от $F_{\rm max} = 0.38 \pm 0.06$ Дж/см^2 (60°) до $F_{\rm min} = 0.28 \pm 0.07$ Дж/см^2 (180°) для пластины Si (001). Полученные значения хорошо согласуются с прошлыми работами, например, в [17] значения $F_{\rm abl}$ лежат в диапазоне 0.28–0.38 Дж/см^2 для абляции в воздухе, что идентично полученным значениям для пластины (001) для длительности УКИ 3.3 пс. Однако для пластины (111) и той же длительности УКИ, а также для обеих пластин и длительности УКИ 0.3 и 1.0 пс, минимальное значение составило $F_{\rm min} = 0.14{-}0.15$ Дж/см^2, что в целом в 2 раза ниже порогов плотности энергии абляции, полученных в предыдущих работах.

Изменение в пороговой плотности энергии абляции $F_{\rm abl}$ ассоциируется с различной шириной зонной щели, которая для кремния составляет $E_{\rm U,K} \approx 3.5$ эВ по направлению [110] (оранжевая область на рис. 4a, b) и $E_{\rm W} \approx 8$ эВ по направлению [112] (сиреневая область на рис. 4a, b) [35]. С точки зрения модуляции $F_{\rm abl}$ наибольший интерес представляет пластина Si (111). Действительно, на графике (рис. 4b) для азимута поляризации 30°, соответствующего направлению [112], наблюдается абсолютный максимум для всех трех длительностей УКИ, за ним следует локальный минимум (60°), соответствующий

Таблица 1. Экспериментальные значения R_{abl} и F_{abl} для пластин Si (001) и C (001)

	Si (001)				C (001)			
	$\tau \approx 0.3$ пс		$\tau \approx 3.3$ пс		$\tau \approx 0.3$ пс		$\tau \approx 3.3$ пс	
α (°)	F_{abl} (Дж/см^2)	R_{abl} (мкм)	F_{abl} (Дж/см^2)	R_{abl} (мкм)	F_{abl} (Дж/см^2)	R_{abl} (мкм)	F_{abl} (Дж/см^2)	R_{abl} (мкм)
0	0.21 ± 0.03	0.7 ± 0.1	0.35 ± 0.07	1.0 ± 0.2	1.8 ± 0.2	0.78 ± 0.08	2.8 ± 0.6	0.7 ± 0.2
45	0.27 ± 0.06	0.9 ± 0.2	0.31 ± 0.10	1.1 ± 0.5	2.1 ± 0.4	0.7 ± 0.1	3.3 ± 0.4	0.63 ± 0.07
90	0.30 ± 0.03	0.9 ± 0.1	0.36 ± 0.10	1.3 ± 0.3	1.9 ± 0.2	0.78 ± 0.08	3.7 ± 0.3	0.64 ± 0.06
135	0.28 ± 0.02	0.78 ± 0.04	0.32 ± 0.01	1.28 ± 0.06	1.5 ± 0.2	0.6 ± 0.1	3.2 ± 0.4	0.64 ± 0.09
180	0.28 ± 0.02	0.81 ± 0.05	0.31 ± 0.02	1.26 ± 0.07	1.5 ± 0.1	0.67 ± 0.06	2.4 ± 0.2	0.56 ± 0.04

направлению [110]. Далее для значений азимута поляризации в диапазоне 60−120° экспериментальная кривая несколько отступает от теоретической и снова приобретает ожидаемый вид для значений 135° и более.

В отличие же от кремниевой пластины, порог абляции для алмазной пластины с ориентацией (001) сильно отличается при длительности воздействия в 3.3 от 0.3 и 1.0 пс, что продемонстрировано на рис. 4c и может быть связано как с нелинейными эффектами при фотовозбуждении алмаза, так и с транспортом электрон-дырочной плазмы или энергии в течение лазерного импульса. Действительно, величины порогов на всем промежутке изменения азимута поляризации для $\tau \approx 3.3$ пс лежат в диапазоне от значения $F_{\min} = 2.4 \pm 0.2$ Дж/см^2 (180°) до почти $F_{\max} = 3.7 \pm 0.3$ Дж/см^2 (90°). В то же время при длительностях в 0.3 и 1 пс порог абляции незначительно меняется в пределах $F_{\min} = 1.12 \pm 0.05 - F_{\max} = 2.1 \pm 0.2$ Дж/см^2. Однако, в целом, для данного образца не наблюдалось сильно выраженной модуляции F_{abl}. Это можно связать с тем, что для алмаза соотношение ширины зонной щели между направлениями [110] и [112] гораздо меньше, чем для кремния. Так $E_{\mathrm{U,K}} \approx 16.9$ эВ (сиреневая область на рис. 4c), в то время как $E_{\mathrm{W}} \approx 20$ эВ [36] (оранжевая область на рис. 4c). Более подробные данные по радиусам кратеров R_{abl} и пороговой плотности энергии абляции F_{abl}, в зависимости от угла азимута поляризации α для длительностей $\tau = 0.3$ и 3.3 пс приведены в табл. 1.

В азимутальных зависимостях характерных размеров и пороговых плотностей энергии могут проявляться различные (многофотонный, ударный) механизмы фотоионизации и вложения энергии в данных диэлектриках, управляемые шириной зонной щели, тогда как кристаллографические различия в других – например, механических или теплофизических – физических свойствах проявились бы скорее в анизотропии формы кратеров, чего в данной работе не наблюдалось. С другой стороны, в указанных азимутальных зависимостях для больших длительностей УКИ могут проявляться динамические эффекты безынерционной электронной и субпикосекундной фононной перенормировки ширины запрещенной зоны [37, 38], а также субпикосекундное "нетермическое" разупорядочивание полупроводников (в том числе – кремния [39–41]).

4. В заключение, впервые систематически исследованы зависимости пороговой плотности энергии абляции поверхности кремния и алмаза (с ориентациями (001) и (111)) от направления линейной поляризации УКИ на длине волны 515 нм с длительностями 0.3, 1 и 3.3 пс относительно кристаллографических осей, для которых характерны отличные значения ширины зонной щели. Полученные значения пороговой плотности энергии абляции F_{abl} демонстрируют для всех пластин заметную немонотонную зависимость от азимута поляризации лазерных импульсов для всех трех длительностей, коррелирующую с ориентацией поляризации в зоне Бриллюэна. Полученные результаты позволят в будущем учитывать поляризацию ультракоротких лазерных импульсов для более эффективной обработки различных кристаллических материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 21-79-30063).

1. M. Malinauskas, A. Žukauskas, S. Hasegawa, Y. Hayasaki, V. Mizeikis, R. Buividas, and S. Juodkazis, Light Sci. Appl. **5**, e16133 (2016).
2. F.Chen and J. R. Vazquez de Aldana, *Laser Micro-Nano-Manufacturing and 3D Microprinting*, **309**, 185 (Springer Nature Switzerland AG, Cham, 2020).
3. A. Cerkauskaite, R. Drevinskas, P. G. Kazansky, and A. O. Rybaltovskii, Opt. Express **25**, 8011 (2017).
4. A. E. Rupasov, P. A. Danilov, M. P. Smaev, M. S. Kovalev, A. S. Zolot'ko, A. A. Ionin, and S. I. Kudryashov, Optics and Spectroscopy **128**, 928 (2020).

5. A. J. Traverso, J. Huang, T. Peyronel, G. Yang, T. G. Tiecke, and M. H. Mikkelsen, Optica **8**, 202 (2021).
6. V. Kesaev, A. Nastulyavichus, S. Kudryashov, M. Kovalev, N. Stsepuro, and G. Krasin, Opt. Mater. Express **11**, 1971 (2021).
7. S. I. Kudryashov, T. Pflug, N. I. Busleev, M. Olbrich, A. Horn, M. S. Kovalev, and N. G. Stsepuro, Opt. Mater. Express **11**, 1 (2020).
8. R. Zazo, J. Solis, R. Ariza, R. Serna, and J. Siegel, Appl. Surf. Sci. **520**, 146307 (2020).
9. S. Lin, H. Lin, C. Ma, Y. Cheng, S. Ye, F. Lin, R. Li, J. Xu, and Y. Wang, Light Sci. Appl. **9**, 22 (2020).
10. S. S. Fedotov, A. S. Lipatiev, M. Yu. Presniakov, G. Yu. Shakhgildyan, A. G. Okhrimchuk, S. V. Lotarev, and V. N. Sigaev, Appl. Opt. **57**, 978 (2018).
11. B. N. Chichkov, C. Momma, S. Nolte, F. von Alvensleben, and A. Tünnermann, Appl. Phys. A **63**, 109 (1996).
12. C. Liu, X. L. Mao, S. S. Mao, X. Zeng, R. Greif, and R. E. Russo, Anal. Chem. **76**, 379 (2004).
13. K.-H. Leitz, B. Redlingshofer, Y. Reg, A. Otto, and M. Schmidt, Phys. Procedia **12**, 230 (2011).
14. A. A. Kuchmizhak, A. P. Porfirev, S. A. Syubaev, P. A. Danilov, A. A. Ionin, O. B. Vitrik, Yu. N. Kulchin, S. N. Khonina, and S. I. Kudryashov, Opt. Lett. **42**, 2838 (2017).
15. E. V. Golosov, L. I. Emel'yanov, A. A. Ionin, Yu. R. Kolobov, S. I. Kudryashov, A. E. Ligachev, Yu. N. Novoselov, L. V. Seleznev, and D. V. Sinitsyn, JETP Lett. **90**, 107 (2009).
16. S. I. Kudryashov, A. A. Nastulyavichus, I. N. Saraeva, A. A. Rudenko, D. A. Zayarny, and A. A. Ionin, Appl. Surf. Sci. **519**, 146204 (2020).
17. N. A. Smirnov, S. I. Kudryashov, P. A. Danilov, A. A. Rudenko, A. A. Ionin, and A. A. Nastulyavichus, JETP Lett. **108**, 368 (2018).
18. X. Zhao and Y. C. Shin, Appl. Phys. Lett. **105**, 111907 (2014).
19. S. K. Sundaram and E. Mazur, Nature Mater. **1**, 217 (2002).
20. N. Krstulović, S. Shannon, R. Stefanuik, and C. Fanara, Int. J. Adv. Manuf. Technol. **69**, 1765 (2013).
21. S. Barcikowski, A. Hahn, A. Kabashin, and B. N. Chichkov, Appl. Phys. A **87**, 47 (2007).
22. D. Zhang, B. Gökce, and S. Barcikowski, Chem. Rev. **117**, 3990 (2017).
23. D. A. Zayarny, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, S. V. Makarov, A. A. Kuchmizhak, O. B. Vitrik, and Yu. N. Kulchin, JETP Lett. **103**, 752 (2016).
24. S. I. Kudryashov, A. O. Levchenko, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, A. E. Rupasov, R. A. Khmel'nitskii, O. E. Koval'chuk, and A. A. Ionin, JETP Lett. **112**, 579 (2020).
25. A. P. Joglekar, H. Liu, E. Meyhöfer, G. Mourou, and A. J. Hunt, Proc. Natl. Acad. Sci. **101**, 5856 (2004).
26. H. R. Reiss, Phys. Rev. Lett. **29**(17), 1129 (1972).
27. L. A. Lompre, G. Mainfray, C. Manus, and J. Thebault, Phys. Rev. A **15**, 1604 (1977).
28. D. Liu, Y. Li, M. Liu, H. Yang, and Q. Gong, Appl. Phys. B **91**, 597 (2008).
29. D. J. Little, M. Ams, P. Dekker, G. D. Marshall, J. M. Dawes, and M. J. Withford, Opt. Express **16**, 20029 (2008).
30. V. V. Temnov, K. Sokolowski-Tinten, P. Zhou, A. El-Khamhawy, and D. von der Linde, Phys. Rev. Lett. **97**, 23 (2006).
31. Q. Wen, P. Zhang, G. Cheng, F. Jiang, and X. Lu, Ceram. Int. **45**, 23501 (2019).
32. X. Zhang, L. Zhang, S. Mironov, R. Xiao, L. Guo, and T. Huang, Appl. Phys. A **127**, 196 (2021).
33. J. M. Liu, Opt. Lett. **7**, 196 (1982).
34. P. A. Danilov, D. A. Zayarnyi, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, S. V. Makarov, A. A. Rudenko, V. I. Yurovskikh, Yu. N. Kulchin, O. B. Vitrik, A. A. Kuchmizhak, E. A. Drozdova, and S. B. Odinokov, Quantum Electronics **44**, 540 (2014).
35. D. A. Papaconstantopoulos, M. J. Mehl, S. C. Erwin, and M. R. Pederson, MRS Proc. **491**, 221 (1997).
36. *Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Springer-Verlag, Berlin (1982).
37. A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, L. V. Seleznev, D. V. Sinitsyn, A. F. Bunkin, V. N. Lednev, and S. M. Pershin, JETP **116**, 347 (2013).
38. P. A. Danilov, A. A. Ionin, S. I. Kudryashov, S. V. Makarov, A. A. Rudenko, P. N. Saltuganov, L. V. Seleznev, V. I. Yurovskikh, D. A. Zayarny, and T. Apostolova, JETP **120**, 946 (2015).
39. C. V. Shank, R. Yen, and C. Hirlimann, Phys. Rev. Lett. **51**, 900 (1983).
40. H. W. Tom, G. D. Aumiller, and C. H. Brito-Cruz, Phys. Rev. Lett. **60**, 1438 (1988).
41. K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, and D. von der Linde, Phys. Rev. B **51**, 14186 (1995).

Pis'ma v ZhETF, vol. 114, iss. 3, pp. 154 – 155

Enhancement of second-harmonic generation in micropillar resonator due to the engineered destructive interference

S. A. Kolodny[+1)], V. K. Kozin[+*], I. V. Iorsh[+]

[+]ITMO University, 197101 St. Petersburg, Russia

[*]Science Institute, University of Iceland, Dunhagi-3, IS-107 Reykjavik, Iceland

Submitted 10 June 2021
Resubmitted 25 June 2021
Accepted 25 June 2021

DOI: 10.31857/S1234567821150027

It has been recently shown that the engineering of the shape of the dielectric nanoantenna allows to achieve the destructive interference of the low order multipole modes [1, 2]. As a result these structures may support high quality optical modes, characterized at the same time by relatively small mode volumes. Since the effect of the emergence of the dark modes due to the destructive interference is analogous to the bound states in the continuum (BIC) arising in periodic structures [3], these modes are usually referred to as quasi-BIC states. It has been shown experimentally that these states, supported by the AlGaAs pillars, facilitate substantial increase in the second harmonic generation efficiency [4].

At the same time, even at the quasi-BIC regime, individual semiconductor pillars are characterized by fairly modest quality factors in mid-infrared and optical frequency ranges. The quality factor can be substantially increased if the pillar is sandwiched between Bragg reflectors, which suppress the radiation losses through the top and bottom of the pillar. The resulting structures, pillar microcavities, are conventionally characterized by large values of Q/V ratio and are routinely used to enhance the light-matter interactions at the nanoscale [5, 6].

The main source of the radiation losses in pillar microcavities is due to the radiation leakage through the sidewalls, which increase as the diameter of the cavity is decreased. We have recently shown, that the at certain ratios of cavity radius to cavity height, the destructive interference occurs similar to the one in the quasi-BIC state, which suppresses the side-wall leakage and resonantly increases the quality factor while preserving the effective mode volume [7]. Here, we show that this quasi-BIC state occurring in pillar microcavities can be used to substantially increase the efficiency of the second harmonic generation.

[1)]e-mail: s.kolodny@metalab.ifmo.ru

We investigate the second-harmonic generation (SHG) in a micropillar resonator with radius 500 nm, consisting of an AlGaAs cylinder, sandwiched between two DBR mirrors (GaAs-AlGaAs, 30 layers on top and bottom), as shown on the inset in Fig. 1. The micropillar resonator is tuned to the quasi-BIC

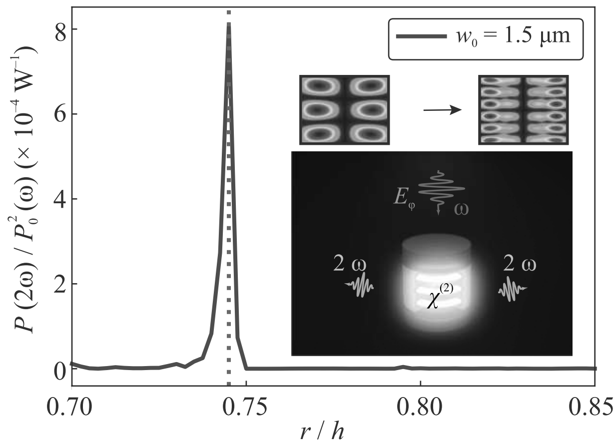

Fig. 1. (Color online) (a) – The sketch of the system under consideration. (b) – Dependence of the wavelength of the modes on the r/h ratio of the cavity. The wavelength of the mode $\mathbf{E}_2$ is doubled for better comparison (to demonstrate that ω_2 is close to $2\omega_1$)

regime [1, 8]. It means that we consider the same structure where the Q/V ratio enhancement for cavity mode has been observed for micropillar resonator with low-contrast Bragg reflectors [8] and for high-contrast Bragg reflectors [7] due to destructive interference of two radiating modes.

The cavity is placed in the background field (pump), which in our case is supposed to be a superposition of two linearly polarized Hermite–Gauss beams [9] that result in an azimuthally polarized field with the azimuth number $m = 0$. The AlGaAs has a non-vanishing tensor of the second-order nonlinear susceptibility $\chi^{(2)}_{ijk}$. This tensor contains only off-diagonal elements in the principal axis system of the zinc blende crystalline structure [10], with the components being non-zero only if $i \neq j \neq k$, $\chi^{(2)}_{xyz} \equiv \chi^{(2)}_{\mathrm{AlGaAs}} = 290\,\mathrm{pm/V}$. As for the GaAs its tensor of the second-order nonlinear susceptibility $\chi^{(2)}_{xyz}$ also has non-zero components if $i \neq j \neq k$, $\chi^{(2)}_{xyz} \equiv \chi^{(2)}_{\mathrm{GaAs}} = 180\,\mathrm{pm/V}$ [11]. The second harmonic generation was considered in whole micropillar resonator (both in AlGaAs cavity and AlGaAs/GaAs Bragg reflectors). In our analysis we focus on the two modes of the pillar: $\mathbf{E}_{1,2}$ with the real and imaginary parts of the eigenfrequencies being equal to $\omega_{1,2}$ and $\gamma_{1,2}$, respectively. The pillar is pumped at the frequency ω close to ω_1, and the frequency ω_2 of the mode $\mathbf{E}_2$ is assumed to be close to 2ω. So in our simulations we consider TE_{012} mode as $\mathbf{E}_1$ since it has a confirmed quasi BIC, and the TE_{215} mode as $\mathbf{E}_2$ because of the proximity of ω_2 to 2ω. The cavity radius is fixed in our study and we vary only its height as well as the Bragg layers period to make the center of the bandgap tuned to the mode frequency.

Our main goal is to calculate the nonlinear conversion coefficient, showing the efficiency of the second-harmonic generation, and defined as the ratio between the total SHG power and the pump power squared: $P(2\omega)/P_0(\omega)^2$. The corresponding expression for the total SHG power is given by [4]

$$P(2\omega) = \frac{8\pi}{c}\left(\frac{2\omega}{c}\right)^2 \kappa_2 Q_2 L_2(2\omega)\kappa_{12} \times \times \left[Q_1 L_1(\omega)\kappa_1(\omega)P_0(\omega)\right]^2. \quad (1)$$

Here $Q_j = \omega_j/(2\gamma_j)$ is the mode quality factor, L_j is the spectral overlap factor, κ_1, $\kappa_{1,2}$ and κ_2 are the so-called coupling, cross-coupling, and decoupling coefficients, respectively, where they are expressed in terms of the spatial mode profiles $\mathbf{E}_{1,2}(\mathbf{r})$ and the pillar parameters. The dependence of second harmonic nonlinear coefficient on the aspect ratio r/h was studied with a fixed beam waist radius equal to 1.5 μm (see Fig. 1). As it can be seen from this plot, the nonlinear coefficient has a pronounced maximum at $r/h = 0.745$, where the coefficient is at least an order of magnitude larger in comparison with the rest of the aspect ratio area and it is about $8 \times 10^{-4}\,\mathrm{W}^{-1}$. At this point the nonlinear coefficient dependence on the background field frequency in the frequency domain looks like a narrow peak ($\sim 1 \times 10^{10}$ rad/s) because of the small value of γ_1, which enters the spectral overlap factor $L_1(\omega)$. In addition, an important parameter is the beam waist radius, since its decrease with fixed peak power will lead to a stronger localization of the field inside the cavity and, accordingly, an increase in the coefficient κ_1, which will lead to a significant enhancement of the second harmonic power.

To conclude, in this work we have investigated the second harmonic generation in a micropillar AlGaAs/GaAs resonator, and have shown that it gets significant enhancement in the quasi-BIC regime. Compared to a single resonator [4], the achieved theoretical values are higher by at least an order of magnitude, despite the fact that the Q-factor is much higher (10^5 versus 10^2). Thus, we believe that the presented results can be applied in problems of nonlinear nanophotonics and in the practical implementation of quantum devices, where high nonlinearity plays an important role.

The authors would like to thank Kirill Koshelev from ITMO University and Sergei Yankin from COMSOL.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russian Federation, goszadanie # 2019-1246.

This is an excerpt of the article "Enhancement of second-harmonic generation in micropillar resonator due to the engineered destructive interference". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021150017

1. M. V. Rybin, K. L. Koshelev, Z. F. Sadrieva, K. B. Samusev, A. A. Bogdanov, M. F. Limonov, and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **119**, 243901 (2017).
2. K. Koshelev, G. Favraud, A. Bogdanov, Y. Kivshar, and A. Fratalocchi, Nanophotonics **8**(5), 725 (2019).
3. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, Nat. Rev. Mater. **1**(9), 1 (2016).
4. K. Koshelev, S. Kruk, E. Melik-Gaykazyan, J.-H. Choi, A. Bogdanov, H.-G. Park, and Y. Kivshar, Science **367**(6475), 288 (2020).
5. G. Lecamp, J.-P. Hugonin, P. Lalanne, R. Braive, S. Varoutsis, S. Laurent, A. Lemaître, I. Sagnes, G. Patriarche, I. Robert-Philip, and I. Abram, Appl. Phys. Lett. **90**(9), 091120 (2007).
6. Z. Lin, X. Liang, M. Lončar, S. G. Johnson, and A. W. Rodriguez, Optica **3**(3), 233 (2016).
7. S. Kolodny and I. Iorsh, J. Phys. Conf. Ser. **1461**, 012067 (2020).
8. S. Kolodny and I. Iorsh, Opt. Lett. **45**(1), 181 (2020).
9. Q. Zhan, Adv. Opt. Photonics **1**(1), 1 (2009).
10. R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, N.Y. (2003).
11. *Landolt-Bornstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, ed. by O. Madelung, Springer, Berlin (1982), p. 17.

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 156 – 159

Атомная мера электрической площади униполярного светового импульса

Р. М. Архипов[+1)], М. В. Архипов[+1)], А. В. Пахомов[+1)], Н. Н. Розанов[*1)]

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

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

Поступила в редакцию 27 июня 2021 г.
После переработки 28 июня 2021 г.
Принята к публикации 29 июня 2021 г.

В работе для характеристики воздействия униполярных импульсов на квантовую систему вводится новое понятие “атомная мера электрической площади”. Величина равна отношению постоянной Планка к характерному размеру квантовой системы и электрическому заряду квантовой частицы. Она универсальна и может быть использована для оценки степени эффективности действия униполярных и квазиуниполярных импульсов на различные квантовые системы.

DOI: 10.31857/S1234567821150039

Введение. Импульсы аттосекундной длительности позволяют изучать сверхбыстрые процессы в квантовых системах. Это предоставляет исследователям уникальные возможности для изучения сверхбыстрой динамики волновых пакетов в атомах, молекулах и твердых телах [1–6]. В настоящее время аттосекундные импульсы содержат несколько циклов колебаний. На их протяжении компоненты вектора напряженности поля несколько раз меняют знак. Электрическая площадь таких импульсов, определяемая как интеграл от напряженности электрического поля по времени $\mathbf{S}_E = \int \mathbf{E}(t)dt$ [7–9], близка к 0. Сократить длительность импульса, содержащего один цикл колебаний, можно, если “обрезать” одну из полуволн поля. В таком случае импульсы становятся униполярными (см., например, обзор [9], работы [10–14], и цитируемую литературу).

Для униполярных импульсов одной из важнейших характеристик является электрическая площадь импульса S_E. Как показывают результаты многочисленных недавних теоретических исследований [13–25], воздействие таких импульсов на микрообъекты определяется именно электрической площадью импульса, а не его энергией.

Это происходит тогда, когда длительность импульса меньше характерного времени осцилляций волновых пакетов вещества, взаимодействующего с излучением. Таким образом, взаимодействие имеет выраженный нерезонансный характер.

1)e-mail: arkhipovrostislav@gmail.com; m.arkhipov@spbu.ru; antpakhom@gmail.com; nnrosanov@mail.ru

В данной работе показано, что существует простой критерий оценки эффективности нерезонансного воздействия униполярного импульса на широкий класс квантовых систем. Для этого вводится величина “атомной меры электрической площади”, которая задает величину электрической площади униполярного импульса, необходимую для опустошения основного состояния квантовой системы.

Масштабы электрической площади униполярных импульсов, эффективно воздействующих на простейшие квантовые системы. Как показывают результаты теоретических [18, 19] и экспериментальных [3] исследований, основной вклад во взаимодействие вносит мощная униполярная компонента импульса, а влиянием отрицательного фронта можно пренебречь, если его амплитуда слабее униполярной части импульса, а длительность больше. Поэтому основной вклад во взаимодействие внесет только униполярная полуволна поля.

В случае водородоподобного атома в работе [15] было получено выражение для заселенности основного состояния после действия импульса. Она определяется электрической площадью импульса:

$$w_0 = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{S_E}{S_0}\right)^2\right]^4}. \tag{1}$$

В выражение (1) входит величина, которая в публикации [17] была в виде $S_0 = \frac{2mq}{\hbar}$. Здесь m – масса электрона, q – заряд электрона, $\hbar$ – приведенная постоянная Планка. Ее можно переписать в следующем виде:

$$S_0 = \frac{2\hbar}{a_0 q} = 8.78 \cdot 10^{-10}\ \text{эрг} \cdot \text{с/см} \cdot \text{ед. СГСЭ}. \quad (2)$$

В (2) входит только два параметра. Постоянная Планка и a_0 – радиус первой боровской орбиты атома водорода ($a_0 = 0.5 \cdot 10^{-8}$ см), т.е. характерный размер невозбужденного атома водорода.

Параметру S_0 можно дать название "атомная мера" электрической площади. Она соответствует электрической площади импульса, который способен перевести систему из основного состояния в возбужденные. Отметим, что выражение (1) было получено в приближении внезапных возмущений Мигдала [26] и справедливо, когда длительность импульса много меньше периода оборота электрона по первой Боровской орбите в атоме водорода. Населенность w_0 имеет сильную степенную зависисмость от электрической площади. Атом практически не возбудится, если $S_E \ll S_0$. Вероятность водородоподобного атома не возбудиться не зависит от полярности импульса, т.е. от знака электрической площади импульса.

Отметим, что в нелинейной оптике критерием сильного поля является значение напряженности электрического поля, которое создает протон на расстоянии, равном первой боровской орбите в атоме водорода $E_{\text{at}} \sim 10^9$ В/см. В случае же униполярных импульсов их воздействие имеет однонаправленный и не резонансный характер. Они способны оказывать более быстрое и эффективное воздействие на заряды по сравнению с многоцикловыми импульсами [3, 13–25]. Воздействие определяет электрическая площадь, а не энергия импульса. Мерой такого воздействия является величина S_0.

Рассматриваемая величина S_0 имеет прозрачный физический смысл масштаба эффективного воздействия. Из (1) видно, что если электрическая площадь импульса в два раза меньше "атомной меры", то основной уровень опустошается более, чем наполовину. При их равенстве остается менее 0.1, а при двойном значении "атомной меры площади" основное состояние заселено на 0.0016.

Обсуждаемое выражение имеет и следующую интерпретацию, допускающую обобщение на более широкий класс квантовых систем. В системе с размером $\sim a$ квантовомеханический импульс, в силу соотношения неопределенности Гейзенберга, порядка $\hbar/a$ [27]. С другой стороны, электрическая площадь импульса совпадает с изменением под его действием среднего квантовомеханического значения импульса, отнесенного к единичному электрическому заряду системы [28]. Тем самым, атомная мера электрической площади импульса отвечает вызванному им изменению импульса квантовой системы, равному характерному квантовомеханическому импульсу "свободной" системы.

Покажем теперь, что приведенные результаты действительно обобщаются на случай и других простых квантовых систем. Это гармонический осциллятор, частица в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и жесткий ротатор.

Выражение, которое описывает заселенность основного состояния квантового гармонического осциллятора, имеет вид [16]:

$$w_{0_{\text{HO}}} = e^{-\frac{S_E^2}{S_{0_{\text{HO}}}^2}}. \quad (3)$$

Здесь характерная мера площади для гармонического осциллятора

$$S_{0_{\text{HO}}} = \frac{\sqrt{2\hbar\omega_0 m}}{q}. \quad (4)$$

Выражение (4) можно переписать в виде, аналогичном (1), если ввести амплитуду отклонения осциллятора из основного состояния x_0 и учесть, что в этой точке вся энергия осциллятора равна $\hbar\omega_0/2 = kx_0^2/2$, k – коэффициент упругости, который в свою очередь равен $k = m\omega_0^2$. С учетом того, что $\sqrt{\omega_0} = \sqrt{\hbar/m} \cdot 1/x_0$, и введя удвоенную амплитуду $X = 2x_0$, выражение (4) принимает вид

$$S_{0_{\text{HO}}} = \frac{2\sqrt{2}\hbar}{qX}. \quad (5)$$

В случае потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками в приближении внезапных возмущений можно также получить выражение для населенности основного состояния после окончания действия импульса. Оно также определяется электрической площадью импульса и имеет вид:

$$w_{0_{\text{QW}}} = \left| \frac{\sin\tilde{S}}{\tilde{S}} + \sin\tilde{S}\frac{\tilde{S}}{\pi^2 - \tilde{S}^2} \right|^2, \quad (6)$$

где $\tilde{S} \equiv \frac{S_E}{S_{0_{\text{QW}}}}$, а

$$S_{0_{\text{QW}}} \equiv \frac{2\hbar}{ql} \quad (7)$$

– характерная "мера площади" для электрона в потенциальной яме ширины l.

Для жесткого ротатора известно выражение для изменения заселенности основного состояния под действием короткого импульса с ненулевой электрической площадью [22]. Можно также ввести соответствующий масштаб.

$$S_{0_{\mathrm{QR}}} = \frac{\hbar}{\mu}.$$

Здесь μ – постоянный дипольный момент ротатора, который можно записать в виде $\mu = qR_0$. Здесь R_0 – "размер" ротатора. Тогда

$$S_{0_{\mathrm{QR}}} = \frac{\hbar}{qR_0}. \quad (8)$$

Вновь видно, что "мера электрической площади" обратно пропорциональна размеру системы.

Заключение. Выражения для "меры площадей" водородоподобной системы, гармонического осциллятора, жесткого ротатора и частицы в потенциальном ящике по физическому смыслу одинаковы. Для любой из рассмотренных квантовых систем мера электрической площади импульса обратно пропорциональна характерному размеру системы.

Можно считать, что эта величина, как и боровский радиус и величина атомной напряженности поля, играющие роль масштаба атомных размеров и полей, имеет смысл масштаба действия предельно коротких униполярных импульсов на квантовые системы.

Полученные соотношения просты и крайне удобны для оценок параметров излучения, необходимого для возбуждения электронов в атомах, водородоподобных образованиях (экситонов) в твердых телах, возбуждения колебаний и вращения молекул. Также они применимы для оценки возможности возбуждения электронов в наночастицах, когда их движение хорошо аппроксимируется потенциалом типа "ящика" с высокими стенками.

Еще раз отметим, что воздействие на квантовую систему оказывает импульс, передаваемый полем заряду. Поэтому эффективность воздействия зависит от электрической площади импульса, а не его энергии. Например, импульс имеет прямоугольную форму и напряженность поля равна E_0 и длительность Δt. Такую же энергию будет иметь прямоугольный импульс с длительностью $\Delta t/2$ и напряженностью поля $\sqrt{2}E_0$. Однако его электрическая площадь будет меньше в $\sqrt{2}$ раз, и он создаст меньшие изменения в квантовой системе.

Уместно отметить, что в случае когерентного воздействия многоциклового импульса на квантовую систему в рамках двухуровневого приближения изменение заселенностей происходит в зависимости от площади огибающей импульса, а не его энергии [29].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-72-10028.

1. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
2. F. Calegari, G. Sansone, S. Stagira, C. Vozzi, and M. Nisoli, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **49**, 062001 (2016).
3. M. T. Hassan, T. T. Luu, A. Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, Nature **530**, 66 (2016).
4. G. M. Rossi, R. E. Mainz, Y. Yang, F. Scheiba, M. A. Silva-Toledo, S. H. Chia, P. D. Keathley, S. Fang, O. D. Mücke, C. Manzoni, G. Cerullo, G. Cirmi, and F. X. Kärtner, Nat. Photonics **14**, 629 (2020).
5. J. Biegert, F. Calegari, N. Dudovich, F. Quéré, and M. Vrakking, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **54**, 070201 (2021).
6. Y. Shou, R. Hu, Z. Gong, J. Yu, J. Chen, G. Mourou, X. Yan, and W. Ma, New J. Phys. **23**, 053003 (2021).
7. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **107**(5), 761 (2009) [N. N. Rosanov, Optics and Spectroscopy **107**(5), 721 (2009)].
8. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, УФН **188**, 1347 (2018) [N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, and M. V. Arkhipov, Phys. Usp. **61**, 1227 (2018)].
9. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, Квантовая электроника **50**, 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, Quantum Electronics **50**, 801 (2020)].
10. H.-C. Wu and J. Meyer-ter-Vehn, Nat. Photonics **6**, 304 (2012).
11. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, Sci. Rep. **8**, 2669 (2018).
12. D. You and P. H. Bucksbaum, JOSA B **14**, 1651 (1997).
13. R. R. Jones, D. You, and P. H. Bucksbaum, Phys. Rev. Lett. **70**, 1236 (1993).
14. S. Pisharody, J. Murray, H. Wen, and P. Bucksbaum, *The 17th Annual Meeting of the IEEE Lasers and Electro-Optics Society, LEOS 2004*, **1**, 376 (2004).
15. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **124**, 75 (2018) [N. N. Rosanov, Optics and Spectroscopy **124**, 72 (2018)].
16. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, Opt. Lett. **44**, 1202 (2019).
17. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **110**, 9 (2019) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. A. Shimko, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **110**, 15 (2019)].

18. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **128**, 106 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, Optics and Spectroscopy **128**, 102 (2020)].
19. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, A. Demircan, U. Morgner, and N. Rosanov, Opt. Express **28**, 17020 (2020).
20. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. Rosanov, Sci. Rep. **11**, 1961 (2021).
21. Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **113**, 656 (2021) [R. M. Arkhipov, JETP Lett. **113**, 611 (2021)].
22. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, I. Babushkin, and N. Rosanov, Laser Phys. Lett. **17**, 105301 (2020).
23. Н. Н. Розанов, Н. В. Высотина, ЖЭТФ **157**, 63 (2020) [N. N. Rosanov and N. V. Vysotina, JETP **130**, 52 (2020)].
24. Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **113**, 157 (2021) [N. N. Rosanov, JETP Lett. **113**, 145 (2021)].
25. I. A. Aleksandrov, D. A. Tumakov, A. Kudlis, V. M. Shabaev, and N. N. Rosanov, Phys. Rev. A **102**, 0231020 (2020).
26. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **9**, 1163 (1939).
27. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М. (1989), 768 с. [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, Pergamon Press, Oxford (1977)].
28. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **125**, 818 (2018) [N. N. Rosanov, Optics and Spectroscopy **125**, 1012 (2018)].
29. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, М. (1978) [L. Allen and J. H. Eberly, *Optical resonance and two-level atoms*, Wiley, N.Y. (1975)].

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 160 – 166

Униполярные солитоноподобные структуры в неравновесных средах с диссипацией

С. В. Сазонов[1)]

Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 191991 Москва, Россия

Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), 125993 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 июня 2021 г.
После переработки 3 июля 2021 г.
Принята к публикации 4 июля 2021 г.

Предсказана возможность формирования униполярных солитоноподобных метастабильных объектов электромагнитной природы в неравновесных диссипативных средах. Показано, что после прохождения данных объектов среда переходит из неравновесного в короткоживущее метастабильное состояние, сохраняя на масштабах времени его жизни память о входных условиях.

DOI: 10.31857/S1234567821150040

1. Введение. Одной из тенденций развития современной нелинейной оптики и лазерной физики является создание в лабораторных условиях световых импульсов все более коротких длительностей. Особое место здесь занимают предельно короткие импульсы (ПКИ), содержащие порядка одного периода электромагнитных колебаний [1–8]. Очевидно, при теоретических исследованиях взаимодействия ПКИ с веществом несправедливо приближение медленно меняющихся огибающих [9].

В самое последнее время значительно возрос интерес к нелинейной оптике униполярных импульсов (УПИ) [10–12]. Такие сигналы состоят всего из половины периода электромагнитных колебаний. Следует заметить, что теоретические работы, связанные с динамикой униполярных импульсов в нелинейных средах, начали появляться еще в 1990-х гг. [4, 5, 13–15]. Однако именно в настоящее время данные исследования приобретают все большую актуальность [10–12, 16–18]. Здесь важно отметить, что нелинейное взаимодействие УПИ с веществом иногда приводит к эффектам, которые не имеют места в нелинейной оптике квазимонохроматических сигналов [11, 19]. УПИ могут найти приложения в динамической голографии, а также в современных системах передачи и обработки информации.

Другой современной тенденцией в развитии нелинейной оптики является бурный рост исследований, посвященных диссипативным оптическим солитонам [20–30]. Эти солитоны также могут быть использованы в системах оптической связи. Кроме того, диссипативные оптические солитоны представляют фундаментальный интерес. Такие солитоны формируются из-за взаимной компенсации притока запасенной в неравновесной среде энергии и оттока данной энергии в результате необратимых потерь.

Обобщая сказанное выше, приходим к выводу о том, что приобретают актуальность исследования возможностей формирования в неравновесных диссипативных средах униполярных солитоноподобных объектов. Этому и посвящена настоящая работа.

2. Вывод уравнения типа "реакция – диффузия". Рассмотрим распространение УПИ в двухуровневой среде. В данном случае модель двухуровневой среды является достаточно грубой. С другой стороны, данная модель обладает относительной простотой, что придает ей привлекательность. Более того, двухуровневая модель при определенных условиях вбирает в себя основные оптические свойства любой изотропной среды, включая ее нелинейные и дисперсионные характеристики [13]. В нашем случае будем считать, что остальные квантовые состояния удалены от двух рассматриваемых состояний настолько, что их влиянием можно пренебречь. Такая ситуация может выполняться в случае туннельных квантовых переходов [31, 32]. Здесь имеются основное симметричное и возбужденное асимметричное состояния, разделенные частотой ω_0.

Материальные уравнения, описывающие взаимодействие двухуровневого атома с электрическим полем E линейно поляризованного электромагнитного импульса, имеют хорошо известный вид [33]

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

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\omega_0 V - \frac{U}{T_2}, \quad \frac{\partial V}{\partial t} = \omega_0 U - \frac{V}{T_2} + \Omega W, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\Omega V - \frac{W + 1/2}{T_1}, \qquad (2)$$

где T_1 и T_2 – времена энергетической и фазовой релаксации соответственно, $\Omega = 2\mu E/\hbar$, μ – матричный элемент дипольного момента рассматриваемого квантового перехода, $\hbar$ – постоянная Планка, U, V и W – безразмерные переменные Блоха; при этом переменная U имеет смысл нестационарного дипольного момента, индуцируемого электрическим полем импульса, V – это быстрота изменения данного дипольного момента, W – разность населенностей квантовых состояний двухуровневого атома.

При полной заселенности основного состояния $W = -1/2$. Если же заселен только возбужденный уровень, то $W = +1/2$.

Дополним систему (1) волновым уравнением, считая, что импульс распространяется вдоль оси z:

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial z^2} - \frac{n_m^2}{c^2}\frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} = \frac{8\pi\mu}{\hbar c^2}\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}, \qquad (3)$$

где c – скорость света в вакууме, n_m – показатель преломления среды, содержащей примесные двухуровневые атомы, P – поляризационный отклик системы двухуровневых атомов, определяемый выражением

$$P = 2\mu n U, \qquad (4)$$

n – концентрация двухуровневых атомов.

Ниже, следуя работе [34], будем предполагать, что концентрация n мала, так что выполняется неравенство

$$\eta = \frac{8\pi\mu^2 n}{\hbar\omega_0 n_m} \ll 1. \qquad (5)$$

Это обстоятельство позволяет нам редуцировать порядок волнового уравнения (3) относительно производных. Для этого перепишем данное уравнение в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{n_m}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{n_m}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)\Omega = \frac{8\pi\mu}{\hbar c^2}\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}.$$

Так как импульс распространяется вдоль оси z, а правая часть уравнения мала, то с хорошей точностью запишем $c\partial/\partial z \approx -n_m \partial/\partial t$. Применив это равенство в левой скобке, после использования (4), (5), интегрирования по времени и учета первого уравнения (1) будем иметь

$$\frac{\partial \Omega}{\partial z} + \frac{n_m}{c}\frac{\partial \Omega}{\partial t} = \frac{\omega_0}{c}\eta\left(\omega_0 V + \frac{U}{T_2}\right). \qquad (6)$$

Таким образом, мы имеем самосогласованную систему уравнений (1), (2) и (6). Для исключения из этой системы материальных переменных будем считать, что временная длительность τ_p импульса удовлетворяет условию $\tau_p \gg T_2$. С другой стороны, для двухуровневых атомов в конденсированных средах времена релаксации T_1 и T_2 очень сильно разнятся между собой. При этом $T_2/T_1 \sim 10^{-3}$–10^{-9} [35]. Таким образом, с хорошим запасом выполняется неравенство $T_2 \ll T_1$. Данное обстоятельство дает нам основания полагать, что

$$T_2 \ll \tau_p \ll T_1. \qquad (7)$$

Полагая также, что длительность Δt наблюдения всего процесса удовлетворяет условию

$$\Delta t \ll T_1, \qquad (8)$$

мы можем положить в уравнении (2) $T_1 = \infty$.

Введя динамическую переменную $S = U + iV$, из (1) будем иметь

$$S(z,t) = i\int_0^\infty \Omega(z,t-\tau)W(z,t-\tau)e^{-(1/T_2 - i\omega_0)\tau}d\tau. \qquad (9)$$

Так как длительность импульса значительно превышает характерное время релаксации дипольного момента, то дисперсия является слабой. Тогда мы можем использовать разложение, формально схожее с разложением Криспа [13, 36]

$$\Omega(z,t-t')w(z,t-t') = \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{k!}t'^k\frac{\partial^k}{\partial t^k}(\Omega(z,t)w(z,t)). \qquad (10)$$

Подставляя (10) в (9), получим

$$S(z,t) = i\sum_{k=0}^\infty (-1)^k\left(\frac{T_2}{1 - iT_2\omega_0}\right)^{k+1}\frac{\partial^k}{\partial t^k}(\Omega w). \qquad (11)$$

Сохранив здесь только первые три члена разложения, после разделения действительной и мнимой частей и учета неравенства

$$T_2\omega_0 \gg 1 \qquad (12)$$

найдем

$$U = -\frac{\Omega}{\omega_0}W + \frac{2}{T_2\omega_0^3}\frac{\partial}{\partial t}(\Omega W) + \frac{1}{\omega_0^3}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\Omega W), \qquad (13)$$

$$V = \frac{\Omega}{T_2\omega_0^2}W + \frac{1}{\omega_0^2}\frac{\partial}{\partial t}(\Omega W) - \frac{3}{T_2\omega_0^4}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\Omega W). \qquad (14)$$

При условиях (7), (8) и (12) разность населенностей W под действием электромагнитного импульса в среде изменяется незначительно. Учитывая это, перепишем (13) и (14) в виде

$$U = -\frac{\Omega}{\omega_0}W + \frac{2}{T_2\omega_0^3}\frac{\partial}{\partial t}(\Omega W) + \frac{W_{-\infty}}{\omega_0^3}\frac{\partial^2\Omega}{\partial t^2}, \quad (13a)$$

$$V = \frac{\Omega}{T_2\omega_0^2}W + \frac{1}{\omega_0^2}\frac{\partial}{\partial t}(\Omega W) - \frac{3W_{-\infty}}{T_2\omega_0^4}\frac{\partial^2\Omega}{\partial t^2}, \quad (14a)$$

где $W_{-\infty}$ – начальная разность населенностей (при $t = -\infty$).

Подставляя разложение (14a) с сохранением только первого члена в уравнение (2) при $T_1 = \infty$, получим

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\Omega^2 W}{T_2\omega_0^2} \approx -\frac{W_{-\infty}\Omega^2}{T_2\omega_2^2}.$$

После интегрирования будем иметь

$$W = W_{-\infty}\left(1 - \frac{1}{T_2\omega_0^2}\int\limits_{-\infty}^{t}\Omega^2 dt'\right). \quad (15)$$

Подставляя (13a) и (14a) в (6) с учетом (15), придем к уравнению

$$\frac{\partial\Omega}{\partial z} = \alpha\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\Omega\int\limits_{-\infty}^{\tau}\Omega^2 d\tau'\right) + \beta\frac{\partial^2\Omega}{\partial\tau^2}, \quad (16)$$

где $\tau = t - z/v_0$, $1/v_0 = (n_m - W_{-\infty}\eta)/c$, $\alpha = -W_{-\infty}\frac{\eta}{cT_2\omega_0^2}$, $\beta = 2\alpha$.

Уравнение (16) можно отнести к классу уравнений типа “реакция – диффузия” [37].

В случае равновесной начальной заселенности квантовых состояний двухуровневых атомов ($W_{-\infty} < 0$) имеем $\alpha > 0$ и $\beta > 0$. Тогда второе слагаемое в правой части (16) описывает диффузионное (вязкое) затухание импульса. Первое слагаемое в правой части (16) соответствует нелинейному усилению импульса за счет тенденции к выравниванию разности населенностей квантовых состояний (см. (15)).

Если до импульсного воздействия двухуровневая среда обладает инверсной разностью населенностей ($W_{-\infty} > 0$), то $\alpha < 0$ и $\beta < 0$. В этом случае второе слагаемое в правой части (16) соответствует отрицательной диффузии (вязкости). Таким образом, данное слагаемое описывает линейную стадию самосжатия импульса, сопровождаемого его пиковым усилением. В свою очередь первое слагаемое в правой части (16) описывает нелинейный процесс насыщения данного усиления из-за уменьшения разности населенностей квантовых уровней.

В обоих рассмотренных случаях имеются два конкурирующих процесса, способных при некоторых условиях уравновесить друг друга. Это может привести к формированию локализованных солитоноподобных структур.

Важно заметить, что использованные приближения при выводе уравнения (16) не нарушают следующего из точных уравнений Максвелла правила сохранения электрической площади $S \equiv \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Omega d\tau$ УПИ [38]. Действительно, интегрируя (16) по τ от $-\infty$ до $+\infty$ и учитывая, что электрическое поле импульса со всеми его производными стремится к нулю при $\tau \to \pm\infty$, а энергия импульса $\sim \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Omega^2 d\tau$ имеет конечное значение, придем к равенству $dS/dz = 0$. Отсюда следует, что $S = \mathrm{const}$.

3. Солитоноподобное решение и его физический анализ. Уравнение (16) имеет решение в виде бегущего униполярного солитоноподобного импульса:

$$\Omega = \pm\Omega_m \operatorname{sech}\xi, \quad (17)$$

где $\xi = (t - z/v)/\tau_p$, а амплитуда Ω_m и скорость v связаны с временной длительностью τ_p импульса соотношениями

$$\Omega_m = \frac{1}{\tau_p}\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}, \quad \frac{1}{v} = \frac{1}{v_0} - \frac{\beta}{\tau_p}. \quad (18)$$

Используя (15), (17) и (18), а также выражения для α и β, найдем изменение разности населенностей в виде бегущего фронта, сопровождающего импульс (17), (18):

$$W = W_{-\infty}\left[1 - \frac{2}{\omega_0^2 T_2\tau_p}(1 + \tanh\xi)\right]. \quad (19)$$

Отсюда имеем $W_{+\infty} = W_{-\infty}\left(1 - \frac{4}{\omega_0^2 T_2\tau_p}\right)$. Тогда легко видеть, что выражение (18) для скорости можно переписать в виде

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{c}\left(n_m - \eta\frac{W_{-\infty} + W_{+\infty}}{2}\right). \quad (20)$$

Рассматриваемое солитоноподобное решение содержит один непрерывный свободный параметр, в качестве которого здесь выбрана временная длительность τ_p импульса. Таким свойством обычно обладают консервативные солитоны, сохраняя в непрерывном свободном параметре память об условиях на входе в среду. Однако в нашем случае явно присутствует диссипация в виде фазовой релаксации. К тому же длительность солитоноподобного импульса значительно превышает время фазовой релаксации. Поэтому диссипативные процессы проявляют себя достаточно отчетливо, что и следует из уравнения (16).

Для выяснения физического механизма формирования локализованного импульса (17), (18) умножим обе части уравнения (6) на 2Ω. Используя затем (2) при $T_1 = \infty$, после интегрирования по t от $-\infty$ до $+\infty$ будем иметь

$$\frac{d}{dz}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Omega^2 dt =$$

$$= 2\eta\frac{\omega_0}{c}\left[\omega_0(W_{-\infty} - W_{+\infty}) + \frac{1}{T_2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Omega U dt\right], \quad (21)$$

где $W_{+\infty}$ – разность населенностей после прохождения импульса.

С учетом (4), а также выражений для Ω и η равенство (21) можно переписать в виде

$$\frac{dw_e}{dz} = n\hbar\omega_0(W_{-\infty} - W_{+\infty}) - \int\limits_{-\infty}^{+\infty} Q dt. \quad (21a)$$

Здесь $w_e = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} I_e dt$ – световая энергия импульса, проходящая через единицу площади поперечного сечения среды, $I_e = cn_m E^2/4\pi$ – интенсивность импульса,

$$Q \equiv -\frac{PE}{T_2}. \quad (22)$$

Первое слагаемое в правой части (21а) представляет собой взятое с обратным знаком изменение плотности энергии, запасенной в двухуровневых атомах.

Очевидно, что Q – это есть количество теплоты, выделяемой за единицу времени в единице объема среды за счет необратимой релаксации индуцированного дипольного момента рассматриваемого квантового перехода.

Так как энергия стационарного импульса (17), (18) при его распространении не изменяется, то $dw_e/dz = 0$. Тогда в консервативном случае ($T_2 = \infty$) имеем $W_{+\infty} = W_{-\infty}$. Таким образом, консервативный стационарный солитон, как хорошо известно, своим передним фронтом возбуждает среду, а задним фронтом переводит среду в исходное состояние. В нашем же случае, как видно из (21а), справедливо условие $W_{+\infty} \neq W_{-\infty}$. Таким образом, состояние среды изменяется после распространения в ней стационарного солитоноподобного импульса (17), (18). Это является отличительным свойством волн переключения в бистабильных системах [20, 27, 39].

Рассмотрим по отдельности два случая.

a) Двухуровневые атомы с инверсной населенностью ($W_{-\infty} > 0$). Система в целом – среда и содержащиеся в ней двухуровневые атомы – является неравновесной. Второе слагаемое в скобках выражения (15) описывает малую поправку к $W_{-\infty}$, поэтому оно заведомо меньше единицы. Следовательно, разность населенностей при условиях (7) и (8) не изменяет своего знака. Второе и третье слагаемые в разложении (13а) представляют собой малые поправки к первому слагаемому данного разложения. Поэтому при $W_{-\infty} > 0$ динамические переменные U и Ω (P и E) имеют разные знаки. Тогда, как следует из (22), $Q > 0$. В свою очередь из (21а) следует, что в состоянии равновесия ($w_e = \text{const}$) имеем $W_{+\infty} < W_{-\infty}$ (рис. 1).

Таким образом, поглощая часть энергии, запасенной в усиливающей среде, импульс необратимо теряет ее в виде тепла, выделяющегося из-за затухания индуцированного дипольного момента за счет фазовой релаксации. Результатом такого баланса притока и оттока энергии является формирование униполярного солитоноподобного сигнала (17), (18). Как видно из (20), в этом случае скорость распространения униполярного солитоноподобного импульса превышает фазовую скорость света в среде: $v > c/n_m$. Механизм распространения здесь связан с процессом переформирования и обусловлен протяженным характером импульсных фронтов. Подробности см., например, в [40–43]. Так как в рассматриваемом случае $\alpha < 0$ и $\beta < 0$, то из (18) видно, что с укорочением длительности импульса его амплитуда возрастает, а скорость уменьшается.

b) Двухуровневые атомы с нормальной населенностью ($W_{-\infty} < 0$). В этом случае $Q < 0$. Следовательно, в стационарном режиме распространения $W_{+\infty} > W_{-\infty}$ (рис. 1). Таким образом, после прохождения импульса в системе двухуровневых атомов образуется запасенная энергия. Такая ситуация возможна, если, как и в предыдущем случае, рассматриваемая безграничная среда и содержащиеся в ней двухуровневые атомы исходно находятся в неравновесном состоянии. При этом, в согласии со вторым началом термодинамики, температура среды превышает температуру двухуровневых атомов. В этом случае приток в импульс тепла из окружающей среды компенсируется оттоком энергии из импульса к двухуровневым атомам. Среда с показателем преломления n_m, являясь безграничной, выступает здесь в роли термостата. Поэтому изменением ее

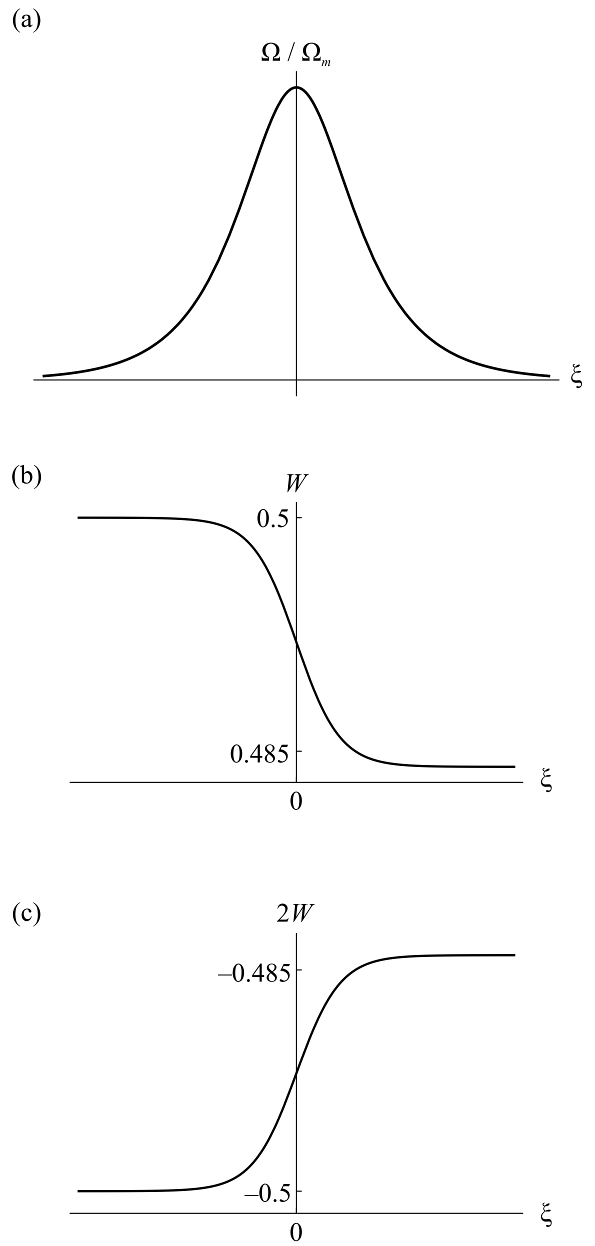

Рис. 1. Бегущий профиль электрического поля солитонопдобного импульса (a) и сопровождающие его профили разности населенностей в системе двухуровневых атомов с инверсной (b) и нормальной (c) населенностями

состояния при данном процессе можно пренебречь. В свою очередь униполярный электромагнитный сигнал стимулирует установление термодинамического равновесия между двухуровневыми атомами и двухуровневой средой. В рассматриваемом случае параметры α и β положительны. Тогда из (18) следует, что с укорочением временной длительности τ_p униполярного импульса его амплитуда и скорость возрастают. Так как знаки разностей населенностей $W_{-\infty}$ и $W_{+\infty}$ отрицательны, то, как видно из (20), скорость распространения импульса меньше фазовой скорости света в среде.

Сделаем некоторые численные оценки. Взяв, например, для туннельных переходов протона в кристалле KDP [31, 32] $\omega_0 \sim 10^{13}\,\text{с}^{-1}$, $T_1 \sim 10^{-8}\,\text{с}$ и $T_2 \sim 10^{11}\,\text{с}$, для удовлетворения неравенству (7) примем $\tau_p \sim 10^{-10}\,\text{с}$. Тогда, как видно из (18) при $\beta = 2\alpha$, $\Omega_m \sim 1/\tau_p \sim 10^{10}\,\text{с}^{-1}$. Учитывая, что $\mu \sim 10^{-18}$ СГСЭ, найдем для электрического поля импульса $E \sim \hbar\Omega/\mu \sim 10$ СГСЭ. Следовательно, интенсивность $I \sim cE^2/4\pi \sim 10^4\,\text{Вт/см}^2$.

Пусть концентрация двухуровневых переходов $n \sim 10^{19}\,\text{см}^{-3}$. Тогда $\eta \sim 10^{-2}$, т.е. условие (5) выполняется с хорошим запасом. Отсюда и из (20) приходим к выводу, что скорость распространения рассмотренных здесь солитоноподобных структур отличается от скорости света на величины порядка одного процента.

4. Заключение. Таким образом, в настоящей работе на основе выведенного уравнения (16) и его солитоноподобного решения (17), (18) выявлена принципиальная возможность формирования в неравновесных средах солитоноподобных униполярных объектов электромагнитной природы. Длительность этих объектов превышает время фазовой релаксации двухуровневых переходов, но короче времени энергетической релаксации. По всей видимости, именно этим обстоятельством обусловлено то, что рассмотренные солитоноподобные объекты обладают как свойствами консервативных солитонов, так и свойствами волн переключения в диссипативных средах. Консервативное свойство здесь заключается в наличии у данных объектов непрерывного свободного параметра. Это означает, что такие объекты сохраняют в себе память об условиях на входе в неравновесную среду. Свойство волн переключения здесь проявляется в том, что после их прохождения в среде состояние последней изменяется, становясь ближе к равновесному состоянию. При этом конечное состояние среды отнюдь не является термодинамически равновесным, которое устанавливается на временах, превышающих время T_1 энергетической релаксации. Скорее, здесь следует говорить о переходе среды из неравновесных к метастабильным состояниям, которые разрушаются на временах порядка T_1. Таким образом, рассмотренные здесь солитоноподобные объекты, способные формироваться только в неравновесных средах, являются достаточно короткоживущими.

Использованная здесь модель двухуровневых атомов для исследования взаимодействия униполярных импульсов с веществом является, на первый взгляд, весьма грубой. Однако можно показать, что при условиях (7), (8) и (11) данная модель, являясь наиболее простой, в качественном отношении адекватно описывает нелинейную динамику широкополосных сигналов.

Результаты наших исследований по формированию униполярных солитоноподобных структур в многоуровневых неравновесных средах с диссипацией мы планируем опубликовать отдельно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект # 17-11-01157).

1. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
2. А. И. Маймистов, Квантовая электроника **30**, 287 (2000) [A. I. Maimistov, Quantum Electron. **30**, 287 (2000)].
3. H. Leblond and D. Mihalache, Phys. Rep. **523**, 61 (2013).
4. Э. М. Беленов, П. Г. Крюков, А. В. Назаркин, А. Н. Ораевский, А. В. Усков, Письма в ЖЭТФ **47**, 442 (1988) [E. M. Belenov, P. G. Kryukov, A. V. Nazarkin, A. N. Oraevskii, and A. V. Uskov, JETP Lett. **47**, 523 (1988)].
5. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, Письма в ЖЭТФ **51**, 252 (1990) [E. M. Belenov and A. V. Nazarkin, JETP Lett. **51**, 288 (1990)].
6. С. А. Козлов, С. В. Сазонов, ЖЭТФ **111**, 404 (1997) [S. A. Kozlov and S. V. Sazonov, JETP **84**, 221 (1997)].
7. H. Leblond, S. V. Sazonov, I. V. Mel'nikov, D. Mihalache, and F. Sanchez, Phys. Rev. A **74**, 063815 (2006).
8. С. В. Сазонов, Н. В. Устинов, Письма в ЖЭТФ **112**, 30 (2020) [S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, JETP Lett. **112**, 24 (2020)].
9. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, М. (1978) [L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, John Wiley and Sons, N.Y. (1978)].
10. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **110**, 9 (2019) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. A. Shimko, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **110**, 15 (2019)].
11. Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **113**, 636 (2021).
12. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, М. О. Жукова, А. Н. Цыпкин, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **113**, 237 (2021) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. O. Zhukova, A. N. Tcypkin, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **113**, 242 (2021)].
13. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, В. А. Ущаповский, ЖЭТФ **100**, 762 (1991) [E. M. Belenov, A. V. Nazarkin, and V. A. Ushchapovskii, JETP **73**, 57 (1991)].
14. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **53**, 400 (1991) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **53**, 420 (1991)].
15. А. Ю. Пархоменко, С. В. Сазонов, ЖЭТФ **114**, 1595 (1998) [A. Yu. Parkhomenko and S. V. Sazonov, JETP **87**, 864 (1998)].
16. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Phys. Rev. A **98**, 063803 (2018).
17. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Phys. Rev. A **100**, 053807 (2019).
18. С. В. Сазонов, ЖЭТФ **146**, 483 (2014) [S. V. Sazonov, JETP **119**, 423 (2014)].
19. Н. В. Знаменский, С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **85**, 440 (2007) [N. V. Znamenskii and S. V. Sazonov, JETP Lett. **85**, 358 (2007)].
20. Н. Н. Розанов, *Диссипативные оптические и родственные солитоны*, Физматлит, М. (2021).
21. С. К. Турицын, Н. Н. Розанов, И. Я. Яруткина, А. Е. Беднякова, С. В. Федоров, О. В. Штырина, М. П. Федорук, УФН **186**, 713 (2016) [S. K. Turitsyn, N. N. Rosanov, I. A. Yarutkina, A. E. Bednyakova, S. V. Fedorov, O. V. Shtyrina, and M. P. Fedoruk, Phys.-Uspekhi **59**, 642 (2016)].
22. N. Akhmediev, A. Ankiewicz, J. M. Soto-Crespo, and Ph. Grelu, International Journal of Bifurcation and Chaos **19**, 2621 (2009).
23. N. A. Veretenov, N. N. Rosanov, and S. V. Fedorov, Phys. Rev. Lett. **117**, 183901 (2016).
24. С. В. Федоров, Н. Н. Розанов, Н. А. Веретенов, Письма в ЖЭТФ **107**, 342 (2018) [S. V. Fedorov, N. N. Rosanov, and N. A. Veretenov, JETP Lett. **107**, 327 (2018)].
25. V. E. Lobanov, O. V. Borovkova, and B. A. Malomed, Phys. Rev. A **90**, 053820 (2014).
26. V. E. Lobanov, N. M. Kondratiev, and I. A. Bilenko, Opt. Lett. **46**, 2380 (2021).
27. Н. Н. Розанов, *Диссипативные оптические солитоны. От микро- к нано- и атто-*, Физматлит, М. (2011).
28. D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, Письма в ЖЭТФ **111**, 303 (2020) [D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, JETP Lett. **111**, 268 (2020)].
29. D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, Письма в ЖЭТФ **112**, 79 (2020) [D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, JETP Lett. **112**, 71 (2020)].
30. S. V. Sazonov, Phys. Rev. A **103**, 053512 (2021).
31. В. Г. Вакс, *Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков*, Наука, М. (1983).
32. Р. Блинц, Б. Жекш, *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики*, Мир, М. (1975) [R. Blinc and B. Žekš, *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1974)].

33. Дж. Лэм, *Введение в теорию солитонов*, Мир, М. (1983) [G. L. Lamb, Jr., *Elements of Soliton Theory*, Wiley, N.Y. (1980)].
34. P. J. Caudrey, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and R. K. Bullough, J. Phys. A: Math., Nucl. Gen. **6**, L53 (1973).
35. П. Г. Крюков, В. С. Летохов, УФН **99**, 169 (1969) [P. G. Kryukov and V. S. Letokhov, Sov. Phys. Usp. **12**, 641 (1970)].
36. M. D. Crisp, Phys. Rev. A **8**, 2128 (1973).
37. V. Danilov, V. Maslov, and K. Volosov, *Mathematical Modelling of Heat and Mass Transfer Processes*, Kluwer, Dordrecht (1995).
38. Н. Н. Розанов, Оптика и спектроскопия **107**, 761 (2009) [N. N. Rosanov, Optics and Spectroscopy **107**, 721 (2009)].
39. В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно, *Автоволновые процессы*, Наука, М. (1987).
40. Н. Г. Басов, Р. В. Амбарцумян, В. С. Зуев, П. Г. Крюков, В. С. Летохов, ЖЭТФ **50**, 23 (1966) [N. G. Basov, R. V. Ambartsumyan, V. S. Zuev, P. G. Kryukov, and V. S. Letokhov, Sov. Phys. JETP **23**, 14 (1966)].
41. А. Н. Ораевский, УФН **168**, 1311 (1998) [A. N. Oraevsky, Phys.-Uspekhi **41**, 1199 (1998)].
42. С. В. Сазонов, УФН **171**, 663 (2001) [S. V. Sazonov, Phys.-Uspekhi **44**, 631 (2001)].
43. A. N. Bugay and S. V. Sazonov, J. Opt. B: Quant. and Semiclassical Optics **6**, 328 (2004).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 167 – 171

Низкопороговое параметрическое возбуждение косых ленгмюровских волн, локализованных в периферийном транспортном барьере токамака, при электронном циклотронном нагреве плазмы

Е. З. Гусаков, А. Ю. Попов[1)]

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

Поступила в редакцию 20 июня 2021 г.
После переработки 6 июля 2021 г.
Принята к публикации 7 июля 2021 г.

Обнаружена возможность локализации продольных волн промежуточного диапазона частот в периферийном транспортном барьере тороидальной термоядерной установки. Показано, что такие локализованные волны могут возбуждаться при параметрическом распаде пучков обыкновенных СВЧ волн суб-мегаватного уровня в экспериментах по электронному циклотронному резонансному нагреву плазмы, приводя к генерации аномально рассеянных волн.

DOI: 10.31857/S1234567821150052

В нелинейных средах резонансные трехволновые взаимодействия волн, удовлетворяющие принципам сохранения импульса и энергии (или условиям распада), могут приводить к возбуждению параметрических распадных неустойчивостей (ПРН) волны накачки [1] и, как следствие, к интенсивной нелинейной генерации дочерних волн. Этот процесс является пороговым и происходит, если амплитуда волны накачки превышает определенное значение, определяемое потерями энергии дочерних волн [1]. В неоднородных средах порог возбуждения ПРН часто определяется конвективными потерями дочерних волн из конечной вдоль направления неоднородности области распада [2, 3]. Эксперименты в ионосфере [4] и при лазерном термоядерном синтезе [5] показали, что развитие ПРН приводит к аномальному поглощению и отражению волны накачки. Вместе с тем, теоретический анализ поведения волн, используемых для дополнительного электронного циклотронного резонансного нагрева (ЭЦРН) плазмы в тороидальных термоядерных установках [6, 7], предсказал отсутствие этих неустойчивостей, поскольку порог их возбуждения составляет порядка ГВт и не может быть превзойден в современных установках, оперирующих мегаваттными пучками СВЧ волн. В настоящее время ЭЦРН рассматривается как наиболее надежный метод локального нагрева электронов и генерации токов увлечения в токамаках. Согласно современным представлениям считается, что этот локальный нагрев позволит осуществлять контроль неоклассической тиринг-моды в токамаке-реакторе ИТЭР (ITER – *International Thermonuclear Experimental Reactor*, Международный термоядерный реактор). Однако недавние экспериментальные наблюдения аномального рассеяния греющего излучения [8], генерации групп высокоэнергичных ионов [9], излучения плазмы на полуцелых гармониках частоты генератора [10] и уширения профиля энерговыделения СВЧ волны [11, 12] свидетельствуют о возбуждении нелинейных явлений при распространении мощных пучков СВЧ волн в плазме тороидальных ловушек. Теоретическая модель [13–16], которая расширяет традиционную схему описания трехволнового взаимодействия [1–3] и учитывает наличие в ЭЦРН экспериментах немонотонных профилей плотности плазмы, предсказывает возможность возбуждения низкопороговых ПРН и интерпретирует аномальные явления как последствия их развития [17–21]. Ключевой элемент новой модели – это возможность локализации дочерних волн (или одной волны) вблизи локального максимума плотности и в присутствие ограниченного в поперечном направлении пучка волн накачки, что влечет за собой подавление потерь их энергии из области распада в направлении неоднородности и, следовательно, приводит к резкому снижению порога неустойчивости. Однако немонотонный профиль плотности, по-видимому, не является единственной причиной низкопороговых ПРН. В настоящей работе показано,

[1)]e-mail: a.popov@mail.ioffe.ru

что совершенно неожиданно возбуждение этих явлений может происходить в периферийном транспортном барьере (ПТБ), т.е. в самой крутой области профиля плотности, где, на первый взгляд, конвективные потери дочерних волн должны быть максимальными и выводы теоретического анализа [6, 7] должны быть наиболее обоснованы. Тем не менее, в настоящей работе показано, что специфические зоны прозрачности, возникающие для волн промежуточной частоты в областях плазмы с высоким градиентом плотности [22, 23], приводят к их локализации в пределах транспортного барьера и легкому параметрическому возбуждению. Поскольку пороговые мощности ПРН, приводящих к возбуждению локализованных дочерних волн [13–16], оказываются значительно ниже, чем пороги, предсказанные для генерации нелокализованных дочерних волн [6, 7], абсолютная параметрическая распадная неустойчивость (ПРН) мегаваттных микроволновых пучков представляется возможной и в будущих ЭЦРН экспериментах с использованием СВЧ волн обыкновенной поляризации, в частности, в токамаке ИТЭР. Эта неустойчивость приводит к возбуждению аномально рассеянных обыкновенных волн и косых ленгмюровских волн (КЛВ), запертых в направлении плазменной неоднородности.

Традиционным подходом к анализу волн промежуточной частоты в неоднородной замагниченной плазме является приближение геометрической оптики, использование которого приводит к тем же выводам об областях прозрачности волн, что и теория однородной плазмы. Однако сильная неоднородность на периферии плазмы в сочетании с большим значением в промежуточном частотном диапазоне недиагональной компоненты диэлектрического тензора холодной плазмы g может привести к значительному изменению этих выводов и появлению новых зон прозрачности [22, 23]. Длина волны в этом случае остается намного меньше масштаба неоднородности плазмы. По этой причине эффект неоднородности может быть учтен в приближении геометрической оптики, модифицированном добавлением к дисперсионному уравнению членов, пропорциональных производным компонент диэлектрического тензора холодной плазмы. Чтобы проиллюстрировать это явление в ПТБ токамака, введем локальную декартову систему координат (x, ζ, ξ). Координата x направлена вдоль направления неоднородности, координата ζ – перпендикулярно линии магнитного поля на магнитной поверхности и координата ξ – вдоль линии магнитного поля. Потенциал продольной КЛВ описывается уравнением $\hat{D}_L\varphi = (\varepsilon(\omega_L)\Delta_\perp + \partial_x\varepsilon(\omega_L)\partial_x - i\partial_x g(\omega_L)\partial_\zeta + \eta(\omega_L)\partial_{\xi\xi})\varphi = 0$, являющимся следствием закона Гаусса. В этом уравнении ε, η – диагональные компоненты диэлектрического тензора холодной плазмы, $\Delta_\perp = \partial_{xx} + \partial_{\zeta\zeta}$, $\partial_x = \partial/\partial x$, $\partial_\zeta = \partial/\zeta$ и второй член $\sim\partial_x\varepsilon(\omega_L)$ в $\omega_L/\omega_{ce} \ll 1$ раз меньше третьего члена $\sim\partial_x g(\omega_L)$, что позволяет в дальнейшем им пренебречь. Функция $\kappa(x) = \partial_x g(\omega_L)/\varepsilon(\omega_L)$ имеет локальный максимум в области периферийного транспортного барьера. Чтобы проиллюстрировать этот факт, мы возьмем профиль плотности (рис. 1), который является близким к тем, что из-

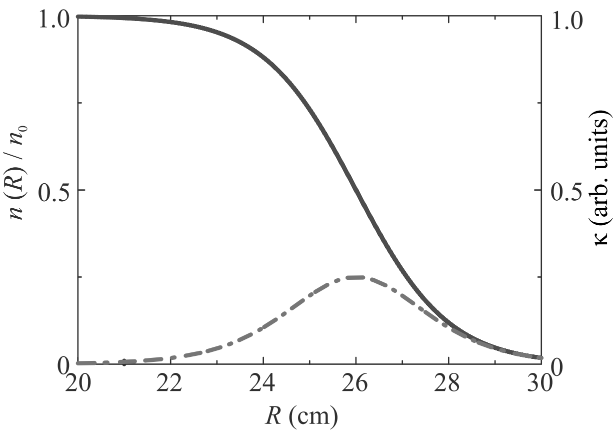

Рис. 1. (Цветной онлайн) Профиль плотности, нормированной на значение плотности в центре (сплошная линия), близкий к тем, что измерялся в токамаке FTU, и профиль производной плотности (штрих-пунктирная линия)

мерялись в области ПП в токамаке FTU [24, 25]. На этом же рисунке показана функция $\kappa(x)$, которая имеет локальный максимум в точке $x = x_m$ и может аппроксимироваться в области барьера параболической зависимостью $\kappa \approx \kappa_0(1 - (x - x_m)^2/l_x^2)$. Далее будем искать решение, описывающее КЛВ, которая распространяется преимущественно в направлении y, т.е. $\varphi(\mathbf{r}, t) = \psi_n(x)\exp(iq_y y + inz/R_m + i\omega_L t)/2 + \text{c.c.}$, где R_m – большой радиус, соответствующий координате x_m, y, z – координаты, имитирующие полоидальное и тороидальное направления. Для анализа свойств этой волны рассмотрим моду, для которой продольная компонента волнового вектора равна 0: $q_\xi = \cos\alpha \cdot n/R_m - \sin\alpha \cdot q_y = 0$, где $\alpha \ll \pi$ – угол магнитного поля $\mathbf{B}$ с тороидальным направлением z. Подставим $\varphi(\mathbf{r})$ в уравнение для потенциала КЛВ и получим

$$\hat{D}_L\psi_n \simeq \varepsilon(\omega_L, x_m) \times$$
$$\times (\partial_{xx} + \kappa_0 q_\zeta - q_\zeta^2 - K^4(x - x_m)^2)\psi_n(x) - 0, \quad (1)$$

где $K = (\kappa_0 q_\zeta/l_x^2)^{1/4}$, $q_\zeta = n/(R_m \sin\alpha) = q(x_m)n/r_m$,

q, r_m – локальный запас устойчивости и малый радиус магнитной поверхности, соответствующие x_m. Решение (1) описывается полиномами Эрмита

$$\psi_n(x) = \phi_{p,n} f_p(K(x - x_m)),$$

$$f_p(Kx) = \sqrt{K/(\sqrt{\pi}2^p p!)}\exp(-K^2x^2/2)H_p(Kx), \quad (2)$$

$$\phi_{p,n} = \text{const}.$$

Дисперсионное уравнение, определяющее собственную частоту волны $\omega_L^p = \omega_L^p(q_\zeta)$, имеет вид

$$D_L(\omega_L^p) = \varepsilon(\omega_L^{p,r})[\kappa_0(\omega_L^p)q_\zeta - q_\zeta^2 - (2p+1)K^2(\omega_L^p)] = 0. \quad (3)$$

Решение (2), которое описывает локализованные КЛВ, существует только в сильно неоднородной плазме, где для них при положительном полоидальном числе q_ζ есть область прозрачности. Если градиент плотности мал, $\kappa \simeq 0$, то плазма для такой волны не является прозрачной. Следует отметить, что эта волна обладает примечательным свойством. В некотором диапазоне волновых векторов, являющихся решением уравнения $q_\zeta^* \simeq \kappa_0(\omega_L^p(q_\zeta^*))/2$, в пределах области локализации вдоль направления неоднородности она меняет знак групповой скорости $v_{g\zeta} = \partial_{q_\zeta} D_L/\partial_{\omega_L} D_L\big|_{\omega_L^p(q_\zeta),q_\zeta}$ в направлении ζ. Далее, покажем, что локализованные КЛВ могут быть легко возбуждены в ЭЦРН экспериментах в результате ПРН.

Рассмотрим волну накачки обыкновенной поляризации, распространяющуюся в экваториальной плоскости вдоль координаты x перпендикулярно магнитному полю внутрь плазмы. В рамках приближения геометрической оптики электрическое поле этой волны может быть представлено в следующем виде: $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_z A_0(y,z) n_x(\omega_0,x)^{-1/2}\exp(i\int_0^x k_x(\omega_0,x')dx' - i\omega_0 t) + \text{c.c.})$, где $A_0 = \sqrt{2P_0/(cw^2)}\exp(-(y^2 + z^2)/(2w^2))$ – поперечное распределение поля в пучке, P_0 – мощность волны, w – радиус пучка, $n_x(\omega_0) = ck_x(\omega_0)/\omega_0 = \sqrt{1-\omega_{pe}^2/\omega_0^2}$ – показатель преломления. Рассмотрим распад волны накачки в ПТБ на локализованную КЛВ (2) и рассеянную в сторону и поляризованную вдоль $\mathbf{e}_z$ обыкновенную волну $\mathbf{E}_s(\mathbf{r})$, распространяющуюся практически поперек магнитного поля, амплитуды которых в присутствии волны накачки описываются системой нелинейно связанных уравнений

$$\begin{cases} \hat{D}_s E_s = \Delta_\perp E_s + \omega_s^2/c^2\eta(\omega_s)E_s = -i\kappa_{nl}\omega_s/c\Delta_\perp E_0^*\varphi, \\ \hat{D}_L\varphi = i\kappa_{nl}c/\omega_s\Delta_\perp E_0 A_s, \end{cases} \quad (4)$$

где $\kappa_{nl} = \omega_{pe}^2/(\omega_0\omega_{ce}B)$ – коэффициент нелинейной связи дочерних волн в присутствии волны накачки. Первое из этих уравнений описывает дочернюю обыкновенную волну, которая возбуждается в результате слияния волны накачки и дочерней КЛВ (правая часть уравнения). Второе уравнение описывает потенциал КЛВ, источником которой является нелинейное взаимодействие обыкновенной волны накачки и обыкновенной дочерней волны. Будем искать ВКБ решение первого из уравнений (4) в виде $E_s(\mathbf{r}) = A_s(x,z)n_{sx}(q_y,x)^{-1/2}\exp(i\int_0^x k_{sx}(q_y,x')dx' + iq_y y + i\omega_s t)/2 + \text{c.c.}$, где $n_{sx} = k_{sx}(\omega_s)c/\omega_s$, равна $A_s = -i\kappa_{nl}(\omega_s/c)G_s\{\Delta_\perp A_0\varphi\}\exp(-iq_y y - i\omega_L t)$ – медленно меняющаяся в области взаимодействия амплитуда и $G_s\{\ldots\} = \frac{-i}{\sqrt{n_{0x}(x)n_{sx}(x)}}\frac{c}{2\omega_s}\int_x^\infty \frac{dx'}{\sqrt{n_{0x}(x')n_{sx}(x')}}\{\ldots\} \times \exp(-i\int_x^{x'}(k_{0x}(x'') + k_{sx}(q_\zeta^*,x''))dx'')$ – часть функции Грина этого уравнения, в которой оставлен доминирующий член, описывающий резонансное взаимодействие волн. На рисунке 2 показана сумма

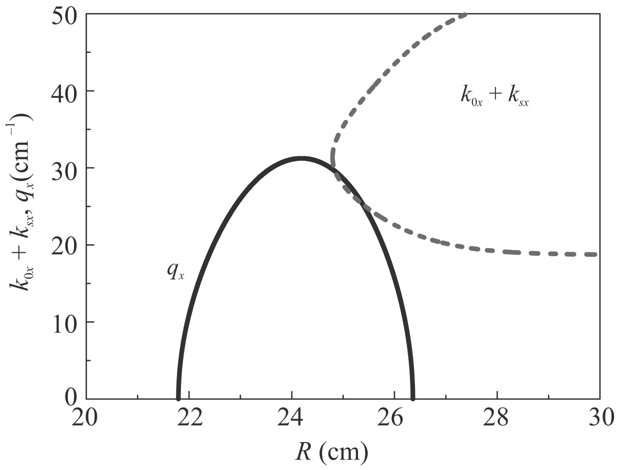

Рис. 2. (Цветной онлайн) Сумма волновых векторов $k_{0x} + k_{sx}(q_\zeta^*)$ обыкновенных волн (пунктирная линия) и волновой вектор $q_x = q_x(q_\zeta^*)$ (сплошная линия) – решение дисперсионного уравнения (3); $f_0 = 140$ ГГц, $f_s = 138.8$ ГГц, $q_\zeta^* = 22.24\,\text{см}^{-1}$

волновых чисел волны накачки и дочерней обыкновенной волны $k_{0x}(x) + k_{sx}(q_\zeta^*, x)$ (пунктирная линия) и волновое число КЛВ $q_x = q_x(q_\zeta^*, x)$, являющееся решением дисперсионного уравнения (3) при $q_\xi = 0$ (сплошная линия). Параметры волн следующие: $f_0 = 140$ ГГц, $f_s = 138.8$ ГГц. В силу большого значения поперечной компоненты волнового вектора $q_\zeta^* = 22.24\,\text{см}^{-1}$ дочерняя обыкновенная волна имеет точку отражения в области распада, т.е. ее волновой вектор обнуляется, $k_{sx}(q_\zeta^*, x) \simeq 0$ в окрестности точек пересечения пунктирной и сплошной линий, где выполняются распадные условия $\Delta K = k_{0x} + k_{sx} - q_x = 0$. Подставляя A_s в правую часть второго уравнения (4), получим уравнение для потенциала КЛВ

$$\hat{D}_L\varphi = k_{nl}^2\Delta_\perp(A_0G_s\{\Delta_\perp(A_0^*\varphi)\}\exp(-iq_yy - i\omega_Lt)). \tag{5}$$

Чтобы найти решение (5), мы используем процедуру теории возмущений [26]. На первом этапе мы пренебрегаем нелинейной накачкой, описываемой правой частью (5), и потерями энергии дочерних КЛВ вдоль направления y. Решением однородной версии уравнения (5) является выражение (2). На втором шаге процедуры теории возмущения мы учтем потери энергии КЛВ вдоль координаты y. Для волны с тороидальной модой $q_\zeta^*(n) = \kappa_0(\omega_L^p)/2$ групповая скорость вдоль ζ обнуляется. Таким образом, единственным механизмом потери энергии из области распада в направлении y оказывается дифракция – более медленный процесс, чем конвекционный вынос. Поэтому КЛВ, обладающие полоидальным числом волны, близким к значению q_ζ^*, наиболее неустойчивы и возбуждаются в первую очередь. Нелинейное взаимодействие и потеря энергии делают амплитуду $\phi_{p,n}$ в представлении (2) для ψ_n переменной величиной, т.е. $\phi_{p,n} \to \phi_{p,n}(t,y)$. Подставим (2) в уравнение (5), умножим его обе части на собственную функцию, $f_p(K_x,x)^*\exp(-inz/R_m)$, и проинтегрируем по координатам x и z. В результате получим следующее уравнение для амплитуды $\phi_{p,n}(t,y)$

$$(\partial/\partial t + i\Lambda_y\partial^2/\partial y^2)\phi_{p,n} = \gamma_0\exp(-y^2/w^2)\phi_{p,n}, \tag{6}$$

где $\gamma_0 = i\frac{\omega_{pe}^4(k_x^2(\omega_0)+q_\zeta^{*2})^2}{\omega_0^2\omega_{ce}^2|\langle\partial_{\omega_L}D_L\rangle|}\frac{2P_0}{cn_{0x}w^2|\mathbf{B}|^2}\Big|_{x_m}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dxf_p(x)^*G_s\times$ $\times\left\{\exp\left(i\int\limits_{x'}^{x}k_x(\omega_0)dx''\right)f_p(x')\right\}$ – коэффициент усиления, $\Lambda_y = \varepsilon(\omega_L,x_m)(1-|\eta(\omega_L,x_m)|\alpha^2)/\partial_{\omega_L}D_L$ – коэффициент дифракции. Отметим, что наличие точки отражения для дочерней обыкновенной волны приводит к снижению ее групповой скорости и увеличению амплитуды в области распада, что, в свою очередь, увеличивает эффективность нелинейного взаимодействия. Уравнение (6) описывает экспоненциальный рост КЛВ, который имеет место, когда мощность пучка превышает пороговое значение P_0^{th}. Если мощность пучка накачки значительно превышает пороговое значение $P_0 \gg P_0^{th}$, то мы можем приближенно записать $\exp(-y^2/w^2) \approx 1 - y^2/w^2$ и получить аналитическое выражение для экспоненциально растущего решения [16]

$$\phi_{p,n}(t,y) = \exp(\gamma_{ins}^st + i\delta\omega_{ins}^st)f_s(y/\delta_y),$$
$$\delta_y = \Lambda_y^{1/4}w^{1/2}/\sqrt[4]{\gamma_0}\exp(-i\pi/8 - i\arg(\gamma_0/4)), \tag{7}$$

где инкремент неустойчивости и поправка к собственной частоте, определяемой (3), имеют вид

$$\gamma_{ins}^s =$$
$$= \gamma_0' - \sqrt{|\gamma_0|/w^2}(2s+1)\Lambda_y\sin(\arctan(\gamma_0''/\gamma_0')/2+\pi/4)$$
$$\delta\omega_{ins}^s =$$
$$= \gamma_0'' - \sqrt{|\gamma_0|/w^2}(2s+1)\Lambda_y\cos(\arctan(\gamma_0''/\gamma_0')/2+\pi/4) \tag{8}$$

и $s \in \mathbb{Z}$. Выражение (8) становится некорректным в окрестности порога возбуждения неустойчивости при $P_0 \approx P_0^{th}$. Однако мы можем использовать его для качественной оценки значения P_0^{th}. Положим $\gamma_{ins}^s = 0$ в (8) и для наиболее опасной фундаментальной моды $s = 0$ получим выражение, которое определяет P_0^{th}

$$\gamma_0'(P_0^{th}) = \sqrt{|\gamma_0(P_0^{th})|\Lambda_y^2/w^2}\times$$
$$\times\sin(\arctan(\gamma_0''(P_0^{th})/\gamma_0'(P_0^{th}))/2+\pi/4). \tag{9}$$

Далее, решим уравнение (6) численно. Результаты решения показаны на рис. 3, где приведена зависи-

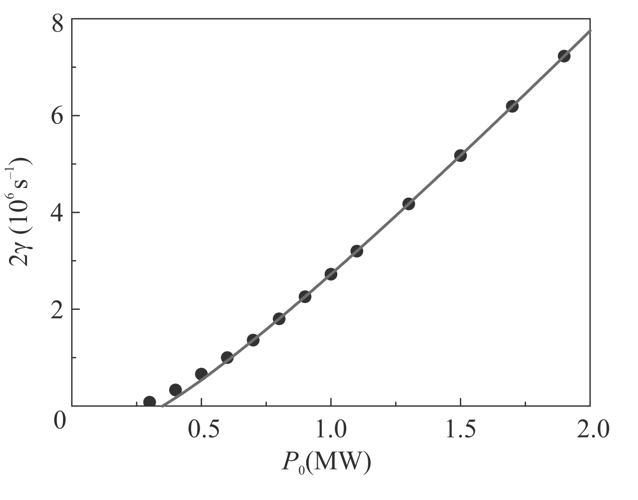

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость инкремента от мощности накачки при $w = 1$ см. Сплошная кривая – (8), символы – результат численного решения (6). Оценка порога ПРН согласно (9) – $P_0^{th} = 367$ кВт, численное решение– $P_0^{th} = 323$ кВт

мость инкремента от мощности накачки при $w = 1$ см. Сплошная кривая отвечает (8), а символы –

результат численного решения (6). Оценка порога согласно (9) дает $P_0^{th} = 367$ кВт, а численное решение – $P_0^{th} = 323$ кВт. Так что качественная аналитическая оценка, определяемая уравнением (9), лишь немного завышает ее реальное значение. Тем не менее, при мощности накачки, значительно превышающей пороговую мощность возбуждения неустойчивости, аналитическая зависимость (8) с хорошей точностью описывает результат численного анализа.

Полученные значения пороговой мощности абсолютной неустойчивости на три порядка меньше значения, предсказанного теорией [6], не учитывающей наличие новых областей прозрачности и возможности локализации КЛВ в транспортном барьере. Поскольку этот нелинейный эффект может оказать значительное влияние на эффективность системы дополнительного нагрева в одном из флагманов современной физики – Международном термоядерном экспериментальном реакторе (ITER), он будет проанализирован в последующих работах и должен быть учтен при планировании будущих экспериментов.

Аналитическое рассмотрение ПРН поддержано в рамках государственного контракта ФТИ им. А. Ф. Иоффе 0040-2019-0023, численное моделирование – в рамках государственного контракта 0034-2021-0003.

1. D. J. Kaup, A. Reiman, and A. Bers, Rev. Mod. Phys. **51**, 275 (1979).
2. A. D. Piliya, in *Proc. of the 10th Intern. Conf. on Phenomena in Ionized Gases, September 13–18, 1971, Oxford, England*, ed. by R. N. Franklin, Donald Parsons and Co., Oxford (1971), p. 320.
3. M. N. Rosenbluth, Phys. Rev. Lett. **29**, 565 (1972).
4. T. B. Leyser, Phys. Plasmas **1**, 2003 (1994).
5. O. N. Krokhin, V. V. Pustovalov, A. A. Rupasov, V. P. Silin, G. V. Sklizkov, A. N. Starodub, V. T. Tikhonchuk, and A. S. Shikanov, Sov. Phys. JETP Lett. **22**, 21 (1975).
6. B. I. Cohen, R. H. Cohen, W. M. Nevins, and T. D. Rognlien, Rev. Mod. Phys. **63**, 949 (1991).
7. A. G. Litvak, A. M. Sergeev, E. V. Suvorov, M. D. Tokman, and I. V. Khazanov, Phys. Fluids B **5**, 4347 (1993).
8. E. Westerhof, S. K. Nielsen, J. W. Oosterbeek, M. Salewski, M. R. De Baar, W. A. Bongers, A. Bürger, B. A. Hennen, S. B. Korsholm, F. Leipold, D. Moseev, M. Stejner, and D. J. Thoen (the TEXTOR Team), Phys. Rev. Lett. **103**, 125001 (2009).
9. S. Coda for the TCV Team, Nucl. Fusion **55**, 104004 (2015).
10. S. K. Hansen, S. K. Nielsen, J. Stober, J. Rasmussen, M. Stejner, M. Hoelzl, T. Jensen, and the ASDEX Upgrade team, Nucl. Fusion **60**, 106008 (2020).
11. B. van Milligen, B. A. Carreras, C. Hidalgo, A. Cappa, and the TJ-II, Phys. Plasmas **25**, 062503 (2018).
12. Yu. N. Dnestrovskij, A. V. Danilov, A. Yu. Dnestrovskij, S. E. Lysenko, A. V. Melnikov, A. R. Nemets, M. R. Nurgaliev, G. F. Subbotin, N. A. Solovev, D. Yu. Sychugov, and S. V. Cherkasov, Plasma Phys. Control. Fusion **63**, 055012 (2021).
13. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, Phys. Rev. Lett. **105**, 115003 (2010).
14. E. Gusakov and A. Popov, Europhys. Lett. **99**, 15001 (2012).
15. A. Yu. Popov and E. Z. Gusakov, Plasma Phys. Control. Fusion **57**, 025022 (2015).
16. A. Yu. Popov and E. Z. Gusakov, Europhys. Lett. **116**, 45002 (2016).
17. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, Phys. Plasmas **23**, 082503 (2016).
18. E. Z. Gusakov, A. Yu. Popov, and P. V. Tretinnikov, Nucl. Fusion **59**, 106040 (2019).
19. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, Nucl. Fusion **60**, 076018 (2020).
20. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, Nucl. Fusion **60**, 076018 (2020).
21. Е. З. Гусаков, А. Ю. Попов, УФН **190**, 396 (2020).
22. E. Z. Gusakov, M. A. Irzak, and A. D. Piliya, JETP Lett. **65**, 25 (1997).
23. E. Z. Gusakov, V. V. Dyachenko, M. A. Irzak, O. N. Shcherbinin, and S. A. Khitrov, Plasma Phys. Control. Fusion **52**, 075018 (2010).
24. C. Mazzotta, O. Tudisco, A. Canton, P. Innocente, M. De Benedetti, E. Giovannozzi, D. Marocco, P. Micozzi, G. Monari, and G. Rocchi, Phys. Scr. T **123**, 79 (2006).
25. V. G. Petrov, A. A. Petrov, A. Yu. Malyshev, M. De Benedetti, and O. Tudisco, Plasma Physics Reports **34**, 24 (2008).
26. E. Z. Gusakov and V. I. Fedorov, Sov. J. Plasma Phys. **5**, 263 (1979).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 172 – 178

Двухслойный Стоун-Уэльсовский графен: структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность

А. И. Подливаев[+*], *К. С. Гришаков*[+1)], *К. П. Катин*[+*], *М. М. Маслов*[+*]

[+]*Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия*

[*]*Научно-исследовательский институт Проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, 119620 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 2021 г.
После переработки 22 июня 2021 г.
Принята к публикации 6 июля 2021 г.

В рамках неортогональной модели сильной связи исследована структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность двухслойного Стоун-Уэльсовского графена. Среди нескольких метастабильных изомеров, отличающихся взаимным расположением слоев, выделена самая устойчивая конфигурация. Установлено, что рассматриваемая структура характеризуется более сильным межслоевым взаимодействием, чем двухслойный графен, но ее жесткость в вертикальном направлении на 17 % меньше. Методом молекулярной динамики исследован теплообмен между двумя слоями Стоун-Уэльсовского графена, один из которых изначально охлажден до 0 K, а второй нагрет до $77 \div 7000$ K. Определена зависимость межслоевой теплопроводности от деформации исследуемой двухслойной структуры. Показано, что интенсивность межслоевого теплообмена сильно зависит от температуры и деформации. Выявлены и объяснены особенности межслоевого взаимодействия в двухслойном Стоун-Уэльсовском графене, не характерные для обычного двухслойного графена.

DOI: 10.31857/S1234567821150064

Введение. Двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG) представляет собой двумерный углеродный материал, состоящий из двух параллельно расположенных графеновых слоев. Фотоэмиссионные эксперименты доказали возможность управлять электронной структурой BG [1]. Поворот одного из слоев BG относительно другого на некоторый угол θ порождает семейство двухслойных материалов с очень необычными зонными структурами. Например, BG с $\theta = 1.1^\circ$, отнесенный в работе [2] к категории "странных металлов", проявляет сверхпроводящие свойства [3, 4]. Возможность управления межзонной щелью при помощи вертикального электрического поля делает BG перспективным материалом для транзисторов нового типа [5, 6]. Большая удельная поверхность и повышенная по сравнению с графеном жесткость BG позволяют использовать его в качестве датчика влажности [7] или поглотителя ядовитых газов [8]. Внешнее давление, гидрогенизация или фторирование позволяют получать из BG диаманы – необычные двухслойные материалы с ковалентно связанными слоями [9].

К настоящему времени открыто множество аллотропов графена, которые представляют собой sp^2- или sp/sp^2-гибридизованные углеродные листы одноатомной толщины. К таким структурам можно отнести азуграфен [10], ψ-графен [11], T-графен [12], фаграфен [13], пентаграфен [14], модификации графиновых слоев [15] и др. Они притягиваются друг к другу за счет сил ван-дер-Ваальса и могут формировать двухслойные структуры, подобные BG. Примером такой структуры является двухслойный азуграфен, предсказанный и теоретически исследованный в 2019 г. в работе [10]. Среди известных аллотропов графена наибольшей устойчивостью обладает Стоун-Уэльсовский графен [16]. Расчеты из первых принципов предсказывают, что его энергия всего на 149 мэВ/атом выше энергии графена [16]. Неортогональная модель сильной связи [17] дает близкое значение 161 мэВ/атом [18]. Элементарная ячейка Стоун-Уэльсовского графена [19] может быть получена из 16-атомной ячейки графена поворотом центральной C–C связи на 90° (см. рис. 1).

Потенциальная возможность синтеза SW-графена следует из его высокой термодинамической устойчивости, наибольшей среди всех двумерных аллотропов углерода (после графена) [16]. В работе [20] теоретически обоснован механизм образования устойчивых углеродных структур низкой размерности, ключевую роль в котором играет миграция

1)e-mail: ksgrishakov@yahoo.com

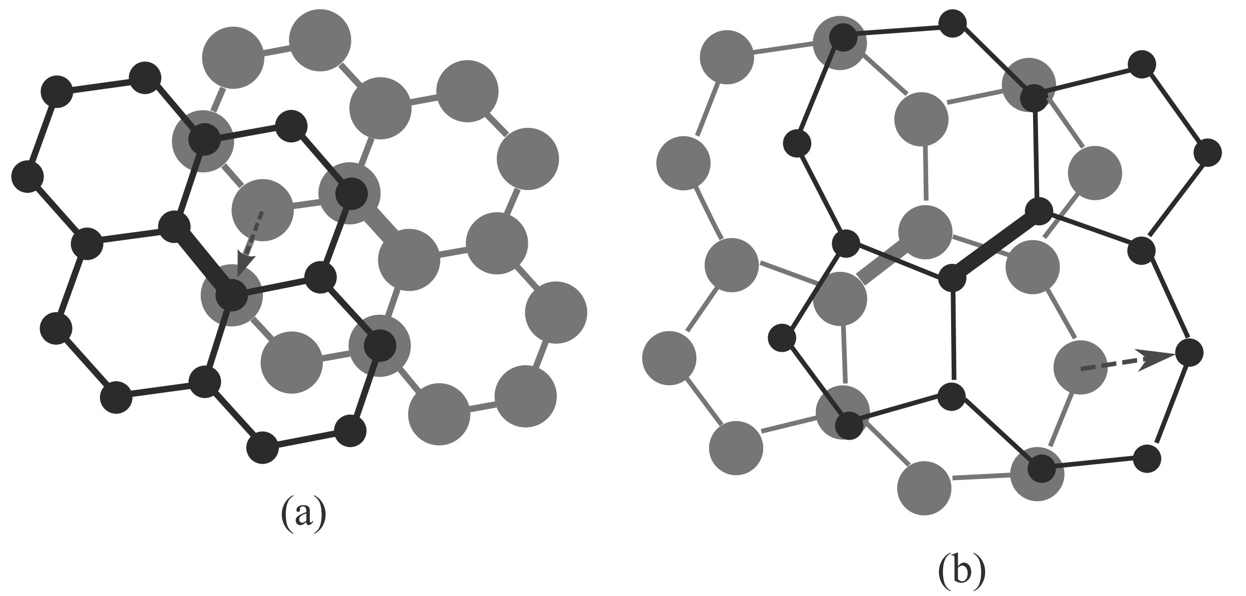

Рис. 1. Фронтальный вид структуры AB двухслойного графена (a) и двухслойного Стоун-Уэльсовского графена (b). Серыми большими кружками отмечены атомы нижней, малыми черными – верхней графитовой плоскости. Пунктирными стрелкой обозначено направление относительного смещения графеновых плоскостей, переводящего конфигурацию AB в AA

дефектов Стоуна-Уэльса. Известны способы понижения энергии этих дефектов: деформация [21] и наличие адсорбировавшегося водорода [22]. К объединению дефектов Стоуна-Уэльса в плотные скопления может приводить их взаимное притяжение на больших расстояниях, вызванное поперечным искривлением графенового листа вокруг этих дефектов [23, 24].

В настоящей работе рассматривается структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность двухслойного Стоун-Уэльсовского графена (Bilayer Stone-Wales Graphene, BSWG).

Однородный нагрев двухслойного графена существенно влияет на его электронную систему [2, 3, 25]. Процессы межслоевого теплообмена играют большую роль при неравномерном нагреве слоев. Такой нагрев возникает, например, при облучении структуры потоком быстрых заряженных частиц, падающих под острым углом и рассеивающихся на верхнем слое. Отметим, что в экспериментах по импульсному лазерному нагреву многослойных нанотрубок характерная плотность энергии составляет ~ 1 Дж/см^2 [26, 27], что соответствует ~ 150 мэВ/атом. Неодинаковый нагрев слоев также может быть получен, например, при пропускании импульсного тока через двухслойную систему, один из слоев которой имеет пониженную проводимость из-за наличия областей, допированных фтором [28, 29], хлором [30] или водородом [31], что может блокировать протекание тока через этот слой.

В нашей работе [32] рассматривался процесс теплообмена между слоями BG. Было показано существование двух конкурирующих процессов, происходящих в BG при нагреве одного из слоев. При высоких температурах преобладал термический распад нагретого слоя или его отслоение. При более низких температурах нагретый слой охлаждался за счет межслоевого теплообмена, так что BG не разрушался. Согласно выводам работы [32], интенсивность межслоевого теплообмена в BG существенно зависит от начальной температуры нагретого слоя и резко возрастает вблизи температуры плавления графена.

Из-за своей напряженной структуры, включающей пяти- и семиугольные циклы, Стоун-Уэльсовский графен не достигает исключительных механических характеристик, характерных для графена [33, 34]. Моделирование предсказывает, что бездефектный графен плавится при $4500 \div 5100$ K [35–37], в то время как температура плавления Стоун-Уэльсовского графена оценивается в 3800 K [17]. Согласно теоретическим расчетам, модуль Юнга и коэффициент Пуассона Стоун-Уэльсовского графена равны, соответственно, 857 ГПа и 0.39 [17]. Эти величины отличаются от экспериментально измеренных модуля Юнга графена (1.0 ± 0.1 ТПа [38]) и коэффициента Пуассона графита (0.16 [39]). Более низкая устойчивость и механическая прочность Стоун-Уэльсовского графена, а также особенности межслоевого взаимодействия в нем обуславливают отличия свойств BSWG и BG. Настоящая работа посвящена выявлению и объяснению этих отличий.

Постановка задачи. Мы рассматривали теплоизолированный BSWG, не связанный с подложкой. Использовались периодические граничные условия в плоскости листов BSWG и свободные условия в перпендикулярном направлении. Транслируемая ячейка содержала по 32 атома (по 16 атомов углерода в каждом слое), как показано на рис. 1. Размеры ячейки и сдвиг одного слоя относительно другого оптимизировались, а угол относительного поворота слоев друг относительно друга оставался равным нулю.

Молекулярно-динамическое моделирование межслоевой теплопроводности проводилось с использованием микроканонического ансамбля [40]. В начальный момент времени атомы одного слоя были неподвижны, а атомам второго слоя сообщались случайные скорости, распределенные по закону Максвелла и соответствующие температурам 77, 300, 1000, 3000, 5000 или 7000 K, как это делалось в работе [32]. Наивысшая рассматриваемая температура немного ниже удвоенной температуры плавления монослоя, благодаря чему возможны три конкурирующих процесса: расслоение, плавление нагретого слоя или его охлаждение за счет передачи энергии другому слою. Начальный импульс системы выбирался равным нулю. В процессе движения атомов импульс и полная энергия системы не менялись. Этот подход известен как "теория ограниченного теплового резервуара" (*finite heat bath theory*) [41, 42]. Движения атомов рассчитывались методом Верле с шагом 0.3 фс. Характерное время τ выравнивания температуры слоев определялось алгоритмом, описанным в работе [32]. Этот алгоритм основан на экспоненциальной интерполяции временной зависимости разности микроканонических температур двух слоев. Декремент экспоненты определялся методом наименьших квадратов. Для каждой температуры рассчитывалось 4 варианта движения системы, которые различались начальным стохастическим распределением скоростей и термических смещений атомов. Это позволило определить дисперсию рассматриваемых физических величин.

Во всех расчетах использовался межатомный потенциал на основе неортогональной модели сильной связи [18], менее точной, чем методы *ab initio*, но превосходящей их по быстродействию. Программная реализация модели [18] опубликована в работе [43]. Эта модель демонстрирует хорошее согласование с результатами теории функционала плотности для структур, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [44]. Кроме того, она успешно применялась для исследования термической устойчивости фуллеренов, графена и похожих углеродных систем (см., например, работы [17, 34, 36, 45–47] и ссылки в них). Для описания ван-дер-Ваальсова межслоевого взаимодействия использовались поправки, предложенные в работе [32] и хорошо воспроизводящие экспериментально измеренные межслоевые расстояния и модуль упругости C_{zz} графита.

Моделирование межплоскостного теплообмена проводилось для ненапряженной (компоненты тензора деформаций $U_{XX} = U_{YY} = 0$), двуосно растянутой ($U_{XX} = U_{YY} = 0.05$) и одноосно сжатой ($U_{XX} = -0.1$, $U_{YY} = 0$) структуры BSWG. Выбранная растягивающая деформация (5 %) лежит в области упругости графена [48]. Одноосное сжатие на 10 % приводит к гофрированию графенового листа [32, 49]. Интерес к исследованию гофрированного образца, сжатого вдоль только одной оси, обусловлен двумя причинами. Во-первых, при такой деформации возможен равномерный нагрев верхнего слоя облучением образца быстрыми частицами, падающими под острым углом на поверхность BSWG параллельно образовавшимся гофрам. В этом случае отсутствуют участки "тени", что способствует равномерному нагреву. Во-вторых, из данных экспериментальной работы [50] следует, что выпуклые участки гофров адсорбируют атомы водорода интенсивнее вогнутых участков. Это дает возможность формировать продольные диэлектрические полосы водорода на графене, что может быть полезно для приложений графеновой электроники.

Энергия межслоевого взаимодействия E_{lay} в двухслойной структуре, содержащей N атомов углерода, определялась по формуле $E_{\text{lay}} = (E(bilayer) - 2E(monolayer))/N$.

Результаты. Статические характеристики. На рисунке 1a и b изображены 16-атомные периодические ячейки BG и BSWG. Как известно, для BG конфигурация AA соответствует локальному минимуму энергии, а AB – глобальному минимуму (см. [32, 51] и ссылки в них). Для BSWG мы рассмотрели всевозможные вектора относительного смещения слоев, что позволило определить его оптимальную конфигурацию, которая оказалась подобна AB (см. рис. 1b). Существуют также несколько метастабильных конфигураций BSWG с более высокой потенциальной энергией. На рисунке 2 представлены линии уровней потенциальной энергии BSWG (в единицах

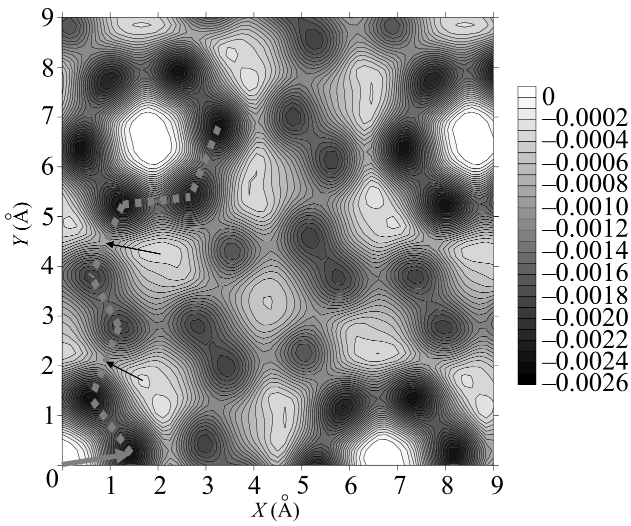

Рис. 2. Линии уровней потенциальной энергии (эВ/атом) при смещении верхнего слоя Стоун-Уэльсовского графена относительно нижнего на вектор трансляции с координатами (X, Y)

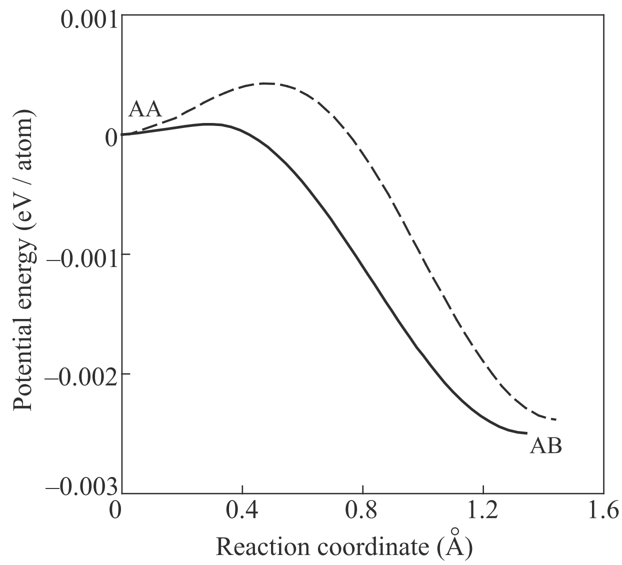

Рис. 3. Зависимость энергии межслоевого взаимодействия двухслойного графена (пунктирная линия) и Стоун-Уэльсовского графена (сплошная линия) при параллельном смещении верхней графеновой плоскости над нижней вдоль вектора трансляции, переводящего конфигурацию АА в АВ

эВ/атом) в зависимости от горизонтального смещения слоев друг относительно друга. За нулевое значение потенциальной энергии принята энергия конфигурации АА, когда один слой располагается точно над другим, а расстояние между уровнями равно 0.1 мэВ/атом. Затемненные области соответствуют стабильным и метастабильным конфигурациям. Жирной стрелкой серого цвета отмечен вектор, переводящий структуру АА в АВ. Вследствие симметрии структуры и периодических граничных условий на рис. 2 попадают несколько эквивалентных конфигураций АА и АВ. Стабильная конфигурация АВ и метастабильные конфигурации ниже по энергии конфигурации АА на ~2.5 и ~1.5 мэВ/атом соответственно.

На рисунке 3 представлены зависимости потенциальной энергии взаимодействия слоев BG и BSWG в зависимости от смещения вдоль вектора, переводящего метастабильные конфигурации АА этих структур в стабильные конфигурации АВ. На этом рисунке видно, что термодинамическая устойчивость конфигурации АА почти одинакова для BG и BSWG: энергетическое отличие от конфигурации АВ составляет 2.5 и 2.4 мэВ/атом соответственно. Однако энергетические барьеры, препятствующие переходу от АА к АВ конфигурации, сильно различаются: они равны 0.42 и 0.08 мэВ/атом, соответственно. Таким образом, слои BSWG легче "скользят" друг относительно друга. На рисунке 2 серой пунктирной линией обозначена траектория, при движении по которой верхний слой BSWG перейдет из конфигурации АВ в эквивалентную конфигурацию, отличающуюся сдвигом на вектор трансляции слоя. Черными стрелками обозначены равные потенциальные барьеры, разделяющие две эквивалентные конфигурации АВ. Высота этих барьеров для BSWG и BG равна 1.9 и 2.8 мэВ/атом соответственно.

Расчет показал, что межслоевое расстояние в BG и BSWG зависит от деформации этих структур. Межслоевые расстояния в рассматриваемых ненапряженном, растянутом и гофрированном BSWG равны 3.35, 3.34 и 3.64 Åсоответственно. В BG эти расстояния составляют 3.35, 3.33 и 3.78 Å. Модуль упругости BSWG C_{ZZ}, определяемый как вторая производная энергии межслоевого взаимодействия по межслоевому расстоянию, равен 1.73 эВ/атом. Это несколько ниже, чем аналогичная величина в BG (2.083 эВ/атом). Значения E_{lay} в ненапряженном, растянутом и гофрированном BSWG равны 23.8, 21.6 и 20.8 мэВ/атом соответственно. Аналогичные величины для BG составляют 25, 23 и 13 мэВ/атом, соответственно [32]. Отличительной особенностью BSWG оказалось то, что энергия межслоевого взаимодействия почти не ослабевает при сжатии.

Результаты. Динамические характеристики. На рисунке 4 и в табл. 1 представлены значения характерного времени межслоевого теплообмена в ненапряженных и деформированных BSWG в зависимости от начальной температуры нагретого слоя.

Таблица 1. Характерное время межслоевого теплообмена и распада (пс) двухслойного графена [32] и двухслойного Стоун-Уэльсовского графена. Время распада приведено в скобках для тех температур, при которых он наблюдался

	T (K)	77	300	1000	3000	5000	7000
$U_{XX} = 0$ $U_{YY} = 0$	BSWG	78.9 ± 13.9	58.0 ± 5.6	38 ± 2.5	38.2 ± 4.6	48.8 ± 4.9	1.4 ± 0.3 $1(0.6 \pm 0.1)$
	BG [32]	25.4 ± 5.2	97.6 ± 19.5	85.8 ± 6.4	57.2 ± 2.6	60.7 ± 3.5	2.7 ± 0.8 (0.9 ± 0.3)
$U_{XX} = 0.05$ $U_{YY} = 0.05$	BSWG	56.0 ± 10.7	51.2 ± 5.8	56.2 ± 3.5	55.1 ± 13.9	3.8 ± 0.8 $(1.5 \pm 0.3$	0.8 ± 0.15 (0.4 ± 0.1)
	BG [32]	19.4 ± 7.7	60.1 ± 9.3	62.1 ± 8.1	79.1 ± 13.6	101 ± 11.7	1.7 ± 0.3 (1.8 ± 0.3)
$U_{XX} = -0.1$ $U_{YY} = 0.0$	BSWG	72.3 ± 12.1	61.2 ± 5.7	47.9 ± 1.5	33.6 ± 3.5	20.4 ± 5.1 (5.6 ± 0.6)	1.2 ± 0.5 (0.5 ± 0.1)
	BG [32]	235 ± 41	94.2 ± 6.5	70.7 ± 11.1	43.9 ± 2.0	38.4 ± 3.9	1.6 ± 0.4 (0.4 ± 0.1)

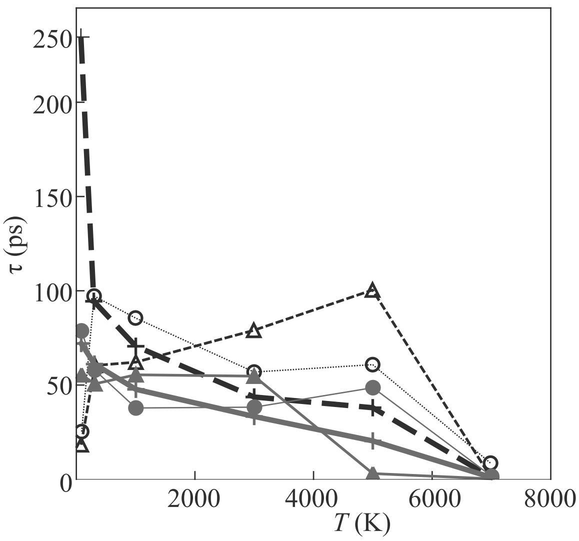

Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурные зависимости времени межплоскостной теплопередачи в двухслойном графене (пунктирные черные линии) и Стоун-Уэльсовском графене (сплошные красные линии). Маленькие кружки и тонкие линии – время теплопередачи в ненапряженном кристалле. Треугольники и линии средней толщины – время теплопередачи в двухосно-растянутом (на 5 %); кристалле. Кресты и жирные линии – аналогичные характеристики для гофрированных кристаллов с одноосным сжатием (−10 %)

Из приведенных данных видно, что характер зависимости межслоевой теплопроводности от деформации и температуры неодинаков для BG и BSWG. При комнатной и более высоких температурах межслоевой теплообмен в BSWG происходит гораздо интенсивнее, чем в BG, при всех рассматриваемых деформациях. Это объясняется описанной выше разницей межслоевого взаимодействия в рассматриваемых структурах: межслоевое расстояние в BSWG на $\sim 4\,\%$ ниже, а энергия межслоевого взаимодействия в 1.6 раза выше, чем в BG. Этими особенностями BSWG объясняется также отсутствие в нем сдвига верхнего слоя вдоль гребня гофра, которое наблюдается в сжатом BG при высоких температурах [32]. Кроме того, в ходе молекулярно-динамического моделирования BSWG ни разу не наблюдалось расслоения структуры, как это имело место для BG [32]. Единственным каналом разрушения BSWG было плавление и (для высоких температур) последующая фрагментация нагретого слоя. На рисунке 5 представлен характерный вид гофрированного

Рис. 5. Гофрированная структура BSWG после распада горячего слоя. Начальная температура $T = 7000$

BSWG после распада нагретого слоя с начальной температурой 7000 K. На этом рисунке видно, что в нагретом слое образуются смежные многоатомные кольца. По мере накопления таких дефектов, значительная часть атомов углерода приобретает *sp*-гибридизацию, так что слой превращается в "клубок" карбиновых нитей аналогично тому, как это наблюдалось при моделировании BG [32].

Невозможность термического расслоения BSWG можно объяснить совокупностью двух причин. Первая причина – достаточно высокое значение энергии межслоевого взаимодействия E_{lay}, которая слабо меняется при растяжении и даже увеличивается при сжатии BSWG. Вторая причина – низкая температура плавления Стоун-Уэльсовского графена (~ 3800 K [17]) по сравнению с графеном (~ 5100 K [35], обе температуры плавления получены в рамках одной и той же неортогональной модели сильной связи [18]). Вероятность расслоения BG и BSWG определяется в основном величиной E_{lay}, но из-за сравнительно низкой температуры плавления распад нагретого слоя BSWG происходит раньше, чем его отрыв. Общей характерной чертой BG и BSWG является резкое увеличение интенсивности межслоевого теплообмена вблизи порога плавления, что видно из табл. 1. Отметим также малость времени плавления по сравнению с характерным временем теплопередачи. Это подтверждает вывод о том, что межслоевая теплопередача может предотвращать плавление нагретого слоя.

Заключение. Статическое моделирование BSWG выявило, что он имеет несколько существенных отличий от BG. Во-первых, BSWG обладает меньшей жесткостью в поперечном направлении. Во-вторых, слои BSWG легче смещаются друг относительно друга. В-третьих, в BSWG невозможно формирование конфигурации AA из-за ее низкой устойчивости. В-четвертых, BSWG характеризуется меньшим межслоевым расстоянием и более сильным межслоевым взаимодействием.

Динамическое исследование межслоевого теплообмена показало, что интенсивность этого процесса в BSWG выше, чем в BG, и слабее зависит от начальной температуры нагретого слоя и деформации структуры. Резкий рост межслоевой теплопроводности (более чем на порядок) наблюдается лишь вблизи температуры плавления Стоун-Уэльсовского графена. В интервале температур от комнатной до 7000 K межслоевая теплопроводность BSWG выше, чем у BG. Однако при криогенных температурах более симметричный BG демонстрирует лучшую межслоевую теплопроводность. Высокая теплопроводность при низких температурах характерна для бездефектных кристаллов алмаза, сапфира, кварца и алюминия (см. [52, 53] и ссылки к ним). При одноосном сжатии на 10 % BSWG, подобно BG, становится гофрированным. Однако в отличие от BG, тепловой контакт между его слоями при этом не нарушается. Характерное время межслоевого теплообмена в гофрированном BSWG монотонно, почти линейно падает до нулевого значения в рассмотренном температурном интервале 77–7000 K.

Столь заметные различия свойств BSWG и BG делают интересным исследование свойств комбинированного двухслойного материала, один слой которого представляет собой графен, а другой – Стоун-Уэльсовский графен.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ. Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации # МК-722.2020.2.

1. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
2. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthi, and Pablo Jarillo-Herrero, Phys. Rev. Lett. **124**, 076801 (2020).
3. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 43 (2018).
4. G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **107**, 537 (2018).
5. Y. Zhang, T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, Nature **459**, 820 (2009).
6. G. Fiori and G. Iannaccone, IEEE Electron Device Letters **30**, 261 (2009).
7. M.-C. Chen, C.-L. Hsu, and T.-J. Hsueh, IEEE Electron Device Letters **35**, 590 (2014).
8. Y. Tang, Z. Liu, Z. Shen, W. Chen, D. Ma, and X. Dai, Sens. Actuators B **238**, 182 (2017).
9. Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Г. Квашнин, Д. Г. Квашнин, Письма в ЖЭТФ **90**, 144 (2009).
10. J. Liu and H. Lu, RSC Adv. **9**, 34481 (2019).
11. X. Li, Q. Wang, and P. Jena, J. Phys. Chem. Lett. **8**, 3234 (2017).
12. Y. Liu, G. Wang, Q. Huang, L. Guo, and X. Chen, Phys. Rev. Lett. **108**, 225505 (2012).
13. Z. Wang, X.-F. Zhou, X. Zhang, Q. Zhu, H. Dong, M. Zhao, and A. R. Oganov, Nano Lett. **15**, 6182 (2015).
14. S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, Proc. Nat. Acad. Sci. **112**, 2372 (2015).
15. Е. А. Беленков, В. В. Мавринский, Т. Е. Беленкова, В. М. Чернов, ЖЭТФ **147**, 949 (2015).
16. H. Yin, X. Shi, C. He, M. Martinez-Canales, J. Li, C. J. Pickard, C. Tang, T. Ouyang, C. Zhang, and J. Zhong, Phys. Rev. B **99**, 041405 (2019).

17. M. M. Maslov, A. I. Podlivaev, and K. P. Katin, Molecular Simulation **42**, 305 (2016).
18. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 746 (2019).
19. A. J. Stone and D. J. Wales, Chem. Phys. Lett. **128**, 501(1986).
20. Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов, УФН **167**, 751 (1997).
21. T. Dumitrică and B. I. Yakobson, Appl. Phys. Lett. **84**, 2775 (2004).
22. A. J. M. Nascimento and R. W. Nunes, Nanotechnology **24**, 435707 (2013).
23. J. Ma, D. Alfe, A. Michaelides, and E. Wang, Phys. Rev. B **80**, 033407 (2009).
24. S. Deng and V. Berry, Mater. Today **19**, 197 (2016).
25. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgo, and L. M. K. Vandersypen, Nat. Mater. **7**, 151 (2008).
26. P. M. Korusenko, V. V. Bolotov, S. N. Nesov, S. N. Povoroznyuk, and I. P. Khailov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **358**, 131 (2015).
27. V. V. Bolotov, P. M. Korusenko, S. N. Nesov, S. N. Povoroznyuk, and E. V. Knyazev, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **337**, 1 (2014).
28. J. T. Robinson, J. S. Burgess, C. E. Junkermeier, S. C. Badescu, T. L. Reinecke, F. K. Perkins, M. K. Zalalutdniov, J. W. Baldwin, J. C. Culbertson, P. E. Sheehan, and E. S. Snow, Nano Lett. **10**, 3001 (2010).
29. K. S. Grishakov, K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, and M. M. Maslov, Applied Surface Science **463**, 1051 (2019).
30. B. Li, L. Zhou, D. Wu, H. Peng, K. Yan, Y. Zhou, and Z. Liu, ACS NANO **5**, 5957 (2011).
31. D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, Science **323**, 610 (2009).
32. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, Письма в ЖЭТФ **113**, 182 (2021).
33. J. A. Baimova, L. Bo, S. V. Dmitriev, K. Zhou, and A. A. Nazarov, Europhys. Lett. **103**, 46001 (2013).
34. С. В. Дмитриев, Ю. А. Баимова, А. В. Савин, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **93**, 632 (2011).
35. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, ФТТ **58**, 821 (2016).
36. J. H. Los, K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, Phys. Rev. B **91**, 045415 (2015).
37. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **113**, 204 (2016).
38. C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, Science **321**, 385 (2008).
39. O. L. Blakslee, J. Appl. Phys. **41**, 3373 (1970).
40. E. M. Pearson, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, Phys. Rev. A **32**, 3030 (1985).
41. C. E. Klots, Z. Phys. D **20**, 105 (1991).
42. J. V. Andersen, E. Bonderup, and K. Hansen, J. Chem. Phys. **114**, 6518 (2001).
43. K. P. Katin, K. S. Grishakov, A. I. Podlivaev, and M. M. Maslov, J. Chem. Theory Comput. **16**, 2065 (2020).
44. K. P. Katin and M. M. Maslov, J. Phys. Chem. Solids **108**, 82 (2017).
45. А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **111**, 728 (2020).
46. А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **92**, 54 (2010).
47. А. И. Подливаев, ФТТ **62**, 979 (2020).
48. E. Cadelano, P. L. Palla, S. Giordano, and L. Colombo, Phys. Rev. Lett. **102**, 235502 (2009).
49. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Phys. Stat. Sol. B **249**, 1393 (2012).
50. R. Balog, B. Jørgensen, J. Wells, E. Løgsgaard, P. Hofmann, F. Besenbacher, L. Hornekør, J. Am. Chem. Soc. **131**, 8744 (2009).
51. I. V. Lebedova, A. A. Knizhnik, A. M. Popov, Y. E. Lozovik, and B. V. Potapkin, Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 5687 (2011).
52. G. Fugallo, M. Lazzeri, L. Paulatto, and F. Mauri, Phys. Rev. B **88**, 045430 (2013).
53. F. Pobell, *Matter and Methods at Low Temperatures*, Springer, Berlin, Heidelberg (2007), p. 64.

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 179 – 184

Метамагнитное поведение слоистого кобальтита $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta \approx 0.5$

Н. И. Солин[1], *С. В. Наумов*

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 15 июня 2021 г.
После переработки 5 июля 2021 г.
Принята к публикации 5 июля 2021 г.

Слоистый кобальтит $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta \approx 0.5$ – метамагнетик, ниже $T \sim 20$ K в небольшом магнитном поле переходит из антиферромагнитного в смешанное ферромагнитное состояние. Выше $T \sim 20$ K он представляет смесь обменно-связанных ферромагнитной и антиферромагнитной фаз. Переход из квазиметаллического в слабо проводящее состояние происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS в IS/LS состояние.

DOI: 10.31857/S1234567821150076

Интерес к упорядоченным слоистым оксидам кобальта $RBaCo_2O_{5.5}$, где R^{3+} – редкоземельный ион, вызван из-за их необычных магнитных и транспортных свойств. В этих соединениях обнаружен ряд последовательных переходов: металл-изолятор (MI), парамагнитный (PM), ферромагнитный (FM), антиферромагнитные (AFM) переходы [1]. Основной вопрос касается происхождения и движущих сил переходов металл-изолятор в этих материалах. В отличие от манганитов, переход MI в кобальтитах не связан с магнитным упорядочением. Физика слоистых кобальтитов определяется взаимодействием между зарядовыми, спиновыми, орбитальными и решеточными степенями свободы [2, 3]. Переход MI сопровождается изменениями спиновых состояний ионов Co^{3+}. Во многих кобальтитах разности энергий между спиновыми состояниями малы и легко преодолеваются изменениями температуры, приводящей к трансформации спинового состояния и к различным фазовым переходам [1].

Размер редкоземельного элемента влияет на кристаллическое поле на ионах Co и, следовательно, он может оказывать влияние на их спиновое состояние и магнитное состояние $RBaCo_2O_{5.5}$. Наибольшими размерами из редкоземельных ионов обладают ионы Pr^{3+} и Nd^{3+} [4]. Результаты нейтронной и синхротронной порошковой дифракции [5] и мюонной спектроскопии [6] показывают, что, хотя температуры фазовых переходов $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta \approx 0.5$ аналогичны температурам переходов других кобальтитов, микроскопическая магнитная природа их сильно отличается. В нулевом магнитном поле ниже $T_{\mathrm{MI}} \sim 360$ K при $T_{\mathrm{N1}} \sim 275$ K ионы Co^{3+} $NdBaCo_2O_{5.47}$ упорядочиваются в AFM структуру G-типа. Ниже $T_{\mathrm{SSO}} \sim 230$ K возникает AFM упорядоченная по спину фаза (SSO – *spin-state ordered phase*). С понижением температуры объемная доля AFM G-типа постепенно трансформируется в SSO фазу в виде кластеров с размерами ~ 350 Å с отчетливой магнитной структурой [5]. AFM-фазы представляют смесь FM и AFM фаз, они содержат иные спиновые структуры, чем в соединениях с другими редкоземельными ионами [6]. Несмотря на такие необычные результаты $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, магнитные свойства его наименее изучены: нет данных о спиновом состоянии ионов Co^{3+} вблизи T_{MI} и магнитном состоянии $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta \approx 0.5$. Данная работа направлена на изучение магнитного и спинового состояния $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta \approx \approx 0.5$.

Результаты и обсуждение. Поликристаллы $NdBaCo_2O_{5+\delta}$ были синтезированы твердофазным методом из исходных компонентов Nd_2O_3, $BaCO_3$ и Co_3O_4 ступенчатым отжигом при $T = 900{-}1150\,°$C. Абсолютное содержание кислорода определено методом восстановления образца в водороде. Исходный образец был однофазным с $\delta = 0.65$. Необходимое содержание кислорода δ достигалось дополнительными отжигами и закалкой исходного образца на воздухе. Орторомбическая структура $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta = 0.48 \pm 0.02$, при комнатной температуре описывается пространственной группой Pmmm (# 47) с элементарной ячейкой $a_p \times 2a_p \times 2a_p$, где a_p – параметр псевдокубической ячейки перовскита. По данным порошковой дифракции рентгеновских лучей образец $NdBaCo_2O_{5.48}$ был однофазным с параметрами элементарной ячейки $a = 3.899(5)$ Å, $b = 7.8539$ Å,

[1]e-mail: solin@imp.uran.ru

$c = 7.5882$ Å. Измерения намагниченности проведены на установках MPMS-5XL (QUANTUM DESIGN) и PPMS.

На рисунке 1 приведены температурные зависимости намагниченности $M(T)$ кобальтита $NdBaCo_2O_{5.48}$ в магнитном поле $H = 1$ кЭ и $H = 50$ кЭ при охлаждении без магнитного поля (ZFC). Сплошными линиями указаны экспериментальные значения намагниченности (кривые *1* и *2*), символами указана намагниченность при вычитании парамагнитного вклада иона Nd^{3+} (пунктирные кривые *3* и *4*). Намагниченность $NdBaCo_2O_{5.48}$ в поле 1 кЭ (символы) резко возрастает ниже температуры Кюри $T_C \approx 280-290$ K, достигает наибольшего значения при $T_{\max} \sim 230$ K, ниже которой намагниченность резко уменьшается при $T \sim T_{N2} \sim 150-160$ K. Поведения намагниченности $M(T)$ при $H = 1$ и 50 кЭ при учете PM вклада Nd^{3+} (показано символами) качественно совпадают. Намагниченность $NdBaCo_2O_{5.48}$ в поле 50 кЭ (символы) резко возрастает до $M \sim 0.5\mu_B$ при $T \sim 200$ K, ниже которой она медленно уменьшается. Ниже $T \sim 150$ K намагниченность $NdBaCo_2O_{5.48}$ остается в состоянии, похожем на ферромагнитное.

Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ кобальтитов $NdBaCo_2O_{5.48}$ и с R = Gd или Tb ниже $T \sim 150$ K сильно отличаются [2, 7, 8]. Намагниченность $TbBaCo_2O_{5.47}$ при $H = 50$ кЭ достигает максимума при $T \sim 250$ K, ниже которой резко уменьшается из-за перехода в AFM состояние (вставка рис. 1) [7, 8]. Спонтанная намагниченность M_s существует в узкой области температур от $T_C \sim 280$ K до $T_{N1} \approx 230$ K [8]. Приложение внешнего магнитного поля вызывает переходы из AFM в FM состояние при критическом поле $H_{\rm cr}$, которое увеличивается линейно с понижением температуры (вставка рис. 1): $H_{\rm cr}(\text{кЭ}) = 248 - 0.96{*}T\,(\text{K})$. Аналогичное поведение $H_{\rm cr}$ наблюдалось и в других кобальтитах с R = Gd, Tb и Eu [2, 7, 9].

Определение PM вклада ионов Nd^{3+} необходимо для интерпретации полученных результатов, и в $NdBaCo_2O_{5.48}$ он весьма значителен. Об этом указывает рост намагниченности $M(T)$ ниже $T \sim 20-50$ K (кривые *1* и *2* рис. 1). Влияние PM вклада редкоземельных ионов и необходимость учета их вклада на магнитные свойства слоистых манганитов хорошо известно, изучено и учитывается [2, 3, 7–10]. Обычно он определяется из выражения для парамагнитной восприимчивости $\chi = \mu_{\rm eff}^2/3k(T - \theta_{\rm PM})$, где $\mu_{\rm eff}$ – эффективный магнитный момент иона R^{3+}, $\theta_{\rm PM}$ – парамагнитная температура Вейса. Значения $\mu_{\rm eff}$ и $\theta_{\rm PM}$ определяются из насыщения намагниченности в

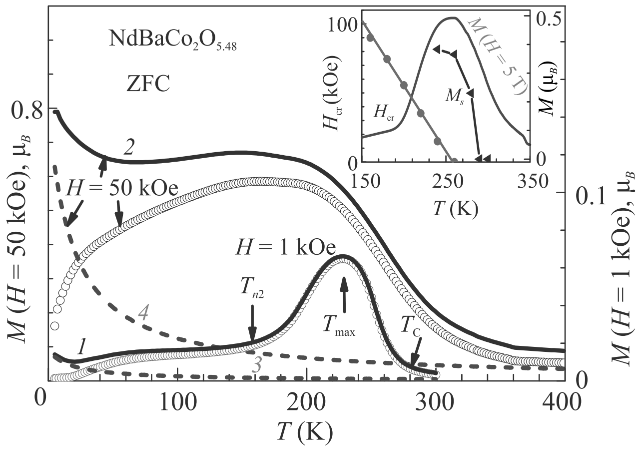

Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости намагниченности поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ в магнитных полях 1 и 50 кЭ (сплошные линии *1* и *2* – эксперимент, символы – PM вклад иона Nd^{3+} удален). Пунктирными линиями *3* и *4* показаны PM вклады иона Nd^{3+} при 1 и 50 кЭ. Вставка: температурные зависимости намагниченности, спонтанной намагниченности M_s и критического поля $H_{\rm cr}$ перехода из AFM в FM состояние поликристалла $TbBaCo_2O_{5.48}$. PM вклад иона Tb^{3+} удален

большом магнитном поле при низких температурах [8, 10], которая описывается функцией Бриллюэна с параметрами для свободного иона R^{3+} [11]:

$$M = N_A g \mu_B J B_S(x), \tag{1}$$

где $B_S(x)$ – функция Бриллюэна, N_A – число Авогадро, $x = g\mu_B JH/k(T - \theta_{\rm PM})$, g – фактор Ланде, μ_B – магнетон Бора, J – суммарный магнитный момент, H – магнитное поле, k – постоянная Больцмана. Однако намагниченность $NdBaCo_2O_{5.48}$ не описывается только выражением (1), так как вклад ионов Co^{3+} в намагниченность ниже $T \sim 150$ K весьма значителен, и он сравним с PM вкладом ионов Nd^{3+} и при $T \sim 400$ K (рис. 1).

PM вклад иона Nd^{3+} нами определен из исследований намагниченности в магнитном поле до 90 кЭ при 10 K. На рисунке 2 показана экспериментальная кривая намагничивания ($M_{\rm exp}$) и петля гистерезиса намагниченности кобальтита $NdBaCo_2O_{5.48}$ (вставка рис. 2) при охлаждении в магнитном поле $H = 0$. Коэрцитивное поле $H_C \sim 15$ кЭ свидетельствует о высокой анизотропии соединения. В поле $H > 70$ кЭ $\approx 5H_C$ значения намагниченности восходящей и нисходящей петли гистерезиса совпадают (вставка рис. 2). Вид поведения $M_{\rm exp}(H)$, петля гистерезиса намагниченности (вставка рис. 2) указывает, обменное смещение (см. ниже) доказывает фазо-

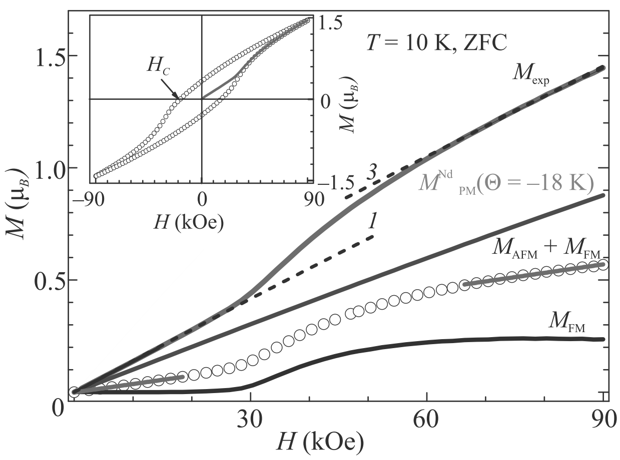

Рис. 2. (Цветной онлайн) Кривая намагничивания $NdBaCo_2O_{5.48}$ (M_{exp}), парамагнитный вклад ионов Nd^{3+} ($M_{\mathrm{PM}}^{\mathrm{Nd}}$), суммарный FM и AFM вклад ($M_{\mathrm{AFM}} + M_{\mathrm{FM}}$), FM вклад ($M_{\mathrm{FM}}$) ионов Co^{3+}. Вставка: петля гистерезиса намагниченности. Поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ при $T = 10$ K

вую неоднородность среды, состоящей из ФМ и АФМ фаз.

Согласно данным нейтронной дифракции $NdBaCo_2O_{5.48}$ при $H = 0$ [5], ионы Co^{3+} до $T \sim 230$ K находятся в двух разных позициях – октаэдрического и пирамидального – кислородного окружения. Ниже $T \sim 230$ K AFM структура G-типа превращается в (так называемую) SSO фазу с другой AFM структурой, в которой ионы Co^{3+} имеют четыре разные состояния и расположены в двух разных октаэдрах и пирамидах. С понижением температуры объемная доля SSO фазы увеличивается (до 95 % при 78 K) за счет уменьшения доли AFM-G типа и превращается в упорядоченные по спину AFM кластеры.

Намагниченность M_{exp} (рис. 2) исследованного образца $NdBaCo_2O_{5.48}$ до $H \approx 25$ кЭ увеличивается пропорционально магнитному полю. Во 2-м интервале полей 30–60 кЭ намагниченность растет нелинейно по магнитному полю. Выше ~ 60 кЭ намагниченность возрастает пропорционально магнитному полю, причем восприимчивости dM/dH в указанных областях полей (пунктирные линии *1* и *3*) очень близки. Естественно предположить, что линейное поведение $M_{\mathrm{exp}}(H)$ связано с AFM вкладом ионов Co^{3+} и PM вкладом ионов Nd^{3+}. Указанные выше экспериментальные значения намагниченности $M_{\mathrm{exp}}(H)$ можно описать тремя составляющими:

$$M_{\mathrm{exp}} = M_{\mathrm{PM}}^{\mathrm{Nd}} + M_{\mathrm{AFM}} + M_{\mathrm{FM}}, \tag{2}$$

где $M_{\mathrm{PM}}^{\mathrm{Nd}}$ – PM вклад ионов Nd^{3+}, $M_{\mathrm{AFM}} = \chi_{\mathrm{AFM}} H$ – AFM вклад ионов Co. Близость dM/dH в областях *1* и *3* означает, что намагниченность во 2-й области магнитных полей M_{FM} имеет ферромагнитный характер и насыщается в магнитном поле $H > 60$ кЭ. С учетом ФМ поведения намагниченности во 2-й области полей AFM восприимчивости (χ_{AFM}) ионов Co^{3+} (т.е. dM/dH – сплошные линии на кривой $M_{\mathrm{AFM}} + M_{\mathrm{FM}}$ рис. 2) должны быть одинаковы в малых и больших полях при вычитании PM вклада. В этом предположении из выражения (1) подобрано значение намагниченности $M_{\mathrm{PM}}^{\mathrm{Nd}}$, удовлетворяющее этому условию при $\theta = -18$ K. Этот вклад превышает половину M_{exp} (рис. 2). Ферромагнитное поведение намагниченности при 10 K появляется выше $H \approx 25$ кЭ.

На рисунке 3a приведены кривые намагничивания $M(H)$ поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ в магнитном поле до 90(50) кЭ при фиксированных температурах от 300 до 10(5) K. Видно, что выше 50 K намагниченность плавно, ниже 50 K немонотонно зависит от магнитного поля. Пороговое поле (h_{thres}) перехода AFM/FM уменьшается с повышением температуры от 40 до 25 кЭ для $T = 5$ и 10 K соответственно (рис. 3b). При температурах выше $T \sim 50$ K в отсутствии магнитного поля, по-видимому, образец переходит в смешанное FM и AFM состояние, возможно, в виде кластеров, как показано в [5]. Немонотонное поведение $M(H)$ при 20 K, вероятно, означает, что при этой температуре (или даже выше до 50 K?) существуют области с значениями $h_{\mathrm{thres}} \neq 0$. Интересно отметить, что в эксперименте по мюонной спектроскопии ниже 50 K наблюдается дополнительная частота [6]. Связано ли появление этого сигнала с метамагнитным переходом, на данный момент не ясно.

Из линейной зависимости намагниченности от магнитного поля $M(H) \sim H$ в высоких магнитных полях определены температурные зависимости намагниченности насыщения M_S и AFM восприимчивости (χ_{AFM}) поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ (вставка рис. 3a). Спонтанный магнитный момент M_S монотонно растет до $0.47\,\mu_B$ при $T \sim 150$ K, выше $T \sim 200$ K он резко уменьшается, как и $TbBaCo_2O_{5.47}$ (вставка рис. 1). Поведение AFM восприимчивости $\chi_{\mathrm{AFM}}(T)$ имеет приблизительно такое же поведение.

Соединения, которые демонстрируют индуцированные магнитным полем переходы AFM/FM при низких температурах, называются метамагнетиками [12] или антиферромагнетиками с пороговым полем [13]. При приложении магнитного поля они претерпевают фазовый переход первого рода из состояния с низкой намагниченностью в состояние с от-

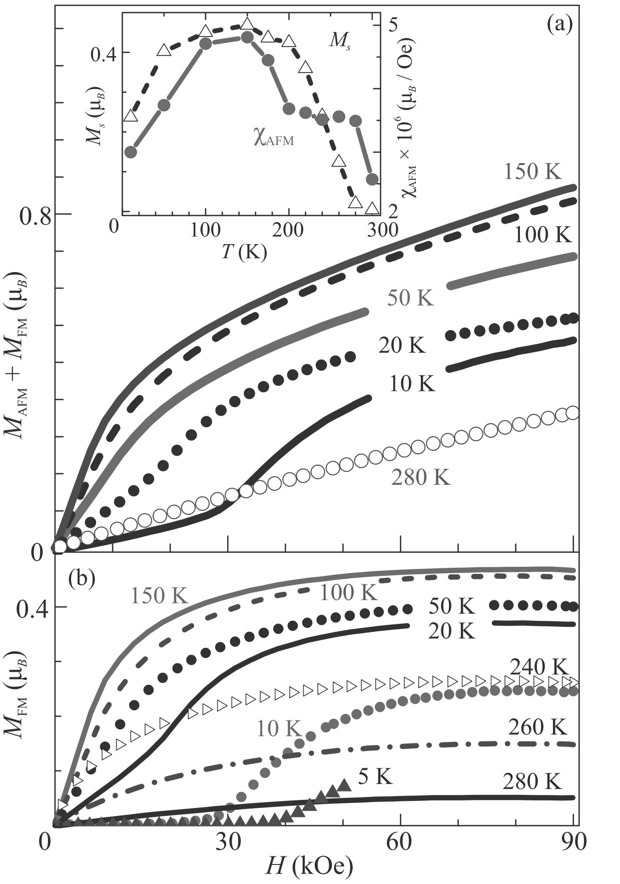

Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Кривые намагничивания поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ при $T = 5 - 280$ K. (PM вклад ионов Nd^{3+} удален). Вставка: температурные зависимости намагниченности насыщения M_S и AFM восприимчивости поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$. (b) – Ферромагнитное поведение намагниченности поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ при разных температурах

носительно высокой намагниченностью [12]. Одним из наиболее часто изучаемых метамагнетиков является слоистое соединение $FeCI_2$. В магнитном поле выше порогового значения $H_{\rm thres} \sim 10$ кЭ при $T < T_N = 23.5$ K образец переходит в насыщенное парамагнитное (квазиферромагнитное) состояние с высокой намагниченностью [12]. Качественное объяснение этому явлению дано Л. Д. Ландау [14][2)] и состоит в том, что парамагнитные ионы в разных слоях $FeCl_2$ ориентированы в противоположном направлении, т.е. намагниченность в магнитном поле ниже T_N отсутствует. Имеющееся внутри слоев ферромагнитное взаимодействие гораздо больше антиферромагнитного взаимодействия между различными слоями. Ниже T_N достаточно присутствия уже сравнительно слабого поля, чтобы сильно изменить противоположную ориентацию моментов и образец стал ферромагнитным. Теория разрушения антиферромагнетиков в магнитном поле разработана Неэлем [13].

Для проверки фазовой неоднородности поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ – существования ФМ и АФМ фаз, проведены исследования обменного смещения при 77 K после охлаждения образца в магнитном поле 50 кЭ от 300 K (рис. 4). Обменное смеще-

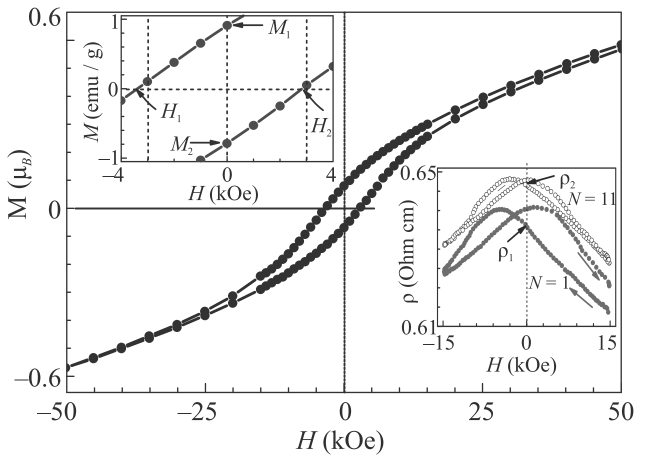

Рис. 4. (Цветной онлайн) Эффект обменного смещения поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$ при 77 K. Верхняя вставка: смещенная петля гистерезиса намагниченности в увеличенном масштабе. Нижняя вставка: влияние циклического изменения магнитного поля на электросопротивление. Поликристалл $NdBaCo_2O_{5.48}$, $T = 77$ K

ние зарождается в гетерогенной среде, содержащей обменно-связанные FM и AFM частицы при охлаждении в магнитном поле $H_{\rm cool}$ при температуре выше температуры Нееля (T_N), причем FM частицы должны иметь более высокую температуру FM упорядочения, $T_C > T_N$ [15]. Кривая намагниченности несимметрична относительно $H = 0$: смещена по полю в сторону меньших полей, а по намагниченность смещена вверх (верхняя вставка рис. 4). Коэрцитивная сила $H_C \approx 3$ кЭ при 77 K показывает уменьшение поля анизотропии с повышением температуры. Петля гистерезиса электросопротивления $\rho(H)$ (нижняя вставка рис. 4), как и петля гистерезиса намагниченности, смещена относительно $H = 0$ и имеет ассиметричный вид кривой "бабочки". Электросопротивление после первого цикла $N = 1$ не возвращается в исходное состояние (как и намагниченность) и увеличивается с увеличением числа перемагничивания ($\rho_2 > \rho_1$), как в $GdBaCo_2O_{5.52}$ [17].

[2)] В этой работе Л. Д. Ландау предложена модель антиферромагнетизма.

Величина поля обменного смещения $H_{EB} = (H_1 - H_2)/2 \approx 300$ Э и поведение $\rho(N)$ (вставки рис. 4) типичны для слоистых кобальтитов [16, 17]. Причиной обменного смещения в $RBaCo_2O_{5+\delta}$ является избыток кислорода ($\delta > 0.5$) и соответственно существование определенного количества ионов Co^{4+} в матрице с основной массой трехвалентных ионов кобальта. Двойной обмен между ионами Co^{3+} и Co^{4+} ведет к образованию FM-кластеров в AFM матрице и к фазовому расслоению [18]. Обменное смещение обнаружено в поликристалле $NdBaCo_2O_{5.40}$, где имеются только ионы Co^{3+} и Co^{2+}. Результаты исследований обменного смещения (рис. 4) показывают, что метамагнитный переход в $NdBaCo_2O_{5+\delta}$, $\delta < 0.5$, вероятно, происходит вследствие фазового расслоения AFM фазы в магнитном поле на обменно-связанные FM и AFM слои (или кластеры).

Приложение внешнего магнитного поля при $T \sim \sim 250$ K вызывает в слоистых кобальтитах на основе Gd, Tb, Eu переходы из АФМ в ФМ состояние. В этом смысле они являются метамагнетиками. Переход АФМ/ФМ (см. вставку рис. 1) при низких температурах может происходить в магнитных полях, превышающих несколько сотен кЭ. Значения $\chi_{\mathrm{AFM}}(T)$ и $M_S(T)$ по-разному ведут выше и ниже $T \sim 200$ K (вставка рис. 3а). Значения их растут до $T \sim 200$ K, ниже которой они уменьшаются. По-видимому, разные механизмы ответственны за метамагнитные переходы выше и ниже $T \sim 200$ K.

Результаты можно объяснить тем, что в слоистых кобальтитах при $T \sim 200 - 250$ K происходит изменение спиновой структуры. Выше $T \sim 200 - 250$ K ионы Co^{3+} находятся в двух разных позициях – пирамидального и октаэдрического – кислородного окружения. Ниже $T \sim 200 - 250$ K $GdBaCo_2O_{5.50}$ [18], $TbBaCo_2O_{5.50}$ [19], $PrBaCo_2O_{5.50}$ [20], как и $NdBaCo_2O_{5.48}$ [5] находятся в SSO состоянии, т.е. ионы Co^{3+} расположены в четырех разных состояниях. В состоянии SSO фазы кобальтиты $GdBaCo_2O_{5.50}$ [2, 3], $TbBaCo_2O_{5.50}$ [7, 8] находятся в AFM, а кобальтит $NdBaCo_2O_{5.48}$ – в FM состоянии. Предполагалось, что причина необычных свойств $NdBaCo_2O_{5.50}$ связана с большим ионным радиусом Nd^{3+} [6]. В связи с этим представляют интерес магнитные свойства $PrBaCo_2O_{5.50}$, так как ионный радиус Pr^{3+} превышает ионный радиус Nd^{3+}. По магнитным данным [21], соединение $PrBaCo_2O_{5.50}$ при низких температурах, как и $NdBaCo_2O_{5.48}$, находится в состоянии, похожим на ферромагнитное. Результаты работы [21] подтверждают, на наш взгляд, предположение [6], что свойства $NdBaCo_2O_{5.48}$, отличные от свойств других слоистых кобальтитов, связаны, вероятно, большим ионным радиусом R^{3+}.

Необычные свойства $NdBaCo_2O_{5.5}$ появляются ниже $T \sim 230$ K, где ионы Co находятся в четырех неэквивалентных состояниях. Возможно, что причина малых пороговых значений $NdBaCo_2O_{5.48}$ при низких температурах не только в большом ионном радиусе Nd^{3+}, и в том, что ионы Co расположены в четырех неэквивалентных состояниях. Можно предположить, что в этом состоянии ионов Co^{3+} антиферромагнитное взаимодействие между различными слоями слабее по сравнению с двумя неэквивалентными состояниями ионов Co^{3+}.

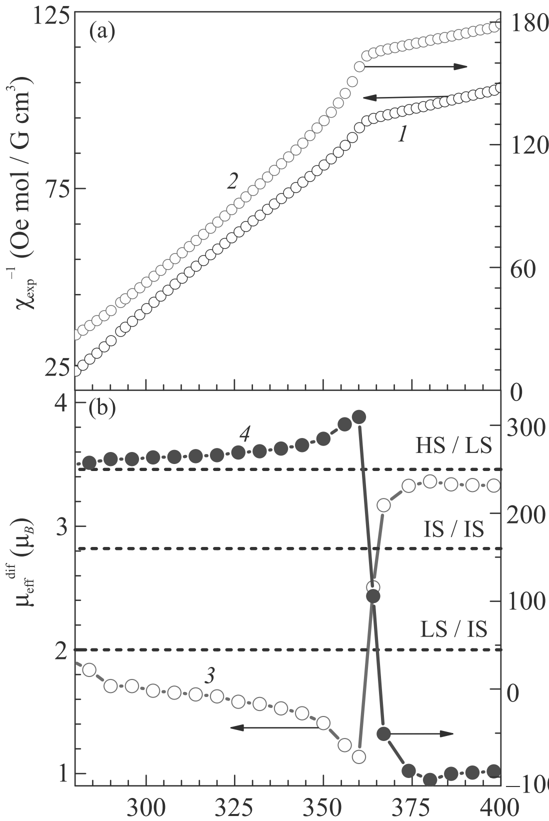

Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Температурные зависимости экспериментальной $\chi_{\exp}^{-1}$ (*1*), расчетной с вычетом PM вклада иона Nd^{3+} парамагнитной восприимчивости χ^{-1} (*2*); (b) – дифференциальных значений эффективного момента μ_{eff}/Co (*3*) и парамагнитной температуры θ_{PM} (*4*) поликристалла $NdBaCo_2O_{5.48}$

Из исследований парамагнитной восприимчивости $NdBaCo_2O_{5.48}$ определены спиновые состояния ионов Co^{3+} вблизи перехода металл-изолятор. На левой оси рис. 5 приведены температурные зависимости экспериментальных значений $\chi^{-1}(T)_{\exp} = H/M$ в магнитном поле $H = 10$ кЭ. Для выделения вклада ионов Co^{3+} из общей намагниченности был вычтен вклад ионов Nd^{3+}, используя выражение (1), и пересчитан $\chi^{-1}(T)$ для ионов кобальта (правая ось рис. 5). Зависимость $\chi^{-1}(T)$, нелинейная от температуры, только в небольшом интервале температур PM восприимчивость можно описать законом Кюри–Вейса $\chi(T) \sim \mu_{\rm eff}^2/(T-\theta_{\rm PM})$ с $\theta_{\rm PM} \approx -97$ K, $\mu_{\rm eff}/{\rm Co} \approx \approx 3.3\,\mu_B$ выше $T_{\rm MI}$, значениями $\mu_{\rm eff}/{\rm Co} \approx 1.60\,\mu_B$ и $\theta_{\rm PM} \approx 265$ K ниже $T_{\rm MI}$ соответственно. Значения $\theta_{\rm PM}$ близки к значениям температур перехода в FM ($T_C \sim 280$ K) и AFM ($T_{N2} \sim 150$ K) состояние.

Видно, что переход сопровождается изменениями $\mu_{\rm eff}$ и $\theta_{\rm PM}$ с температурой. Весь интервал температур измерений $\chi^{-1}(T)$ был разделен на участки и для каждого участка были определены дифференциальные значения $\mu_{\rm eff}$, $\theta_{\rm PM}$ (рис. 5b). Наиболее резкие изменения $\mu_{\rm eff}$, $\theta_{\rm PM}$ происходят вблизи $T_{\rm MI} \approx 352$ K. Значению $\mu_{\rm eff}/{\rm Co} \approx 3.3\,\mu_B$ в квазиметаллическом состоянии из всех возможных состояний ионов Co^{3+} (рис. 5) ближе всех соответствует смесь с одинаковым соотношением HS и LS состояний с $\mu_{\rm eff}/{\rm Co} = 3.43\,\mu_B$. Вблизи $T \sim T_{\rm MI}$ большая часть ионов Co^{3+} (при $\mu_{\rm eff}/{\rm Co} \approx 1\,\mu_B$) находится в LS спиновом состоянии (рис. 5b). Переход из квазиметаллического в непроводящее состояние в $NdBaCo_2O_{5.48}$ происходит при изменении спинового состояния из HS/LS в LS/IS примерно в соотношении 1 : 1, как в слоистых кобальтитах с R = Gd или Tb [8, 9].

В заключение, экспериментальные данные магнитных исследований, представленные в этой статье, соответствуют, в основном, результатам нейтронографических измерений [5] и мюонной спектроскопии [6]. Результаты исследований $PrBaCo_2O_{5.50}$ [20, 21] позволяют предполагать, что метамагнитное поведение и ферромагнитное состояние $NdBaCo_2O_{5.48}$ при низких температурах определяются не только большим размером ионов Nd^{3+}, но и структурой спиновых состояний ионов Co^{3+}. Переход из квазиметаллического состояния в непроводящее состояние происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS в IS/LS состояние.

Авторы благодарны А. В. Королеву за проведение магнитных измерений.

Работа выполнена в рамках государственного задания (тема “Спин” Г.р. # АААА-А18-118020290104-2) и частично при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 20-02-00461).

1. A. Maignan, C. Martin, D. Pelloquin, N. Nguyen, and B. Raveau, J. Solid State Chem. **142**, 247 (1999).
2. A. A. Taskin, A. N. Lavrov, and Y. Ando, Phys. Rev. B **71**, 134414 (2005).
3. C. Frontera, J. L. Garcıa-Muñoz, C. Ritter, D. M. y Marero, and A. Caneiro, Phys. Rev. B **65**, 180405(R) (2002).
4. R. D. Shannon, Acta Crystallogr. A **32**, 751 (1976).
5. F. Fauth, E. Suard, V. Caignaert, and I. Mirebeau, Phys. Rev. B **66**, 184421 (2002).
6. A. Jarry, H. Luetkens, Y. G. Pashkevich, M. Stingaciu, E. Pomjakushina, K. Conder, P. Lemmens, and H. Klaus, Physica B **404**, 765 (2009).
7. M. Baran, V. I. Gatalskaya, R. Szymczak S. V. Shiryaev, S. N. Barilo, K. Piotrowski, G. L. Bychkov, and H. Szymczak, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 8853 (2003).
8. Н. И. Солин, С. В. Наумов, ЖЭТФ **157**, 824 (2020).
9. Z. X. Zhou and P. Schlottmann, Phys. Rev. B **71**, 174401 (2005).
10. Н. И. Солин, С. В. Наумов, С. В. Телегин, Письма в ЖЭТФ **107**, 206 (2018).
11. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, М. (1971), гл. 9.
12. E. Stryjewski and N. Giordano, Adv. Phys. **26**, 487 (1977).
13. Л. Неель, Изв. АН СССР, сер. физическая **21**, 890 (1957).
14. L. Landau, Phys. Zs. Sowjet. Un. **4**, 675 (1933).
15. A. E. Berkowitz and K. Takano, J. Magn. Magn. Mater. **200**, 552 (1999).
16. Н. И. Солин, С. В. Наумов, С. В. Телегин, А. В. Королев, ЖЭТФ **152**, 1286 (2017).
17. Н. И. Солин, С. В. Наумов, ЖЭТФ **159**, 315 (2021).
18. Y. P. Chernenkov, V. P. Plakhty, V. I. Fedorov, S. N. Barilo, S. V. Shiryaev, and G. L. Bychkov, Phys. Rev. B **71**, 184105 (2005).
19. V. P. Plakhty, Y. P. Chernenkov, S. N. Barilo, A. Podlesnyak, E. Pomjakushina, E. V. Moskvin, and S. V. Gavrilov, Phys. Rev. B **71**, 214407 (2005).
20. P. Miao, X. Lin, S. Lee Y. Ishikawa, S. Torii, M. Yonemura, T. Ueno, N. Inami, K. Ono, Y. Wang, and T. Kamiyama, Phys. Rev. B **95**, 125123 (2017).
21. S. Ganorkar, K. R. Priolkar, P. R. Sarode, and A. Banerjee, J. Appl. Phys. **110**, 053923 (2011).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 185 – 191 © 2021 г. 10 августа

Фазовый переход в сульфиде серебра и взаимное положение атомных плоскостей фаз α-Ag_2S и β-Ag_2S[1)]

С. И. Садовников[2)], *А. И. Гусев*

Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН, 620990 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 25 июня 2021 г.
После переработки 7 июля 2021 г.
Принята к публикации 7 июля 2021 г.

На основе экспериментальных рентгеновских и электронно-микроскопических данных определено взаимное положение атомных плоскостей низкотемпературного моноклинного акантита α-Ag_2S и высокотемпературного объемноцентрированного аргентита β-Ag_2S. Обратимый переход β-Ag_2S – α-Ag_2S связан с искажением оцк подрешетки атомов серы S в структуре аргентита β-Ag_2S до моноклинной подрешетки акантита α-Ag_2S. В кубическом аргентите расстояния между атомами серебра слишком малы для того, чтобы позиции металлической подрешетки были полностью заняты атомами Ag, поэтому вероятности заполнения узлов металлической подрешетки менее 0.1. В акантите вследствие моноклинного искажения атомы Ag находятся на достаточно больших расстояниях друг от друга и занимают свои позиции с вероятностью, близкой к 1. С учетом смещений атомов S и Ag найдены взаимные ориентации атомных плоскостей акантита и аргентита.

DOI: 10.31857/S1234567821150088

Сульфид серебра Ag_2S имеет три модификации: моноклинный акантит α-Ag_2S, объемноцентрированный кубический (оцк) аргентит β-Ag_2S и высокотемпературный гранецентрированный кубический (гцк) сульфид γ-Ag_2S [1]. Кристаллические структуры моноклинного (пр. гр. $P2_1/c$) акантита α-Ag_2S и оцк (пр. гр. $Im\bar{3}m$) аргентита β-Ag_2S первоначально были определены на минеральных образцах [2, 3] и позднее уточнены на синтезированных образцах в работах [4–8]. Согласно [7, 9], нанокристаллический сульфид серебра с размером частиц менее 60 нм тоже является моноклинным, но содержит небольшое количество вакансий в подрешетке серебра и имеет нестехиометрический состав $Ag_{1.93}S$. В равновесных условиях при охлаждении аргентита β-Ag_2S ниже температуры 450 K происходит полиморфный фазовый переход с образованием полупроводникового моноклинного акантита α-Ag_2S [8]. Это превращение сопровождается искажением оцк подрешетки атомов S до моноклинной подрешетки. Атомы Ag, статически размещенные на позициях $6(b)$ и $48(j)$ оцк структуры аргентита [4, 8], концентрируются на позициях моноклинной структуры акантита и заполняют их с вероятностью, близкой к 1.

По данным дифференциального термического и дифференциального термогравиметрического анализа и калориметрических измерений [10–13] фазовое превращение акантита α-Ag_2S в аргентит происходит при температуре $T_{\rm trans} \sim 449{-}452$ K, энтальпия $\Delta H_{\rm trans}$ фазового превращения α-Ag_2S – β-Ag_2S равна $\sim 4.0 \pm 0.5$ кДж $\cdot$ моль$^{-1}$.

Согласно [2, 13], структуру акантита α-Ag_2S можно рассматривать как результат искажения оцк подрешетки атомов серы S в структуре аргентита β-Ag_2S. Действительно, элементарная ячейка моноклинного (пр. гр. $P2_1/c$) акантита β-Ag_2S, предложенная в работе [2], имеет оси, которые можно представить как комбинации осей $\mathbf{a}_{\rm bcc}$, $\mathbf{b}_{\rm bcc}$ и $\mathbf{c}_{\rm bcc}$ элементарной ячейки оцк аргентита: $\mathbf{a}_{P2_1/c} \approx (\mathbf{a}_{\rm bcc} + \mathbf{b}_{\rm bcc} - \mathbf{c}_{\rm bcc})/2$, $\mathbf{b}_{P2_1/c} \approx (\mathbf{a}_{\rm bcc} - \mathbf{b}_{\rm bcc})$ и $\mathbf{c}_{P2_1/c} \approx 2\mathbf{c}_{\rm bcc}$.

В работе [14] показано, что обратимое превращение "акантит–аргентит" играет важную роль в физическом действии гетеронаноструктуры Ag_2S/Ag как потенциального резистивного переключателя. Строение границ раздела гетеронаноструктур Ag_2S/ZnS также зависит от взаимного положения атомных плоскостей фаз сульфида серебра – акантита и аргентита. Однако ориентационные соотношения между этими двумя фазами сульфида серебра до сих пор не были выяснены.

В связи с этим в настоящей работе методом просвечивающей электронной микроскопии высоко-

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

[2)] e-mail: sadovnikov@ihim.uran.ru

го разрешения проведено *in situ* наблюдение фазового перехода “акантит α-Ag_2S – аргентит β-Ag_2S” в сульфиде серебра и впервые с учетом атомных смещений определены взаимные положения атомных плоскостей акантита и аргентита.

Для определения структуры акантита и аргентита и ориентационных соотношений между этими фазами использовали крупно- и нанокристаллический порошки сульфида серебра со средним размером частиц ~ 850 и ~ 50 нм, соответственно. Методики синтеза порошков сульфида серебра описаны ранее [13]. Кристаллическую структуру синтезированных порошков сульфида серебра исследовали на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 в $CuK\alpha_1$-излучении в интервале углов $2\theta = 20-95°$ с шагом $\Delta(2\theta) = 0.02°$ и временем экспозиции 10 с в каждой точке. Высокотемпературное *in situ* рентгеновское исследование проводили на дифрактометре X‘Pert PRO MPD (Panalytical) с печью Anton Paar HTK-1200 Oven.

Определение параметров кристаллической решетки и окончательное уточнение структуры синтезированных порошков сульфида серебра проводили с помощью программного пакета X’Pert HighScore Plus [15].

Наблюдение за изменением кристаллической структуры при фазовом переходе α-Ag_2S (акантит)–β-Ag_2S (аргентит) проводили на наночастицах сульфида серебра методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения HRTEM на микроскопе JEOL JEM-2100 с решеточным разрешением 0.14 нм. Для исследования коллоидные растворы наночастиц Ag_2S наносили на медную сетку. Нагрев наночастиц Ag_2S осуществляли непосредственно в электронном микроскопе, регулируя энергию электронного пучка.

Количественный анализ рентгенограмм крупнокристаллического порошка сульфида серебра при 300 и 503 К и сравнение их с данными [2, 6, 7] показали, что крупнокристаллический порошок при ~ 300 К содержит только моноклинный (пр. гр. $P2_1/c$) акантит α-Ag_2S, а при 503 К – только кубический аргентит β-Ag_2S.

Рентгенограммы нанокристаллического порошка сульфида серебра, записанные *in situ* при температурах 298, 443 и 463 К, показаны на рис. 1.

Сравнение рентгенограмм (рис. 1a, b) синтезированного нанопорошка с данными [2, 6] показало, что наблюдаемый набор дифракционных отражений соответствует однофазному сульфиду серебра с моноклинной (пр. гр. $P2_1/c$) структурой типа акантита. Средний размер наночастиц равен ~ 50 нм. Количе-

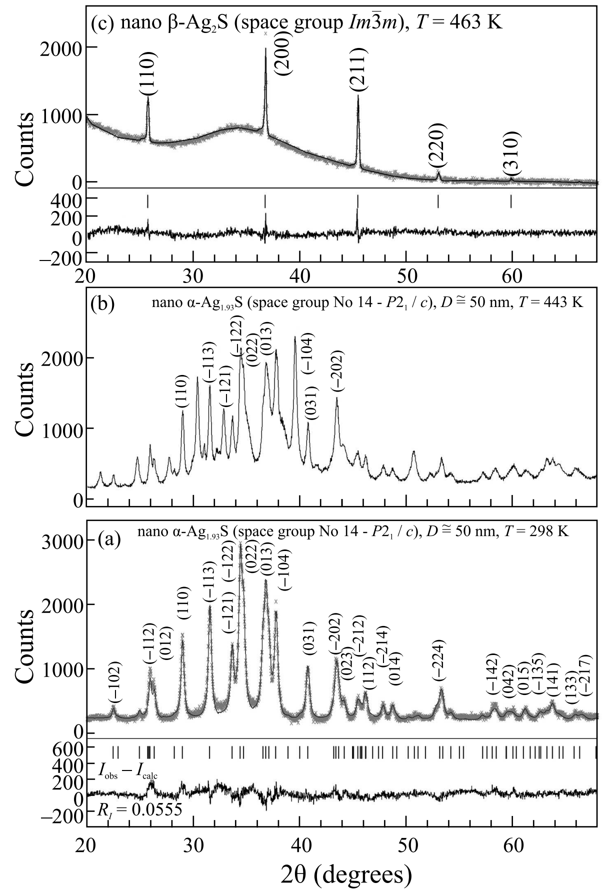

Рис. 1. Экспериментальная (×) и расчетная (——) рентгенограммы нанокристаллического порошка сульфида серебра с размером частиц ~ 50 нм, записанные *in situ* при температуре (a) – 298, (b) – 443 и (c) – 463 К, соответственно. Разности ($I_{\rm obs} - I_{\rm calc}$) между интенсивностями экспериментальной и расчетной рентгенограмм показаны в нижней части рисунков (a) и (c). Уточнение рентгенограмм показало, что нанопорошок сульфида серебра при 298 и 443 К имеет нестехиометрический состав $Ag_{1.93}S$ и моноклинную (пр. гр. $P2_1/c$) структуру акантита. Тот же нанопорошок при 463 К имеет кубическую (пр. гр. $Im\bar{3}m$) структуру типа аргентита β-Ag_2S

ственное уточнение структуры показало, что степени заполнения кристаллографических позиций $4(e)$ атомами серебра Ag1 и Ag2 в элементарной моноклинной ячейке немного меньше 1 и равны 0.97 и 0.96 соответственно. Таким образом, нанопорошок сульфида серебра с размером частиц ~ 50 нм и менее при температуре 298–443 К имеет состав $\sim Ag_{1.93}S$ и является нестехиометрическим.

Уточнение рентгенограммы сульфида серебра, полученной при температуре 463 К (рис. 1c) показало, что при этой температуре сульфид серебра со-

Таблица 1. Кристаллические структуры моноклинного нанопорошка α-$Ag_{1.93}S$ со структурой акантита и размером частиц ~ 50 нм при 298 K и кубического сульфида серебра β-Ag2S со структурой аргентита при 463 K

Фаза и ее пр. гр.	Параметры ячейки (нм)	Атом	Позиция и кратность	Атомные координаты			Степень заполнения
				x/a	y/b	z/c	
α-$Ag_{1.93}S$	$a = 0.4234(3)$	Ag1	4(e)	0.0715	0.0151(0)	0.3093(9)	0.97
	$b = 0.6949(3)$						
$(P2_1/c)$	$c = 0.9549(5)$	Ag2	4(e)	0.2736	0.8240(9)	0.0625(0)	0.96
$^*Z = 4$	$\beta = 125.43°$	S	4(e)	0.4920	0.2339(8)	0.1321(1)	1.00
β-Ag_2S	$a = 0.4863(1)$	Ag1	6(b)	0	0.5	0.5	0.0978
$(Im\bar{3}m)$		Ag2	48(j)	0	0.3306(5)	0.4122(7)	0.0711
$Z = 2$		S	2(a)	0	0	0	1.00

$^*Z$ – число формульных единиц в элементарной ячейке.

держит только кубическую (пр. гр. $Im\bar{3}m$) фазу со структурой типа аргентита β-Ag_2S. Согласно высокотемпературным рентгеновским данным в элементарной ячейке аргентита β-Ag_2S два атома серы S занимают кристаллографические позиции $2(a)$ и образуют оцк подрешетку. Четыре атома серебра Ag статистически распределены по 54 позициям $6(b)$ и $48(j)$ с вероятностями заполнения ~ 0.0978 и ~ 0.0711, соответственно.

Атомные координаты нанопорошков сульфида серебра с моноклинной структурой акантита α-Ag_2S и кубической структурой аргентита β-Ag_2S приведены в табл. 1.

В целом рентгеновское *in situ* исследование сульфида серебра обнаружило только акантит при $T \leq$ ≤ 443 K и только аргентит при $T > 453$ K. С учетом этого и данных [9–13] при нагреве моноклинного акантита α-Ag_2S до температуры ~ 449–450 K происходит полиморфный фазовый переход с образованием оцк аргентита β-Ag_2S.

Схема смещений атомов S из узлов оцк подрешетки аргентита и моноклинно искаженная подрешетка атомов S, построенная с учетом координат атомов S в моноклинной (пр. гр. $P2_1/c$) фазе α-Ag_2S, показаны на рис. 2.

В результате смещений атомов S из оцк позиций $2(a)$ решетки аргентита возникают моноклинные трансляции **a**, **b** и **c**, направление которых является комбинацией базисных трансляций оцк решетки аргентита: $\mathbf{a}\|[11\text{-}1]_{\mathrm{bcc}}/2$, $\mathbf{b}\|[1\text{-}10]_{\mathrm{bcc}}$ и $\mathbf{c}\|[001]_{\mathrm{bcc}}$. Однако по абсолютной величине моноклинные трансляции $|\mathbf{a}|$, $|\mathbf{b}|$ и $|\mathbf{c}|$ несколько больше, чем $\sqrt{3}\cdot(a_{\mathrm{bcc}}/2)$, $\sqrt{2}\cdot a_{\mathrm{bcc}}$ и $2a_{\mathrm{bcc}}$. Для объяснения этого рассмотрим межатомные расстояния в аргентите.

В кубическом аргентите возможные расстояния между атомами серебра слишком малы для того, чтобы позиции $6(b)$ и $48(j)$ были заняты атомами Ag с вероятностью, равной 1. По этой причине степени заполнения позиций $6(b)$ и $48(j)$ атомами Ag (иначе говоря, вероятности обнаружения атомов Ag на позициях $6(b)$ и $48(j)$) очень малы и составляют менее 0.1 (см. табл. 1).

В акантите вследствие моноклинного искажения решетки атомы (ионы) серебра находятся на достаточно больших (больше, чем в аргентите) расстояниях друг от друга и поэтому занимают свои кристаллографические позиции $4(e)$ с вероятностью, близкой к 1.

Синтезированный моноклинный нанопорошок α-Ag_2S в микроскопе JEOL JEM-2010 нагревали электронным пучком. Нагрев наночастиц сульфида серебра до разных температур проводили, регулируя энергию электронного пучка. При нагреве наночастицы Ag_2S от комнатной температуры до ~ 450 K сохраняется моноклинная структура с увеличением периодов решетки. Нагрев до 455–460 K сопровождается перестройкой моноклинной структуры акантита α-Ag_2S в кубическую структуру аргентита β-Ag_2S. Дальнейший нагрев приводит к увеличению периода решетки кубического аргентита. При уменьшении энергии электронного пучка период решетки аргентита уменьшается. При температуре ниже ~ 455 K происходит переход от кубической структуры аргентита к моноклинной структуре акантита.

Изображения наночастиц сульфида серебра до и после радиационного нагрева, полученные с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения HRTEM (рис. 3), подтверждают образование аргентита.

HRTEM изображение наночастицы сульфида серебра до радиационного нагрева представлено на рис. 3a. На рисунке 3b показана картина электронной дифракции, полученная Фурье-преобразованием (Fast Fourier Transform (FFT)) части этого изображения, выделенной белым контуром; область электронной дифракции содержит пятна (001), (010), (011) и (012) (рис. 3b), соответствующие моноклинно-

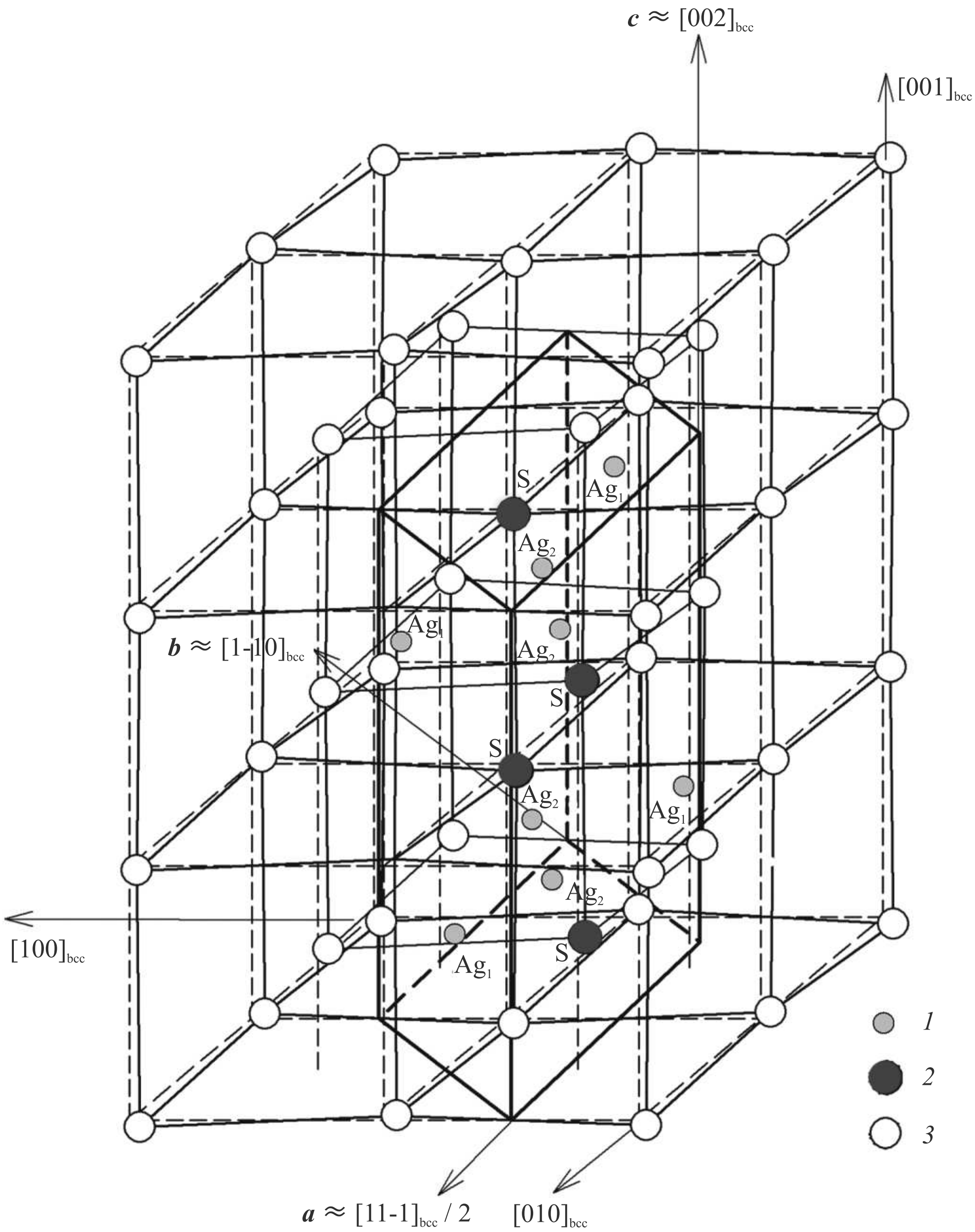

Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема смещений атомов S из положений оцк подрешетки аргентита и размещение атомов S в моноклинном акантите. Контуры решетки кубического аргентита показаны пунктиром, искаженная из-за смещений атомов S решетка аргентита показана сплошной линией. Моноклинная (пр. гр. $P2_1/c$) элементарная ячейка акантита α-Ag_2S показана толстой сплошной линией. *1* и *2* – атомы Ag и S, расположенные в моноклинной элементарной ячейке акантита α-Ag_2S; *3* – атомы S, расположенные вне моноклинной элементарной ячейки

му (пр. гр. $P2_1/c$) акантиту α-Ag_2S. Эти отражения наблюдаются вдоль оси зоны $[100]_{P2_1/c}$ моноклинного акантита α-Ag_2S.

HRTEM изображение наночастицы сульфида серебра, нагретой электронным пучком до температуры выше, чем T_{trans}, показано на рис. 3c, картина электронной дифракции, полученная Фурье-преобразованием части этого HRTEM изображения, выделенной белым контуром, представлена на рис. 3d. Дифракционные пятна на картине электрон-

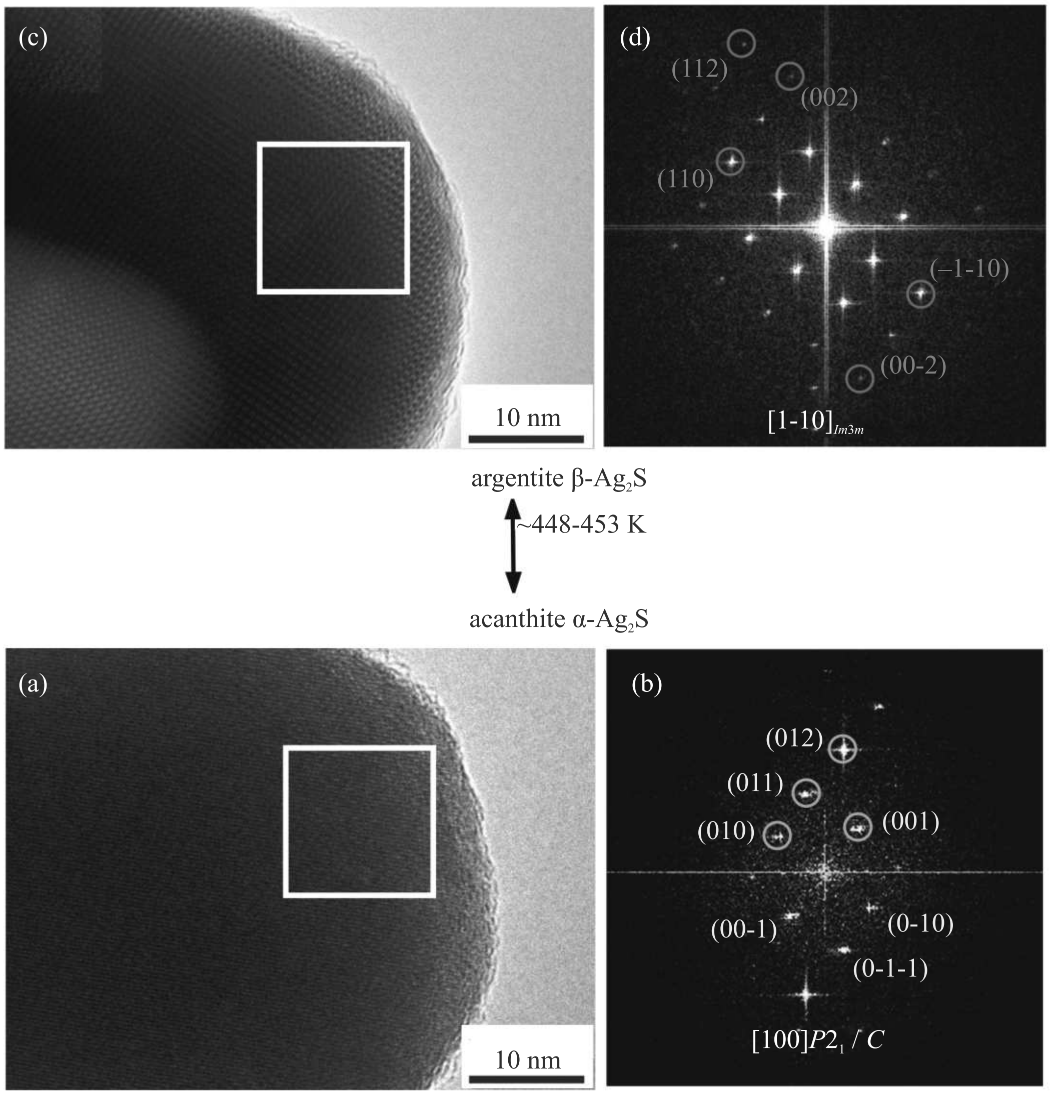

Рис. 3. (Цветной онлайн) HRTEM изображения (a), (c) наночастицы сульфида серебра до и после радиационного нагрева и картины электронной дифракции (b), (d), полученные Фурье-преобразованием (FFT) частей этих HRTEM изображений, выделенных белыми контурами. Дифракционная картина (b) содержит пятна (001), (010), (011) и (012), соответствующие моноклинному (пр. гр. $P2_1/c$) акантиту α-Ag_2S, а картина электронной дифракции (d) содержит пятна (002), (110) и (112) кубического (пр. гр. $Im\bar{3}m$) аргентита

ной дифракции (рис. 3d) имеют кристаллографические индексы (002), (110) и (112) кубического (пр. гр. $Im\bar{3}m$) аргентита и наблюдаются вдоль оси зоны $[1{-}10]_{Im\bar{3}m}$ кубического аргентита β-Ag_2S.

Как было отмечено, моноклинная (пр. гр. $P2_1/c$) структура акантита α-Ag_2S является результатом небольших смещений атомов серы из положений оцк (пр. гр. $Im\bar{3}m$) решетки аргентита β-Ag_2S. Найденные координаты атомов в элементарных ячейках акантита и аргентита позволяют выяснить ориентационные соотношения между ними, реализуемые при обратимом фазовом превращении акантит-аргентит. В частности, взаимное положение атомных плоскостей $(010)_{P2_1/}$, $(020)_{P2_1/c}$ и $(001)_{P2_1/c}$ акантита, с одной стороны, и атомных плоскостей $(1{-}10)_{Im-3m}$ и $(333/2)_{Im-3m}$ аргентита, с другой стороны, проанализировано и представлено в дополнительном материале.

Взаимное положение атомных плоскостей идеального (без учета атомных смещений) и реального (с учетом атомных смещений) акантита и углы между этими плоскостями были рассчитаны обычными методами аналитической геометрии (см. дополнительный материал).

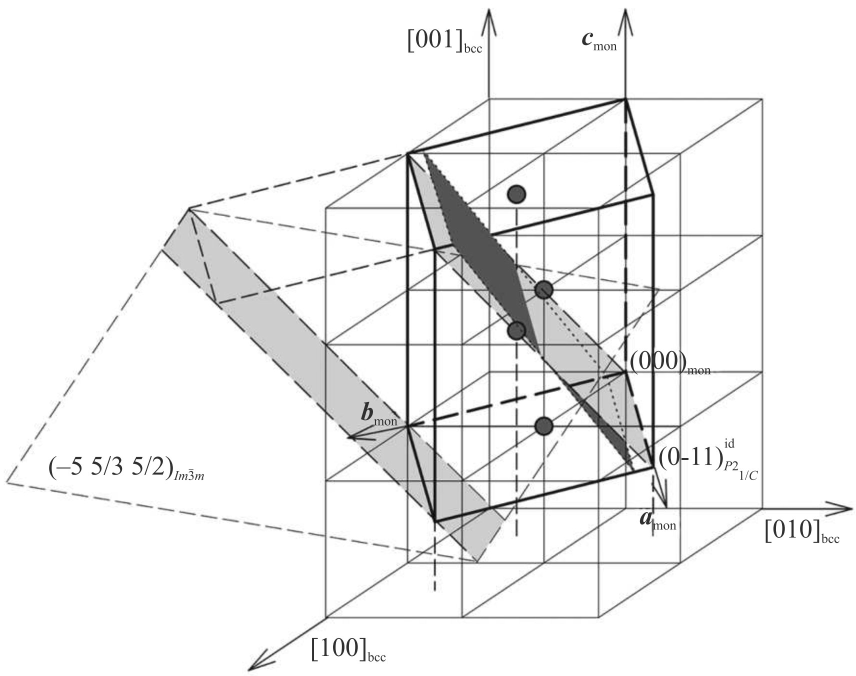

Рис. 4. (Цветной онлайн) Ориентационные соотношения между атомной плоскостью $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$ акантита и плоскостями аргентита. Диагональная атомная плоскость аргентита, параллельная идеальной (без учета смещений атомов S) плоскости $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$ акантита, совпадает с плоскостью $(-5\,5/3\,5/2)_{Im-3m}$ аргентита и параллельна плоскостям $(-6\,2\,3)_{Im-3m}$ и $(-3\,1\,3/2)_{Im-3m}$. Элементарная ячейка акантита α-Ag_2S показана без учета смещений атомов S. Идеальная плоскость $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$ акантита выделена голубым цветом. Реальная (с учетом атомных смещений) атомная плоскость $(0{-}11)_{P2_1/c}$ акантита выделена синим цветом и направлена под углом $\sim 1.76^\circ$ к идеальной атомной плоскости $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$

Атомная плоскость $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/}$ акантита, проходящая через диагонали боковых граней моноклинной ячейки, без учета смещений атомов из позиций решетки аргентита совпадает с плоскостью $(-5\,5/3\,5/2)_{Im-3m}$, изображенной пунктиром в виде четырехугольника на рис. 4, и параллельна плоскостям $(-6\,2\,3)_{Im-3m}$ и $(-3\,1\,3/2)_{Im-3m}$ аргентита.

Идеальная атомная плоскость $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$ проходит через три узла с моноклинными координатами $(100)_{\rm mon}$, $(000)_{\rm mon}$ и $(011)_{\rm mon}$. В соответствии с рис. 2 моноклинные координаты преобразуются в кубические по формулам $x_{\rm cub} = x_{\rm mon}/2 + y_{\rm mon}$, $y_{\rm cub} = x_{\rm mon}/2 - y_{\rm mon} + 3/2$ и $z_{\rm cub} = -x_{\rm mon}/2 + 2z_{\rm mon} + 1/2$, поэтому эти узлы имеют кубические координаты $(0.5\,2\,0)_{\rm cub}$, $(0\,1.5\,0.5)_{\rm cub}$ и $(1\,0.5\,2.5)_{\rm cub}$. В общем случае уравнение плоскости, проходящей через три точки, имеет вид $A_ix + B_iy + C_iz + D = 0$. Рассчитанное уравнение идеальной атомной плоскости $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$ в кубических координатах имеет вид $x - 3y - 2z + 5.5 = 0$, т. е. $A_1 = 1$, $B_1 = -3$ и $C_1 = -2$.

Реальная (с учетом смещений атомов) атомная плоскость $(0{-}11)_{P2_1/c}$ акантита проходит через атомы Ag1 с моноклинными координатами $(0.9285\,0.5151\,0.1906)_{\rm mon}$ и $(0.9285\,0.9849\,0.6906)_{\rm mon}$ и аналогичный атом Ag1 с координатами $(1.9285\,0.5151\,0.1906)_{\rm mon}$ в соседней моноклинной элементарной ячейке, расстояние между плоскостями $(0{-}11)_{P2_1/c}$ акантита равно ~ 0.517 нм. Указанные атомы Ag1 имеют следующие кубические координаты: $(0.9794\,1.4492\,0.4170)_{\rm cub}$, $(1.4492\,0.974\,1.4170)_{\rm cub}$ и $(1.4784\,1.9492\,{-0.0831})_{\rm cub}$. В соответствии с выполненным решением (см. дополнительный материал), уравнение реальной плоскости $(0{-}11)_{P2_1/c}$ в кубических координатах записывается как $x - 2.7722y - 1.7722z + 3.7771 = 0$, где $A_2 = 1$, $B_2 = -2.7722$ и $C_2 = -1.7722$.

Плоскости $(0{-}11)^{\rm id}_{P2_1/c}$ и $(0{-}11)_{P2_1/c}$ в результате смещений атомов оказываются не параллельными, а направленными друг относительно друга под небольшим углом, который равен углу между нормалями к плоскостям. С учетом этого при известных уравнениях идеальной и реальной плоскостей, записанных в кубических координатах, величину угла φ между ними можно найти как $\cos\varphi = |A_1A_2 +$

$+ B_1B_2 + C_1C_2|/(A_1^2 + B_1^2 + C_1^2)^{1/2}(A_2^2 + B_2^2 + C_2^2)^{1/2}$. Расчет показал, что $\varphi \simeq 1.76°$. На рисунке 4 идеальная $(0{-}11)^{\mathrm{id}}_{P2_1/c}$ и реальная $(0{-}11)_{P2_1/c}$ атомные плоскости показаны голубым и синим цветом соответственно.

Определение взаимной ориентации атомных плоскостей в моноклинном акантите α-Ag_2S и кубическом аргентите β-Ag_2S важно для понимания физического действия гетеронаноструктур Ag_2S/Ag и Ag_2S/ZnS, связанного с превращением "акантит-аргентит", которое согласно [16] является переходом беспорядок-порядок. В частности, гетеронаноструктура Ag_2S/Ag рассматривается как потенциальная основа для создания резистивных переключателей и энергонезависимых (*nonvolatile*) устройств памяти [14, 17, 18]. Гетеронаноструктуры на основе нанокристаллических сульфидов Ag_2S и ZnS [19] позволяют регулировать ширину запрещенной зоны и рассматриваются как перспективные наноматериалы для твердотельных УФ-лазеров, быстродействующих переключателей сопротивления, а также катализа. Заметим, что стабильность гетеронаноструктур на основе суперионного сульфида серебра Ag_2S зависит от его упругих свойств [20].

Авторы благодарят Е. Ю. Герасимова и А. В. Чукина за помощь в электронно-микроскопических и высокотемпературных рентгеновских измерениях.

Работа выполнена по государственному заданию # 0397-2019-0001 в Институте химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук.

1. R. C. Sarma and Y. A. Chang, Bull. Alloy Phase Diagrams **7**, 263 (1986).
2. R. Sadanaga and S. Sueno, Mineralog, J. Japan. **5**, 124 (1967).
3. L. S. Ramsdell, Am. Mineral. **28**, 401 (1943).
4. T. Blanton, S. Misture, N. Dontula, and S. Zdzieszynski, Powder Diffraction **26**, 110 (2011).
5. R. J. Cava, F. Reidinger, and B. J. Wuensch, J. Solid State Chem. **31**, 69 (1980).
6. S. I. Sadovnikov, A. I. Gusev, and A. A. Rempel, Superlat. Microstr. **83**, 35 (2015).
7. S. I. Sadovnikov, A. I. Gusev, and A. A. Rempel, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 12466 (2015).
8. S. I. Sadovnikov, A. I. Gusev, and A. A. Rempel, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 20495 (2015).
9. А. А. Ремпель, С. И. Садовников, Г. Клинзер, В. Шпренгель, Письма в ЖЭТФ **107**, 6 (2018).
10. C. M. Perrott and N. H. Fletcher, J. Chem. Phys. **50**, 2344 (1969).
11. W. T. Thompson and S. N. Flengas, Can. J. Chem. **49**, 15503 (1971).
12. F. Grønvold and E. F. Westrum, J. Chem. Thermodyn. **18**, 381 (1986).
13. С. И. Садовников, А. В. Чукин, А. А. Ремпель, А. И. Гусев, ФТТ **58**, 32 (2016).
14. C. H. Liang, K. Terabe, T. Hasegawa, and M. Aono, Nanotechnology **18**, 485202 (2007).
15. X'Pert HighScore Plus. Version 2.2e (2.2.5). ©2009 PANalytical B. V. Almedo, the Netherlands.
16. С. И. Садовников, А. И. Гусев, Письма в ЖЭТФ **109**, 605 (2019).
17. D. Wang, L. Liu, Y. Kim, Z. Huang, D. Pantel, D. Hesse, and M. Alexe, Appl. Phys. Lett. **98**, 243109 (2011).
18. С. И. Садовников, А. А. Ремпель, А. И. Гусев, Письма в ЖЭТФ **106**, 569 (2017).
19. С. И. Садовников, А. И. Гусев, Письма в ЖЭТФ **113**, 733 (2021).
20. С. И. Садовников, Письма в ЖЭТФ **112**, 203 (2020).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 192 – 195

Роль интерфейсов в формировании тензора диэлектрической проницаемости тонких слоев ферромагнитного металла

С. Г. Овчинников[+*1)], *О. А. Максимова*[+*], *С. А. Лященко*[+], *И. А. Яковлев*[+], *С. Н. Варнаков*[+]

[+]*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН – обособленное подразделение Федерального исследовательского центра "Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН", 660036 Красноярск, Россия*

[*]*Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 26 июня 2021 г.
После переработки 9 июля 2021 г.
Принята к публикации 9 июля 2021 г.

Из экспериментальных работ известно, что компоненты тензора диэлектрической проницаемости ε зависят от толщин слоев многослойных тонких пленок, а при нанометровых слоях необходимо дополнительно учитывать межслоевые интерфейсы. Данная работа посвящена ответу на вопрос, с чем связано влияние данных интерфейсов на свойства пленок. Показано, что вклад межзонных матричных элементов для ферромагнитных пленок, имеющих недиагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости, определяет соотношение между диагональной и недиагональной компонентами тензора ε при толщинах ферромагнитного слоя порядка 10 нм.

DOI: 10.31857/S123456782115009X

1. Как известно, интерфейсные явления во многом определяют свойства различных многослойных структур [1, 2]. В полупроводниковых гетероструктурах интерфейсы влияют на рабочие характеристики создаваемых устройств [3, 4]. В магнитных гетероструктурах спинтроники от свойств интерфейса на границе раздела магнитный/немагнитный слой зависит прохождение спин-поляризованного тока и величина эффекта гигантского магнитосопротивления [5–7]. В настоящей работе мы рассматриваем влияние интерфейсов между магнитным и немагнитными слоями на магнитооптические свойства многослойных структур, в частности, на соотношение между диагональными и недиагональными компонентами тензора диэлектрической проницаемости ε.

Экспериментальные исследования частотной зависимости компонент тензора диэлектрической проницаемости тонких пленок железа ε в слоистой структуре слой Fe/искусственный оксид SiO_2/подложка Si (100) методом спектральной магнитооптической эллипсометрии [8] выявили для тонких слоев Fe с толщинами 77.0 ± 0.6, 33.5 ± 0.6 и 11.5 ± 0.6 нм зависимость компонент тензора ε не только от частоты света, но и от толщины слоя. В то же время для образца с толщиной слоя железа $d(\mathrm{Fe}) = 160.5 \pm 0.8$ нм значения компонент тензора ε позволяют рассматривать его как объемный образец [9], что характерно для образца с толщиной много больше толщины скин-слоя. Более того, анализ данных для самых тонких слоев ($d(\mathrm{Fe}) = 11.5 \pm 0.6$ нм) показал необходимость учета интерфейсов на границе Fe/vacuum (толщина интерфейса 0.58 нм с содержанием железа 50 %) и Fe/SiO_2 (толщина 0.12 нм с содержанием железа 50 %), в то время как для остальных, более толстых пленок, компоненты тензора диэлектрической проницаемости нечувствительны к учету межслоевых интерфейсов. В связи с этим возникает вопрос, с чем связано влияние интерфейсов на свойства тонких пленок? Возможно, с перестройкой электронной структуры вблизи поверхности или с изменением матричных элементов дипольных межзонных переходов?

В данной статье для ответа на этот вопрос мы анализируем общие выражения для действительной и мнимой части компонент тензора диэлектрической проницаемости. Получено упрощенное представление, разделяющее вклады межзонной плотности состояний и дипольных межзонных матричных элементов, из которого следует независимость от частоты отношения мнимых частей диагональной и недиагональной компонент тензора. Экспериментальные данные для тонких слоев ($d(\mathrm{Fe}) = 11.5 \pm 0.6$ нм) показывают, что такое отношение, действительно, постоянно практически во всем измеряемом спектральном диапазоне, но нарушается в узком интервале частот.

1) e-mail: sgo@iph.krasn.ru

2. Тензор диэлектрической проницаемости ε намагниченного ферромагнетика строится на основе вынужденной анизотропии и, при параллельности вектора намагниченности оси z, выглядит следующим образом [10, 11]:

$$[\varepsilon]=\begin{bmatrix}\varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0\\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{bmatrix}. \tag{1}$$

При проведении расчетов компонент тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ в зависимости от частоты в рамках теории линейного отклика [12] и в рамках зонной теории на основе теории функционала плотности [13] используются следующие выражения для мнимой части тензора при волновом векторе $q\to 0$:

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{4\pi^2e^2}{\Omega}\lim_{q\to 0}\frac{1}{q^2}\sum_{c,v,k}2\delta(E_{ck}-E_{vk}-\omega)\times$$

$$\times\langle u_{c,k+e_\alpha q}|u_{v,k}\rangle\langle u_{c,k+e_\beta q}|u_{v,k}\rangle^*, \tag{2}$$

где индексы c и v обозначают незаполненные и заполненные зоны (для полупроводников – зону проводимости и валентную зону, соответственно), а $u_{\lambda k}$ – волновая функция орбитали $\lambda=c,v$ с волновым вектором k. Здесь Ω есть объем элементарной ячейки, e_α – компоненты единичного вектора. Множитель 2 появляется за счет суммирования по спину электронов.

Для вещественной части обычно используют формулу Крамерса–Кронига [13]:

$$\operatorname{Re}\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int\limits_0^\infty\frac{\operatorname{Im}\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')\omega'}{\omega'^2-\omega^2+i\eta}d\omega'. \tag{3}$$

При расчете диэлектрической проницаемости металла, вместо валентной зоны и зоны проводимости есть две зоны: d и sp. Соответственно, выражение для нахождения мнимой части диэлектрической проницаемости можно переписать в длинноволновом пределе $q\to 0$ через матричные элементы межзонных переходов $\langle u_{c,k+e_\alpha q)}|u_{v,k}\rangle=d^\alpha_{cv}(k)$:

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{4\pi^2e^2}{\Omega}\lim_{q\to 0}\frac{1}{q^2}\sum_{c,v,k}2\delta(E_{ck}-E_{vk}-\omega)\times$$

$$\times\, d^\alpha_{cv}(k)d^\beta_{cv}(k)^*. \tag{4}$$

Таким образом, в выражение для мнимой части диагональной компоненты тензора $\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}$ будет входить квадрат x-компоненты межзонного матричного элемента $|d^x_{cv}|^2$, зависящего от волнового вектора k, а в выражение для мнимой части недиагональной компоненты $\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}$ войдет произведение x,y компонент $d^x_{cv}(d^y_{cv})^*$.

Если матричные элементы слабо зависят от волнового вектора, то из-под суммы по k в формуле (4) можно вынести средние по зоне Бриллюэна матричные элементы $\langle d^x_{cv}\rangle$, $\langle d^y_{cv}\rangle$. Введем межзонную плотность состояний $N_{cv}(\omega)$:

$$N_{cv}(\omega)=\frac{1}{\Omega}\sum_k 2\delta(E_{ck}-E_{vk}-\omega). \tag{5}$$

Тогда мнимая часть компонент тензора принимает вид

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)=4\pi^2e^2\sum_{c,v}N_{cv}(\omega)|\langle d^x_{cv}\rangle|^2, \tag{6}$$

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)=4\pi^2e^2\sum_{c,v}N_{cv}(\omega)\langle d^x_{cv}\rangle\langle {}^y_{cv}\rangle^*. \tag{7}$$

Такое приближенное представление позволяет разделить вклады от изменения электронных энергий за счет интерфейсов (которые входят в межзонную плотность состояний), от изменений матричных элементов межзонных переходов. Мы заранее не знаем, как сильно зависят матричные элементы от номера зоны, в простейшем приближении двух зон ($sp=1$, $d=2$) сумма по зонным индексам уходит, и остается

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)=4\pi^2e^2N_{12}(\omega)|\langle d^x_{12}\rangle|^2, \tag{8}$$

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)=4\pi^2e^2N_{12}(\omega)\langle d^x_{12}\rangle\langle d^y_{12}\rangle^*. \tag{9}$$

Из выражений (8), (9) видно, что ключевое отличие между мнимыми частями диагональной и недиагональной компонент тензора ε заключается в различии матричных элементов, в то время как межзонная плотность состояний входит в обе компоненты одинаково. При этом ранее в экспериментах [8] мы наблюдали, что диагональные компоненты тензора (1) для всех толщин пленок железа получаются одинаковыми как при учете интерфейсов при обработке данных измерений, так и без учета интерфейсов. В то же время недиагональная компонента (1) зависит от присутствия интерфейса для самых тонких пленок. Соответственно, ниже мы проверяем гипотезу о том, что именно вклад матричных элементов в выражениях (8), (9) определяет вклад интерфейсов при формировании значений недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости.

Согласно выражениям (8), (9), отношение $\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)/\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$ определяется как отношение матричных элементов $\langle d_{12}^x \rangle / \langle d_{12}^y \rangle$, и ожидается, что эта величина будет не зависеть от энергии (и, соответственно, от возможных изменений энергии за счет интерфейса), что можно проверить экспериментально.

3. Ранее были опубликованы результаты экспериментального исследования методом спектральной магнитооптической эллипсометрии образцов структуры $Fe/SiO_2/Si$, полученных методом термического испарения в вакууме, а именно величины компонент тензора диэлектрической проницаемости слоя Fe [8, 9]. Используя эти данные, в настоящей работе для самого тонкого образца с толщиной слоя железа 11.5 ± 0.6 нм мы рассчитали зависимость отношения $\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)/\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$ от частоты света в области видимого спектрального диапазона (рис. 1). Значения

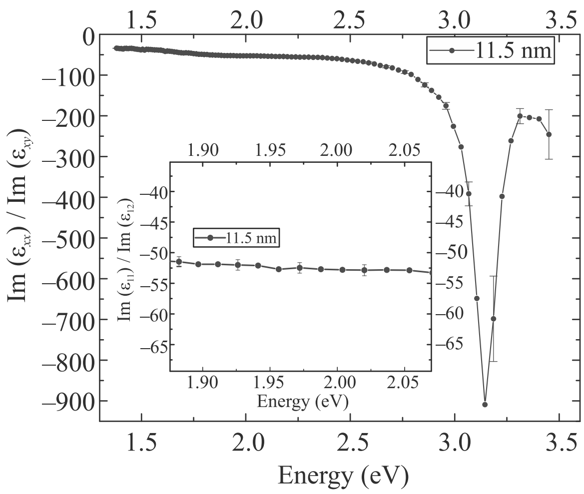

Рис. 1. (Цветной онлайн) Отношение мнимых частей диагональной и недиагональной компонент тензора диэлектрической проницаемости тонкопленочного образца $Fe/SiO_2/Si$. На вставке – увеличенный в масштабе спектральный интервал 1.875–2.075 эВ

компонент тензора ε были рассчитаны с использованием многослойной модели образца и с учетом межслоевых интерфейсов на границе Fe/vacuum (толщина 0.58 нм с содержанием железа 50 %) и Fe/SiO_2 (толщина 0.12 нм с содержанием железа 50 %).

Видно, что для данного образца на большей части видимого спектрального диапазона выполняется условие независимости отношения $\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)/\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$ от энергии падающего излучения. Выброс в области 3–3.3 эВ появляется в результате перехода через нуль недиагонального элемента $\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$. Особенности в этой области спектра обсуждались подробно в работе [8], где был проведен спин-поляризованный расчет плотности электронных состояний. Из этого расчета следует (рис. 3 в [8]), что особенность на нашем рис. 1 в области энергий 3–3.3 эВ ассоциирована с межзонными $d{-}p$ переходами.

4. Как видно из рис. 1, и особенно на вставке к рис. 1, отношение матричных элементов $\langle d_{12}^x \rangle / \langle d_{12}^y \rangle$, действительно, можно считать постоянным почти во всем интервале измеряемого диапазона частот. В этом интервале спектральная зависимость компонент тензора определяется межзонной плотностью состояний и можно утверждать, что различие диагональных и недиагональных компонент обусловлено только различием матричных элементов межзонных переходов. В то же время имеется интервал энергий от 3 до 3.3 эВ, в котором отношение матричных элементов резко возрастает по модулю. Сравнение в данном интервале энергий абсолютных значений мнимых частей диагональной и недиагональных компонент тензора, приведенных в работе [8], показывает, что $\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)$ мала, но отлична от нуля, в то время как $\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$ близка к нулю. Это возможно, если матричный элемент d_{12}^y близок к нулю для энергий от 3 до 3.3 эВ. Для более толстых образцов (с толщиной слоя Fe более 33 нм), где роль интерфейса заведомо незначительна, $\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$ не обращается в нуль и особенность в отношении $\operatorname{Im}\varepsilon_{xx}(\omega)/\operatorname{Im}\varepsilon_{xy}(\omega)$ в данном диапазоне энергий отсутствует. Таким образом, подавление матричного элемента d_{12}^y для энергий от 3 до 3.3 эВ для пленок толщиной 11 нм есть эффект интерфейса.

Мы благодарны участникам семинара кафедры магнетизма МГУ за стимулирующие дискуссии, и особенно А. В. Ведяеву, обратившему наше внимание на роль интерфейсов. Мы также благодарим В. С. Жандуна за консультацию по расчетам тензора диэлектрической проницаемости в теории функционала плотности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-12-00226, http://rscf.ru/project/21-12-00226/.

1. К. Оура, В. Г. Лифшиц, А. А. Саранин, А. В. Зотов, М. Катаяма, *Введение в физику поверхности*, Наука, М. (2006).
2. E. L. Ivchenko and G. Pikus, *Superlattices and other heterostructures, Symmetry and optical phenomena*, Springer Series in Solid-State Sciences, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1997), v. 110.
3. В. А. Соловьев, А. А.Торопов, Б. Я. Мельцер, Я. З. Терентьев, Р. Н. Кютт, А. А. Ситников, А. Н. Семенов, С. В. ИвАСанов, Е. М. Голдис, П. С. Копьев, ФТП **36**, 869 (2002).

4. А. И. Лебедев, *Физика полупроводниковых приборов*, Физматлит, М. (2008).
5. А. Ферт, УФН **178**, 1336 (2008).
6. А. Б. Грановский, М. Ильин, А. Жуков, В. Жукова, Х. Гонзалес, ФТТ **53**, 299 (2011).
7. *Физика магнитных материалов и наноструктур*, под ред. В. В. Устинова, Н. В. Мушникова, В. Ю. Ирхина, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург (2020).
8. О. А. Максимова, С. А. Лященко, М. А. Высотин, И. А. Тарасов, И. А. Яковлев, Д. В. Шевцов, А. С. Федоров, С. Н. Варнаков, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **110**(3), 155 (2019).
9. O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, S. N. Varnakov, S. A. Lyaschenko, I. A. Yakovlev, I. A. Tarasov, D. V. Shevtsov, O. M. Maximova, and S. G. Ovchinnikov, JMMM **440**, 196 (2017).
10. А. В. Соколов, *Оптические свойства металлов*, ГИФМЛ, М. (1961).
11. Г. С. Кринчик, *Физика магнитных явлений*, изд-во Моск. ун-та, М. (1976).
12. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М. (1971).
13. M. Gajdoš, K. Hummer, G. Kresse, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **73**, 045112 (2006).

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 114

Выпуск 4

25 августа 2021

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.ru

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

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 199 – 203 © 2021 г. 25 августа

Распад $\tau \to K^-\eta\nu_\tau$ в расширенной модели Намбу–Иона-Лазинио с учетом взаимодействия мезонов в конечном состоянии

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

Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 23 июня 2021 г.
После переработки 20 июля 2021 г.
Принята к публикации 21 июля 2021 г.

Ширина распада $\tau \to K^-\eta\nu_\tau$ вычислена в рамках расширенной модели Намбу–Иона-Лазинио с учетом взаимодействия мезонов в конечном состоянии. При этом были учтены как контактный член, так и канал с промежуточным основным состоянием $K^*(892)$ и его первым радиальным возбуждением $K^*(1410)$. Для описания взаимодействия в конечном состоянии была рассмотрена треугольная диаграмма с тремя мезонами. Причем парметр обрезания расходящихся интегралов по мезонной петле брался равным значению соответствующего параметра, использованного в нашей предыдущей работе при описании распада $\tau \to K^-\pi^0\nu_\tau$. Таким образом, в данной работе не появилось дополнительных произвольных параметров. При этом получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S1234567821160011

1. Введение. Как показали многочисленные расчеты, модель Намбу–Иона-Лазинио (НИЛ) [1–4] позволяет удовлетворительно описать многие основные распады тау лептона. В рамках этой модели в согласии с экспериментальными данными были описаны целые серии распадов тау лептона: $\tau \to M\nu_\tau$, $\tau \to VP\nu_\tau$, где V – векторный мезон, P – псевдоскалярный мезон, M – псевдоскалярный или векторный мезон [4–11]. Однако некоторые процессы тау-распадов на псевдоскалярные мезоны не удается описать в рамках модели НИЛ в согласии с экспериментом. Это может быть связано с необходимостью учета взаимодействия мезонов в конечном состоянии. Такой учет требует более высокого порядка разложения по $1/N_c$, чем тот, в котором сформулирована модель НИЛ. Взаимодействие в конечном состоянии с небольшим выходом за рамки данной модели было рассмотрено в недавних работах в процессах $\tau^- \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$ [12] и $\tau^- \to K^-\pi^0\nu_\tau$ [13]. У данных распадов порог рождения конечных мезонов находится ниже масс промежуточных основных состояний $\rho(770)$ и $K^*(892)$ соответственно. Поэтому возбужденные состояния здесь не вносят существенный вклад. В отличие от них, процесс $\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau$ имеет порог рождения конечных мезонов выше массы основного состояния $K^*(892)$, в результате чего этот процесс становится чувствительным к резонансу $K^*(1410)$, который начинает играть существенную роль. Поэтому данный процесс, будучи схожим по структуре с процессом $\tau^- \to K^-\pi^0\nu_\tau$, оказывается более полезным для изучения возбужденных состояний мезонов.

В настоящей работе мы рассматриваем процесс $\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau$ с учетом взаимодействия мезонов в конечном состоянии. По структуре он схож с распадом $\tau^- \to K^-\pi^0\nu_\tau$, однако из-за большой роли резонанса $K^*(1410)$ для его исследования применяется расширенная модель НИЛ [14, 15], позволяющая описать первые радиально возбужденные состояния мезонов без нарушения $U(3) \times U(3)$ киральной симметрии, и также производится выход за ее рамки для учета взаимодействия в конечном состоянии. Для описания этого взаимодействия в данном случае требуется учесть лишь одну треугольную диаграмму с обменом заряженным векторным мезоном $K^{*\pm}(892)$. Однако сами мезонные вершины в этом треугольнике более сложны из-за особенностей структуры η мезона. Интересным является тот факт, что величины обрезания мезонных треугольников процессов $\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau$ и $\tau^- \to K^-\pi^0\nu_\tau$ оказываются одинаковыми.

Процесс $\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau$ изначально исследовался экспериментально коллаборациями CLEO [16] и ALEPH [17]. Позже коллаборации Belle [18] и Babar [19] провели более точные измерения этого процесса.

Данный процесс также исследовался теоретически. Например, в работе [20] он рассматривается с помощью модели векторной доминантности и эффек-

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

тивной киральной теории. В работе [21] для его рассмотрения используется киральная теория возмущений с резонансами.

2. Лагранжиан расширенной модели НИЛ. Фрагмент кирального кварк-мезонного лагранжиана расширенной модели НИЛ, содержащий нужные нам вершины, принимает следующий вид [4]:

$$\Delta L_{\text{int}} = \bar{q}\left[\frac{1}{2}\gamma^{\mu}\sum_{j=\pm}\lambda_j^K\left(A_{K^*}K_{\mu}^{*j} + B_{K^*}K_{\mu}^{*'j}\right) + \right. \\ + i\gamma^5\sum_{j=\pm}\lambda_j^K\left(A_K K^j + B_K K'^j\right) + \\ \left. + i\gamma^5\sum_{j=u,s}\lambda_j^{\eta}A_{\eta^j}\eta^j\right]q, \quad (1)$$

где q и $\bar{q}$ – поля u-, d- и s-кварков с составляющими массами $m_u \approx m_d = 280$ МэВ, $m_s = 420$ МэВ, возбужденные мезонные состояния отмечены штрихом. Множители A и B для странных мезонов имеют вид:

$$A_M = \frac{1}{\sin(2\theta_M^0)} \times \\ \times\left[g_M\sin(\theta_M + \theta_M^0) + g_M^{'}f_M(k_{\perp}^2)\sin(\theta_M - \theta_M^0)\right], \\ B_M = \frac{-1}{\sin(2\theta_M^0)} \times \\ \times\left[g_M\cos(\theta_M + \theta_M^0) + g_M^{'}f_M(k_{\perp}^2)\cos(\theta_M - \theta_M^0)\right]. \quad (2)$$

Индекс M обозначает соответствующий мезон.

Для η-мезона множитель A принимает несколько другую форму. Это связано с тем, что в случае η-мезона смешиваются не два, а четыре состояния [4]:

$$A_{\eta^u} = 0.71g_{\eta^u} + 0.11g_{\eta^u}^{'}f_{uu}(k_{\perp}^2), \\ A_{\eta^s} = 0.62g_{\eta^s} + 0.06g_{\eta^s}^{'}f_{ss}(k_{\perp}^2). \quad (3)$$

$f\left(k_{\perp}^2\right) = \left(1 + dk_{\perp}^2\right)\Theta(\Lambda^2 - k_{\perp}^2)$ – формфактор, описывающий первые радиально возбужденные мезонные состояния. Параметр наклона d однозначно фиксируется из требования неизменности кваркового конденсата после включения радиально возбужденных состояний и зависит только от кваркового состава соответствующего мезона:

$$d_{uu} = -1.784 \times 10^{-6}\,\text{МэВ}^{-2}, \\ d_{us} = -1.761 \times 10^{-6}\,\text{МэВ}^{-2}, \\ d_{ss} = -1.737 \times 10^{-6}\,\text{МэВ}^{-2}. \quad (4)$$

Поперечный относительный импульс внутренней кварк-антикварковой системы может быть представлен в виде

$$k_{\perp} = k - \frac{(kp)p}{p^2}, \quad (5)$$

где p – импульс мезона. В системе покоя мезона

$$k_{\perp} = (0, \mathbf{k}). \quad (6)$$

Поэтому данный импульс может быть использован в трехмерном виде.

Параметры θ_M – углы смешивания, которые фиксируются в результате диагонализации свободного лагранжиана с основными и первыми радиально возбужденными состояниями [4, 15]:

$$\theta_K = 58.11^{\circ}, \quad \theta_{K^*} = 84.74^{\circ}. \quad (7)$$

Вспомогательные величины θ_M^0 вводятся для удобства:

$$\sin\left(\theta_M^0\right) = \sqrt{\tfrac{1+R_M}{2}}, \\ R_{K^*} = \frac{I_{11}^{f_{us}}}{\sqrt{I_{11}I_{11}^{f_{us}^2}}}, \quad R_K = \frac{I_{11}^{f_{us}}}{\sqrt{Z_K I_{11}I_{11}^{f_{us}^2}}}, \quad (8)$$

где

$$Z_K = \left(1 - \frac{3}{2}\frac{(m_u + m_s)^2}{M_{K_{1A}}^2}\right)^{-1}, \\ M_{K_{1A}} = \left(\frac{\sin^2\alpha}{M_{K_1(1270)}^2} + \frac{\cos^2\alpha}{M_{K_1(1400)}^2}\right)^{-1/2}. \quad (9)$$

Здесь Z_K – дополнительная константа перенормировки, появляющаяся в $K - K_1$ переходах, $M_{K_1(1270)} = 1253 \pm 7$ МэВ – масса мезона $K_1(1270)$, $M_{K_1(1400)} = 1403 \pm 7$ МэВ – масса мезона $K_1(1400)$ [22]. В указанном выражении для Z_K учтено расщепление состояния K_{1A} на два физических мезона $K_1(1270)$ и $K_1(1400)$ с углом смешивания $\alpha = 57^{\circ}$ [6].

Интегралы, появляющиеся в кварковых петлях как результат перенормировки лагранжиана:

$$I_{n_1 n_2}^{f^m} = -i\frac{N_c}{(2\pi)^4} \times \\ \times\int\frac{f^m(\mathbf{k}^2)}{(m_u^2 - k^2)^{n_1}(m_s^2 - k^2)^{n_2}}\Theta(\Lambda^2 - \mathbf{k}^2)\mathrm{d}^4k, \quad (10)$$

где $\Lambda = 1.03$ ГэВ – параметр трехмерного обрезания. Тогда

$$\theta_K^0 = 55.52^{\circ}, \quad \theta_{K^*}^0 = 59.56^{\circ}. \quad (11)$$

Матрицы λ – линейные комбинации матриц Гелл-Мана:

$$\lambda_+^K = \frac{\lambda_4 + i\lambda_5}{\sqrt{2}}, \quad \lambda_-^K = \frac{\lambda_4 - i\lambda_5}{\sqrt{2}}, \\ \lambda_u^{\eta} = \frac{2\lambda_0 + \sqrt{3}\lambda_8}{3}, \quad \lambda_s^{\eta} = \frac{-\sqrt{2}\lambda_0 + \sqrt{6}\lambda_8}{3}, \quad (12)$$

где λ_0 – единичная матрица.

Константы связи:

$$g_{K^*}=\left(\frac{2}{3}I_{11}\right)^{-1/2},\quad g'_{K^*}=\left(\frac{2}{3}I_{11}^{f^2}\right)^{-1/2},$$
$$g_K=\left(\frac{4}{Z_K}I_{11}\right)^{-1/2},\quad g'_K=\left(4I_{11}^{f^2}\right)^{-1/2},$$
$$g_{\eta^u}=\left(\frac{4}{Z_{\eta^u}}I_{20}\right)^{-1/2},\quad g'_{\eta^u}=\left(4I_{20}^{f^2}\right)^{-1/2},$$
$$g_{\eta^s}=\left(\frac{4}{Z_{\eta^s}}I_{02}\right)^{-1/2},\quad g'_{\eta^s}=\left(4I_{02}^{f^2}\right)^{-1/2},\tag{13}$$

где

$$Z_{\eta^u}\approx Z_\pi=\left(1-6\frac{m_u^2}{M_{a_1}^2}\right)^{-1},$$
$$Z_{\eta^s}=\left(1-6\frac{m_s^2}{M_{f_1^s}^2}\right)^{-1}.\tag{14}$$

Здесь Z_{η^s} – дополнительная константа перенормировки, появляющаяся в переходах между аксиально векторным мезоном $f_1(1420)$ и s-кварковой частью η мезона, $M_{f_1^s}=1426\pm0.9$ МэВ [22]. Параметр Z_{η^u} в модели НИЛ обычно принимается приблизительно равным параметру Z_π, возникающему в результате $a_1-\pi$ переходов, $M_{a_1}=1230\pm40$ МэВ – масса мезона $a_1(1260)$ [22].

3. Процесс $\tau^-\to K^-\eta\nu_\tau$ в расширенной модели НИЛ. Процесс $\tau^-\to K^-\eta\nu_\tau$ в расширенной модели НИЛ может быть описан диаграммами, изображенными на рис. 1, 2.

Амплитуда этого процесса принимает вид:

$$M_{\text{tree}}=-2G_fV_{us}\left(I_{11}^{K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K\eta^s}\right)\times$$
$$\times L_\mu\left[\left(T_K^{(c)}p_K-T_\eta^{(c)}p_\eta\right)^\mu+\frac{C_{K^*}}{g_{K^*}}\times\right.$$
$$\times\frac{I_{11}^{KK^*\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{KK^*\eta^s}}{I_{11}^{K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K\eta^s}}\times$$
$$\times\frac{g^{\mu\nu}q^2f(q^2)-q^\mu q^\nu f(M_{K^*}^2)}{M_{K^*}^2-q^2-i\sqrt{q^2}\Gamma_{K^*}}\times$$
$$\times\left(T_K^{(K^*)}p_K-T_\eta^{(K^*)}p_\eta\right)_\nu+\frac{C_{K^{*\prime}}}{g_{K^*}}\times$$
$$\times\frac{I_{11}^{KK^{*\prime}\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{KK^{*\prime}\eta^s}}{I_{11}^{K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K\eta^s}}\times$$
$$\times\frac{g^{\mu\nu}q^2f(q^2)-q^\mu q^\nu f(M_{K^{*\prime}}^2)}{M_{K^{*\prime}}^2-q^2-i\sqrt{q^2}\Gamma_{K^{*\prime}}}\times$$
$$\left.\times\left(T_K^{(K^{*\prime})}p_K-T_\eta^{(K^{*\prime})}p_\eta\right)_\nu\right],\tag{15}$$

где G_f – константа Ферми, V_{us} – элемент матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскава, L_μ – лептонный ток, выражение $f(q^2)$ принимает вид:

$$f(q^2)=1-\frac{3}{2}\frac{(m_s-m_u)^2}{q^2}.\tag{16}$$

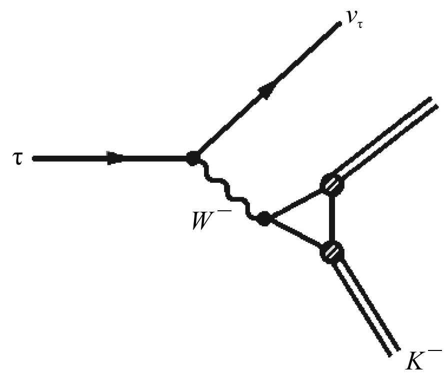

Рис. 1. Контактная диаграмма

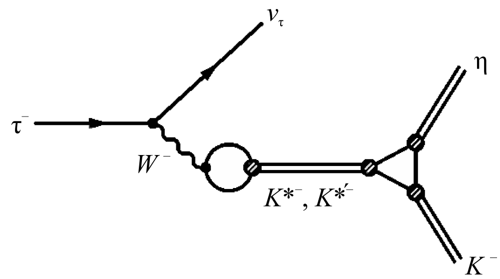

Рис. 2. Диаграмма с промежуточными мезонами

Множители T описывают переходы между аксиально векторными и псевдоскалярными мезонами:

$$T_K^{(c)}=1-2\frac{m_sI_{11}^{K_1\eta^u}+\sqrt{2}m_uI_{11}^{K_1\eta^s}}{I_{11}^{K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K\eta^s}}I_{11}^{K_1K}\frac{m_s+m_u}{M_{K_{1A}}^2},$$
$$T_\eta^{(c)}=1-2\frac{I_{11}^{Kf^u}I_{20}^{f^u\eta^u}}{I_{11}^{K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K\eta^s}}\frac{m_u(3m_u-m_s)}{M_{f_1^u}^2}-$$
$$-2\sqrt{2}\frac{I_{11}^{Kf^s}I_{02}^{f^s\eta^s}}{I_{11}^{K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K\eta^s}}\frac{m_s(3m_s-m_u)}{M_{f_1^s}^2},$$
$$T_K^{(K^*)}=1-2\frac{m_sI_{11}^{K^*K_1\eta^u}+\sqrt{2}m_uI_{11}^{K^*K_1\eta^s}}{I_{11}^{KK^*\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{KK^*\eta^s}}\times$$
$$\times I_{11}^{K_1K}\frac{m_s+m_u}{M_{K_{1A}}^2},$$
$$T_\eta^{(K^*)}=1-2\frac{I_{11}^{K^*Kf^u}I_{20}^{f^u\eta^u}}{I_{11}^{K^*K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K^*K\eta^s}}\frac{m_u(3m_u-m_s)}{M_{f_1^u}^2}-$$
$$-2\sqrt{2}\frac{I_{11}^{K^*Kf^s}I_{02}^{f^s\eta^s}}{I_{11}^{K^*K\eta^u}+\sqrt{2}I_{11}^{K^*K\eta^s}}\frac{m_s(3m_s-m_u)}{M_{f_1^s}^2},$$

$$T_K^{(K^{*'})} = 1 - 2\frac{m_s I_{11}^{K^{*'}K_1\eta^u} + \sqrt{2} m_u I_{11}^{K^{*'}K_1\eta^s}}{I_{11}^{KK^{*'}\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{KK^{*'}\eta^s}} \times$$
$$\times I_{11}^{K_1 K}\frac{m_s + m_u}{M_{K_{1A}}^2},$$
$$T_\eta^{(K^{*'})} = 1 - 2\frac{I_{11}^{K^{*'}Kf^u} I_{20}^{f^u\eta^u}}{I_{11}^{K^{*'}K\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{K^{*'}K\eta^s}} \times$$
$$\times \frac{m_u\,(3m_u - m_s)}{M_{f_1^u}^2} -$$
$$- 2\sqrt{2}\frac{I_{11}^{K^{*'}Kf^s} I_{02}^{f^s\eta^s}}{I_{11}^{K^{*'}K\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{K^{*'}K\eta^s}}\frac{m_s\,(3m_s - m_u)}{M_{f_1^s}^2}. \quad (17)$$

Интегралы с вершинами из лагранжиана в числителе, также используемые в амплитуде:

$$I_{n_1 n_2}^{M,\dots,M',\dots} = -i\frac{N_c}{(2\pi)^4} \times$$
$$\times \int \frac{A_M \dots B_M \dots}{(m_u^2 - k^2)^{n_1}(m_s^2 - k^2)^{n_2}}\Theta(\Lambda^2 - \mathbf{k}^2)\mathrm{d}^4 k, \quad (18)$$

где A_M, B_M определены в (2) и в (3).

Константы C_{K^*} и $C_{K^{*'}}$

$$C_{K^*} = \frac{1}{\sin\left(2\theta_{K^*}^0\right)} \times$$
$$\times \left[\sin\left(\theta_{K^*} + \theta_{K^*}^0\right) + R_{K^*}\sin\left(\theta_{K^*} - \theta_{K^*}^0\right)\right],$$
$$C_{K^{*'}} = \frac{-1}{\sin\left(2\theta_{K^*}^0\right)} \times$$
$$\times \left[\cos\left(\theta_{K^*} + \theta_{K^*}^0\right) + R_{K^*}\cos\left(\theta_{K^*} - \theta_{K^*}^0\right)\right] \quad (19)$$

возникают в переходах между W-бозоном и промежуточным векторным мезоном. Здесь θ – угол смешивания основных и возбужденных состояний, определенный в (7). Величины θ^0 и R определены в (8).

Первое слагаемое амплитуды в квадратных скобках соответствует контактной диаграмме, второе и третье слагаемые – диаграммам с промежуточными основным и возбужденным векторными мезонами $K^*(892)$ и $K^*(1410)$.

Данная амплитуда приводит к следующему значению парциальной ширины этого распада:

$$Br(\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau)_{\text{tree}} = 1.35 \times 10^{-4}. \quad (20)$$

Экспериментальное значение [22]:

$$Br(\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau)_{\text{exp}} = (1.55 \pm 0.08) \times 10^{-4}. \quad (21)$$

Как видно, полученный результат несколько ниже экспериментального значения. Это может говорить о необходимости учета дополнительных эффектов, таких как взаимодействие мезонов в конечном состоянии.

4. Процесс $\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau$ с учетом взаимодействия в конечном состоянии. Взаимодействие в конечном состоянии в данном процессе может быть учтено через обмен заряженным мезоном K^* между конечными каоном и η-мезоном, в результате чего они меняются местами. Это приводит к треугольнику, изображенному на рис. 3. Мезонная вершина лагранжиана, необходимая для построения этого треугольника в расширенной модели НИЛ, имеет вид:

$$- i2\left(I_{11}^{KK^*\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{KK^*\eta^s}\right) \times$$
$$\times K_\mu^{*-}\left(T_K^{(K^*)}\partial^\mu K^+\eta - T_\eta^{(K^*)}K^+\partial^\mu\eta\right). \quad (22)$$

Данный мезонный треугольник приводит к интегралу

$$F_\mu = \int \frac{\left(T_K^{(K^*)}k - \left(T_K^{(K^*)} + T_\eta^{(K^*)}\right)p_\eta\right)_\lambda \left(T_\eta^{(K^*)}k + \left(T_K^{(K^*)} + T_\eta^{(K^*)}\right)p_K\right)_\nu \left(\left(T_K^{(K^*)} + T_\eta^{(K^*)}\right)k + T_\eta^{(K^*)}p_K - T_K^{(K^*)}p_\eta\right)_\mu \left(g^{\nu\lambda} - \frac{k^\nu k^\lambda}{M_{K^*}^2}\right)}{\left[k^2 - M_{K^*}^2\right]\left[(k+p_K)^2 - M_\eta^2\right]\left[(k-p_\eta)^2 - M_K^2\right]}$$
$$\times \frac{d^4k}{(2\pi)^4}. \quad (23)$$

Как видно, данный интеграл по структуре схож с интегралом по мезонному треугольнику для процесса $\tau \to K\pi\nu_\tau$ [13].

В итоге амплитуда дополнительного вклада от мезонной петли процесса $\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau$ принимает вид:

$$M_{\text{loop}} = 8iG_f V_{us}\left(I_{11}^{K\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{K\eta^s}\right)^3 L_\mu\left[g^{\mu\nu} + \frac{C_{K^*}}{g_{K^*}}\left(\frac{I_{11}^{KK^*\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{KK^*\eta^s}}{I_{11}^{K\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{K\eta^s}}\right)^3 \times\right.$$
$$\left.\times \frac{g^{\mu\nu}q^2 f(q^2) - q^\mu q^\nu f(M_{K^*}^2)}{M_{K^*}^2 - q^2 - i\sqrt{q^2}\Gamma_{K^*}} + \frac{C_{K^{*'}}}{g_{K^*}}\left(\frac{I_{11}^{KK^{*'}\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{KK^{*'}\eta^s}}{I_{11}^{K\eta^u} + \sqrt{2} I_{11}^{K\eta^s}}\right)^3 \frac{g^{\mu\nu}q^2 f(q^2) - q^\mu q^\nu f(M_{K^{*'}}^2)}{M_{K^{*'}}^2 - q^2 - i\sqrt{q^2}\Gamma_{K^{*'}}}\right]F_\nu. \quad (24)$$

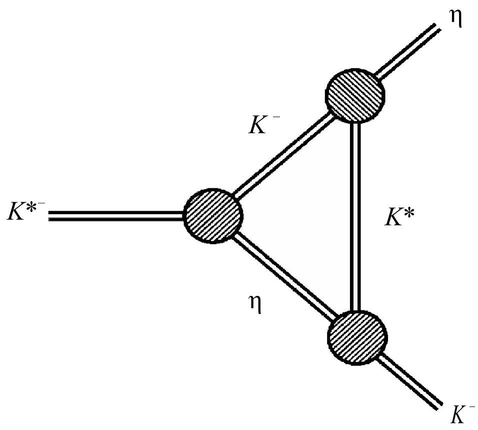

Рис. 3. Мезонный треугольник

Если использовать параметр обрезания, равный тому, который применялся в процессе $\tau \to K\pi\nu_\tau$ при сравнении с результатами из Particle Data Group (PDG) [13] ($\Lambda_M = 950$ МэВ), то парциальная ширина данного процесса согласуется с экспериментальным значением:

$$Br(\tau^- \to K^-\eta\nu_\tau) = 1.56 \times 10^{-4}. \quad (25)$$

5. Заключение. В данной, а также в предыдущей [13] нашей работе были рассмотрены процессы $\tau \to K^-\eta\nu_\tau$ и $\tau \to K^-\pi^0\nu_\tau$ соответственно. Эти процессы уже рассматривались нами ранее с использованием модели НИЛ [4]. Однако в тех работах были допущены существенные неточности: в константе перенормировки Z_K, определенной в (9), не учитывалось расщепление мезона K_1 на два состояния, кроме того, не учитывались переходы между аксиально векторным и псевдоскалярным мезонами, а также присутствовал ряд других недостатков. Поэтому предыдущие результаты не следует принимать во внимание. В работе [13] мы заново исследовали процесс $\tau \to K^-\pi^0\nu_\tau$, а в данной работе процесс $\tau \to K^-\eta\nu_\tau$ без этих недостатков. В результате учета взаимодействия в конечном состоянии появился новый параметр – обрезание по мезонной петле, который при сравнении с данными из PDG оказался одинаковым для обоих процессов.

Рассмотренный здесь распад также исследовался и в других теоретических работах. Например, можно выделить работу [21]. В ней рассматривались разные способы учета взаимодействия в конечном состоянии в рамках киральной теории возмущений с резонансами. Непосредственное использование этих способов в сочетании с моделью НИЛ невозможно в силу несогласованности соответствующих подходов. Вариант учета взаимодействия мезонов в конечном состоянии, использованный в настоящей работе, допускает применение модели НИЛ, хоть и требует небольшого выхода за ее рамки.

Как было указано во Введении, нами были вычислены многочисленные распады тау лептона с участием векторных мезонов без учета взаимодействия в конечном состоянии. Тем не менее, для них были получены удовлетворительные результаты. Поэтому до сих пор остается вопрос, при каких условиях этот учет взаимодействия мезонов в конечном состоянии играет важную роль, и когда им можно пренебречь. Эту проблему авторы собираются рассматривать в будущих работах.

Авторы выражают благодарность А. Б. Арбузову за интерес к данной работе и полезные обсуждения.

1. M. K. Volkov, Sov. J. Part. Nucl. **17**, 186 (1986).
2. M. K. Volkov, Phys. Part. Nucl. **24**, 35 (1993).
3. M. K. Volkov and A. E. Radzhabov, Phys.-Uspekhi **49**, 551 (2006).
4. M. K. Volkov and A. B. Arbuzov, Phys.-Uspekhi **60**(7), 643 (2017).
5. M. K. Volkov, K. Nurlan, and A. A. Pivovarov, JETP Lett. **106**(12), 771 (2017).
6. M. K. Volkov, K. Nurlan, and A. A. Pivovarov, Int. J. Mod. Phys. A **34**(24), 1950137 (2019).
7. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Eur. Phys. J. A **55**(9), 165 (2019).
8. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, Pisma ZhETF **109**(4), 219 (2019); Erratum: JETP Lett. **109**(12), 821 (2019).
9. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, JETP Lett. **110**(4), 237 (2019).
10. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Int. J. Mod. Phys. A **35**(06), 2050035 (2020).
11. M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Nucl. Phys. A **1000**, 121810 (2020).
12. M. K. Volkov, A. B. Arbuzov, and A. A. Pivovarov, JETP Lett. **112**(8), 457 (2020).
13. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, Pis'ma v ZhETF **113**(12), 777 (2021).
14. M. K. Volkov and C. Weiss, Phys. Rev. D **56**, 221 (1997).
15. M. K. Volkov, Phys. Atom. Nucl. **60**, 1920 (1997).
16. J. E. Bartelt, S. E. Csorna, and V. Jain et al. (CLEO), Phys. Rev. Lett. **76**, 4119 (1996).
17. D. Buskulic, I. De Bonis, D. Decamp et al. (ALEPH), Z. Phys. C **74**, 263 (1997).
18. K. Inami, T. Ohshima, H. Kaji et al. (Belle), Phys. Lett. B **672**, 209 (2009).
19. P. del Amo Sanchez, J. P. Lees, V. Poireau et al. (BaBar), Phys. Rev. D **83**, 032002 (2011).
20. B. A. Li, Phys. Rev. D **55**, 1436 (1997).
21. R. Escribano, S. Gonzalez-Solis, and P. Roig, JHEP **10**, 039 (2013).
22. P. A. Zyla, R. M. Barnett, J. Beringer et al. (Particle Data Group), PTEP **2020**(8), 083C01 (2020).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 204 – 211 © 2021 г. 25 августа

Корреляционные свойства оптико-терагерцового бифотонного поля

П. А. Прудковский[1)]

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

Поступила в редакцию 13 июля 2021 г.
После переработки 13 июля 2021 г.
Принята к публикации 13 июля 2021 г.

Работа посвящена теоретическому исследованию влияния структуры угловых мод оптико-терагерцового бифотонного поля, возникающего при сильно-невырожденном параметрическом рассеянии, на возможность измерения неклассических корреляционных свойств этого поля. В работе показано, что если частота холостого излучения лежит в терагерцовом диапазоне, оператор нелинейного взаимодействия, описывающий параметрическое рассеяние, может быть диагонализован в пространстве азимутальных углов. Это позволяет найти собственные азимутальные моды и определить матрицу рассеяния при произвольных коэффициентах параметрического взаимодействия. Полученная матрица рассеяния используется для того, чтоб найти зависимости величин нормированной корреляционной функции и фактора подавления шума оптико-терагерцового бифотонного поля от значений угловых апертур детекторов, регистрирующих сигнальное и холостое излучение.

DOI: 10.31857/S1234567821160023

Свойства бифотонного излучения, возникающего при параметрическом рассеянии света (ПР), уже давно используются в квантовых технологиях [1], спектроскопии [2] и безэталонной фотометрии [3, 4]. Частоты сопряженных фотонов, рождающихся при ПР, могут существенно различаться. Это позволило развить методы нелинейной интерферометрии, в которых для исследования свойств вещества в одном диапазоне частот достаточно измерять интенсивность сигнального излучения, лежащего совсем в другом спектральном диапазоне [5–8], а также методы построения фантомных изображений (*ghost imaging*) в ИК-диапазоне [9] и в рентгеновском излучении [10, 11].

По мере освоения терагерцового диапазона некоторые из применений бифотонных полей удается перенести и в эту частотную область. Так, за последнее десятилетие удалось использовать сильно-невырожденное ПР для спектроскопии нелинейных кристаллов в терагерцовом диапазоне частот [12–14], реализовать схему нелинейной интерференции для измерения показателя преломления в этом же частотном диапазоне [15, 16] и методику безэталонного измерения яркости терагерцового излучения [17, 18].

Однако методы, требующие регистрации одиночных фотонов в различных пространственных модах, активно применяемые в оптическом и ближнем ИК-диапазоне, не так просто перенести в терагерцовый диапазон. Это связано с тем, что пока что практически не существует детекторов, способных регистрировать отдельные фотоны на терагерцовых частотах, а также с тем, что из-за больших длин волн структура пространственных мод оптико-терагерцового бифотонного излучения оказывается сильно перепутанной. В результате квантовые корреляции, необходимые для реализации квантовооптических приложений, таких как безэталонная калибровка фотодетекторов, построение фантомных изображений и пр., между оптическими и терагерцовыми фотонами пока что не зарегистрированы. Даже в среднем ИК-диапазоне это пока что представляет непростую задачу [19, 20], а в области терагерцовых частот сложностей еще больше. Тем не менее, слабое терагерцовое излучение, возникающее в процессе ПР, удается зарегистрировать при помощи сверхпроводящего болометра [21, 22], и до одновременной регистрации сигнальных оптических и холостых терагерцовых фотонов осталось, по-видимому, не так уж и много времени.

Однако на сегодняшний день существуют лишь теоретические работы, описывающие квантовые корреляционные параметры оптико-терагерцовых бифотонных состояний. Влияние тепловых флуктуаций и поглощения нелинейного кристалла в случае спонтанного ПР на величину корреляционной функции сигнального оптического и холостого терагерцового излучения исследуется в работах [23, 24] при помощи обобщенного закона Клышко–Киргофа. Тепловыми флуктуациями поля можно пренебречь, если нелинейный кристалл охлажден до единиц граду-

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

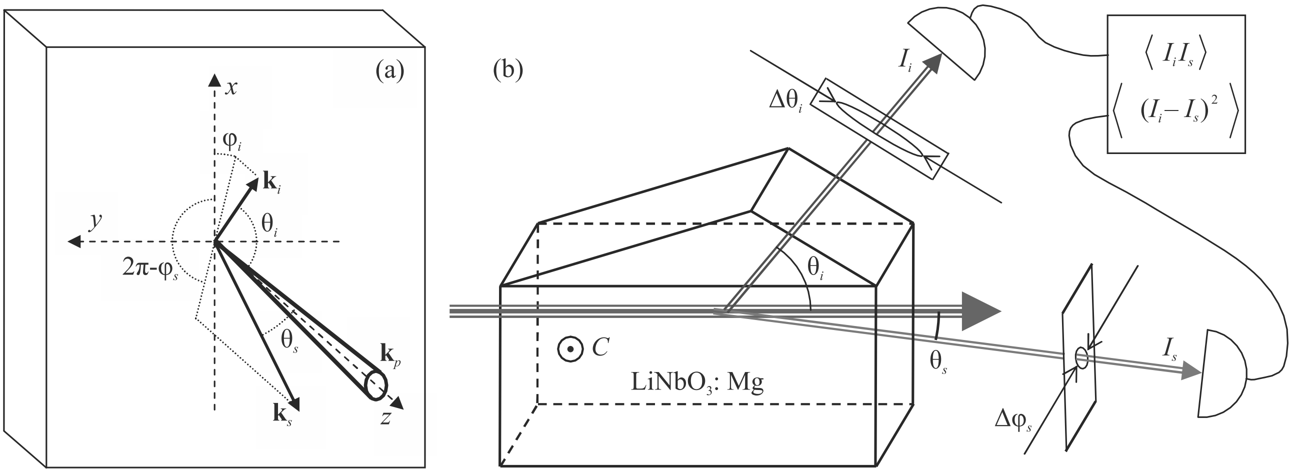

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Геометрия рассеяния: пучок накачки с волновым вектором $\mathbf{k}_p$ направлен вдоль оси z, направления волновых векторов сигнальной $\mathbf{k}_s$ и холостой $\mathbf{k}_i$ мод рассеянного излучения определяются полярными $\theta_{s,i}$ и азимутальными $\varphi_{s,i}$ углами; (b) – условная схема измерения корреляционных свойств интенсивностей сигнального I_s и холостого I_i излучения, прошедшего через диафрагмы с угловыми апертурами $\Delta\theta_{s,i}$ и $\Delta\varphi_{s,i}$

сов Кельвина, а поглощение становится несущественным, если частота холостого излучения существенно меньше нижней фононной ветви. В этих условиях оказалось возможным получить матрицу рассеяния, описывающую бифотонное оптико-терагерцовое поле при произвольных коэффициентах параметрического усиления [25].

В данной работе на основе метода, развитого в [25], будет исследовано, как модовая структура оптико-терагерцового излучения влияет на величины нормированной корреляционной функции интенсивностей и дисперсии разности фотонов в сопряженных модах, измеряемых в конкретных экспериментальных условиях.

Азимутальные собственные моды и матрица рассеяния. Рассмотрим бифотонное поле на частотах сигнального ω_s и холостого ω_i излучения, рождающееся при ПР в нелинейном кристалле под действием гауссова пучка накачки с частотой $\omega_p = \omega_s + \omega_i$. Геометрия рассеяния изображена на рис. 1а. В рамках подхода, описанного в [26], его можно описывать с помощью оператора нелинейного взаимодействия

$$\hat{G}_{nl} = \hbar\gamma \iint \frac{\chi^{(2)}_{\text{eff}}(\theta_s, \varphi_s, \theta_i, \varphi_i)}{\sqrt{\cos\theta_s \cos\theta_i}} \times e^{i\Delta k_z z - \frac{d^2(\mathbf{k}_{s\perp}+\mathbf{k}_{i\perp})^2}{4}} \hat{a}^+_s(z)\hat{a}^+_i(z) d\Omega_s d\Omega_i + \text{h.c.} \quad (1)$$

Здесь $\hat{a}^+_{s,i}$ – операторы рождения фотонов в различных сигнальных и холостых модах плоских волн рассеянного излучения с волновыми векторами $\mathbf{k}_{s,i}$, направление которых определяется полярными $\theta_{s,i}$ и азимутальными $\varphi_{s,i}$ углами, $d\Omega_{s,i}$ – элементы телесных углов, $\chi^{(2)}_{\text{eff}}$ – результат свертки тензора квадратичной восприимчивости с векторами поляризации накачки и рассеянных полей, косинусы в знаменателе связаны с тем, что длина пути излучения в кристалле зависит от полярного угла, d – ширина пучка накачки, $\Delta k_z = k_{pz} - k_{sz} - k_{iz}$ – продольная расстройка фазового синхронизма, для поперечных компонент волновых векторов выполняется строгое условие $\mathbf{k}_{s\perp} + \mathbf{k}_{i\perp} = \mathbf{k}_{p\perp}$, а коэффициент γ определяет эффективность параметрического взаимодействия и пропорционален амплитуде поля накачки. В этом случае эволюция операторов рождения фотонов в кристалле описывается уравнениями

$$\frac{\partial \hat{a}^+_{s,i}}{\partial z} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{a}^+_{s,i}, \hat{G}_{nl}\right]. \quad (2)$$

В работе [25] было показано, что в случае сильно невырожденного ПР, когда частота холостого излучения не превышает нескольких терагерц, оператор нелинейного взаимодействия можно диагонализовать в общем виде в пространстве азимутальных углов. Показатель экспоненты в (1) можно переписать в виде

$$i\Delta k_z - \frac{d^2(\mathbf{k}_{s\perp}+\mathbf{k}_{i\perp})^2}{4} \approx i\left(\Delta k_{z0} - \frac{\Delta k_\perp^2}{2k_p}\right) z - \frac{d^2 \Delta k_\perp^2}{4} - 2\tau\left(1 + \frac{2iz}{d^2 k_p}\right)\cos^2\left(\frac{\varphi_i - \varphi_s}{2}\right), \quad (3)$$

где $\Delta k_\perp = k_i \sin\theta_i - k_s \sin\theta_s$, $\Delta k_{z0} = k_p - (k_i \cos\theta_i + k_s \cos\theta_s)$, а параметр $\tau = d^2 k_i k_s \sin\theta_i \sin\theta_s / 2$. Максимум рассеяния наблюдается в направлениях, определяемых условием полного фазового синхронизма, при котором все три слагаемых в этом выражении обращаются в ноль. Обычно величина $2z/d^2k_p \ll 1$, а параметр τ по мере уменьшения частоты холостого терагерцового излучения быстро уменьшается, поэтому при достаточно низких частотах ω_i мнимой частью последнего слагаемого, зависящего от азимутальных углов, можно пренебречь. В этом случае оператор нелинейного взаимодействия принимает вид:

$$\hat{G}_{nl} \approx \hbar\gamma \int \Bigg\{ e^{i(\Delta k_{z0} - \Delta k_\perp^2/2k_p)z - d^2\Delta k_\perp^2/4} \times \\ \times \frac{\sin\theta_s \sin\theta_i}{\sqrt{\cos\theta_s\cos\theta_i}} d\theta_s d\theta_i \times \\ \times \Bigg[\int \chi^{(2)}_{\text{eff}}(\theta_s,\varphi_s,\theta_i,\varphi_i) e^{-\tau\{1+\cos(\varphi_i-\varphi_s)\}} \times \\ \times \hat{a}_i^+(z)\hat{a}_s^+(z) d\varphi_s d\varphi_i \Bigg] + \text{h.c.} \Bigg\}. \tag{4}$$

Часть выражения в квадратных скобках содержит все зависимости от углов $\varphi_{s,i}$ и при этом не зависит от z, поэтому его можно диагонализовать по азимутальным углам в общем виде.

В расчетах мы будем рассматривать, как и в работах [24, 25], ПР в eee-геометрии в кристалле ниобата лития толщиной $L = 1$ мм под действием пучка накачки шириной $d = 300$ мкм на длине волны $\lambda_p = 523.3$ нм. Если частота холостого излучения находится в диапазоне от 0.01 до 2 ТГц, то полярный угол синхронизма $\theta_i \approx 60^\circ$. При этом в [24] было показано, что параметр Федорова [27], дающий оценку числа мод Шмидта, для полярных углов практически равен единице. Это значит, что в пространстве полярных углов практически все рассеяние сосредоточено в единственной паре сопряженных мод, сконцентрированных вблизи направлений, соответствующих условию точного фазового синхронизма. При этом эффективная квадратичная восприимчивость имеет вид

$$\chi^{(2)}_{\text{eff}}(\theta_s,\varphi_s,\theta_i,\varphi_i) = \chi^{(2)}_0 \cos\theta_s\cos\theta_i \times \\ \times \sqrt{(1+\mathrm{tg}^2\,\theta_s\cos^2\varphi_s)(1+\mathrm{tg}^2\,\theta_i\cos^2\varphi_i)} \approx \\ \approx \frac{1}{2}\chi^{(2)}_0\sqrt{1+3\cos^2\varphi_i}. \tag{5}$$

Для удобства дальнейших расчетов ее можно приближенно аппроксимировать более простым выражением

$$\chi^{(2)}_{\text{eff}}(\varphi_i) \approx \frac{1}{2}\chi^{(2)}_0(1+\cos^2\varphi_i). \tag{6}$$

В результате, для исследования структуры азимутальных мод достаточно анализировать оператор нелинейного взаимодействия в виде

$$\hat{G}_{nl} \sim \int \chi^{(2)}_{\text{eff}}(\varphi_i) e^{-\tau\{1+\cos(\varphi_i-\varphi_s)\}} \times \\ \times \hat{a}_i^+(\varphi_i,z)\hat{a}_s^+(\varphi_s,z) d\varphi_s d\varphi_i + \text{h.c.} \tag{7}$$

В работе [25] было показано, что диагонализация этого выражения может быть проведена в два этапа. На первом мы переходим в базис мод Фурье $\hat{a}^+_{s,i}(\varphi_{s,i}) = (2\pi)^{-1/2}\sum\limits_n \hat{a}_n^{+(s,i)} e^{in\varphi_{s,i}}$. При этом оператор (7) принимает вид

$$\hat{G}_{nl} = \hbar\tilde{\gamma}\sum_{n,m} H_{n,m}\hat{a}_n^{+(i)}\hat{a}_{-m}^{+(s)} + \text{h.c.}, \tag{8}$$

где $\tilde{\gamma}$ – коэффициент параметрического взаимодействия, включающий в себя коэффициент γ, величину квадратичной восприимчивости $\chi^{(2)}_0$ и коэффициенты, связанные с полярными углами, а элементы матрицы H_{nm} зависят от угловой зависимости эффективной квадратичной восприимчивости и в нашем случае имеют вид

$$H_{nm} = (-1)^n e^{-\tau} I_m(\tau)\left\{\delta_{n,m} + \frac{1}{6}\delta_{n+2,m} + \frac{1}{6}\delta_{n-2,m}\right\}. \tag{9}$$

Здесь $I_m(\tau) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\pi e^{\tau\cos x}\cos(mx)dx$ – функции Инфельда. При любом значении τ величина $e^{-\tau}I_m(\tau)$ уменьшается с ростом m, что дает возможность на втором этапе ограничиться матрицей конечных размеров $|n|, |m| \le n_{\max}$ и диагонализовать ее численно, представив в виде

$$H_{nm} = \sum_j W^{-1}_{nj} R_j V_{jm}, \tag{10}$$

где V и W – ортогональные матрицы, а $\{R_j\}$ – собственные значения матрицы H_{nm}. В результате оператор нелинейного взаимодействия принимает диагональный вид

$$\hat{G}_{nl} = \hbar\tilde{\gamma}\sum_j R_j \hat{b}_j^+(z)\hat{c}_j^+(z) + \text{h.c.}, \tag{11}$$

где $\hat{b}_j^+(z) = \int\limits_{-\pi}^{\pi} U(\varphi_i)\hat{a}_i^+(z,\varphi_i)d\varphi_i$ и $\hat{c}_j^+(z) = \int\limits_{-\pi}^{\pi}\tilde{U}(\varphi_s)\hat{a}_s^+(z,\varphi_s)d\varphi_s$ – операторы рождения фотонов в собственных азимутальных модах, связанных с исходными модами плоских волн унитарными преобразованиями $U_j(\varphi_j) = (2\pi)^{-1/2}\sum\limits_n e^{in\varphi_i}W_{jn}$,

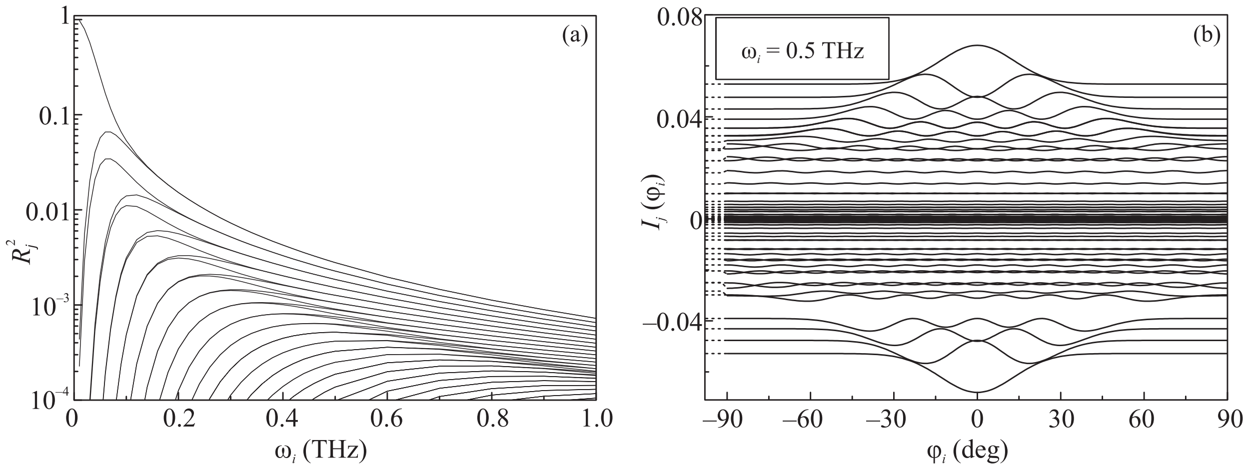

Рис. 2. (a) – Зависимость квадратов собственных значений R_j^2 от частоты терагерцового излучения ω_i; (b) – угловая структура азимутальных собственных мод холостого излучения при частоте $\omega_i = 0.5$ ТГц (для наглядности каждая мода показана относительно уровня ее собственного значения R_j: $I_j(\varphi_i) = R_j(1+2\pi|R_j||U_j(\varphi_i)|^2)$, сам уровень показан пунктиром слева)

$\tilde{U}_j(\varphi_s) = (2\pi)^{-1/2}\sum_m e^{im\varphi_s}V_{jm}$. Решение уравнений эволюции для операторов $\hat{b}_j^+$ и $\hat{c}_j^+$ имеет вид преобразований Боголюбова

$$\begin{aligned}\hat{b}_j^+(L) &= \hat{b}_j^+(0)\cosh g_j - i\hat{c}_j(0)\sinh g_j,\\ \hat{c}_j^+(L) &= \hat{c}_j^+(0)\cosh g_j - i\hat{b}_j(0)\sinh g_j,\end{aligned} \tag{12}$$

где $g_j = \tilde{\gamma}LR_j$. Это позволяет записать матрицу рассеяния в исходных модах, которая описывает квантовые корреляционные свойства оптико-терагерцового бифотонного излучения при произвольных значениях коэффициента параметрического усиления:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^+(\varphi_i, L) &= \sum_j U_j(\varphi_i)\{\hat{b}_i^+(0)\cosh g_j - i\hat{c}_j(0)\sinh g_j\},\\ \hat{a}_s^+(\varphi_s, L) &= \sum_j \tilde{U}_j^*(\varphi_s)\{\hat{c}_i^+(0)\cosh g_j - i\hat{b}_j(0)\sinh g_j\}.\end{aligned} \tag{13}$$

Корреляционная функция и фактор подавления шума. Рассмотрим возможность измерения корреляционных свойств оптико-терагерцового поля в схеме, изображенной на рис. 1b. Интенсивности холостого и сигнального излучения, прошедшего через диафрагмы с угловыми апертурами $\Delta\theta_{s,i}$ и $\Delta\varphi_{s,i}$, регистрируются соответствующими детекторами, фототоки которых далее сводятся на обрабатывающей аппаратуре. Предполагается, что апертуры полярных углов выбраны в соответствии с шириной фазового синхронизма. Например, на частоте $\omega_i = 1$ ТГц, согласно [24], $\Delta\theta_s \sim 0.04°$ и $\Delta\theta_i \sim 4°$. Для простоты мы будем везде использовать величины углов внутри кристалла (при необходимости их можно пересчитать в углы после выхода из кристалла).

Используя матрицу рассеяния (13), можно получить зависимость интенсивности рассеянного излучения от азимутального угла:

$$\begin{aligned}I_i(\varphi_i) \sim \langle N_i(\varphi_i)\rangle &= \langle \text{vac}|\hat{a}_i^+(\varphi_i, L)\hat{a}_i(\varphi_i, L)|\text{vac}\rangle = \\ &= \sum_j |U_j(\varphi_i)|^2 \sinh^2 g_j,\end{aligned} \tag{14}$$

где $\langle N_i(\varphi_i)\rangle$ – среднее число фотонов холостого излучения, рассеянного в данном направлении. Для сигнального излучения можно записать аналогичное выражение. Видно, что интенсивность состоит из суммы интенсивностей азимутальных собственных мод $|U_j(\varphi_i)|^2$ с весами $\sinh^2 g_j$. В случае спонтанного ПР $\tilde{\gamma}L \ll 1$ веса определяются квадратами собственных значений R_j^2. На рисунке 2a показана зависимость величин R_j^2 от частоты холостого излучения. При малых частотах практически все излучение сосредоточено в единственной азимутальной моде, однако с ростом частоты терагерцового излучения различие между собственными значениями уменьшается, и излучение оказывается распределено между большим количеством мод. На рисунке 2b показана структура азимутальных собственных мод холостого излучения при частоте терагерцового излучения $\omega_i = 0.5$ ТГц. Структура азимутальных собственных мод сигнального излучения, несмотря на различие между унитарными операторами $U_j(\varphi_i)$ и $\tilde{U}_j(\varphi_s)$, выглядит практически так же. Видно, что азимутальные собственные моды оказываются перемешаны, и детекторы неизбежно будут регистриро-

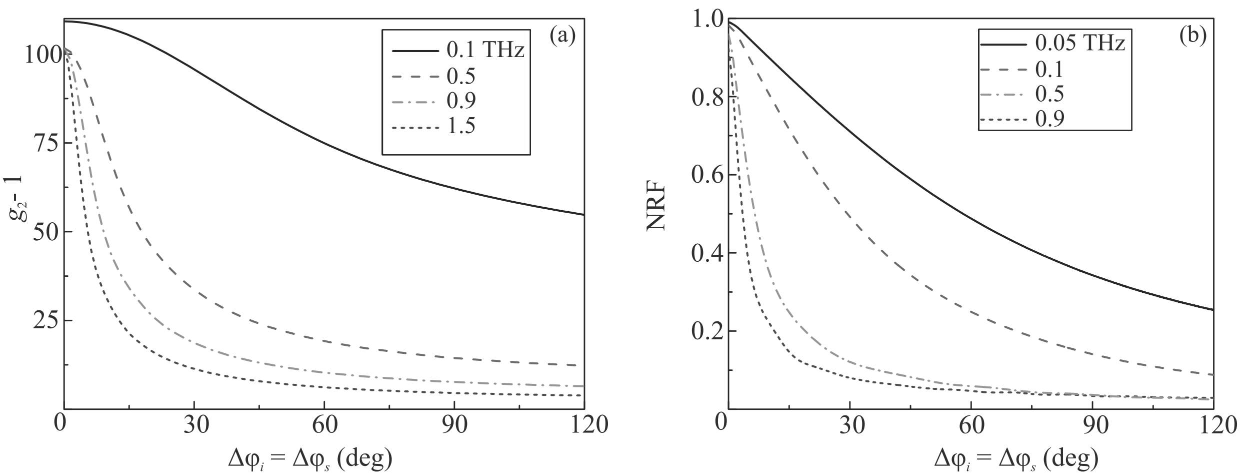

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость от величины апертур детекторов $\Delta\varphi_i = \Delta\varphi_s$ в случае спонтанного ПР: (a) – превышения g_2 над единицей и (b) – величины NRF при различных значениях частоты холостого терагерцового излучения

вать многомодовое излучение, что усложняет возможность регистрации корреляционных свойств.

Существует два основных способа измерения неклассических корреляций в бифотонном поле [28]: нормированная корреляционная функция интенсивностей холостого и сигнального излучения и дисперсия разности чисел фотонов в сопряженных модах (NRF, фактор подавления шума). Нормированная корреляционная функция

$$g_2 = \frac{\langle I_i I_s\rangle}{\langle I_i\rangle\langle I_s\rangle}, \tag{15}$$

которая в случае независимых полей равна единице, может достигать больших значений для спонтанного ПР, но падает обратно пропорционально числу регистрируемых мод, а в случае вынужденного ПР даже в одномодовом случае спадает до уровня теплового излучения $g_2 = 2$. В то же время фактор подавления шума, также равный единице в случае независимых полей, в случае идеальной регистрации сопряженных мод бифотонного поля стремится к нулю и практически не зависит от числа мод и коэффициента параметрического усиления, однако весьма чувствителен к потерям части излучения, принадлежащего детектируемым модам. Как видно из рис. 2b, вклад различных мод в детектируемое излучение будет зависеть от апертур диафрагм $\Delta\varphi_{s,i}$, поэтому и g_2, и NRF также будут зависеть от них.

Пусть детекторы регистрируют интенсивности холостого и сигнального излучения

$$\langle I_i\rangle = \int\limits_{-\Delta\varphi_i/2}^{\Delta\varphi_i/2} I_i(\varphi_i)d\varphi_i \sim \langle N_i\rangle =$$

$$= \int\limits_{-\Delta\varphi_i/2}^{\Delta\varphi_i/2} \sum_j |U_j(\varphi_i)|^2 \sinh^2 g_j d\varphi_i, \tag{16}$$

$$\langle I_s\rangle = \int\limits_{\pi-\Delta\varphi_s/2}^{\pi+\Delta\varphi_s/2} I_s(\varphi_s)d\varphi_s \sim \langle N_s\rangle =$$

$$= \int\limits_{\pi-\Delta\varphi_s/2}^{\pi+\Delta\varphi_s/2} \sum_j |\tilde{U}_j(\varphi_s)|^2 \sinh^2 g_j d\varphi_s,$$

Их корреляционную функцию можно найти также с помощью матрицы рассеяния (13):

$$\langle I_i I_s\rangle \sim \langle N_i N_s\rangle = \iint\limits_{\Delta\varphi_{i,s}} \langle \mathrm{vac}|\hat{a}_i^+(\varphi_i, L)\hat{a}_i(\varphi_i, L) \times$$

$$\times\, \hat{a}_s^+(\varphi_s, L)\hat{a}_s(\varphi_s, L)|\mathrm{vac}\rangle d\varphi_i d\varphi_s = \langle N_i\rangle\langle N_s\rangle +$$

$$+ \iint\limits_{\Delta\varphi_{i,s}} \left|\sum_j U_j(\varphi_i)\tilde{U}_j^*(\varphi_s)\sinh g_j \cosh g_j\right|^2 d\varphi_i d\varphi_s. \tag{17}$$

Второй член в этом выражении отвечает за отличие g_2 от единицы. На рисунке 3a показана рассчитанная по этой формуле зависимость превышения g_2 над единицей от величины апертур детекторов $\Delta\varphi_i = \Delta\varphi_s$ для случая спонтанного ПР. Известно [28], что в этом случае величина корреляционной функции определяется выражением $g_2 = 1 + \frac{1}{mN}$, где $N \ll 1$ – среднее число фотонов в моде, которое в нашем случае порядка $N \sim (\tilde{\gamma} L R_j)^2$, а m – число регистрируемых мод. Вообще говоря, значение g_2 в

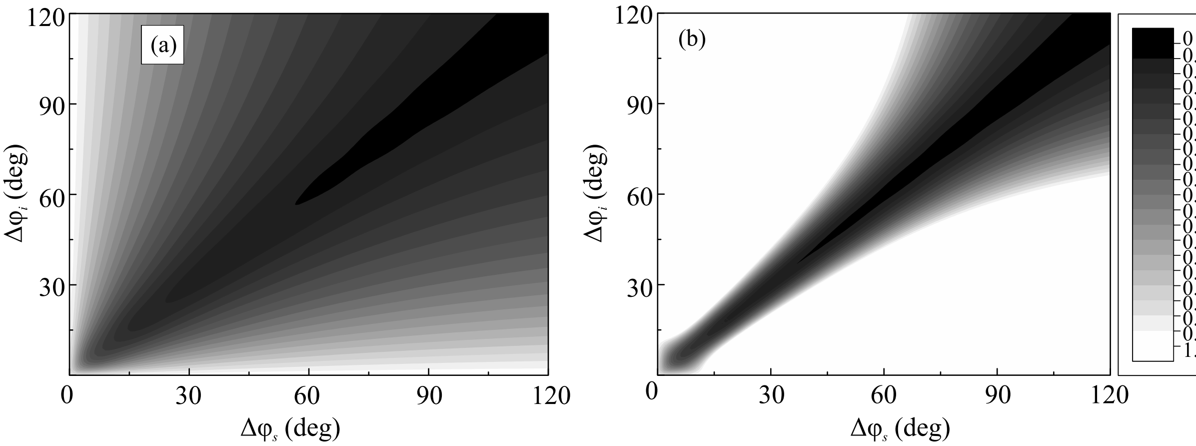

Рис. 4. Двумерные зависимости величины NRF от угловых апертур детекторов при значении частоты холостого излучения $\omega_i = 0.9$ ТГц в случае: (a) – спонтанного ПР $\tilde{\gamma}L \ll 1$ и (b) – вынужденного ПР при $\tilde{\gamma}LR_{\max} = 2$

максимуме может зависеть от частоты терагерцового излучения, так как параметр $\gamma \sim \sqrt{\omega_i}$, а значения R_j с ростом частоты уменьшаются. Для наглядности на рис. 3а значения $\tilde{\gamma}$ выбирались такими, чтоб в максимуме величина g_2 была порядка сотни. Видно, что чем выше частота терагерцового излучения, тем быстрее корреляционная функция спадает с ростом апертур детекторов. Это связано с тем, что число эффективных мод растет с ростом частоты, а чем больше апертуры детекторов – тем больше мод дают вклад в зарегистрированное излучение. Таким образом, для регистрации высоких значений g_2 следует по возможности использовать детекторы с малыми апертурами по азимутальным углам.

Как и следовало ожидать, значение g_2 в максимуме при больших значениях коэффициента параметрического взаимодействия $\tilde{\gamma}L > 1$ спадает до двух. В этом случае более показательным является фактор подавления шума, определяемый как

$$\mathrm{NRF} = \frac{\langle \Delta(N_i - N_s)^2 \rangle}{\langle N_i \rangle + \langle N_s \rangle}. \tag{18}$$

Так как в бифотонном поле в сопряженных модах одинаковое число фотонов, то в случае идеальной их регистрации он равен нулю. Однако если при детектировании происходит потеря части фотонов – как из-за неполной регистрации мод, так и из-за неидеальности детекторов, дисперсия разности фотонов увеличивается. Особенно быстро она возрастает, если детекторы регистрируют разное среднее число фотонов $\langle N_i \rangle \neq \langle N_s \rangle$. В этом случае в работах, посвященных использованию NRF для определения квантовой эффективности детекторов [29, 30], предлагалось в выражении для фактора подавления шума модифицировать интенсивность одного из каналов коэффициентом $\alpha = \langle N_i \rangle / \langle N_s \rangle$. В наших расчетах мы будем использовать более симметричное выражение для модифицированного фактора подавления шума

$$\mathrm{NRF} = \frac{\langle (\beta^{-1} N_i - \beta N_s)^2 \rangle}{\langle N_i \rangle + \langle N_s \rangle} =$$

$$= 1 + \frac{\beta^{-2} \langle : \delta N_i^2 : \rangle + \beta^2 \langle : \delta N_s^2 : \rangle - 2 \langle \delta N_i \delta N_s \rangle}{\langle N_i \rangle + \langle N_s \rangle}, \tag{19}$$

где $\beta = \sqrt{\langle N_i \rangle / \langle N_s \rangle}$, $\delta N_{i,s} = N_{i,s} - \langle N_{i,s} \rangle$, среднее $\langle \delta N_i \delta N_s \rangle$ уже найдено в (17), а нормально упорядоченные средние, найденные с помощью матрицы рассеяния (13), имеют вид:

$$\langle : \delta N_i^2 : \rangle = \langle N_i^2 \rangle - \langle N_i \rangle^2 - \langle N_i \rangle =$$

$$= \iint\limits_{\Delta\varphi_i} \left| \sum_j U_j(\varphi_1) U_j^*(\varphi_2) \operatorname{sh}^2 g_j \right|^2 d\varphi_1 d\varphi_2,$$

$$\langle : \delta N_s^2 : \rangle = \langle N_s^2 \rangle - \langle N_s \rangle^2 - \langle N_s \rangle =$$

$$= \iint\limits_{\Delta\varphi_s} \left| \sum_j \tilde{U}_j(\varphi_1) \tilde{U}_j^*(\varphi_2) \operatorname{sh}^2 g_j \right|^2 d\varphi_1 d\varphi_2. \tag{20}$$

На рисунке 3b показана зависимость NRF, рассчитанного по формуле (19), от величины апертур детекторов $\Delta\varphi_i = \Delta\varphi_s$. По мере роста апертур детектируется все большая часть азимутальных собственных мод, что объясняет спадание величины NRF. При низких частотах терагерцового холостого излучения угловая ширина отдельных мод больше, что объясняет более медленное спадание фактора подавления шума. Эти зависимости практически не зависят от величины коэффициента параметрического усиления $\tilde{\gamma}L$. Отличие спонтанного и вынужденного

ПР проявляется, если апертуры сигнального и холостого детекторов различны. На рисунке 4 показаны двумерные графики зависимости величины NRF от угловых апертур детекторов для случая спонтанного ПР $\tilde{\gamma} \ll 1$ и вынужденного ПР при $\tilde{\gamma} L R_{\max} = 2$ для частоты терагерцового излучения $\omega_i = 0.9$ ТГц. Видно, что в вынужденном режиме NRF намного более чувствителен к дисбалансу регистрируемых сопряженных мод.

Таким образом, в случае сильно-невырожденного ПР, когда частота холостого излучения лежит в терагерцовом диапазоне, а его длина волны сравнима с размерами рассеивающего объема, азимутальные моды рассеянного излучения имеют большие угловые ширины и накладываются друг на друга (рис. 2b). Это усложняет детектирование фотонов сигнального и холостого излучения в сопряженных модах и измерение их неклассических корреляционных свойств. С другой стороны, в этом случае можно приближенно диагонализовать оператор нелинейного взаимодействия в пространстве азимутальных углов, что позволило получить матрицу рассеяния (13) при произвольных коэффициентах параметрического взаимодействия. С помощью полученной матрицы рассеяния в работе были рассчитаны зависимости нормированной корреляционной функции g_2 и фактора подавления шума в зависимости от угловых апертур детекторов сигнального и холостого излучения. Полученные зависимости говорят о том, что для регистрации высоких значений g_2 желательно уменьшать апертуры обоих детекторов по азимутальным углам, насколько это возможно. В то же время, для наблюдения низких значений NRF апертуры обоих детекторов по азимутальным углам должны быть по возможности большими, и при этом одинаковыми.

Работа выполнена при поддержке гранта Российский фонда фундаментальных исследований # 20-02-00621A.

1. D. Bouwmeester, A. Ekert, and A. Zeilinger, *Quantum Teleportation, and Quantum Computation*, Springer, N.Y. (2000).
2. K. A. Kuznetsov, H. C. Guo, G. K. Kitaeva, A. A. Ezhov, D. A. Muzychenko, A. N. Penin, and S. H. Tang, Appl. Phys. B **83**, 273 (2006).
3. Д. Н. Клышко, А. Н. Пенин, УФН **152**, 653 (1987).
4. L. Qi, F. Just, G. Leuchs, and M. V. Chekhova, Opt. Express **24**, 26444 (2016).
5. D. A. Kalashnikov, A. V. Paterova, S. P. Kulik, and L. A. Krivitsky, Nat. Photonics **10**, 98 (2016).
6. S. K. Lee, T. H. Yoon, and M. Cho, Sci. Rep. **7**, 6558 (2017).
7. A. Paterova, S. Lung, D. A. Kalashnikov, and L. A. Krivitsky, Sci. Rep. **7**, 42608 (2017).
8. I. Kviatkovsky, H. M. Chrzanowski, E. G. Avery, H. Bartolomaeus, and S. Ramelow, Sci. Adv. **6**, eabd0264 (2020).
9. P.-A. Moreau, E. Toninelli, T. Gregory, and M. J. Padgett, Laser Photonics Rev. **12**, 1700143 (2018).
10. A.-X. Zhang, Y.-H. He, L.-A. Wu, L.-M. Chen, and B.-B. Wang, Optica **5**, 374 (2018).
11. A. Schori, D. Borodin, K. Tamasaku, and S. Shwartz, Phys. Rev. A **97**, 063804 (2018).
12. K. A. Kuznetsov, S. P. Kovalev, G. K. Kitaeva, T. D. Wang, Y. Y. Lin, Y. C. Huang, I. I. Naumova, and A. N. Penin, Appl. Phys. B **101**, 811 (2010).
13. K. A. Kuznetsov, G. Kh. Kitaeva, S. P. Kovalev, S. A. Germansky, A. M. Buryakov, A. N. Tuchak, and A. N. Penin, Appl. Phys. B **122**, 223 (2016).
14. B. Haase, M. Kutas, F. Riexinger, P. Bickert, A. Keil, D. Molter, M. Bortz, and G. von Freymann, Opt. Express **27**, 7458 (2019).
15. M. Kutas, B. Haase, P. Bickert, F. Riexinger, D. Molter, and G. von Freymann, Sci. Adv. **6**, eaaz8065 (2020).
16. K. A. Kuznetsov, E. I. Malkova, R. V. Zakharov, O. V. Tikhonova, and G. K. Kitaeva, Phys. Rev. A **101**, 053843 (2020).
17. G. K. Kitaeva, S. P. Kovalev, A. N. Penin, A. N. Tuchak, and P. V. Yakunin, J. Infrared Millim., Terahertz Waves **32**, 1144 (2011).
18. G. K. Kitaeva, P. V. Yakunin, V. V. Kornienko, and A. N. Penin, Appl. Phys. B **116**, 929 (2014).
19. M. Mancinelli, A. Trenti, S. Piccione, G. Fontana, J. S. Dam, P. Tidemand-Lichtenberg, C. Pedersen, and L. Pavesi, Nat. Commun. **8**, 15184 (2017).
20. S. Prabhakar, T. Shields, A. C. Dada, M. Ebrahim, G. G. Taylor, D. Morozov, K. Erotokritou, S. Miki, M. Yabuno, H. Terai, C. Gawith, M. Kues, L. Caspani, R. H. Hadfield, and M. Clerici, Sci. Adv. **6**, eaay5195 (2020).
21. G. K. Kitaeva, V. V. Kornienko, K. A. Kuznetsov, I. V. Pentin, K. V. Smirnov, and Yu. B. Vakhtominet, Opt. Lett. **44**, 1198 (2019).
22. В. Д. Султанов, К. А. Кузнецов, А. А. Леонтьев, Г. Х. Китаева, Письма в ЖЭТФ **112**, 297 (2020).
23. G. K. Kitaeva, V. V. Kornienko, A. A. Leontyev, and A. V. Shepelev, Phys. Rev. A **98**, 063844 (2018).
24. G. K. Kitaeva, A. A. Leontyev, and P. A. Prudkovskii, Phys. Rev. A **101**, 053810 (2020).
25. L. S. Dvernik and P. A. Prudkovskii, Appl. Phys. B **127**, 85 (2021).
26. B. Huttner, S. Serulnik, and Y. Ben-Aryeh, Phys. Rev. A **42**, 5594 (1990).

27. Yu. M. Mikhailova, P. A. Volkov, and M. V. Fedorov, Phys. Rev. A **78**, 062327 (2008).
28. Т. Ш. Исхаков, Е. Д. Лопаева, А. Н. Пенин, Г. О. Рытиков, М. В. Чехова, Письма в ЖЭТФ **88**, 757 (2008).
29. A. Meda, I. Ruo-Berchera, I. P. Degiovanni, G. Brida, M. L. Rastello, and M. Genoves, Appl. Phys. Lett. **105**, 101113 (2014).
30. A. Avella, I. Ruo-Berchera, I. P. Degiovanni, G. Brida, and M. Genoves, Opt. Lett. **41**, 1841 (2016).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 212 – 220

Нерезонансные эффекты в двухфотонной спектроскопии атома водорода: приложение к расчету зарядового радиуса протона

А. А. Аникин[1), Т. А. Залялютдинов, Д. А. Соловьев

Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 12 июля 2021 г.
После переработки 17 июля 2021 г.
Принята к публикации 18 июля 2021 г.

Последнее десятилетие в современной литературе остро стоит вопрос о расхождении значений радиуса протона, получаемых путем измерения частот переходов в электронном (H) и мюонном (μH) атомах водорода, направляя теоретические и экспериментальные усилия на проверку и поиск эффектов устраняющих имеющееся расхождение в 4σ (стандартное отклонение). Совсем недавно измерения $2s-4p$ перехода и Лэмбовского сдвига в электронном атоме водорода приблизили "загадку радиуса протона" к своему разрешению. Среднеквадратичное значение радиуса протона (r_p), рассчитанное на основе этих экспериментов имеет значение 0.8335(95) фм, что согласуется со значением 0.84087(39) фм, полученным на основе эксперимента с мюонным водородом, в пределах указанных погрешностей. Такое согласование результатов было достигнуто в результате учета интерференционных эффектов, возникающих в процессах однофотонного рассеяния на атоме водорода, в то время как эксперименты на мюонном водороде к ним нечувствительны. Однако вычисление зарядового радиуса протона не может быть отнесено только к однофотонным переходам и должно учитывать измеренные частоты, соответствующие двухфотонным переходам. В данной работе показано, что интерференционные эффекты в двухфотонных переходах $2s-nd$ в атоме водорода могут вносить значительный вклад в определение зарядового радиуса протона и постоянной Ридберга.

DOI: 10.31857/S1234567821160035

Проблема, известная в современной научной литературе как "загадка радиуса протона", возникла после выхода работы [1], в которой было найдено среднеквадратичное значение радиуса протона (r_p), равное $r_p = 0.84184(67)$ фм. Данное значение, полученное из эксперимента по измерению лэмбовского сдвига в мюонном водороде, расходится более, чем на четыре стандартных отклонения от значения, рекомендованного CODATA [2, 3], $r_p = 0.8751(61)$ фм, которое, в свою очередь, является усредненным значением результатов спектроскопических измерений различных (одно- и двух-фотонных) переходов в атоме водорода и экспериментов по упругому электрон-протонному ($e-p$) рассеянию [4]. Столь большое расхождение между результатами экспериментов по рассеянию и спектроскопических экспериментов с обычным водородом с данными экспериментов с мюонным водородом сохранялось до недавнего времени, пока не были опубликованы результаты работы по измерению однофотонного перехода $2s-4p$ в атоме водорода [5]. Результаты [5] послужили отправной точкой для последующих экспериментов по измерению Лэмбовского сдвига [6] и электрон-протонного рассеяния [7], приведших к значениям зарядового радиуса, совпадающим с [5]. Несмотря на то, что значения r_p, рассчитанные с использованием частоты однофотонного перехода $2s-4p$ и Лэмбовского сдвига в атоме водорода, находятся в полном согласии друг с другом, имеющееся расхождение в 3.3 стандартных отклонений с данными эксперимента с мюонным водородом остается все еще открытым вопросом.

Вычисление зарядового радиуса протона включает в себя расчет и постоянной Ридберга для атома водорода, что выражается в зависимости энергии связанного состояния от этих параметров

$$E_{nlj} = hcR_\infty \left(-\frac{1}{n^2} + f_{nlj}\left(\alpha, \frac{m_e}{m_p}, r_p, \dots\right)\right), \quad (1)$$

где n, l и j представляют собой главное квантовое число, орбитальный момент и квантовое число полного углового момента соответственно. $R_\infty = m_e\alpha^2 c/2h$ – постоянная Ридберга (c – скорость света в вакууме, h – постоянная Планка и α – постоянная тонкой структуры), m_e и m_p – массы электрона и протона. Функция f_{nlj} включает в себя все возможные поправки, возникающие в рамках релятивистской КЭД теории, см. [2, 3].

1)e-mail: alexey.anikin.spbu@gmail.com

Чтобы определить постоянную Ридберга и радиус протона, теоретические результаты сравниваются с соответствующими экспериментальными значениями частот переходов: $E_{nlj} - E_{n'l'j'} = \Delta E^{\rm exp}_{nlj-n'l'j'}$. Так, полагая, что имеются только две неизвестных константы, r_p и R_∞, нужно составить систему из двух уравнений, соответствующих двум независимым переходам. Как правило, один из этих переходов соответствует наиболее точно измеренному переходу в атоме водорода: $1s-2s$ [8] – двухфотонный переход.

Значения $r_p = 0.8335(95)$ фм и $R_\infty = 10973731.568076(96)\,\text{м}^{-1}$, полученные в [5], были определены с учетом эффекта квантовой интерференции, возникающего за счет нерезонансных вкладов для двух интерферирующих переходов между тонко расщепленными уровнями атома. Описание нерезонансных эффектов в процессах рассеяния фотонов на атомах впервые было рассмотрено в рамках квантовоэлектродинамической (КЭД) теории Ф. Лоу в 1952 г., см.[9], а важность нерезонансных поправок в измерениях Лэмбовского сдвига и процессах радиационного захвата электрона в многозарядных водородоподобных ионах была продемонстрирована в работах [10, 11]. Несколько позже нерезонансные (НР) эффекты в измерениях частот переходов детально изучались и в атоме водорода [12–16]. Наиболее значимая НР поправка за счет квантовой интерференции тонких подуровней $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ была исследована в работе [17] для перехода $1s - 2p$. "Усиление" относительно других НР эффектов в этом случае происходит за счет малого значения тонкого расщепления уровней $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$, входящего в знаменатель соответствующей поправки. НР поправки такого типа [14, 17] стали предметом для дальнейших исследований и в других атомных системах [18–24]. Главная особенность эффекта квантовой интерференции заключается в зависимости его величины от типа эксперимента (его геометрии, в частности, [25, 26]). Так, в работе [5] путем использования асимметричной модели формы линии (*Fano-Voigt line profile*), учитывающей эффекты, связанные с геометрией эксперимента, удалось компенсировать вклад квантовой интерференции. Это, в свою очередь, позволило более аккуратно определить частоту $2s - 4p$ перехода. Однако, как было показано в работе [26], условия эксперимента типа [5] могут быть нарушены. Например, если конечное состояние системы фиксировано (т.е. в случае, когда регистрируются только фотоны на одной конкретной частоте), то угловой зависимости не будет и, следовательно, извлекаемая из профиля рассеяния частота будет сдвинута на величину нерезонансной поправки для любой геометрии. Таким образом, нерезонансные эффекты и квантовая интерференция как их часть должны рассматриваться для каждого типа эксперимента отдельно, требуя аккуратного теоретического описания.

Стоит отметить, что поиск эффектов, устраняющих расхождение в значениях радиуса протона, побудил интерес к экспериментальной верификации квантовой интерференции в мюонном водороде [27, 28]. Измерение частоты лэмбовского сдвига с учетом последней показало, что эксперименты с мюонным водородом нечувствительны к этому эффекту [24] и оставляют значение зарядового радиуса протона практически неизменным, $r_p = 0.84087(39)$ фм. Отличие последнего от значения [1] происходит в основном за счет эффекта смешивания $2^3p_{3/2}$ и $2^3p_{1/2}$ уровней (здесь и ниже мы используем следующее обозначение для атомного терма $n^{2F+1}L_J$, n – главное квантовое число, L – орбитальный угловой момент, J – полный угловой момент с учетом спина электрона S, F – полный угловой момент с учетом спина ядра I), см. [29–31]. В частности, для того чтобы избежать нерезонансных эффектов, связанных с квантовой интерференцией, в экспериментах [27, 28] были выбраны два перехода $2^1s_{1/2} \to 2^3p_{3/2}$ (синглетная линия) и $2^3s_{1/2} \to 2^5p_{3/2}$ (триплетная линия) с частотами ν_s и ν_t соответственно. Учитывая сверхтонкое расщепление, можно составить следующую систему уравнений [28]

$$h\nu_s = E_L + \Delta_{\rm fs} + \frac{3}{4}\Delta^{2S_{1/2}}_{\rm hfs} - \frac{5}{8}\Delta^{2P_{3/2}}_{\rm hfs}, \qquad (2)$$
$$h\nu_t = E_L + \Delta_{\rm fs} - \frac{1}{4}\Delta^{2S_{1/2}}_{\rm hfs} + \frac{3}{8}\Delta^{2P_{3/2}}_{\rm hfs}.$$

Зарядовый радиус протона вычисляется путем сравнения теоретического значения Лэмбовского сдвига $E_L = 206.0668 - 5.2275 r_p^2$ мэВ и сверхтонкого расщепления $2s$ уровня $22.9843 - 0.1621 r_Z$ мэВ (r_Z – радиус Земача (*Zemach radius*) для протона) с измеренными в эксперименте частотами $\nu_s = 54611.16(1.05)$ ГГц и $\nu_t = 49881.35(65)$ ГГц [27, 28]. Затем, используя теоретически рассчитанные значения для тонкого расщепления $\Delta_{\rm fs} = 8.352082$ мэВ и сверхтонкого расщепления уровня $2p_{3/2}$, $\Delta^{2P_{3/2}}_{\rm hfs} = 3.392588$ мэВ и учитывая эффект смешивания $\delta = 0.14456$ мэВ [30, 31], согласно [27, 28] (т.е. включая δ только в выражение для синглетной линии, (2)), можно получить тот же результат: $r_p = 0.84087$ фм и $r_Z = 1.082$ фм. Здесь необходимо подчеркнуть, что вставка δ в обе части уравнений (2) поправит значение радиуса [1] к новому водородному [5] гораздо сильнее, давая отличное совпадение. Однако в работе [32] был проведен более детальный анализ и показано, что эффект смешивания должен учитываться именно только для синглетной линии, оставляя $r_p = 0.84087$ фм “стабильным”.

Как было отмечено выше, определение радиуса протона с помощью спектроскопических измерений требует детального анализа квантово-интерференционных эффектов. Для синглетного перехода $2^1s_{1/2} \to 2^3p_{3/2}$ нет интерференции между переходами на уровни $2^3p_{3/2}$ и $2^3p_{1/2}$, в то время как для триплетного перехода $2^3s_{1/2} \to 2^5p_{3/2}$ возникает интерференция между переходами на три уровня $2^1p_{1/2}$, $2^3p_{1/2}$, и $2^3p_{3/2}$. В работе [24] было показано, что эффект квантовой интерференции не играет значительной роли при измерении частот ν_s и ν_t в мюонном водороде. Используя результаты, полученные в [26], можно найти максимальные значения НР поправок $\delta^s_{\rm NR} = -7.40 \times 10^7$ Гц (или -3.06×10^{-4} мэВ) и $\delta^t_{\rm NR} = -5.26 \times 10^7$ Гц (или -2.18×10^{-4} мэВ) для синглетного и триплетного переходов соответственно. Подстановка соответствующих значений в левую часть выражения (2) подтверждает вывод о незначительности НР поправок в данном случае.

До сих пор мы касались вопроса о вкладе нерезонансных эффектов для процесса однофотонного рассеяния. Однако для независимой верификации значений зарядового радиуса необходимо также измерение большего набора различных переходов, в частности, методами двухфотонной спектроскопии [14, 17]. Первые попытки рассчитать НР эффекты для таких процессов были сделаны в [14, 17], где было установлено, что соответствующие поправки для перехода $1s - 2s$ пренебрежимо малы в сравнении с уровнем точности экспериментов. Более аккуратный теоретический анализ, усложненный наличием внешнего электрического поля, действующего на атом с задержкой по времени, был также представлен в работах [15, 16, 33]. Кроме того, в работе [15] были найдены НР поправки, учитывающие сверхтонкое расщепление для спектральной линии Лайман-α, равные 0.17 МГц, в то время как погрешность соответствующих измерений частот составляет около 6 МГц. Наконец, совсем недавно был проведен теоретический анализ корреляционных эффектов, зависящих от углов между налетающими и испущенным фотонами, для экспериментов, где возбуждение происходит с поглощением двух фотонов и фиксируется процесс девозбуждения, см. [34].

Важно отметить, что на данный момент существует два различных типа экспериментов для измерений $2s - ns/nd$ переходов, основанных на методах двухфотонной спектроскопии. К первому из них относятся эксперименты, в которых возбуждение $2s - ns/nd$ детектируется по сигналу последующей флуоресценции из ns/nd состояния в нижележащие (т.е. по распаду, например, в $2p$ состояние) [35]. В недавней работе [34] были вычислены НР поправки и их угловые корреляции именно к этому типу экспериментов. Ко второму типу можно отнести эксперименты, описанные в работах [36–39], где акт двухфотонного возбуждения регистрировался как уменьшение числа атомов в атомарном пучке, находящихся в метастабильном $2s$ состоянии. Именно на них мы их и сосредоточим наше внимание в дальнейшем.

Теоретическое описание такого рода экспериментов [36–39] может быть отнесено к процессам многофотонного рассеяния на атоме. Измерение частоты перехода $2s-nd$ (n – главное квантовое число, равное 4, 6, 8 или 12) соответствует наблюдению двухфотонного профиля поглощения и нахождению положения его максимума. Рассматривая концентрацию атомов в метастабильном состоянии в зависимости от частоты налетающего излучения как индикатор того, что возбуждение произошло, достаточно рассмотреть только сам процесс двухфотонного возбуждения и не учитывать последующий процесс излучения, в отличие от метода, где регистрируется сигнал флуоресценции, см. [34]. Такой теоретический подход был использован в работе [39] (см. раздел 3).

После стандартных вычислений в рамках формализма S-матрицы и метода контура линии [40] амплитуда двухфотонного поглощения может быть получена в следующей форме:

$$U^{\rm abs}_{ai} = e^2 \frac{2\pi\sqrt{\omega_1\omega_2}}{E_i + \omega_1 + \omega_2 - E_a(1 - i0)} \times \\ \times \Bigg[\sum_k \frac{\langle a|\mathbf{e}_1\mathbf{r}|k\rangle\langle k|\mathbf{e}_2\mathbf{r}|i\rangle}{E_a - \omega_1 - E_k(1 - i0)} + \\ + \sum_k \frac{\langle a|\mathbf{e}_2\mathbf{r}|k\rangle\langle k|\mathbf{e}_1\mathbf{r}|i\rangle}{E_i + \omega_1 - E_k(1 - i0)} \Bigg]. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{e}_j$ ($j = 1, 2$) – вектора поляризаций поглощенных фотонов и ω_j – их частоты, E_i и E_a – энергии начального и возбужденного состояний, а суммы пробегают весь спектр (включая континуум) энергий. Второй член в (3) относится к перестановке поглощенных фотонов. Формула (3) написана в общем виде, но уже с отброшенным множителем, соответствующем процессу девозбуждения. В рамках резонансного приближения [40] это является оправданным, поскольку матричный элемент излучения входит общим множителем в амплитуду (3). Также нужно отметить, что в экспериментах такого типа направления и (или) поляризации поглощенных фотонов фиксированы.

Опуская для краткости промежуточные выкладки, включающие в себя интегрирование по углам и суммирование по проекциям, каждый член в (3) может быть приведен к виду

$$\sum_k \frac{\langle a|\mathbf{e}_2\mathbf{r}|k\rangle\langle k|\mathbf{e}_1\mathbf{r}|i\rangle}{E_i+\omega_1-E_k(1-i0)} = \tag{4}$$

$$= (-1)^{l_k+l_i+j_a+2j_k+F_a+j_i+F_k} \times$$
$$\times \sqrt{(2l_i+1)(2l_k+1)(2j_i+1)(2j_a+1)}(2j_k+1) \times$$
$$\times \sqrt{(2F_k+1)(2F_i+1)} C^{l_a0}_{l_k010} C^{l_k0}_{l_i010} \times$$
$$\times \begin{Bmatrix} l_k & s & j_k \\ j_a & 1 & l_a \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & s & j_i \\ j_k & 1 & l_k \end{Bmatrix} \times$$
$$\times \begin{Bmatrix} j_k & I & F_k \\ F_a & 1 & j_a \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_i & I & F_i \\ F_k & 1 & j_k \end{Bmatrix} \times$$
$$\times \sum_{q_1,q_2} (-1)^{q_1+q_2} C^{F_aM_a}_{F_kM_k1-q_1} C^{F_kM_k}_{F_iM_i1-q_2} \times$$
$$\times e_{1_{q_1}} e_{2_{q_2}} g_{l_k}(E_i+\omega).$$

Здесь суммирование по k в левой части выражения означает все необходимые суммирования по квантовым числам, не фигурирующим в правой части выражения, $e_{1(2)_q}$ представляет собой сферические компоненты векторов поляризации фотонов, коэффициенты $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}$ являются $6j$-символами Вигнера, $C^{lm}_{l_1m_1l_2m_2}$ коэффициенты Клебша–Гордана, F означает полный момент с проекцией M, j – полный угловой момент электрона, а l – его орбитальный момент. Функция $g_l(E)$ представляет собой результат радиального интегрирования $g_{l_k}(E_i+\omega) = \int\limits_0^\infty\int\limits_0^\infty dr_1 dr_2 R_{n_al_a}(r_1) r_1^3 g_{l_k}(E_i+\omega; r_1, r_2) r_2^3 R_{n_il_i}(r_2)$, где $g_{l_k}(E_i+\omega; r_1, r_2)$ есть радиальная часть функции Грина, см., например, [40, 41]. Дифференциальная вероятность поглощения может быть получена с использованием соотношения $dW^{\rm abs}_{ai} = \frac{d^3\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3}\frac{d^3\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3}\left|U^{\rm abs}_{ai}\right|^2$, где $\mathbf{k}_j$ $(j=1,\ 2)$ представляет собой волновой вектор соответствующего фотона.

Далее, можно использовать соотношение $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega = (E_a-E_i)/2$, что соответствует процессу возбуждения двумя эквивалентными фотонами. В результате регуляризации методами КЭД расходимости в энергетическом знаменателе выражения (3), см. [9, 40], возникает добавка, имеющая в качестве вещественной и мнимой частей Лэмбовский сдвиг и ширину Γ_a возбужденного состояния a соответственно. Возникновение последней приводит к образованию контура линии поглощения. После этого, с высокой степенью точности, в оставшихся множителях частота может быть положена равной резонансной частоте [40]. Такое приближение основывается на том факте, что соответствующие НР поправки выходят за рамки погрешности экспериментов [36–39].

Согласно [17], наиболее существенные нерезонансные вклады в амплитуду рассматриваемого процесса возникают при учете тонкой структуры возбужденных уровней, когда в амплитуде (3) учитываются состояния с одинаковыми угловыми моментами электрона, но с разными полными моментами (например, уровни $nd_{3/2}$ и $nd_{5/2}$ в водороде). В этом случае в сумме по промежуточным состояниям достаточно оставить только такие слагаемые [26, 34]. Тогда, в рамках такого приближения, вероятность поглощения может быть записана в виде:

$$\frac{dW^{\rm abs}_{ai}}{d\omega d\Omega_1 d\Omega_2} \sim \frac{C_a}{(2\omega-\omega_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma_a^2} +$$
$$+ \frac{C_b}{(2\omega-\omega_0-\Delta_{fs})^2+\frac{1}{4}\Gamma_b^2} +$$
$$+ \frac{C_{ab}}{(2\omega-\omega_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma_a^2}\frac{2(2\omega-\omega_0)}{2\omega-\omega_0-\Delta_{fs}}. \tag{5}$$

Здесь Ω_i, $i=1,2$ – телесные углы в фазовых пространствах налетающих фотонов, $\Gamma_{a(b)}$ – это естественная ширина линии соответствующего состояния, $\Delta_{fs} = E_{nd_{3/2}}(F=2) - E_{nd_{5/2}}(F=2)$ – энергетический интервал тонкой структуры, $\omega_0 = E_a - E_i$. Коэффициенты C_a, C_b и C_{ab} рассчитываются в соответствии с выражениями (3), (4). Первый член представляет собой резонансный контур линии поглощения для рассматриваемого перехода, второй относится к возбуждению во второе состояние, и, наконец, третий член представляет собой вклад от интерференции данных переходов.

Общепринятый способ определения резонансной частоты $\omega_{\rm res}$ заключается в поиске максимума контура линии (6), см. соответствующее обсуждение в [26]. Тогда НР поправки старшего порядка могут быть найдены из условия экстремума $dW^{\rm abs}_{ai}/d\omega = 0$, где $\omega_{\rm res} = \omega_0 + \delta_{\rm NR}$. Результат представляется следующим образом:

$$\delta_{\rm NR} = -\frac{C_{ab}\Gamma^2_{nd}}{4C_a\Delta_{fs}} + \mathcal{O}\left(\frac{\Gamma_{nd^4}}{\Delta^3_{fs}}\right). \tag{6}$$

Важно подчеркнуть, что суммирование по поляризациям и последующее интегрирование по направлениям распространения фотонов не обязательны в (5). В

Таблица 1. Нерезонансные поправки, соответствующие выражению (6). Первая колонка относится к возбужденному состоянию a, вторая и третья колонки содержат использованные значения энергий расщепления, Δ_{fs} [42], и ширин уровней, Γ_{nd}, соответственно. Значения нерезонансной поправки $\delta_{\rm NR}$ представлены в пятой колонке. В последней колонке приведены значения погрешностей измерения частот переходов $2s-nd_{5/2}$, заимствованные из [2, 3]. Все значения приведены в герцах

Состояние	Δ_{fs}, Гц	Γ_{nd}, Гц	$\delta_{\rm NR}$, Гц	Δ, Гц
$4d$	4.557026×10^8	4.40503×10^6	-8691.82	24×10^3
$6d$	1.350231×10^8	1.33682×10^6	-2701.67	10×10^3
$8d$	5.69628×10^7	5.72382×10^5	-1174.02	6.4×10^3
$12d$	1.68779×10^7	1.72261×10^5	-358.88	7.0×10^3

окончательном выражении для вероятности возбуждения результат этих операций дает общий множитель, который исчезает в НР поправке. Это является результатом приближения, приводящего к тому, что процесс поглощения независим от процесса излучения. Вклад (6) был назван эффектом квантовой интерференции. Поправки следующего порядка могут быть получены из выражения (5), см. [14], но их значения не превышают нескольких Гц, и в последующем мы их опустим. НР поправки данного порядка представляют собой ведущие поправки к резонансной частоте, возникающие в результате того, что контур линии испытывает деформацию в результате наличия второго перехода и их интерференции. При этом аппроксимация экспериментальных данных в работах типа [36–39] была проведена именно с помощью контура Лоренца, имеющего вид первого слагаемого в (5) и содержащего только естественную ширину линии. Это обусловлено тем, что в данных экспериментах эффекты доплеровского, столкновительного и других уширений линии пренебрежимо малы. Однако из-за наличия других переходов в состояния, близкие к резонансному, контур линии имеет вид (5). По этой причине максимум контура, т.е. резонансная частота, не соответствует частоте изучаемого перехода, как это было бы при наличии только одного перехода, данное значение включает в себя НР поправки. В приближении равных ширин для интерферирующих переходов $2s_{j_i=1/2}(F_i=1)\to nd_{j_a=3/2}(F_a=2)$ и $2s_{j_i=1/2}(F_i=1)\to nd_{j_a=5/2}(F_a=2)$ в водороде в табл. 1 приведены значения НР поправок для некоторых переходов, также в этой таблице приведены погрешности измерений частот соответствующих переходов [2, 3].

Как следует из табл. 1, значения НР поправки кубически убывают с ростом главного квантового числа, и для низко лежащих состояний являются значительными. Представляя вклад в несколько килогерц, НР поправки могут быть рассмотрены в приложении к проблеме определения постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона. Для этой цели мы используем выражение (1) и пару переходов: $1s-2s/3s$ вместе с $2s-nd_{3/2(5/2)}$. Результаты вычислений представлены в табл. 2 и 3. Наши вычисления были разбиты на три части. Первая относится к оценке значений R_∞ и r_p на основании данных, представленных в CODATA [2, 3]. Вторая часть заключалась в расчете постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона, обозначенных $R_\infty^{\rm HH}$ и $r_p^{\rm HH}$, в соответствии со значениями, данными в табл. VII работы [42]. Наконец, третья часть состояла в том, чтобы используя данные [42] и учитывая НР поправки из табл. 1, получить соответствующие значения постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона. Несмотря на то, что данные, приведенные в [2, 3] и в [42] основываются на измеренных частотах одних и тех же переходов, главное отличие состоит в том, что в [42] была показана важность учета поправок сверхтонкой структуры за счет аномального момента и конечной массы протона и поправок за счет недиагоналных матричных элементов сверхтонкого гамильтониана (эффект смешивания), поэтому мы приводим здесь значения постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона для двух наборов данных. Следует также обратить внимание на то, что в табл. 2 и 3 учет НР поправок, приведенных в табл. 1, приводит к противоположным по знаку сдвигам значений соответствующих констант. Это связано с тем, что в Таблице 1 приведены НР поправки к переходу без учета полного углового момента, тогда как НР поправки противоположны по знаку для $nd_{3/2}$ и $nd_{5/2}$ состояний за счет знака Δ_{fs} в энергетическом знаменателе (5).

Численные значения НР поправок (6) приведены в табл. 1. Их вклад в определение постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона для конкретных переходов может быть найден в табл. 2 и 3. Чтобы проверить точность наших вычислений, мы рассчитали среднеквадратичное значение R_∞ и r_p, используя CODATA [2, 3]. Полученные результаты находятся в полном согласии с рекомендованными $R_\infty=10973731.568508(65)$ м$^{-1}$ и $r_p=0.879(11)$ фм, см. табл. 2 и 3. Однако анализ, данный в [42], приводит к выводу о том, что необходимо экспериментальное разрешение сверхтонкого расщепления

Таблица 2. Зарядовый радиус протона, r_p. Пары переходов, использованных для определения R_∞ и r_p приведены в первой колонке. Значения (CODATA) r_p даны во второй колонке, в третьей содержатся значения зарядового радиуса протона, полученные из [42], четвертая содержит значения, рассчитанные на основе [42] с учетом НР поправок. Введены обозначения $a = \frac{2}{5}(2s - 8d_{3/2}) + \frac{3}{5}(2s - 8d_{5/2})$, $b = \frac{2}{5}(2s - 12d_{3/2}) + \frac{3}{5}(2s - 12d_{5/2})$, $c = 2s - 4d_{5/2} - \frac{1}{4}(1s - 2s)$, $d = 2s - 6d_{5/2} - \frac{1}{4}(1s - 3s)$

Состояние	r_p, фм	$r_p^{\text{НН}}$, фм	$r_p^{\text{НН}+NR}$, фм
$1s - 2s, 2s - 8d_{3/2}$	0.8790	0.8412	0.8382
$1s - 3s^*$, $2s - 8d_{3/2}$	0.8750	0.8311	0.8267
$1s - 3s^{**}$, $2s - 8d_{3/2}$	0.8841	0.8407	0.8372
$1s - 2s$, $2s - 8d_{5/2}$	0.8913	0.8413	0.8443
$1s - 3s^*$, $2s - 8d_{5/2}$	0.8892	0.8312	0.8348
$1s - 3s^{**}$, $2s - 8d_{5/2}$	0.8982	0.8408	0.8443
$1s - 2s, a$	0.8678	0.8216	0.8223
$1s - 3s^*$, a	0.8620	0.8082	0.8089
$1s - 3s^{**}$, a	0.8712	0.8181	0.8188
$1s - 2s, 2s - 12d_{3/2}$	0.8552	0.8412	0.8404
$1s - 3s^*$, $2s - 12d_{3/2}$	0.8477	0.8315	0.8305
$1s - 3s^{**}$, $2s - 12d_{3/2}$	0.8568	0.8407	0.8397
$1s - 2s, 2s - 12d_{5/2}$	0.8643	0.8411	0.8420
$1s - 3s^*$, $2s - 12d_{5/2}$	0.8582	0.8313	0.8324
$1s - 3s^{**}$, $2s - 12d_{5/2}$	0.8671	0.8406	0.8416
$1s - 2s, b$	0.8660	0.8466	0.8484
$1s - 3s^*$, b	0.8602	0.8377	0.8398
$1s - 3s^{**}$, b	0.8691	0.8469	0.8489
$1s - 2s, c$	0.9300	0.8398	0.8319
$1s - 3s^*$, c	0.9285	0.8340	0.8319
$1s - 3s^{**}$, c	0.9285	0.8340	0.8319
$1s - 2s, d$	0.8562	0.8413	0.8324
$1s - 3s^*$, d	0.8562	0.8413	0.8324
$1s - 3s^{**}$, d	0.8562	0.8413	0.8324
$\text{rms}(1s - 2s)$	0.8765	0.8393	0.8375
$\text{rms}(1s - 3s^*)$	0.8725	0.8308	0.8297
$\text{rms}(1s - 3s^{**})$	0.8792	0.8379	0.8369
rms ($1s - 2s$ and $1s - 3s^*$)	0.8745	0.8351	0.8336
rms ($1s - 2s$ and $1s - 3s^{**}$)	0.8778	0.8386	0.8372

*Помечено значение частоты $1s - 3s$ перехода, рекомендованное CODATA [3].

**Помечено значение частоты $1s - 3s$ перехода, измеренное в [45].

в измерениях типа [36, 38, 39]. Среднеквадратичные значения постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона, вычисленные из данных [42], равны 10973731.568118 м$^{-1}$ и 0.83512 фм соответственно. Недавно были опубликованы новые рекомендованные CODATA [43] значения этих постоянных, равные 10973731.568160(21) м$^{-1}$ и 0.8414(19) фм, соответственно, см. также базу данных *The NIST reference on constants, units, and uncertainty*[2)], где, по-видимому, были учтены поправки сверхтонкой структуры за счет аномального момента и конечной массы протона и поправки за счет недиагональных матричных элементов сверхтонкого гамильтониана (эффект смешивания), важность которых была показана в [42]. Отметим, что учет этих поправок изменяет второй знак после запятой в значении зарядового радиуса протона, в то время как учет НР поправок приводит к изменению третьего знака после запятой, см. табл. 2. В частности, объединяя результаты [42] с учетом НР эффектов, рассмотренных в данной работе, можно получить среднеквадратичные значения $R_\infty = 10973731.568103$ м$^{-1}$ и $r_p = 0.8336$ фм, находящиеся в полном соответствии с результатами [5, 6].

Основной вывод, который следует из данной работы, состоит в том, что НР поправки (6) для таких экспериментов, как [36–39], могут достигать уровня

[2)] https://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html.

Таблица 3. Постоянная Ридберга, R_∞. Пары переходов, использованных для определения R_∞ и r_p приведены в первой колонке. Значения (CODATA) R_∞ даны во второй колонке, в третьей содержатся значения постоянной Ридберга, полученной из [42], четвертая содержит значения, вычисленные по данным [42] с учетом НР поправок. Введены обозначения $a = \frac{2}{5}(2s - 8d_{3/2}) + \frac{3}{5}(2s - 8d_{5/2})$, $b = \frac{2}{5}(2s - 12d_{3/2}) + \frac{3}{5}(2s - 12d_{5/2})$, $c = 2s - 4d_{5/2} - \frac{1}{4}(1s - 2s)$, $d = 2s - 6d_{5/2} - \frac{1}{4}(1s - 3s)$

Состояние	R_∞, м$^{-1}$	$R_\infty^{\text{НН}}$, м$^{-1}$	$R_\infty^{\text{НН+NR}}$, м$^{-1}$
$1s - 2s, 2s - 8d_{3/2}$	10973731.568548	10973731.568152	10973731.568121
$1s - 3s^*$, $2s - 8d_{3/2}$	10973731.568528	10973731.568105	10973731.568072
$1s - 3s^{**}$, $2s - 8d_{3/2}$	10973731.568573	10973731.568149	10973731.568116
$1s - 2s, 2s - 8d_{5/2}$	10973731.568681	10973731.568153	10973731.568184
$1s - 3s^*$, $2s - 8d_{5/2}$	10973731.568670	10973731.568106	10973731.568139
$1s - 3s^{**}$, $2s - 8d_{5/2}$	10973731.568715	10973731.568151	10973731.568184
$1s - 2s, a$	10973731.568429	10973731.567954	10973731.567960
$1s - 3s^*$, a	10973731.568401	10973731.567893	10973731.567900
$1s - 3s^{**}$, a	10973731.568445	10973731.567938	10973731.567944
$1s - 2s, 2s - 12d_{3/2}$	10973731.568297	10973731.568152	10973731.568144
$1s - 3s^*$, $2s - 12d_{3/2}$	10973731.568263	10973731.568109	10973731.568099
$1s - 3s^{**}$, $2s - 12d_{3/2}$	10973731.568304	10973731.568150	10973731.568141
$1s - 2s, 2s - 12d_{5/2}$	10973731.568392	10973731.568151	10973731.568160
$1s - 3s^*$, $2s - 12d_{5/2}$	10973731.568364	10973731.568107	10973731.568117
$1s - 3s^{**}$, $2s - 12d_{5/2}$	10973731.568405	10973731.568149	10973731.568159
$1s - 2s, b$	10973731.568410	10973731.568208	10973731.568226
$1s - 3s^*$, b	10973731.568383	10973731.568168	10973731.568187
$1s - 3s^{**}$, b	10973731.568425	10973731.568209	10973731.568228
$1s - 2s, c$	10973731.569110	10973731.568138	10973731.568058
$1s - 3s^*$, c	10973731.569074	10973731.568133	10973731.568113
$1s - 3s^{**}$, c	10973731.569028	10973731.568087	10973731.568067
$1s - 2s, d$	10973731.568308	10973731.568153	10973731.568062
$1s - 3s^*$, d	10973731.568345	10973731.568201	10973731.568117
$1s - 3s^{**}$, d	10973731.568299	10973731.568155	10973731.568071
rms$(1s - 2s)$	10973731.568522	10973731.568133	10973731.568114
rms$(1s - 3s^*)$	10973731.568503	10973731.568103	10973731.568093
rms$(1s - 3s^{**})$	10973731.568524	10973731.568123	10973731.568113
rms ($1s - 2s$ and $1s - 3s^*$)	10973731.568513	10973731.568118	10973731.568103
rms ($1s - 2s$ and $1s - 3s^{**}$)	10973731.568523	10973731.568128	10973731.568113

*Помечено значение частоты $1s - 3s$ перехода, рекомендованное CODATA [3].
**Помечено значение частоты $1s - 3s$ перехода, измеренное в [45].

нескольких кГц, см. табл. 1. Эти поправки несколько выше, чем соответствующие значения, найденные в [34] для экспериментов, основанных на флуоресцентной двухфотонной спектроскопии [35]. Кроме того, в рассмотренном нами случае квантовая интерференция не может быть редуцирована выбором геометрии эксперимента или экстраполяцией наблюдаемой линии асимметричным профилем, т.к. не имеет угловых корреляций, и должна рассчитываться отдельно для каждого измеряемого перехода с учетом всех экспериментальных параметров, влияющих на уширение спектральной линии [44].

Совсем недавно методом двухфотонной спектроскопии была перемерена частота $1s - 3s$ перехода в атоме водорода [45]. Детальный теоретический анализ искажения соответствующего профиля линии за счет нерезонансных вкладов в сечении рассеяния одно- и двухфотонных процессов рассеяния в эксперименте по двухфотонной спектроскопии с детектированием флуоресценции был рассмотрен в работах [25, 34, 46, 47]. В частности, было показано, что эффект квантовой интерференции в измерении частоты $1s - 3s$ перехода за счет близкого $3d$ состояния достигает 1 кГц. С учетом этого теоретического анализа, в [45] частота $1s - 3s$ перехода в атоме водорода была перемерена методом двухфотонной спектроскопии в эксперименте с детектированием сигнала флуоресценции. Результатом является то, что $1s - 3s$ частота была уточнена более чем на порядок, и оказывается на 13 кГц меньше рекомендованного CODATA [48]. При этом сам эксперимент [45] оказывается наиболее точным на данный момент, его погрешность составляет около 720 Гц, в отличие от нескольких кГц в других экспериментах по определению частот двухфотонных переходов в состояния с главным квантовым числом $n > 2$. В табл. 2, 3 приведены значения R_∞, r_p, полученные из рекомендованных данных CODATA (каждая вторая строка), а также с учетом значения, полученного в [45] $\nu_{1s-3s} = 2\,922\,743\,278\,665.79(72)$ Гц (каждая третья строка).

Как следует из табл. 2, 3, значение частоты $1s-3s$ перехода оказывает сильное влияние на величину R_∞ и r_p, меняя вторую значащую цифру для радиуса и пятую после запятой для постоянной Ридберга. Однако, среднеквадратичные значения оказываются в хорошем соответствии с данными CODATA. Наиболее значимый эффект, влияющий на определение констант R_∞ и r_p, состоит в экспериментальном измерении сверхтонкого расщепления, см. соответствующее обсуждение в [42] и, как результат, второй столбец в табл. 2, 3 данной работы. При этом среднеквадратичные значения постоянной Ридберга, R_∞, и зарядового радиуса протона, r_p, хорошо совпадают с результатами экспериментов на водороде [5, 6] и мюонном водороде [1, 27, 28]. Влияние нерезонансных вкладов в сечении рассеяния, см. Таблицу 1, на определение R_∞ и r_p может быть отмечено из третьего столбца табл. 2 и 3. Так, в частности, НР поправка, соответствующая эффекту квантовой интерференции для двухфотонных $2s-nd$ переходов, дает вклад на уровне третьей значащей цифры в определение зарядового радиуса протона. Более того, НР поправки, полученные в нашей работе, превышают ряд эффектов, включенных в CODATA [3]. Таким образом, квантовая интерференция представляет интерес и, безусловно, должна учитываться при измерениях частот переходов в современных прецизионных экспериментах [36–39].

Данная работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант номер 20-72-00003.

1. R. Pohl, A. Antognini, F. Nez et al. (Collaboration), Nature **466**, 213 (2010).
2. P. J. Mohr, D. B. Newell, and B. N. Taylor, J. Phys. Chem. Ref. Data **45**, 043102 (2016).
3. P. J. Mohr, D. B. Newell, and B. N. Taylor, Rev. Mod. Phys. **88**, 035009 (2016).
4. J. C. Bernauer, M. O. Distler, J. Friedrich et al. (Collaboration), Phys. Rev. C **90**, 015206 (2014).
5. A. Beyer, L. Maisenbacher, A. Matveev, R. Pohl, K. Khabarova, A. Grinin, T. Lamour, D. C. Yost, T. W. Hänsch, N. Kolachevsky, and T. Udem, Science **358**, 79 (2017).
6. N. Bezginov, T. Valdez, M. Horbatsch, A. Marsman, A. C. Vutha, and E. A. Hessels, Science **365**, 1007 (2019).
7. W. Xiong, A. Gasparian, H. Gao et al. (Collaboration), Nature (London) **575**, 11 (2019).
8. A. Matveev, C. G. Parthey, K. Predehl et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **110**, 230801 (2013).
9. F. Low, Phys. Rev. **88**, 53 (1952).
10. L. Labzowsky, V. Karasiev, and I. Goidenko, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27**, L439 (1994).
11. L. N. Labzowsky, I. A. Goidenko, and D. Liesen, Phys. Scr. **56**, 271 (1997).
12. L. N. Labzowsky, D. A. Solovyev, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. Lett. **87**, 143003 (2001).
13. L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien, and G. Soff, Can. J. Phys. **80**, 1187 (2002).
14. L. Labzowsky, D. Soloviev, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. A **65**, 054502 (2002).
15. L. Labzowsky, G. Schedrin, D. Solovyev, and G. Plunien, Phys. Rev. Lett. **98**, 2030032 (2007).
16. L. Labzowsky, G. Schedrin, D. Solovyev, E. Chernovskaya, G. Plunien, and S. Karshenboim, Phys. Rev. A **79**, 052506 (2009).
17. U. D. Jentschura and P. J. Mohr, Can. J. Phys. **80**, 633 (2002).
18. M. Horbatsch and E. A. Hessels, Phys. Rev. A **82**, 052519 (2010).
19. M. Horbatsch and E. A. Hessels, Phys. Rev. A **84**, 032508 (2011).
20. C. J. Sansonetti, C. E. Simien, J. D. Gillaspy, J. N. Tan, S. M. Brewer, R. C. Brown, S. Wu, and J. V. Porto, Phys. Rev. Lett. **107**, 023001 (2011).
21. R. C. Brown, S. Wu, J. V. Porto, C. J. Sansonetti, C. E. Simien, S. M. Brewer, J. N. Tan, and J. D. Gillaspy, Phys. Rev. A **87**, 032504 (2013).
22. A. Marsman, M. Horbatsch, and E. A. Hessels, J. Phys. Chem. Ref. Data **44**, 031207 (2015).
23. P. Amaro, F. Fratini, L. Safari, A. Antognini, P. Indelicato, R. Pohl, and J. P. Santos, Phys. Rev. A **92**, 062506 (2015).
24. P. Amaro, B. Franke, J. J. Krauth, M. Diepold, F. Fratini, L. Safari, J. Machado, A. Antognini, F. Kottmann, P. Indelicato, R. Pohl, and J. P. Santos, Phys. Rev. A **92**, 022514 (2015).
25. T. Udem, L. Maisenbacher, A. Matveev, V. Andreev, A. Grinin, A. Beyer, N. Kolachevsky, R. Pohl, D. C. Yost, and T. W. Hänsch, Ann. Phys. **531**, 1900044 (2019).
26. D. Solovyev, A. Anikin, T. Zalialiutdinov, and L. Labzowsky, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **53**, 125002 (2020).

27. A. Antognini, F. Nez, K. Schuhmann et al. (Collaboration), Science **339**, 417 (2013).
28. A. Antognini, F. Kottmann, F. Biraben, P. Indelicato, F. Nez, and R. Pohl, Ann. Phys. **331**, 127 (2013).
29. S. Romanov, Eur. Phys. J. D **33**, 17 (1995).
30. K. Pachucki, Phys. Rev. A **53**, 2092 (1996).
31. A. Martynenko, Phys. Atom. Nucl. **71**, 125 (2008).
32. S. G. Karshenboim, E. Y. Korzinin, V. A. Shelyuto, and V. G. Ivanov, J. Phys. Chem. Ref. Data **44**, 031202 (2015).
33. L. Labzowsky, D. Solovyev, V. Sharipov, G. Plunien, and G. Soff, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36**, L227 (2003).
34. A. Anikin, T. Zalialiutdinov, and D. Solovyev, Phys. Rev. A **103**, 022833 (2021).
35. M. Weitz, A. Huber, F. Schmidt-Kaler, D. Leibfried, W. Vassen, C. Zimmermann, K. Pachucki, T. W. Hänsch, L. Julien, and F. Biraben, Phys. Rev. A **52**, 2664 (1995).
36. B. de Beauvoir, F. Nez, L. Julien, B. Cagnac, F. Biraben, D. Touahri, L. Hilico, O. Acef, A. Clairon, and J. J. Zondy, Phys. Rev. Lett. **78**, 440 (1997).
37. C. Schwob, L. Jozefowski, O. Acef, L. Hilico, B. de Beauvoir, F. Nez, L. Julien, A. Clairon, and F. Biraben, IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement **48**, 178 (1999).
38. C. Schwob, L. Jozefowski, B. de Beauvoir, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, F. Biraben, O. Acef, J.-J. Zondy, and A. Clairon, Phys. Rev. Lett. **82**, 4960 (1999).
39. B. de Beauvoir, C. Schwob, O. Acef, L. Jozefowski, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, A. Clairon, and F. Biraben, Eur. Phys. J. D **12**, 61 (2000).
40. O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, and D. A. Solovyev, Phys. Rep. **455**, 135 (2008).
41. T. A. Zalialiutdinov, D. A. Solovyev, L. N. Labzowsky, and G. Plunien, Phys. Rep. **737**, 1 (2018).
42. M. Horbatsch and E. A. Hessels, Phys. Rev. A **93**, 022513 (2016).
43. E. Tiesinga, P. J. Mohr, D. B. Newell, and B. N. Taylor, Rev. Mod. Phys. **93**, 025010 (2021).
44. F. Nez, M. D. Plimmer, S. Bourzeix, L. Julien, F. Biraben, R. Felder, O. Acef, J. J. Zondy, P. Laurent, A. Clairon, M. Abed, Y. Millerioux, and P. Juncar, Phys. Rev. Lett. **69**, 2326 (1992).
45. A. Grinin, A. Matveev, D. C. Yost, L. Maisenbacher, V. Wirthl, R. Pohl, T. W. Hänsch, and T. Udem, Science **370**, 1061 (2020).
46. D. C. Yost, A. Matveev, E. Peters, A. Beyer, T. W. Hänsch, and T. Udem, Phys. Rev. A **90**, 012512 (2014).
47. H. Fleurbaey, F. Biraben, L. Julien, J.-P. Karr, and F. Nez, Phys. Rev. A **95**, 052503 (2017).
48. P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell, Rev. Mod. Phys. **84**, 1527 (2012).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 221 – 227 © 2021 г. 25 августа

Эффекты сильного взаимодействия в спектрах излучения квантовой точки, связанной с фононным резервуаром

Р. Х. Гайнутдинов[+*1)], *Л. Я. Набиева*[+], *А. И. Гарифуллин*[+], *А. Ширделхавар*[+], *А. А. Мутыгуллина*[+], *М. Х. Салахов*[+*]

[+]*Институт физики, Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия*

[*]*Институт прикладных исследований, Академия наук РТ, 420111 Казань, Россия*

Поступила в редакцию 13 июля 2021 г.
После переработки 22 июля 2021 г.
Принята к публикации 23 июля 2021 г.

Исследуются эффекты взаимодействия экситона одиночной квантовой точки с резервуаром акустических фононов за пределами теории возмущений. В случае сильных взаимодействий становится неприменимой модель независимых бозонов. Предлагается обобщение этой модели на случай сильного взаимодействия экситона с резервуаром акустических фононов. Мы рассчитываем собственно-энергетическую функцию квантовой точки за пределами теории возмущений и марковского приближения. Важность выхода за рамки теории возмущений демонстрируется на спектрах излучения одиночной квантовой точки.

DOI: 10.31857/S1234567821160047

1. Введение. Передовой фронт оптических квантовых технологий [1–5] строится на возможности генерации и управления большим числом одиночных неразличимых фотонов с помощью различных устройств [6]. В качестве таковых, большую популярность в последние десятилетия приобрели полупроводниковые коллоидные квантовые точки (КТ). КТ являются интересной системой в связи с наличием уникальных оптических свойств, таких как узкий и симметричный спектр флуоресценции, широкий спектр поглощения, перенастраиваемая длина волны излучения, зависящая от размеров КТ, высокая фотостабильность и высокий квантовый выход [7–13]. Благодаря данным уникальным характеристикам КТ широко применяются в микроскопии и картировании нанобъектов [7–10], в различных фотонных и оптоэлектронных приложениях как однофотонные источники [14–19], солнечные элементы и светодиоды [20–22], нанолазеры и фотодетекторы [23, 24], а также используются в создании квантовых компьютеров и в квантовых вычислениях [2–4, 25, 26].

Вопрос о фононных возбуждениях в полупроводниковых нанокристаллах достаточно хорошо изучен и экспериментально, и теоретически [27, 28]. Наряду с этим, во многих приложениях фотоники и квантовых технологий приходится сталкиваться с ситуацией, когда взаимодействие квантовых систем с окружением становится сильным. В этом случае теория возмущения становится недостаточно эффективной. Однако наиболее важным является то, что взаимодействие КТ с резервуаром фононов, имеющим бесконечно большое количество степеней свободы, является нелокальным во времени и в пространстве, другими словами, немарковским [29]. Вместе с тем, в работе [30] было выведено самое общее динамическое уравнение (обобщенное динамическое уравнение, ОДУ), совместное с современными концепциями квантовой физики. Как хорошо известно, причиной ультрафиолетовых расходимостей в квантовой теории поля является локальность взаимодействия в пространстве и во времени. Важным является то, что ОДУ позволяет решить проблему ультрафиолетовых расходимостей, поскольку оно допускает расширение квантовой динамики на случай нелокальных во времени взаимодействий. Возможности обобщенной квантовой динамики (ОКД) были продемонстрированы в работах [31–36]. В работе [36] было показано, что динамика нуклонов при низких энергиях описывается ОДУ с нелокальным во времени взаимодействием, которое в данном случае не сводится к уравнению Шредингера. При этом, когда динамику системы генерирует мгновенное взаимодействие, ОДУ сводится к уравнению Шредингера (марковское приближение).

2. Обобщенная квантовая динамика и описание нелокальных во времени взаимодействий. В общем случае, окружение состоит из практически бесконечного числа степеней свободы и действует на квантовую систему как единое целое, на-

[1)]e-mail: Renat.Gainutdinov@kpfu.ru

зываемое резервуаром. Такое эффективное взаимодействие нелокально как в пространстве, так и во времени, и, следовательно, динамика в системе является негамильтоновой (немарковской). Кроме того, при решении задач физики многих частиц нужно начинать с модельных гамильтонианов. Было показано, что уравнение Шредингера не является самым общим динамическим уравнением, согласующимся с современными представлениями квантовой физики, и более общее уравнение движения было выведено в [30]. Фундаментальная природа ОДУ проявляется не только в том, что оно расширяет квантовую динамику на случай, когда динамика генерируется нелокальным во времени взаимодействием, но и в том, что в отличие от уравнения Шредингера, включающего гамильтониан взаимодействия, вид ОДУ не зависит от особенностей взаимодействия (эти особенности содержатся в граничном условии для уравнения). Это позволяет находить формальные решения различных физических задач из первых принципов, которые также не зависят от особенностей взаимодействия. ОДУ записывается в терминах оператора $\tilde{S}(t_2,t_1)$, который определяет вклад в оператор эволюции $U(t,t_0)$, от процесса, в котором взаимодействие начинается в момент времени t_1 и заканчивается в момент времени t_2:

$$\langle\psi_2|U(t,t_0)|\psi_1\rangle = $$
$$= \langle\psi_2|\psi_1\rangle + \int\limits_{t_0}^{t} dt_2 \int\limits_{t_0}^{t_2} dt_1 \langle\psi_2|\tilde{S}(t_2,t_1)|\psi_1\rangle, \quad (1)$$

$$(t_2-t_1)\tilde{S}(t_2,t_1) = \int\limits_{t_1}^{t_2} dt_4 \int\limits_{t_1}^{t_4} dt_3 (t_4-t_3)\tilde{S}(t_3,t_1). \quad (2)$$

Граничное условие для уравнения (2) соответствует взаимодействию на бесконечно малом временном промежутке $t_2 \to t_1$, определяемом гамильтонианом взаимодействия $\tilde{S}(t_2,t_1) \to H_{\mathrm{int}}(t_2,t_1)$. С учетом того, что в картине Шредингера оператор эволюции можно записать через оператор Грина $G(z)$, имеем $U_S(t,0) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{+\infty} e^{-izt}G(z)dx$, $z = x+iy$. Тогда в энергетическом представлении ОДУ принимает вид

$$\frac{dT(z)}{dz} = -T(z)(G_0)(z))^2 T(z), \quad (3)$$

$$T(z) = i\int\limits_0^{\infty} d\tau \exp(i(z-H_0)t_2)\tilde{S}(t_2,t_1)\exp(-i(z-H_0)t_1). \quad (4)$$

Данный формализм позволяет с самого начала учесть, что вклад в оператор Грина $G(z)$, который исходит от процессов, связанных с самодействием частиц, имеет ту же структуру, что и свободный оператор Грина $G_0(z)$. По этой причине, естественно, заменить $G_0(z)$ оператором $\tilde{G}_0(z)$, описывающим эволюцию системы, когда частицы свободно распространяются,

$$\langle m'|\tilde{G}_0(z)|m\rangle = \frac{\langle m'|m\rangle}{z-E_m-C_m(z)}, \quad (5)$$

где $|m\rangle$ – собственные векторы свободного гамильтониана ($H_0|m\rangle = E_m|m\rangle$). В таком случае полный оператор Грина принимает вид

$$G(z) = \tilde{G}_0(z) + \tilde{G}_0(z)M(z)\tilde{G}_0(z), \quad (6)$$

где оператор $M(z)$ описывает процессы взаимодействия частиц друг с другом [29]. Уравнение для собственно-энергетической функции $C_m(z)$, имеет вид

$$\frac{dC_m(z)}{dz} = -\langle m|M(z)(\tilde{G}_0(z))^2 M(z)|m\rangle, \quad \langle m|m\rangle = 1, \quad (7)$$

а условие $z - E_m^{(0)} - C_m(z) = 0$ определяет физические массы частиц. Фактически, поскольку наибольший вклад вносят процессы, связанные с фундаментальным взаимодействием в системе, в лидирующем порядке уравнение для $C_m(z)$ сводится к уравнению

$$\frac{dC_m^{(0)}(z)}{dz} = -\langle m|H_I(\tilde{G}_0(z))^2 H_I|m\rangle, \quad \langle m|m\rangle = 1. \quad (8)$$

Собственно-энергетическая функция (СЭФ) играет важную роль как в квантовой электродинамике, так и в физике твердого тела. Понятие СЭФ нашло широкое распространение в физике твердого тела [37], например, СЭФ Фана–Мигдала [38, 39]. Конкретно в нашем случае СЭФ определяет поправку к уровню энергии экситона КТ, возникающую за счет взаимодействия с фононами окружения. Зависимость СЭФ $C_m(z)$ от энергии означает, что взаимодействие является нелокальным во времени, иными словами, в этом случае проявляются немарковские эффекты. В предыдущих исследованиях данная зависимость не учитывалась, за исключением некоторых работ [29, 40]. В данной работе подробно показывается, что для решения ряда проблем необходимо использование формализма ОКД.

3. Экситон-фононное взаимодействие. Рассмотрим КТ, сильно связанную с резервуаром акустических фононов. Для описания процессов квантовых флуктуаций квазичастиц между уровнями квантовых точек, одетых бозонной модой, используем граничные условия $M^{(0)}(z) = H_I$. Гамильтониан модели независимых бозонов, описывающий экситон-фононное взаимодействие, имеет вид [41]

$$H_I = \sum_q g_x^q (b_q + b_q^\dagger)|x\rangle\langle x|, \tag{9}$$

где $|x\rangle$ – вектор экситонного состояния, q обозначает различные акустические фононные моды с энергией ω_q, $b_q^\dagger$ и b_q – операторы рождения и уничтожения фононов, соответственно, g_x^q – деформационный потенциал связи, который зависит от материальных параметров основного полупроводника и волновой функции экситона. Итак, уравнение (7) в лидирующем порядке можно записать в виде

$$\frac{dC_{x,\mu}(z)}{dz} = -\sum_q \sum_\mu \frac{\langle x,\mu|H_I|x,\mu,q\rangle\langle x,\mu,q|H_I|x,\mu\rangle}{(z-E_x-\omega_q)^2}. \tag{10}$$

Усредняя по степеням свободы резервуара $|\mu\rangle$, получаем

$$\frac{dC_x(z)}{dz} = -\sum_q \left\{ \frac{|g(q)|^2(1+n(q))}{(z-E_x-\omega_q)^2} + \frac{|f(q)|^2 n(q)}{(z-E_x+\omega_q)^2} \right\}. \tag{11}$$

Решая уравнение по теории возмущений, приходим к выражению для СЭФ:

$$C_x(z) = \sum_q \left\{ \frac{|g(q)|^2(1+n(q))}{z-E_x-\omega_q} + \frac{|g(q)|^2 n(q)}{z-E_x+\omega_q} \right\}. \tag{12}$$

4. Перенормировка оператора Грина. В случае сильной связи нельзя ограничиваться уравнением (10), поэтому необходим выход за рамки теории возмущений, в котором СЭФ определяется оператором $M(z)$:

$$\frac{dC_{x,\mu}(z)}{dz} = \\ = -\sum_q \sum_\mu \frac{\langle x,\mu|M(z)x|,\mu,q\rangle\langle x,\mu,q|M(z)|x,\mu\rangle}{(z-E_{x,\mu}-\omega_q-C_{x,\mu}(z))^2}, \tag{13}$$

где вектор $|\mu\rangle$ определяет состояние резервуара. Представим $C_{x,\mu}$ в виде

$$C_{x,\mu}(z) = (z-E_x-\omega_q)\chi_1(\omega_q) + \tilde{C}_{x,\mu}(z), \tag{14}$$

где $\chi_1(\omega_q)$ – первая производная СЭФ. Подставляя (14) в (13), получаем

$$\frac{dC_{x,\mu}(z)}{dz} = \\ = -\sum_q \sum_\mu \frac{\langle x,\mu|M(z)|x,\mu,q\rangle\langle x,\mu,q|M(z)|x,\mu\rangle}{Z_2^2(z-E_x-\omega_q)^2}. \tag{15}$$

Здесь $Z_2 = 1-\chi_1(\omega_q) = 1-\frac{dC_{x,\mu}(z)}{dz}\Big|_{z=E_x+\omega_q}$ и положено, что вклад от высших производных $\tilde{C}_x(z)$ в разложении (14) является крайне малым. Множитель Z_2 можно рассматривать как константу, перенормирующую оператор Грина экситона.

В окрестности энергии $z = E_x + \omega_q$, которая играет важную роль при описании спектров излучения КТ, энергетической зависимостью оператора $M(z)$ можно пренебречь: $M(E_x + \omega_q)$. В таком случае решение дифференциального уравнения (15) для СЭФ принимает вид:

$$C_{x,\mu}(z) = \\ \sum_q \sum_\mu \frac{\langle x,\mu|M(E_x+\omega_q)|x,\mu,q\rangle\langle x,\mu,q|M(E_x+\omega_q)|x,\mu\rangle}{Z_2^2(z-E_x-\omega_q)}, \tag{16}$$

где взаимодействие описывается обобщенным оператором $M(E_x+\omega_q)$.

5. Перенормировка экситон-фононного взаимодействия. Ограничение перенормировкой оператора Грина приводит к "нарушению баланса", поскольку в этом случае перенормировка вершинных функций (экситон-фононного взаимодействия) пренебрегается. Далее определим параметр перенормировки экситон-фононной связи Z_1. Часть оператора взаимодействия $M(E_x+\omega_q)$ описывается лестничными диаграммами, образованными последовательной заменой членов $H_I\tilde{G}_0(z)H_I\tilde{G}_0(z)\ldots H_I$ в уравнении (4). Таким образом, вклады от лестничных диаграмм могут быть представлены как

$$M(E_x+\omega_q) = H_I + \sum_{n=1} H_I(\tilde{G}_0(z)H_I)^n. \tag{17}$$

Другие члены в решении уравнения (17) содержат петли, связанные с испусканием и поглощением квантов в процессе взаимодействия. Поскольку мы сосредоточены на перенормировке экситон-фононной связи, то ограничимся вкладом от процессов, описываемых петлей с одним гамильтонианом взаимодействия внутри нее:

$$\langle x;\mu|M(E_x+\omega_q)|x;\mu,q\rangle = \langle x;\mu|H_I|x;\mu,q\rangle + \\ + \langle x;\mu|M(E_x+\omega_q)\tilde{G}_0(E_x+\omega_q) \times \\ \times H_I\tilde{G}_0(E_x+\omega_q)M(E_x+\omega_q)|x;\mu,q\rangle, \tag{18}$$

где энергия состояния $|\mu\rangle$ резервуара выбрана в качестве точки нулевой энергии. В пределе $q \to 0$ это уравнение сводится к выражению, которое после усреднения по степеням свободы резервуара принимает вид

$$g_x + g_x \sum_\mu P_\mu\langle x,\mu|M(E_x)\tilde{G}_0^2(E_x)M(E_x)|x;\mu\rangle \equiv g_x Z_1. \tag{19}$$

В свою очередь из уравнения (7) следует, что левая часть уравнения (19) может быть записана как

$$g_x\left(1-\left.\frac{dC_x(z)}{dz}\right|_{z=E_x}\right)=g_xZ_2. \tag{20}$$

Отсюда следует, что $Z_2 = Z_1$. Таким образом, вершину $\Gamma_x(z,q)$ можно представить в виде

$$\Gamma_x(z,q)=g_x(q)Z_1+g_x(q)\Lambda_{\text{ren}}(z,q), \tag{21}$$

где $\Lambda_{\text{ren}}(z,q)=\Lambda(z,q)-\Lambda(z,0)$ и

$$\Lambda(z,q)= \tag{22}$$

$$\sum_\mu\sum_q\frac{\langle x;\mu|M(z)|x;\mu,q_1\rangle\langle x;\mu,q_1|H_{ep}|x;\mu,q_2|M(z)|x;\mu\rangle}{Z_2^2(z-E_x-\omega_{q_1})(z-E_x-\omega_{q_1}-\omega_q)}.$$

Усредняя по степеням свободы μ резервуара и учитывая перенормировку вершинной функции и оператора Грина, получаем

$$\Lambda(z,q)=\sum_q\left\{\frac{Z_1^3|q_x(q_1)|^2(1+n(q_1))}{Z_2^2(z-E_x-\omega_{q_1})(z-E_x-\omega_{q_1}-\omega_q)}+\right.$$

$$\left.+\frac{Z_1^3|g_x(q_1)|^2n(q_1)}{Z_2^2(z-E_x+\omega_{q_1})(z-E_x+\omega_{q_1}+\omega_q)}\right\}=Z_1\tilde{\Lambda}(z,q), \tag{23}$$

и переходя от суммы к интегрированию по внутренним волновым векторам q_1, это выражение можно переписать как

$$\tilde{\Lambda}_{\text{ren}}(z,q)=\frac{S_{HR}}{\omega_b^2}\int_0^\infty\omega_{q_1}^3e^{\left(-\frac{\omega^2(q_1)}{2\omega_b^2}\right)}\times$$

$$\times\left(\frac{1+n(q_1)}{(z-E_x-\omega_{q_1})(z-E_x-\omega_{q_1}-\omega_q)}+\right.$$

$$+\frac{n(q_1)}{(z-E_x+\omega_{q_1})(z-E_x+\omega_{q_1}+\omega_q)}-$$

$$\left.-\frac{1+n(q_1)}{(z-E_x-\omega_{q_1})^2}-\frac{n(q_1)}{(z-E_x+\omega_{q_1})^2}\right)d\omega_{q_1}. \tag{24}$$

С учетом того, что $Z_2 = Z_1$, СЭФ принимает вид

$$C_s(z)=\frac{S_{HR}}{\omega_b^2}\int_0^\infty\omega^3(q)e^{\left(-\frac{\omega^2(q)}{2\omega_b^2}\right)}\times$$

$$\times\left\{\frac{1+n(q)}{z-E_x-\omega(q)}+\frac{n(q)}{z-E_x+\omega(q)}\right\}\times$$

$$\times[1+\tilde{\Lambda}_{\text{ren}}(z,q)]^2d\omega(q). \tag{25}$$

На рисунках 1 a–h представлена СЭФ взаимодействия КТ с фононным резервуаром при различных значениях температуры и параметра связи “КТ-фононный резервуар” – параметра Хуана–Риса [29, 42] без учета и с учетом поправки от перенормировки вершинной функции и оператора Грина (красная (сплошная) линия и синяя (штриховая) линия соответственно). Отметим, что на рис. 1 b, d, f, h мнимая компонента $C_x(z)$ имеет локальный максимум вблизи $z = 0$ мэВ и локальный минимум в промежутке от $z = 0$ мэВ до $z = 2$ мэВ, а реальная компонента $C_x(z)$ (рис. 1a, c, e, g) имеет значительные величины в широком спектральном диапазоне. Таким образом, и реальная и мнимая компоненты СЭФ имеют существенное влияние на эффекты фононной связи. С увеличением температуры и параметра Хуана–Риса амплитуда СЭФ увеличивается, что говорит об усилении взаимодействия КТ с фононными модами.

Экситон-фононное взаимодействие определяет форму спектров излучения КТ, т.е. оптико-спектральные свойства этого нового материала для фотонных технологий [11–13]. На рисунках 2a–f продемонстрированы спектры излучения одиночной КТ, взаимодействующей с фононным резервуаром, в зависимости от температуры и параметра Хуана–Риса. Даны спектры излучения КТ, рассчитанные с помощью теории возмущения и за ее пределами (красная (сплошная) линия и синяя (штриховая) линия соответственно). В случае рассмотрения рис. 2a, c, e, при повышении температуры наблюдается рост фононной боковой линии. Также отметим, что вклад от СЭФ с учетом перенормировки приводит к неочевидной зависимости ширины линии от температуры и параметра экситон-фононной связи. Данное поведение можно объяснить эффектом сильного взаимодействия: рассматривается увеличение константы связи – параметра Хуана–Риса, что демонстрируется расщеплением спектральных линий. Из анализа графиков видно, что значение параметра Хуана–Риса 0.2 приводит к аномальным спектрам, а увеличение до 0.6, что равнозначно переходу к сильному взаимодействию, приводит к дополнительным пикам в спектрах.

5. Заключение. Сравнение расчетов по теории возмущений и за ее пределами демонстрирует необходимость учета перенормировки взаимодействия КТ с резервуаром акустических фононов за пределами теории возмущений. Это объясняется тем, что процессы квантовых флуктуаций, будучи нелокальными во времени взаимодействиями, требуют более тщательного анализа. Использование теории возмущений не позволяет полностью описать вклад от данных процессов и требует обобщения, что позволит учитывать нелокальность во времени взаимодействия. Данное обобщение производится форма-

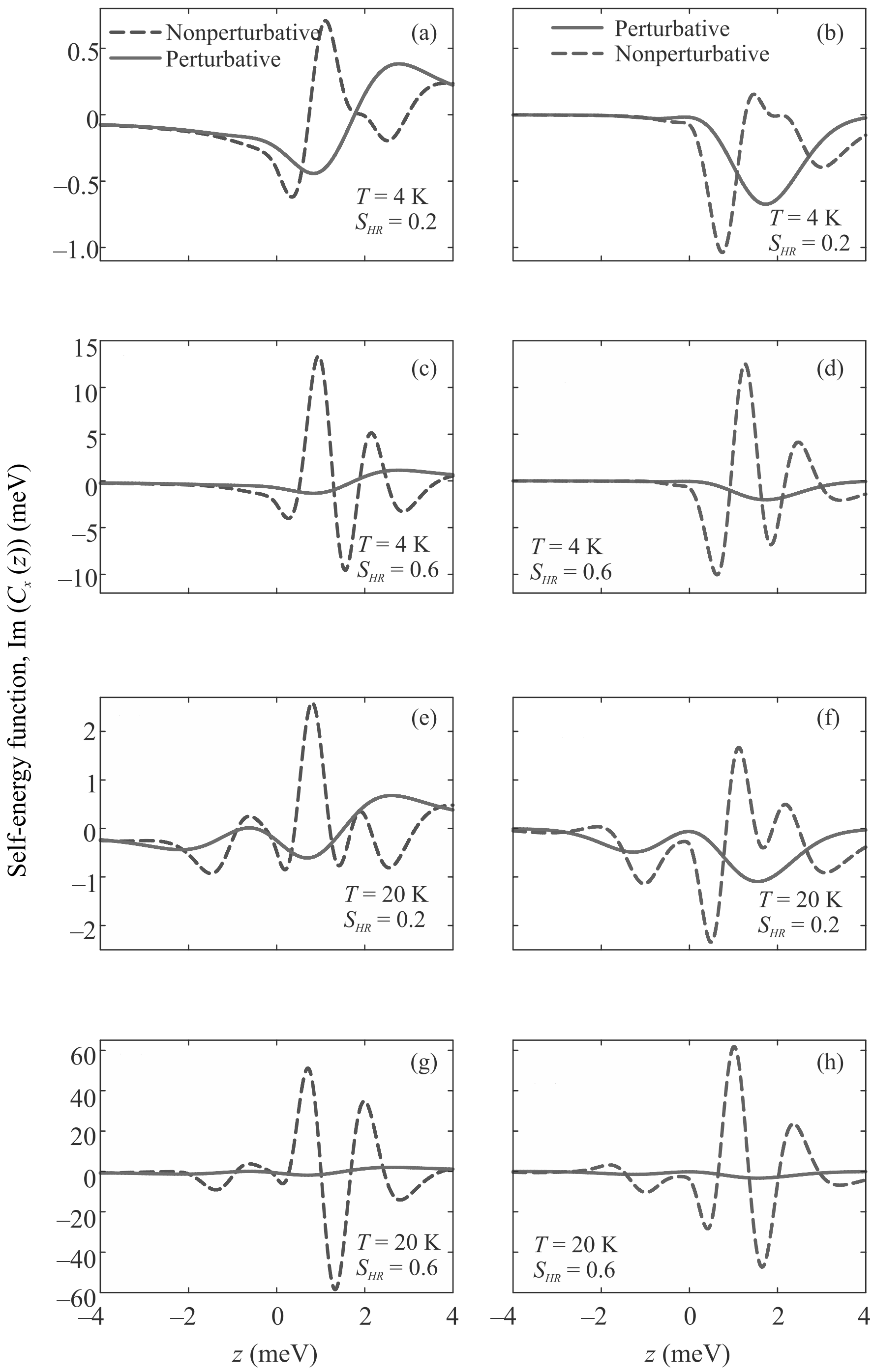

Рис. 1. (Цветной онлайн) СЭФ взаимодействия КТ с фононным резервуаром при различных значениях температуры ($T = 4$ и $20\,$K) и параметра Хуана–Риса ($S_{HR} = 0.2$ и 0.6), где красная (сплошная) линия и синяя (штриховая) линия обозначают решение задачи по теории возмущений и за ее пределами соответственно. Параметр уширения $\Gamma = 77$ мкэВ

лизмом обобщенной квантовой динамики, в котором вклад от квантовых флуктуаций проявляет себя в перенормировках оператора Грина и вершинной функции. Важно отметить, что равенство параметров перенормировок, которые определяются за пределами теории возмущений, порождает аналогию с хорошо известным в квантовой теории поля тождеством Уорда. Зависимость процессов, дающих вклад в СЭФ экситона, от энергии означает, что здесь проявляются немарковские эффекты, другими словами, нело-

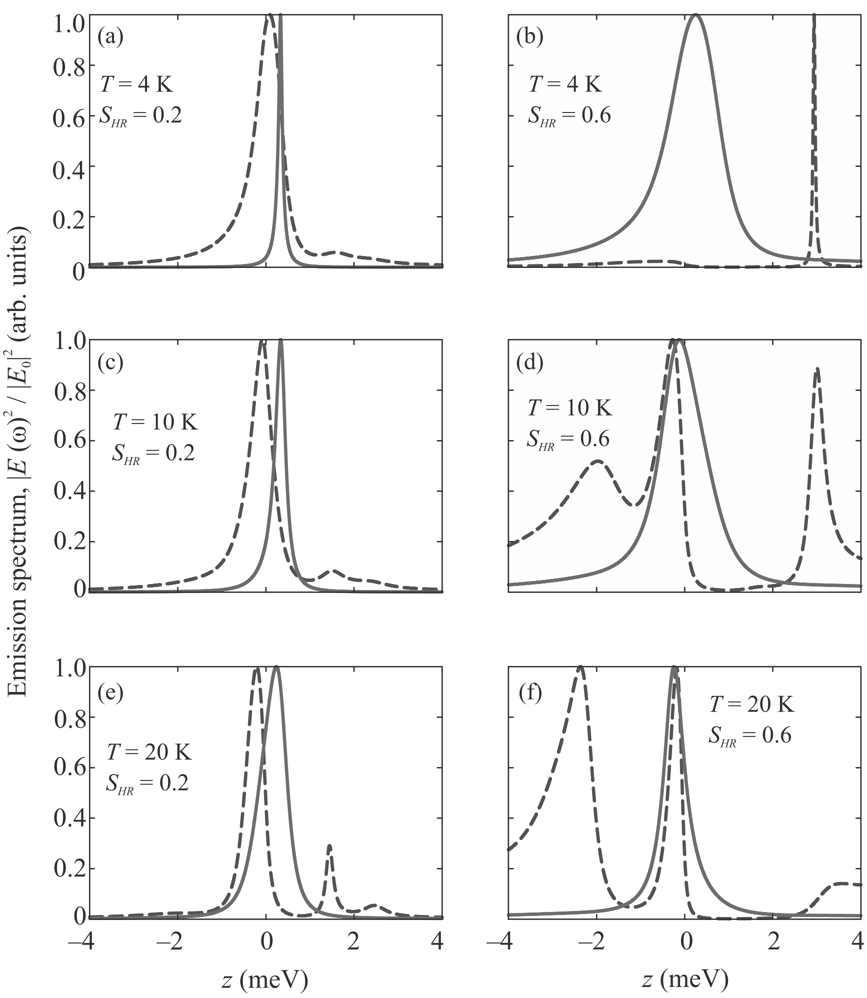

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры излучения КТ при различных температурах (T = 4, 10, 20 K) и параметрах Хуана–Риса (S_{HR} = 0.2 и 0.6), где красная (сплошная) линия и синяя (штриховая) линия обозначают решение задачи по теории возмущений и за ее пределами соответственно. Параметр уширения $\Gamma = 77$ мкэВ

кальность во времени взаимодействия КТ с резервуаром акустических фононов. Вклад от СЭФ с учетом перенормировки приводит к неочевидной зависимости ширины экситон-фотонной связи в спектрах излучения КТ. В случае сильного взаимодействия собственно-энергетический оператор становится частично недиагональным и может приводить к переходам между одетыми состояниями, что может открыть новые возможности для физической реализации кубитов для квантовых вычислений.

---

1. J. L. O'Brien, A. Furusawa, and J. Vučković, Nature Photon. **3**, 687 (2009).
2. S. N. Molotkov and S. S. Nazin, JETP Lett. **63**, 687 (1996).
3. A. V. Krasheninnikov and L. A. Openov, JETP Lett. **64**, 231 (1996).
4. A. M. Bychkov, L. A. Openov, and I. A. Semenihin, JETP Lett. **66**, 298 (1997).
5. M. Hosseini, G. Campbell, B. M. Sparkes, P. K. Lam, and B. C. Buchler, Nature Phys. **7**, 794 (2011).
6. M. Varnava, D. E. Brown, and T. Rudolph, Phys. Rev. Lett. **100**, 060502 (2008).
7. A. V. Naumov, A. A. Gorshelev, M. G. Gladush, T. A. Anikushina, A. V. Golovanova, J. Köhler, and L. Kador, Nano Lett. **18**, 6129 (2018).
8. I. Y. Eremchev, M. Y. Eremchev, and A. V. Naumov, Phys.-Uspekhi **62**, 294 (2018).
9. I. Yu. Eremchev, N. A. Lozing, A. A. Baev, A. O. Tarasevich, M. G. Gladush, A. A. Rozhentsov, and A. V. Naumov, JETP Lett. **108**, 30 (2018).
10. M. G. Gladush, T. A. Anikushina, A. A. Gorshelev, A. V. Naumov, and T. V. Plakhotnik, JETP **128**, 655 (2019).

11. K.R. Karimullin, A.I. Arzhanov, I.Y. Eremchev, B.A. Kulnitskiy, N.V. Surovtsev, and A.V. Naumov, Laser Phys. **29**, 124009 (2019).
12. A.G. Shmelev, A.V. Leontyev, D.K. Zharkov, V.G. Nikiforov, V.S. Lobkov, V.V. Samartsev, R.R. Shamilov, and I.V. Kryukov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **82**, 1027 (2018).
13. A.E. Eskova, A.I. Arzhanov, K.A. Magaryan, K.R. Karimullin, and A.V. Naumov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **84**, 40 (2020).
14. Z. Yuan, B.E. Kardynal, R.M. Stevenson, A.J. Shields, C.J. Lobo, K. Cooper, N.S. Beattie, D.A. Ritchie, and M. Pepper, Science **295**, 102 (2002).
15. S. Strauf, N.G. Stoltz, M.T. Rakher, L.A. Coldren, P.M. Petroff, and D. Bouwmeester, Nature Photon. **1**, 704 (2007).
16. A. Laucht, S. Putz, T. Günthner, N. Hauke, R. Saive, S. Frédérick, M. Bichler, M.-C. Amann, A.W. Holleitner, M. Kaniber, and J.J. Finley, Phys. Rev. X **2**, 011014 (2012).
17. Y.M. He, Y. He, Y.J. Wei, D. Wu, M. Atatüre, C. Schneider, S. Höfling, M. Kamp, C.Y. Lu, and J.W. Pan, Nat. Nanotechnol. **8**, 213 (2013).
18. N. Livneh, M.G. Harats, D. Istrati, H.S. Eisenberg, and R. Rapaport, Nano Lett. **16**, 2527 (2016).
19. N. Somaschi, V. Giesz, L. De Santis et al. (Collaboration), Nature Photon. **10**, 340 (2016).
20. A.J. Nozik, Physica E **14**, 115 (2002).
21. I. Robel, V. Subramanian, M. Kuno, and P.V. Kamat, J. Am. Chem. Soc. **128**, 2385 (2006).
22. A.A. Vashchenko, V.S. Lebedev, A.G. Vitukhnovskii, R.B. Vasiliev, and I.G. Samatov, JETP Lett. **96**, 113 (2012).
23. G. Konstantatos, I. Howard, A. Fischer, S. Hoogland, J. Clifford, E. Klem, L. Levina, and E.H. Sargent, Nature **442**, 180 (2006).
24. S. Strauf, K. Hennessy, M.T. Rakher, Y.-S. Choi, A. Badolato, L.C. Andreani, E.L. Hu, P.M. Petroff, and D. Bouwmeester, Phys. Rev. Lett. **96**, 127404 (2006).
25. J. Yoneda, K. Takeda, T. Otsuka, T. Nakajima, M.R. Delbecq, G. Allison, T. Honda, T. Kodera, S. Oda, Y. Hoshi, N. Usami, K.M. Itoh, and S. Tarucha, Nat. Nanotechnol. **13**, 102 (2018).
26. T. Watson, S. Philips, E. Kawakami, D.R. Ward, P. Scarlino, M. Veldhorst, D.E. Savage, M.G. Lagally, M. Friesen, S.N. Coppersmith, M.A. Eriksson, and L.M.K. Vandersypen, Nature **555**, 633 (2018).
27. A.G. Milekhin, A.I. Nikiforov, O.P. Pchelyakov, S. Schulze, and D.R.T. Zahn, JETP Lett. **73**, 461 (2001).
28. A.G. Milekhin, L.L. Sveshnikova, T.A. Duda, N.V. Surovtsev, S.V. Adichtchev, and D.R.T. Zahn, JETP Lett. **88**, 799 (2008).
29. S. Hughes, P. Yao, F. Milde, A. Knorr, D. Dalacu, K. Mnaymneh, V. Sazonova, P.J. Poole, G.C. Aers, J. Lapointe, R. Cheriton, and R.L. Williams, Phys. Rev. B **83**, 165313 (2011).
30. R.Kh. Gainutdinov, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 5657 (1999).
31. R.Kh. Gainutdinov, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 269 (1989).
32. R.Kh. Gainutdinov, *Metod relyativistskoi T-matritsy i neperturbativnye effecty v spektrakh izlucheniya atomnykh sistem [Relativistic T-matrix method and nonperturbative effects in the radiation spectra of atomic systems] (Dr. habil. (Phys.-Math.) thesis*, Dubna, Joint Institute for Nuclear Research (1993).
33. R.Kh. Gainutdinov, JETP **108**, 1600 (1995).
34. R.Kh. Gainutdinov, K.K. Kalashnikov, and P.F. Schippnick, Sov. Phys. JETP **73**, 73 (1991).
35. R.Kh. Gainutdinov, Sov. J. Nucl. Phys **53**, 885 (1991).
36. R.Kh. Gainutdinov and A.A. Mutygullina, Phys. Rev. C **67**, 014006 (2002).
37. F. Giustino, Rev. Mod. Phys. **91**, 019901 (2019).
38. H.Y. Fan, Phys. Rev. **82**, 900 (1951).
39. A.B. Migdal, Sov. Phys. JETP **7**, 996 (1958).
40. G. Tarel and V. Savona, Phys. Rev. B **81**, 075305 (2010).
41. G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Springer Science & Business Media, N.Y. (2000).
42. M. Bissiri, G. Baldassarri Höger von Högersthal, A.S. Bhatti, M. Capizzi, A. Frova, P. Frigeri, and S. Franchi, Phys. Rev. B **62**, 4642 (2000).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 228 – 232 © 2021 г. 25 августа

Формирование спектральных долин в спектре жесткого рентгеновского излучения путем дифракционной режекторной фильтрации

А. Г. Турьянский[+1)], *В. М. Сенков*[+], *М. З. Зиятдинова*[+*]

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

[*]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 125480 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 9 июля 2021 г.
После переработки 22 июля 2021 г.
Принята к публикации 22 июля 2021 г.

Показана возможность формирования глубоких спектральных долин в полихроматическом спектре рентгеновского излучения с энергией $E \geq 15$ кэВ с помощью дифракционной режекции. Режекция осуществлялась путем пропускания пучка излучения через пластины высокоориентированного пиролитического графита (ВПГ) толщиной 0.73 и 0.58 мм при углах дифракции θ в интервале $3.26^\circ \div 6.98^\circ$. Средние величины углов мозаичности $\Delta\omega$ образцов ВПГ равнялись 0.72° и 0.3°. При режекции полосы спектра с минимумами в области 15.2 и 22.5 кэВ для ВПГ с $\Delta\omega = 0.72^\circ$ получено, соответственно, пяти- и трехкратное ослабление интенсивности излучения вследствие дифракционной экстинкции, а полная ширина на полуглубине долины составляла 1.4 и 3.1 кэВ. Предложенная схема дифракционной фильтрации может быть использована в рентгеновской спектрометрии и в медицинской диагностике для снижения радиационных нагрузок.

DOI: 10.31857/S1234567821160059

Перестраиваемая по энергии режекция спектральных полос в области жесткого рентгеновского спектра $E > 10$ кэВ является одной из актуальных задач рентгеновской спектрометрии и медицинской диагностики. Здесь и далее мы используем термин "спектральная режекция" в том же значении, который принят в радиочастотном и оптическом диапазонах. Необходимость избирательного подавления спектра и создания спектральных долин с помощью режекции в рентгеновском диапазоне возникает при измерениях спектра на фоне интенсивного характеристического излучения [1–3], приводящего к перегрузке спектрометрической системы или искажению измеряемых данных. Другая проблема связана с рассеянием и наложением спектра первичного тормозного излучения на спектр флуоресценции исследуемого объекта [4–6], что резко снижает порог обнаружения слабых флуоресцентных сигналов. Одним из возможных решений этой проблемы является режекция спектральной полосы в первичном спектре, положение которой совмещено с энергетическим положением слабой флуоресцентной линии. В современной медицинской диагностике практически все используемые рентгеновские источники являются полихроматическими, причем основной вклад в интегральный поток создается тормозным излучением [7]. После фильтрации мягкой части спектра абсорбционными фильтрами в рабочем спектре сохраняется достаточно интенсивная и широкая полоса спектра с энергией фотонов от 15–20 до 30 кэВ [8, 9]. Эта часть спектра обычно практически полностью поглощается в теле пациента, и режекция указанного спектрального диапазона, очевидно, может позволить существенно снизить дозовую нагрузку.

Возможность создания спектральной долины в полихроматическом спектре при прохождении рентгеновского излучения через совершенный кристалл следует из динамической теории дифракции [10]. Однако при этом, как показывают оценки, ширина фильтруемой спектральной полосы не превосходит нескольких электрон-вольт, что не представляет интереса для экспериментальной практики. Широкая спектральная долина с полной полушириной на полуглубине (ПШПГ) ~ 1 кэВ в диапазоне энергий $E < 13$ кэВ с использованием первичной дифракционной экстинкции в мозаичном кристалле ВПГ была получена в [5]. В работе [11] была рассмотрена возможность эффективного подавления вторичной экстинкции в ВПГ с помощью структуры в ви-

[1)]e-mail: algeo-tour@yandex.ru

де эшелона тонких пленок. При этом использовались данные коэффициентов пропускания при брегговском отражении для характеристических линий меди CuK_α (8.0 кэВ) и CuK_β (8.9 кэВ). Кристаллы ВПГ имеют сложную блочно-мозаичную структуру, дифракция в которых удовлетворительно не описывается в рамках стандартных моделей рассеяния. Поэтому для практического применения дифракционной фильтрации с использованием ВПГ, очевидно, необходимы достоверные экспериментальные данные о ширине спектрального диапазона, в котором этот метод эффективен. В настоящей работе впервые показано, что режекция спектра с использованием ВПГ может быть эффективна в жестком рентгеновском диапазоне при энергии фотонов $E > 15$ кэВ и предложен метод измерения характеристик создаваемых спектральных долин.

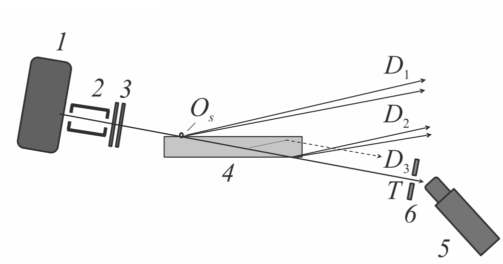

Рис. 1. (Цветной онлайн) Экспериментальная схема измерения: *1* – источник излучения; *2* – коллиматор; *3* – сменные абсорбционные фильтры; *4* – режекторный ВПГ-фильтр; *5* – спектрометр; *6* – диафрагма; O_s – ось вращения ВПГ-фильтра, D_1–D_3, T – соответственно пучки дифрагированного и прошедшего через ВПГ-фильтр излучения

Экспериментальная схема измерения показана на рис. 1. Источником излучения *1* являлась рентгеновская трубка БСВ-21 с медным анодом. Размеры проекции фокуса по ходу первичного пучка составляли 8×0.02 мм. Коллиматором *2* с выходной щелью шириной 50 мкм формировался полихроматический пучок с угловой расходимостью 0.015°. Сменные абсорбционные фильтры *3* из медной фольги толщиной от 8 до 420 мкм обеспечивали фильтрацию мягкой части спектра излучения. В качестве перестраиваемых дифракционных фильтров *4* использовались пластины высокоориентированного пиролитического графита размером $13\times27\times0.73$ мм и $9.5\times25\times0.58$ мм. Кристаллические блоки ВПГ преимущественно ориентированы в кристаллографическом направлении [001] по нормали к поверхности пластины.

Угловой поворот пластины ВПГ относительно первичного пучка осуществлялся вокруг оси O_s. Рентгеновским спектрометром *5* являлся кремниевый SDD детектор (Amptek) с толщиной кристалла 0.5 мм. Энергетическое разрешение детектора на линии меди CuK_β составляло 160 эВ. Для увеличения эффективности регистрации излучения в жесткой области спектра входное окно спектрометра устанавливалось под углом 45° к оси прямого пучка. Расстояния от оси вращения образца до выходной щели коллиматора и до приемного окна спектрометра равнялись, соответственно, 100 и 220 мм. Дифракционные кривые качания измерялись на рентгеновском рефлектометре ComplefleX-5 (CDP Systems), обеспечивающим возможность параллельных измерений на спектральных линиях меди CuK_α, CuK_β и прецизионного линейного сканирования образцов с шагом до 1 мкм.

На рисунке 2 представлены дифракционные кривые качания мозаичных кристаллов ВПГ для отражения (002), полученные на спектральной линии CuK_β (0.139 нм) при фиксированном положении детектирующей системы под удвоенным углом дифракции 23.95°. Угловое положение дифракционного максимума в центре пластины толщиной 0.58 мм (кривая *1*) смещено на 0.22° относительно дифракционного максимума, полученного при линейном смещении от центра к краю образца на 7 мм (кривая *2*). Угол мозаичности $\Delta\omega$, определяемый как полная ширина на полувысоте кривой качания, составляет, соответственно, 0.31° и 0.27°. Это указывает на на-

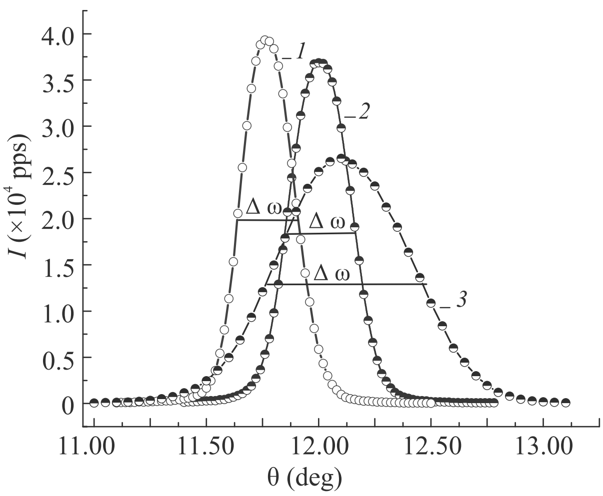

Рис. 2. (Цветной онлайн) Дифракционные кривые качания мозаичных кристаллов ВПГ: кривые *1*, *2* – кристалл толщиной 0.58 мм соответственно в центре пластины и при линейном смещении на 7 мм от центра; *3* – кристалл толщиной 0.73 мм в центре пластины. Соответствующие указанным номерам величины полуширин кривых качания равны 0.27°, 0.31° и 0.72°

личие в объеме кристалла как кристаллических микроблоков [12–14], так и крупных макроблоков размером значительно больше 1 мм. При этом преимущественная кристаллографическая ориентация микроблоков в смежных макроблоках может значительно отличаться. Образец ВПГ толщиной 0.73 мм является более однородным, однако он имеет больший угол мозаичности, средняя величина которого составляет 0.72°. Очевидно, что при статичном положении ВПГ пластины, развернутой на угол θ относительно оси первичного пучка, ширина спектральной долины будет определяться величиной эффективного угла мозаичности $\Delta\omega_{\rm eff}$, а положение минимума эффективной величиной угла дифракции θ. По табулированным данным [15] без учета влияния дифракции длина пути излучения в графите при ослаблении в e раз L_e при энергиях 20 и 30 кэВ составляет, соответственно, 12.3 и 20.7 мм. Это означает, что при дифракции коллимированного пучка в жесткой области спектра происходит значительное уширение его сечения (рис. 1, лучи D_1, D_2). Дополнительное угловое уширение отраженного излучения обусловлено мозаичностью ВПГ. При этом для четного числа дифракционных отражений в объеме ВПГ возможно также уширение проходящего через мозаичный кристалл пучка (рис. 1, луч D_3). Влияние этого уширения устраняется путем установки диафрагмы по ходу прошедшего через пластину ВПГ пучка, либо путем увеличения расстояния между пластиной ВПГ и спектрометром.

В рассматриваемом диапазоне энергий зависимость коэффициента пропускания $T(E)$ коллимированного рентгеновского пучка через кристалл ВПГ может быть выражена через полное сечение взаимодействия $\sigma_{\rm tot}$ [16, 17]

$$T(E) = I(E)/I_0(E) = \exp\left[-\frac{\rho l N_A \sigma_{\rm tot}(E)}{uA}\right], \quad (1)$$

$$\sigma_{\rm tot}(E) = \sigma_{\rm ph}(E) + \sigma_{\rm Re}(E) + \sigma_{\rm C}(E) + \sigma_d(E, \mathbf{k}), \quad (2)$$

где I, I_0 – интенсивности, соответственно, прошедшего через кристалл ВПГ и первичного пучков, ρ – физическая плотность кристалла ВПГ, l – длина пути излучения в ВПГ, N_A – число Авогадро, u – атомная единица массы, A – относительная атомная масса углерода, $\sigma_{\rm ph}$ – сечение фотопоглощения, $\sigma_{\rm Re}$ – сечение рэлеевского рассеяния, $\sigma_{\rm C}$ – сечение комптоновского рассеяния. В выражение для полного сечения взаимодействия (2) добавлен член σ_d, описывающий дифракционное рассеяние. Все компоненты полного сечения рассеяния являются функцией энергии E рентгеновских фотонов, проходящих через ВПГ.

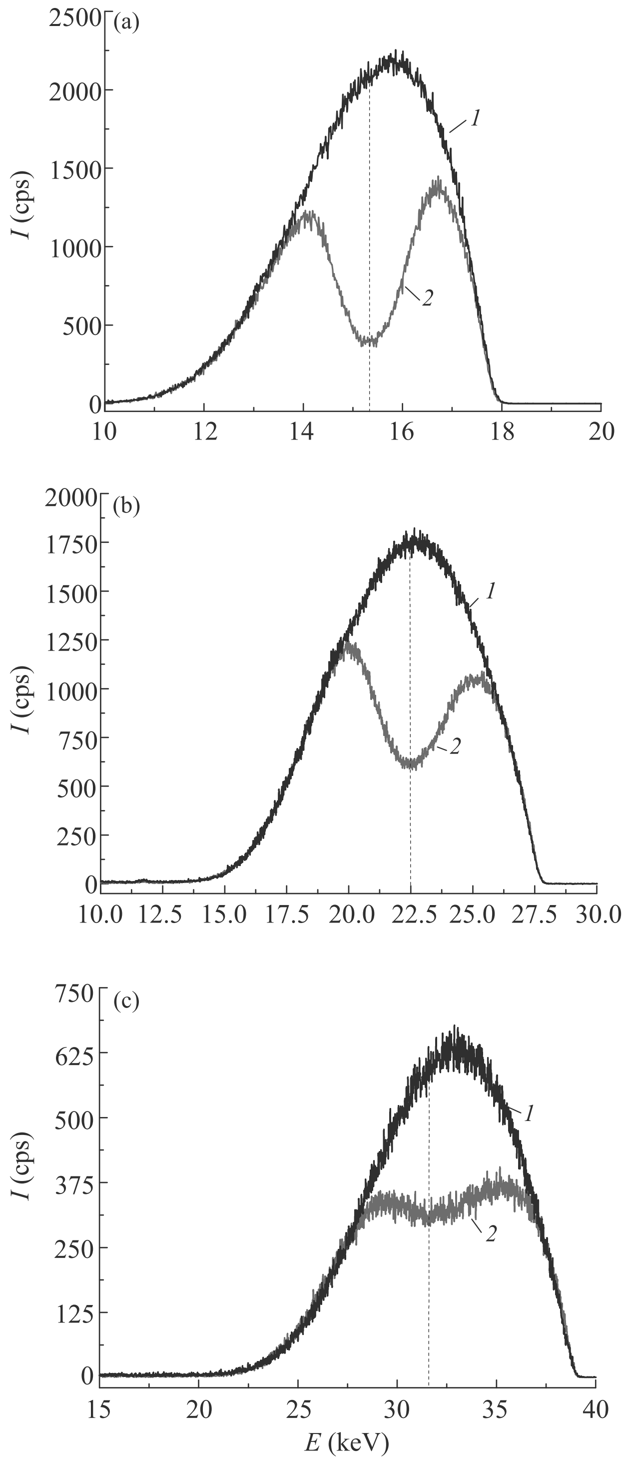

Рис. 3. (Цветной онлайн) Экспериментальные спектры пропускания через ВПГ фильтр ($\omega = 0.72°$): при дифракционной режекции излучения (*1*) и настройке фильтра на минимум пропускания области энергий: 15.2 кэВ (a); 22.5 кэВ (b); 32.5 кэВ (c); без дифракционной режекции (*2*) при сохранении аналогичной величины пути излучения кристалла

При этом в ограниченной угловой зоне σ_d зависит также от направления волнового вектора падающего излучения $\mathbf{k}$ и при выходе из указанной зоны $\sigma_d \to 0$. Экспериментально измеряемая зависимость спектра пропускания $S_{\rm ex}(E)$ описывается следующим выражением:

$$S_{\rm ex}(E) = S_0(E)D(E)T(E), \qquad (3)$$

где $S_0(E)$ – спектр излучения, падающий на кристалл ВПГ, $D(E)$ – энергетическая зависимость эффективности регистрации спектрометром, $T(E)$ – коэффициент пропускания, определяемый выражениями (1), (2). Положим, что обеспечены условия для проведения двух последовательных спектрометрических измерений, при которых первичный спектр и величины параметров ρ и l сохраняются неизменными, а величина σ_d путем варьирования угла θ устанавливается максимальной $\sigma_d = \sigma_{\rm max}$ при дифракционной режекции и стремящейся к нулю вне области брегговской дифракции. При этом сохранение фиксированным параметра l при изменении угла θ может быть достигнуто при линейном сканировании путем смещения координаты ввода пучка в кристалл ВПГ. Очевидно, что в этом случае отношение $S = S_{\rm ex}(E, \sigma_d = \sigma_{\rm max})/S_{\rm ex}(E, \sigma_d = 0)$ позволяет определить спектральные долины, возникающие при дифракционной режекции, независимо от вида функций $S_0(E)$ и $D(E)$, описывающих первичный спектр излучения и энергетическую зависимость эффективности регистрации спектрометра. Полученная функция, как следует из (3), описывает энергетическую зависимость отношения коэффициентов пропускания с режекцией и без режекции.

На рисунке 3 представлены экспериментальные спектры пропускания через ВПГ фильтр толщиной 0.73 мм при дифракционной режекции излучения (кривая *1*) и без режекции (кривая *2*). Спектры с дифракционной режекцией получены при углах дифракции θ, равных 6.98° (a), 4.71° (b), 3.26° (c) с использованием фильтров из медной фольги с суммарной толщиной, соответственно, 8, 24 и 420 мкм. При этом ускоряющее напряжение на рентгеновской трубке, соответственно, составляло 17.8, 28 и 39 кВ. Для исключения дифракционной режекции в измеренной полосе спектра пластина ВПГ поворачивалась на угол θ' удовлетворяющий условию $\theta - \theta' > \Delta\omega$. При этом путем линейного смещения пластины относительно рентгеновского пучка обеспечивалась сохранение длины пути l излучения в ВПГ фильтре.

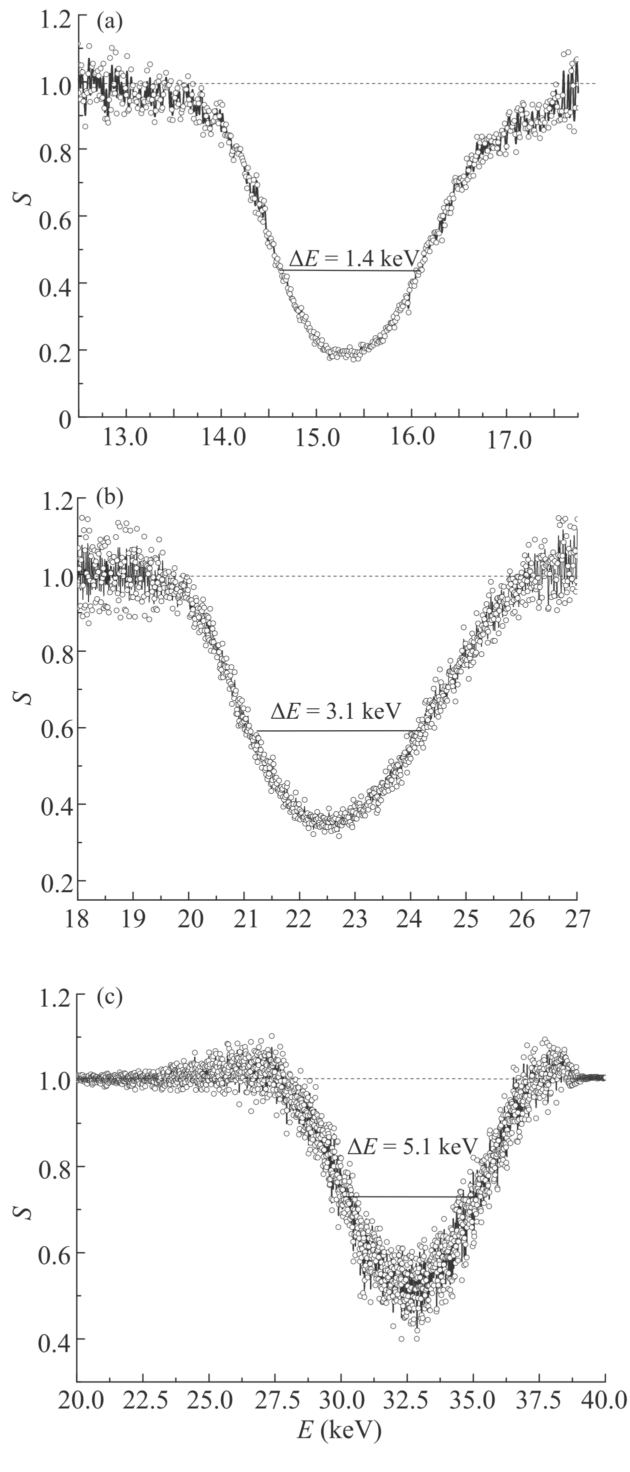

Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектральные долины, создаваемые при пропускании полихроматического пучка через кристалл ВПГ ($\omega = 0.72°$), при настройке фильтра на минимум пропускания области энергий: 15.2 кэВ (a); 22.5 кэВ (b), 32.5 кэВ (c)

Экспериментальные отношения $S_r(E) = S_{\rm ex}(E, \sigma_d = \sigma_{\rm max})/S_{\rm ex}(E, \sigma_d = 0)$, описывающие полученные спектральные долины при указанных выше углах дифракции, представлены на рис. 4a–c. При угле $\theta = 6.98°$ минимум спектральной долины наблюдается в области 15.2 кэВ, а полная ширина на полуглубине, определяемая согласно [18], составляет 1.4 кэВ. При последовательном уменьшении углов θ до 4.71° и 3.26° минимумы спектральной долины смещаются в сторону больших энергий, соответственно, до 22.5 и 32.5 кэВ. При этом величина ПШПГ при $\theta = 3.26°$ возрастает до 5.1 кэВ. Наблюдаемое положение минимумов спектральных долин соответствует ожидаемому из брэгговского условия дифракции при указанных выше углах θ. Что же касается величины ПШПГ, то вследствие большой длины пути излучения в ВПГ ($l = 13$ мм при $\theta = 3.26°$) она, очевидно, определяется эффективной величиной угла мозаичности $\Delta\omega_{\text{eff}}$, которая зависит как от локальной величины $\Delta\omega$, так и от углового отклонения преимущественной ориентации макроблоков в пластине ВПГ (рис. 2).

Полученные результаты показывают, что в исследованном диапазоне энергий $15.2 \div 32.5$ кэВ дифракционная режекция спектра эффективна и может быть использована на практике. В силу монотонного характера снижения структурного фактора с увеличением E указанная верхняя граница не является рабочим пределом и может быть расширена по меньшей мере до $40 \div 45$ кэВ. С учетом полученных ранее результатов [5, 11] максимальный рабочий диапазон может быть принят равным $6 \div 45$ кэВ. При этом в узком спектральном диапазоне $E \leq 1 \div 2$ кэВ эффективность режекции может быть увеличена путем выбора кристаллов ВПГ с меньшим углом мозаичности или последовательно расположенных кристаллов ВПГ при фиксированном угле дифракции [11]. При использовании последовательно расположенного набора кристаллов ВПГ, установленных под различными углами дифракции θ, может формироваться спектральная долина шириной до 10 кэВ. Это позволяет решить проблему избыточной дозовой нагрузки при медицинской диагностике с использованием полихроматических рентгеновских пучков. Важным преимуществом дифракционной режекторной фильтрации является возможность настройки энергетического положения центра спектральной полосы режекции, что представляет большой интерес при измерении спектров с интенсивными спектральными линиями и рентгенофлуоресцентном анализе слабых сигналов.

1. Z. Zhang, H. Nishimura, T. Namimoto et al. (Collaboration), Rev. Sci. Instrum. **83**, 053502 (2012).
2. T. W. L. Sanford, D. Mosher, J. Groot et al. (Collaboration), SANDI REPORT. SAND 96-0222, UC-706, 10–14 June 1996, IET, Prague, Czech Republic (1996).
3. E. V. Parkevich, I. N. Tilikin, A. V. Agafonov, T. A. Shelkovenko, V. M. Romanova, A. R. Mingaleev, S. Yu. Savinov, G. A. Mesyats, and S. A. Pikuz, JETP Lett. **103**, 357 (2016).
4. *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*, ed. by B. Beckhoff, B. Kanngiesser, N. Langhoff, R. Wedell, and H. Wolff, Springer-Verlag, Berlin – Heidelberg (2006).
5. A. G. Tur'yanskii, S. S. Gizha, V. M. Senkov, I. V. Pirshin, and Ya. M. Stanishevskii, JETP Lett. **104**, 417 (2016).
6. P. J. Statham, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **107**, 531 (2002).
7. M. Bhat, J. Pattison, G. Bibbo, and M. Caon, Med. Phys. **25**, 114 (1998).
8. D. O. Odeh, S. A. Jonah, H. Ali, and G. O. Ogbanje, Open Research Journal of Radiology. **1**, 1 (2013).
9. S. Shrestha, S. Vedantham, and A. Karellas, Phys. Med. Biol. **62**, 1969 (2017).
10. З. Г. Пинскер, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах*, Наука, М. (1974).
11. A. G. Turyanskiy and S. S. Gizha, X-Ray Spectrom. **49**, 434 (2020).
12. H. Legall, H. Stiel, V. Arkadiev, and A. A. Bjeoumikhov, Opt. Express **14**, 4570 (2006).
13. A. G. Turiyanskii and I. V. Pirshin, Instrum. Exp. Tech. **54**, 558 (2011).
14. A. G. Tur'yanskii, S. S. Gizha, and V. M. Senkov, Tech. Phys. Lett. **39**, 573 (2013).
15. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables **54**, 181 (1993).
16. L. Gerward, Z. Naturforsch. **37a**, 451 (1982).
17. J. H. Hubbell and S. M. Seltzer, *Tables of X-ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients 1 keV to 20 MeV for Elements Z = 1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest*, NISTIR 5632 (1995).
18. M. A. Viray, E. Paradis, and G. Raithel, New J. Phys. **23**, 063022 (2021).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 233 – 241 © 2021 г. 25 августа

Электронный нагрев кластерной плазмы ультракоротким лазерным импульсом

Д. А. Гожев[+], *С. Г. Бочкарев*[+*1)], *В. Ю. Быченков*[+*]

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

[*]*Центр фундаментальных и прикладных исследований, Федеральное государственное унитарное предприятие "Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова", Росатом, 127055 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 3 июня 2021 г.
После переработки 6 июля 2021 г.
Принята к публикации 15 июля 2021 г.

Исследовано взаимодействие экстремально короткого (~ 10 фс) лазерного импульса релятивистской интенсивности ($\gtrsim 10^{18}$ Вт/см^2) с кластерной средой, характеризуемой случайным распределением больших, суб-микронного размера, кластеров из тяжелых атомов. Найдены условия согласования параметров кластерной среды и лазерного импульса, при которых для заданной энергии лазера выход горячих электронов оказывается максимальным. Стохастическая динамика лазерно-нагретых электронов в кулоновских полях кластеров после прохождения импульса определяет формирование плато с признаками квази-моноэнергетичности в энергетическом спектре электронов в области энергий порядка пондеромоторной, что важно для генерации вторичного электромагнитного излучения.

DOI: 10.31857/S1234567821160060

Лазерное ускорение заряженных частиц и генерация вторичного электромагнитного излучения (ЭМИ) являются предметом пристального внимания фундаментальных исследований и возможных применений в ядерной физике [1, 2], в области ЛТС (лазерного термоядерного синтеза) [3, 4], радиографии [5], радиационной медицине [6, 7] и ядерной фармакологии [8], а также представляет интерес для лабораторной астрофизики и физики экстремального состояния вещества [9]. Активно ведется поиск оптимальных схем ускорения заряженных частиц для целей повышения их энергии и управления характеристиками вторичного излучения, в том числе и с применением микроструктурированных мишеней, "мишеней ограниченной массы", кластеров, а также пылевой плазмы [10–19].

Поглощение лазерной энергии в кластерной плазме может быть намного более эффективным, чем поглощение энергии при взаимодействии с твердотельными или газовыми мишенями, поскольку кластерная среда обладает, с одной стороны, хорошей прозрачностью, с другой – высокой средней плотностью частиц. Уже признается, что выход жесткого рентгеновского излучения [18] и гамма-излучения [17, 20, 21] может быть повышен при кластеризации газовой среды. Типично размер кластеров намного меньше длины волны света, что характеризует среду как наноструктурированную. Однако в настоящее время для экспериментов доступны большие кластеры из тяжелых элементов (например, Xe) [22, 23], и микрокапли, включая дейтерий-содержащие (для генерации нейтронов) [16, 24] – структуры субмикронного масштаба, получаемые при сверхзвуковом разлете мини-струй в вакуум. Современные технологии также позволяют получать металлические субмикронные образования, своего рода сверхмелкодисперсную пылевую среду в сильно разреженном газе (вакууме) с помощью разных подходов, в том числе с помощью специальных генераторов [25, 26], электрического взрывного распыления суб-микронной металлической пыли (золото, серебро) [27]. Лазерное облучение таких кластеров открывает новые возможности для приложений, включая аномально высокий нагрев электронов [13]; генерацию пучков протонов (дейтронов), набирающих высокую энергию в результате кулоновского взрыва; генерацию нейтронов [16], а также для создания яркого контрастного источника рентгеновского излучения [13, 28]. Соответствующие целенаправленные эксперименты требуют полного понимания, какие размеры кластеров и средняя плотность среды могут обеспечить наиболее эффективное взаимодействие с лазерным импульсом, что пока недостаточно хорошо исследовано. Важный шаг в этом направле-

1)e-mail: bochkarevsg@lebedev.ru

нии делается в данной статье в рамках решения фундаментальной задачи создания оптимального источника высокоэнергетичных электронов, который для заданной мощности лазерного импульса мог бы обеспечить максимальный выход горячих частиц и вторичного ЭМИ, от ТГц до рентгеновского диапазона.

Здесь изучаются особенности лазер-кластерного взаимодействия в случае очень коротких лазерных импульсов и достаточно крупных кластеров из тяжелых атомов, когда они не успевают разрушиться в течение импульса. И то и другое находится в русле современных лазерных и нанокластерных технологий. Так, для лазеров высоких энергий (мульти-Дж) современные достижения в так называемой посткомпрессии импульсов демонстрируют их укорочение до длительностей порядка 10 фс при ПВт уровне мощности [29], а для лазеров невысокой энергии (до сотни мДж) достигнуты достаточно высокие частоты следования импульсов (сотни Гц) [16], допускающие высокое вложение энергии за ограниченное время. С другой стороны, получение кластеров размером в сотни нанометров уже стало рутинной процедурой. Такие технологии получения ультракоротких лазерных импульсов и крупных кластеров (капель) сулят продвижение в создании практически интересных компактных источников вторичного излучения на основе эффективного ускорения и нагрева электронов, хотя пока без полноценного обоснования. Ниже на основе теоретических оценок и трехмерного численного моделирования найдено условие согласования лазер-кластерных параметров, позволяющее максимизировать выход горячих электронов требуемой энергии при облучении ансамбля микрокластеров ультракоротким лазерным импульсом.

Проведение “в лоб” трехмерного кинетического моделирования кластерной плазмы в пространственных масштабах, представляющих практический интерес, либо невозможно, либо неимоверно ресурсозатратно, что требует физически оправданной и в то же время реалистичной по ресурсам модели. Поэтому мы проводили расчет в небольшой (относительно нагреваемого лазером фокального объема) области кластерной среды. В этом случае лазерное поле допускает моделирование в плоско-волновом приближении. В поперечных направлениях рассматриваемой области со случайно расположенными кластерами применимы периодические граничные условия, как для электромагнитных полей, так и для частиц. В продольном направлении для ЭМ полей использовалось условие впуска-выпуска, а для частиц – условие поглощения. Хотя электроны, вылетающие в продольном направлении, в принципе, заряжают область моделирования, их число не превышало 10 %, что позволяло пренебречь этим эффектом. Естественно, в расчетах это контролировалось.

Чтобы оптимизировать лазер-кластерное взаимодействие, необходимо согласовать параметры лазерного импульса и параметры кластерной среды. Для эффективного нагрева кластерного газа в фокальном объеме (чтобы обеспечивать максимально возможное число нагреваемых электронов) требуется как достаточно высокая средняя плотность среды (порядка критической плотности), так и хорошее проникновение в нее светового импульса, т.е. среднее расстояние между центрами кластеров, s, и диаметр кластеров, d, должны удовлетворять условиям:

$$s - d \sim \lambda, \quad d \ll \lambda - d, \tag{1}$$

где λ – длина волны излучения. С другой стороны, диаметр кластера не должен быть слишком малым, чтобы обеспечивать максимально возможное число нагреваемых электронов, которое пропорционально числу взаимодействующих с лазером частиц, т.е. объему скин-слоя кластера, $\propto d^2$. Эффективность генерации горячих электронов будем определять путем максимизации числа горячих электронов (ΔN_e) в нагреваемом лазером фокальном объеме (с фиксированной энергией лазера $W \approx cE_\mathrm{L}^2 S\tau/8\pi$). Здесь $S = \pi D^2/4$ – площадь лазерного пятна, D – его диаметр, τ – длительность импульса, E_L – амплитуда поля волны. Горячими (или суперпондеромоторными) электронами будем называть электроны, которые нагреты/ускоренны до энергии порядка или выше пондеромоторной энергии (температуры) $T_\mathrm{pnd} = m_e c^2\left(\sqrt{1+a^2/2}-1\right)$. Число таких электронов в кластере определяется глубиной нелинейного скин-слоя [30–32]: $l_\mathrm{NS} = \lambda n_\mathrm{c} a/(\pi\sqrt{2}n_\mathrm{e})$, отвечающей учету баланса сил, действующих на вырываемые электроны,

$$E_\mathrm{C} \approx E_\mathrm{L}. \tag{2}$$

Здесь n_e – плотность электронов кластера, $n_\mathrm{c} = m_e\omega^2/(4\pi e^2)$, m_e и e – критическая плотность, масса и заряд электрона, ω – частота лазера, c – скорость света, $a = eE_\mathrm{L}/(m_e c\omega) = 0.85\cdot 10^{-9}(I_\mathrm{L}\lambda_\mu^2)^{1/2}$ – стандартная безразмерная амплитуда релятивистски интенсивной лазерной волны, $a \gtrsim 1$, I_L – интенсивность в Вт/см^2, λ_μ – длина волны в мкм, E_C – напряженность кулоновского поля на поверхности кластера. Тогда максимальное число горячих электронов можно оценить следующим образом:

$$\Delta N_\mathrm{e} \approx \pi d^2 l_\mathrm{NS} n_\mathrm{e} N_\mathrm{cl} \approx \frac{W}{m_\mathrm{e}c^2} d^2 L n_\mathrm{cl}\frac{\lambda}{c\tau}\frac{\sqrt{2}}{a}, \tag{3}$$

где $N_{\rm cl}$ и $n_{\rm cl}$ – число и плотность кластеров в фокальном объеме (т.е. в области объемом $V = SL$), L – характерная длина нагреваемой области (длина взаимодействия), которая определяется истощением импульса [33]:

$$L \sim c\tau a n_c/(4\bar{n}_{\rm e}) \approx c\tau s^3/(3\lambda d^2). \qquad (4)$$

Здесь $\bar{n}_{\rm e} = \pi d^2 l_{\rm NS} n_{\rm e} n_{\rm cl}$ – средняя электронная плотность межкластерной плазмы. При фиксированной энергии лазера

$$\Delta N_{\rm e} \approx \frac{\sqrt{2}}{3a}\frac{W}{m_{\rm e}c^2} \propto 1/a. \qquad (5)$$

В последних двух соотношениях было учтено, что $n_{\rm cl} \approx 1/s^3$, т.е. оптимально плотное заполнение среды кластерами, а значит $d^2 L n_{\rm cl} \approx c\tau/(3\lambda)$. Соответственно, число нагреваемых частиц снижается при увеличении интенсивности лазерного импульса корневым образом, $\Delta N_{\rm e} \propto 1/\sqrt{I_{\rm L}}$. Наиболее естественным ограничением длины взаимодействия L могла бы являться стандартная длина ослабления света в результате рассеяния Ми на микрокластерах, $\approx (n_{\rm cl}\sigma_{\rm Mie})^{-1}$, где $\sigma_{\rm Mie} = \sigma_{\rm Mie}(d,\lambda)$ – сечение рассеяния Ми на сферической микрочастице. Такое ограничение имеет место в случае слабых лазерных импульсов. Однако для рассматриваемых параметров лазер-плазменного взаимодействия длина истощения релятивистски интенсивного лазерного импульса, в силу достаточно высокой электронной плотности образующейся плазмы, оказывается короче – примерно в два раза меньше (см. ниже) длины ослабления в результате рассеяния Ми. Дело в том, что сказываются значительные пондеромоторные потери энергии импульса (из-за так называемого эффекта “snow plow” [33]). По этой причине в оценке фокального объема следует использовать именно оценку (4).

Другой важной характеристикой источника является коэффициент конверсии в энергию горячих электронов – отношение энергосодержания горячих частиц ($\Delta E_{\rm e}$) в нагреваемом лазером фокальном объеме к энергии лазера W:

$$\frac{\Delta E_{\rm e}}{W} \approx \frac{1}{3}\left((1+2/a^2)^{1/2} - \sqrt{2}/a\right) \lesssim 1. \qquad (6)$$

Здесь энергосодержание горячих электронов определено как суммарная энергия частиц, вырванных из скин-слоя с энергией порядка пондеромоторной, $\Delta E_{\rm e} = \Delta N_{\rm e} T_{\rm pnd} \approx \pi d^2 n_{\rm e} N_{\rm cl} T_{\rm pnd} l_{\rm NS}$. Так как $1/3 < \left((1+2/a^2)^{1/2} - \sqrt{2}/a\right) \lesssim 1$ для рассматриваемых интенсивностей ($a \gtrsim 1$), то полученный коэффициент конверсии в самом деле демонстрирует эффективное преобразование энергии лазера в горячие электроны, $\Delta E_{\rm e}/W \lesssim 1$. Можно заметить слабый плавный рост и насыщение $\Delta E_{\rm e}/W$ при увеличении a. Конверсия лазерной энергии в энергию электронов $\Delta E_{\rm e}/W$ согласно (6) увеличивается с 10 до 30 % при изменении a от 1 до 10, а затем практически не меняется. Таким образом, из-за практически отсутствующей зависимости оптимального коэффициента трансформации от лазерной интенсивности (слабой зависимости $\Delta E_{\rm e}/W$ от a) и $\Delta N_{\rm e} \propto 1/a$, согласно (3), можно получать либо большее число частиц с меньшей энергией при $a \gtrsim 1$, либо меньшее число частиц, но с большей энергией при $a > 1$. В целом следует, что оптимальный режим нагрева отвечает оптимальной плотности кластеров $n_{\rm cl} \approx 1/s^3 \sim 1/\lambda^3$ и условию $a \gtrsim 1$. При энергии лазера $W \approx I_0 \tau\pi D_0^2/4 \approx 300$ мДж, ожидается выход горячих электронов $\Delta N_{\rm e} \lesssim W/m_e c^2 \approx 4\cdot 10^{12}$ с энергией свыше 100 кэВ для следующего набора параметров, отвечающих рассматриваемому ниже базовому случаю: интенсивности $I_0 = 2\cdot 10^{18}$ Вт/см^2 ($a = 1.2$), длительности $\tau = 10$ фс и диаметру фокального пятна $D_0 \approx 45$ мкм по уровню интенсивности $1/e_{\rm N}$, где $e_{\rm N} \approx 2.71$. Как показывают результаты численного моделирования (см. ниже), уже такие простые рассуждения позволяют выбрать оптимальную плотность кластеров и качественно предсказать эффективность нагрева кластерной плазмы, хотя важные детали распределения нагретых электронов требуют численного исследования.

3D PIC моделирование воздействия сверхкороткого мощного лазерного импульса на кластерную среду было выполнено с помощью кода “частица-в-ячейке” (PIC) “Мандор” [34]. Был выбран следующий размер расчетной области: $[\Delta x \times \Delta y \times \Delta z] = [4.2\lambda \times 3.6\lambda \times 3.6\lambda]$, где $\lambda = 1$ мкм, а пространственное разрешение составляло $\lambda/600 \times \lambda/200 \times \lambda/200$ в направлениях x, y, z, соответственно. Качественная схема постановки численного моделирования дана на рис. 1. Линейно-поляризованный лазерный импульс распространяется в положительном направлении оси x и поляризован по оси y. Интенсивность лазерного излучения варьировалась в диапазоне $I_{\rm L} = (2 \div 34)\cdot 10^{18}$ Вт/см^2 ($a = 1.2 \div 5$), длительность $\tau = 10$ фс (FWHM). Время входа в расчетную область максимума импульса относительно начального момента времени ($t = 0$ фс) составляет $t_{\rm off} = 30$ фс. Время расчета составляло 100 фс. Лазерная волна на границе области задается в виде $E_y = E_{\rm L} g(t)$, здесь $g(t) = \exp(-(t-t_{\rm off})^2/\tau_*^2)$ – огибающая лазерной волны, $\tau_* = \tau/\sqrt{2\ln(2)}$, $c\tau < \Delta x$. В задаче рассматривались большие кластеры (суб-микронного размера) с

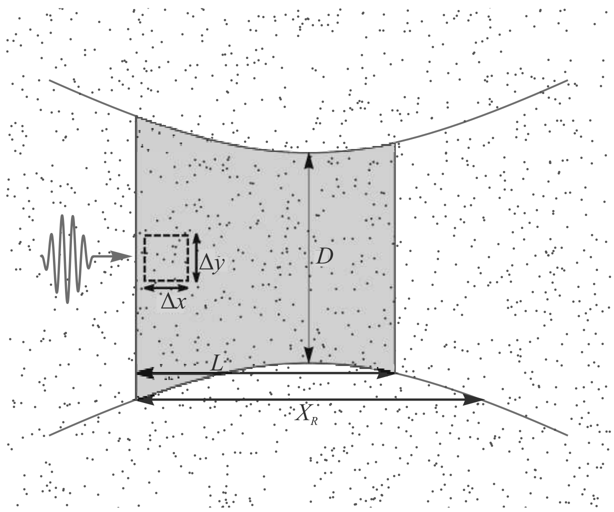

Рис. 1. (Цветной онлайн) Качественная иллюстрация постановки численного моделирования. Показано сечение, (XY), фокальной области лазер-плазменного взаимодействия (выделена розовым цветом), внутри которой схематично изображена расчетная область (внутри прямоугольника $\Delta x \times \Delta y$ – пунктир) и распространяющийся лазерный импульс. Здесь D – диаметр лазерного пятна, L – длина истощения импульса, $x_R = \pi D^2/\lambda$ – рэлеевская длина

диаметром, превосходящим глубину скин-слоя. Мишень представляла собой сферические микрокластеры диаметром $d = 0.2\lambda$ ($\lambda = 1$ мкм) и с электронной плотностью $n_{\rm e} = 200 n_{\rm c}$. В расчетах используются тяжелые многозарядные ионы, для определенности, золото ($M_{\rm i} \approx 197$ а.е.м.) с модельной плотностью $n_{\rm i} = n_{\rm e}/Z$, где $Z = 20$ – заряд иона (уровень ионизации), что позволяет проводить расчеты с приемлемым разрешением. Расположение отдельных кластеров (27 штук) выбиралось случайно, однако, среднее расстояние между центрами было одинаковым, $s = 1.2\lambda$. Используемая в работе модель среды из больших кластеров (субмикронной пудры) в вакууме или остаточном газе является стандартной (см., например, [20]). Ионы считаются подвижными, что позволяет описывать динамику плазмы на масштабе времени, заметно превосходящем длительность лазерного импульса. Моделирование продемонстрировало, что после вырывания электронов из скин-слоя кластеров, в их окрестности возникает сильное кулоновское поле, которое слабо экранировано и спадает немного быстрее, чем кулоновское поле заряда в вакууме, что качественно согласуется с решением уравнения Пуассона, описывающего распределения электростатического поля и потенциала для пробного кластера на фоне ансамбля микрокластеров (см. ниже). Характерное значение квазистационарного кулоновского поля в 3D PIC расчетах оказывается сопоставимым ($(2 \div 4) \cdot E_{\rm L}$) по порядку величины с полем лазерной волны (ср. (2)). Несмотря на то, что лазерный импульс достаточно быстро покидает область взаимодействия, электростатическое кулоновское поле вследствие медленного расширения кластера уменьшается достаточно долго и оказывает существенное влияние на пост-динамику лазерно-нагретых электронов. Так, через 40 фс после момента, когда пик лазерного импульса покидает область взаимодействия, максимальное значение квазистационарного кулоновского поля спадает примерно в 2 раза (для $a = 1.2$), что связано с медленным расширением ионного фронта, и становится примерно равным амплитуде поля лазерной волны. Характерные углы рассеяния электронов на заряженных кластерах, даже в течение времени взаимодействия с лазерным импульсом, оказываются большими (~ 1 рад), что не позволяет описывать коллективные эффекты рассеяния с помощью стандартной теории кулоновского рассеяния на малые углы (ср. [35]).

Рассмотрим теперь динамику энергетических распределений ускоренных электронов (см. рис. 2) для параметров лазера, отвечающих базовому

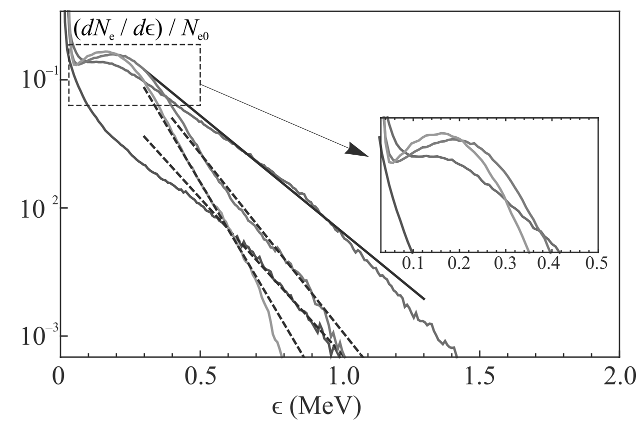

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры электронов на моменты времени $t = 30$ (синий), 40 (красный), 50 (зеленый), 80 (оранжевый) фс для $s = 1.2\lambda$, $d = 0.2\lambda$. На вставке показано формирование и развитие характерного плато с тенденцией квазимоноэнергетичности горячих электронов. Пунктирные линии демонстрируют экспоненциальное приближение ($dN_{\rm e}/d\epsilon \propto \exp(-\epsilon/T_{\rm h})$)

случаю ($a = 1.2$). К моменту входа максимума лазерного импульса в расчетную область ($t = 30$ фс) формируется монотонно-спадающий спектр (синяя кривая), однако со временем в спектре выделяется характерная область плато (хорошо видна на вставке). При этом, если незадолго до ухода импульса (красная кривая) распределение обогащено горячими (супер-пондеромоторными) электронами, температура которых ($T_{\rm h} \approx 240$ кэВ) несколько превосходит пондеромоторную температуру (160 кэВ), то чуть позднее происходит разлет плазмы, в результате падает как температура горячих электронов в спектре, так и максимальная энергия электронов. Характерное время ускорения ионов, за которое ускоряется незначительная часть горячих ионов в результате медленного расширения кластеров, составляет $\gtrsim 100$ фс.

Таким образом, после того, как лазерный импульс покидает расчетную область в энергетическом спектре электронов, происходит их перераспределение по энергии: уменьшается количество самых горячих электронов (уменьшение эффективной температуры высоко-энергетичных частиц); возрастает число умеренно-нагретых частиц, что характеризуется образованием плато в диапазоне энергий электронов, включая значения, превосходящие пондеромоторную энергию (супер-пондеромоторные электроны, $\epsilon > T_{\rm pnd}$). Плато сохраняется до окончания времени расчета (100 фс), оно будет исчезать на масштабе порядка времени обмена энергии горячих электронов с холодными. В целом такая релаксация электронного распределения имеет место для всех значений a из рассматриваемого диапазона, и выглядит как диффузия в пространстве энергии с формированием небольшой квазимоноэнергетичности электронов супер-пондеромоторных энергий.

Энергетическая ширина области плато из расчетов для разных a дана в табл. 1. Так, средняя энергия частиц из плато близка к температуре суперпондеромоторных электронов ($\epsilon_{\rm av} \gtrsim T_{\rm h}$). В процентном отношении число электронов из области плато составляет примерно от 50 % (для $a = 1.2$) до 35 % ($a = 5$) по отношению к числу горячих электронов с энергией выше $\epsilon_0 = 100$ кэВ.

Таблица 1. Зависимость характеристик ускоренных электронов от амплитуды поля (a) на момент времени $t = 60$ фс: ширина области плато ($\Delta\epsilon$) энергетического спектра (в МэВ), средняя энергия электронов ($\epsilon_{\rm av}$) из области плато (в МэВ), а также температура горячих (супер-пондеромоторных) электронов, $T_{\rm h}$ в МэВ, относительное число горячих электронов в расчетной области ($\Delta\widetilde{N}_{\rm e}/\widetilde{N}_{\rm e0}$) и в нагреваемом лазером фокальном объеме ($\Delta N_{\rm e}/N_{\rm e0}$) с энергией выше $\epsilon_0 = 100$ кэВ

a	$\Delta\epsilon$	$\epsilon_{\rm av}$	$T_{\rm h}$	$\Delta\widetilde{N}_{\rm e}/\widetilde{N}_{\rm e0}$	$\Delta N_{\rm e}/N_{\rm e0}$
1.2	0.26	0.17	0.14	0.06	0.06
2	0.68	0.50	0.22	0.11	0.04
3	1.63	1.02	0.30	0.16	0.03
4	3.00	1.80	0.39	0.23	0.02
5	4.32	2.60	0.53	0.29	0.02

При увеличении интенсивности лазерного импульса область плато расширяется, а его середина смещается в сторону бóльших энергий (изменение энергетического спектра показано на рис. 3). Так при

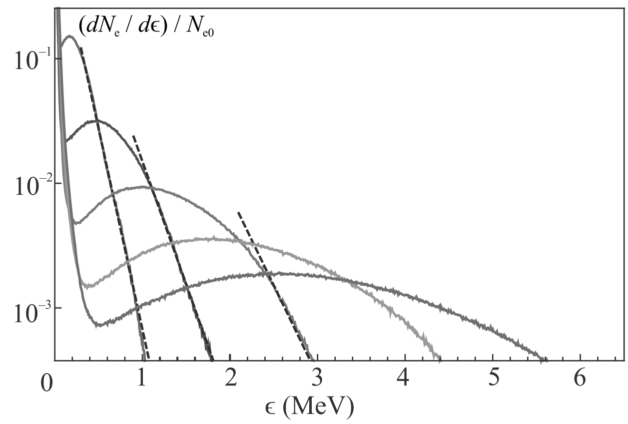

Рис. 3. (Цветной онлайн) Энергетические спектры ускоренных электронов в зависимости от амплитуды поля лазерного импульса (a) на момент времени $t = 60$ фс для $a = 1.2$ (красный), 2 (синий), 3 (зеленый), 4 (оранжевый), 5 (фиолетовый). Пунктирные линии демонстрируют экспоненциальное приближение ($dN_{\rm e}/d\epsilon \propto \exp(-\epsilon/T_{\rm h})$)

увеличении интенсивности в 6 раз ширина плато также увеличивается в 6 раз (от 260 до 1630 кэВ). При этом суммарная энергия электронов, запасенная в плато, от энергии всех электронов в нагреваемом лазером фокальном объеме возрастает с 30 до 76 % при переходе от $a = 1.2$ к $a = 5$. Обнаруженный нагрев кластерной плазмы, характеризуемый платообразным спектром электронов, безусловно, интересен с точки зрения перспективы получения значительного числа горячих электронов. Сам характер широкого распределения электронов с плато с шириной, заметно превосходящей пондеромоторную температуру ($T_{\rm pnd}$), указывает на то, что могут появиться новые возможности в создании рентгеновского источника с использованием кластерной мишени. Действительно, так как значительная доля электронов высоких энергий аккумулируется в области плато, то частицы из этого диапазона энергий будут вносить существенный вклад в жесткое излучение плазмы.

В расчетах была сопоставлена эффективность генерации горячих электронов в условиях заданной энергии лазерного импульса при увеличении его интенсивности. Так как площадь пятна уменьшается обратно пропорционально интенсивности, то число электронов ($N_{\rm e}(\epsilon_0)$) с энергией ϵ_0 в фокальном объеме $V = SL$ связано с числом электронов

($\widetilde{N}_{\rm e}(\epsilon_0)$) в расчетной области соотношением $N_{\rm e}(\epsilon_0) = \widetilde{N}_{\rm e}(\epsilon_0)V/(\Delta V)$, где $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ – объем расчетной области. Полный выход горячих электронов и долю энергии горячих электронов к лазерной энергии можно оценить, считая, что энергия лазерного импульса падает примерно в $e_{\rm N}$ раз при прохождении расстояния L в кластерной среде, и зная коэффициент поглощения лазерной энергии в расчетной области (A). Таким образом, длина поглощения может быть оценена по формуле $L = -\Delta x/\ln(1-A) \approx \approx \Delta x/A \approx 40$ мкм, что близко к значению, рассчитанному по формуле (4). Здесь учтено, что для $a = 1.2$ PIC моделирование предсказывает значение коэффициента поглощения $A \approx 0.08$ (8 %). Эта величина слабо увеличивается с a, достигая значения $A \approx 0.1$ (10 %) при $a = 5$. Длина поглощения значительно короче, чем релеевская длина, и в два раза короче длины рассеяния Ми на сферических частицах, $(n_{\rm cl}\sigma_{\rm Mie})^{-1} \approx 70$ мкм. Также ее значение хорошо согласуется с оценкой для L, представленной выше, см. выражение (4). Спектры на рис. 2 и ниже нормированы на полное число частиц в фокальном объеме, отвечающее базовому случаю (см. выше), $N_{\rm e0} = \widetilde{N}_{\rm e0}S_0L/(\Delta V) = \pi^2 n_e d^3 L D_0^2/(24 s^3) \approx 3 \cdot 10^{13}$, где $S_0 = \pi D_0^2/4$.

Для того чтобы количественно охарактеризовать выход горячих электронов, введем коэффициент конверсии в электроны с энергией выше ϵ_0:

$$\frac{\Delta N_{\rm e}(\epsilon_0)}{N_{\rm e0}} = \int_{\epsilon_0}^{\infty} {\rm d}\epsilon \, \frac{{\rm d}N_{\rm e}}{{\rm d}\epsilon} \Big/ N_{\rm e0}, \tag{7}$$

где для величины ϵ_0 ниже принимается $\epsilon_0 = 100, 300$ кэВ. По аналогии определим энегосодержание горячих электронов:

$$\frac{\Delta E_{\rm e}(\epsilon_0)}{W} = \int_{\epsilon_0}^{\infty} {\rm d}\epsilon \, \epsilon \, \frac{{\rm d}N_{\rm e}}{{\rm d}\epsilon} \Big/ W. \tag{8}$$

На рисунке 4a представлена зависимость выхода горячих электронов как функция амплитуды лазерного импульса (a) при фиксированной энергии лазера (300 мДж). Расчет демонстрирует монотонный спад выхода горячих электронов, при этом для $a = 4$ и значении диаметра пятна 13 мкм выход падает до 2 %. Характер представленной на графике зависимости хорошо аппроксимируется функцией $\propto 1/a$, как и предсказывает формула (5). Отметим, что если во всем фокальном объеме относительное число горячих электронов падает с увеличением интенсивности, то в расчетной области оно растет (ср. 5-ю и 6-ю колонки в табл. 1). Доля энергии, которая содержится в горячих электронах (с энергией свыше 100 кэВ) в фокальном объеме, растет с увеличением лазерной

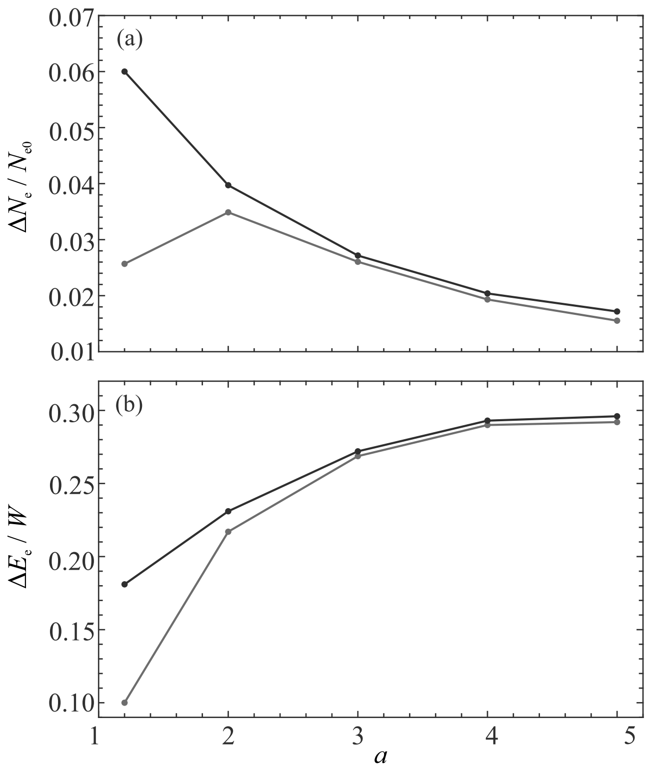

Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Относительное число горячих электронов в фокальном объеме с энергией свыше $\epsilon_0 = 100$ кэВ (черная кривая) и $\epsilon_0 = 300$ кэВ (красная кривая), нормированное на полное число частиц в фокальной области ($N_{\rm e0}$), отвечающее базовому случаю ($a = 1.2$). (b) – Относительное энергосодержание горячих электронов в фокальном объеме как функции амплитуды лазерной волны (a)

интенсивности от 18 % (при $a = 1.2$) и достигает 30 % (при $a = 5$) от лазерной энергии, прошедшей через эту область (см. рис. 4b), что близко к оцененному по формуле (6) значению. Расчет показывает, что при $a = 1.2$ выход горячих электронов с энергией свыше 100 кэВ составляет $5.5 \cdot 10^{12}$ частиц на 1 Дж (или в единицах заряда ≈ 1 мкКл/Дж), выход монотонно падает с интенсивностью лазера до значения 0.2 мкКл/Дж при $a = 5$. При этом выход горячих электронов с энергией свыше 300 кэВ достигает максимального значения 0.5 мкКл/Дж при $a = 2$ (в соответствии с рис. 4b). Проанализировав динамику отдельных частиц из результатов PIC моделирования, отметим три группы горячих электронов (с энергией, превышающей 100 кэВ):

1) электроны, совершающие квазипериодическое движение (рециркулирующие, захваченные), с траекториями вблизи отдельных кластеров типа кепле-

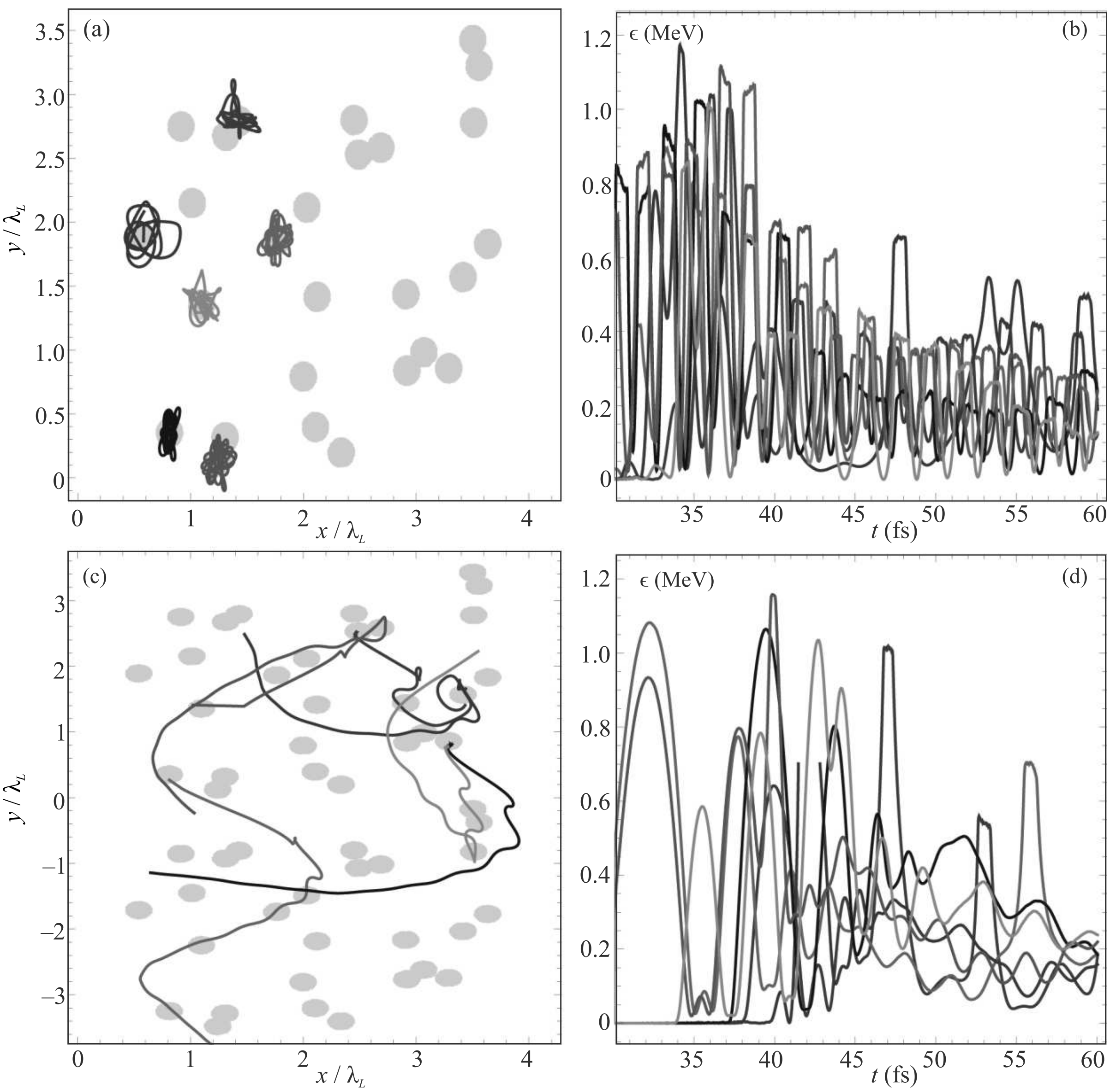

Рис. 5. (Цветной онлайн) (a), (b) – Траектории шести электронов, рециркулирующих вблизи отдельных микрокластеров, на плоскости (x, y) показанные разным цветом в момент времени $t = 60$ фс; справа показана зависимость энергии от времени для выбранных частиц; (c), (d) – то же, но для блуждающих между микрокластерами электронов. Микрокластеры изображены серым цветом. Параметры расчета отвечают базовому случаю ($a = 1.2$)

ровских орбит (примерно 1 % от числа электронов в расчетной области для $a = 1.2$);

2) электроны, испытывающие частичную рециркуляцию вблизи микрокластера с перескоком на соседние микрокластеры (примерно 7 %);

3) электроны, испытывающие множественное рассеяние на кластерах под большими углами и в конечном счете покидающие расчетную область (менее 1 %). Траектории электронов, отвечающих группам *1–3*, а также эволюция их энергии, показаны на рис. 5.

Все группы электронов характеризуются стохастической динамикой в электростатическом поле микрокластеров (ср., например, [35]).

Можно оценить среднюю кинетическую энергию рециркулирующих электронов, приравняв ее к характерному значению электростатической энергии:

$$\epsilon_{\rm av} \simeq e\Phi^*, \tag{9}$$

здесь $\Phi^* = \Phi(d/2)$ – значение электрического потенциала у микрокластера. Потенциал Φ является решением нелинейного уравнения Пуассона, описывающего распределение потенциала вблизи отдельного микрокластера, рассматриваемого как пробный заряд в плазме со средней межкластерной электронной плотностью $\bar{n}_{\rm e}$:

$$\Delta\Phi = -4\pi\rho_0 f(r) + 4\pi e\bar{n}_{\rm e}\exp(e\Phi/T_{\rm h}) - 4\pi Z\bar{n}_{\rm i}. \quad (10)$$

Здесь Z – заряд ионов, параметры $\bar{n}_{\rm e}$, $\bar{n}_{\rm i}$ связаны условием квазинейтральности плазмы: $Z\bar{n}_{\rm i} = e\bar{n}_{\rm e}$, $\rho_0 = 6Q_{\rm skin}/(\pi d^3)$ – плотность заряда кластера ($Q_{\rm skin} \approx en_{\rm e}\pi d^2 l_{\rm NS}$), $f(r)$ – функция, которая описывает профиль плотности заряда.

С помощью метода установления (релаксационного метода) было получено решение уравнения (10) в обезразмеренной форме:

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{d\phi}{d\xi} = (\exp(\phi) - 1) - \frac{\rho_0}{e\bar{n}_e} f(\xi\lambda_{\rm De}), \quad (11)$$

где $\lambda_{\rm De} = \sqrt{\frac{T_h}{4\pi e^2\bar{n}_{\rm e}}}$ – дебаевский радиус электронов, $\phi = e\Phi/T_{\rm h}$, $\xi = r/\lambda_{\rm De}$, для следующего набора параметров: $T_{\rm h} = T_{\rm pnd}$, $\bar{n}_{\rm e} = an_{\rm c}\lambda d^2/(\sqrt{2}s^3)$, $f(r) = 1/2 + 1/2\tanh\left(\frac{d-2r}{2l}\right)$ – “размазанная” ступенчатая функция, где $l \ll d$, причем для определенности принималось $l/\lambda_{\rm De} = 0.01 \div 0.03$. Считается, что центр кластера совпадает с началом координат. Правая часть уравнения (11) содержит большой безразмерный параметр $\frac{\rho_0}{e\bar{n}_e} = (6/\pi)(s/d)^3$, т.е. относительный заряд микрокластера, который определяет вид решения уравнения (11).

На рисунке 6 представлен результат решения уравнения Пуассона (11). Это решение отвечает асимптотике $\phi \propto \exp(-(\xi - d/(2\lambda_{\rm De})))/\xi$ при $\xi > d/(2\lambda_{\rm De})$. Отметим, что формула (9) с учетом решения (11) правильно описывает тенденцию увеличения средней энергии электронов из области плато с ростом амплитуды лазерного поля a. Сопоставляя решение линеаризованного варианта уравнения (11), т.е. при $(\exp(\phi)-1) \approx \phi$, с численным решением нелинейного уравнения, получим, что учет нелинейного вклада приводит к более сильному экранированию пробного заряда по сравнению с линейным случаем (применимого при $\phi \ll 1$) для $a \approx 1$. Таким образом, учет нелинейности несколько улучшает соответствие решения (11) результатам PIC расчетов, особенно при небольших $a \approx 1$. Среднее значение энергии электронов из области плато, определенное по формуле (9), согласуется со значениями, представленными в табл. 1.

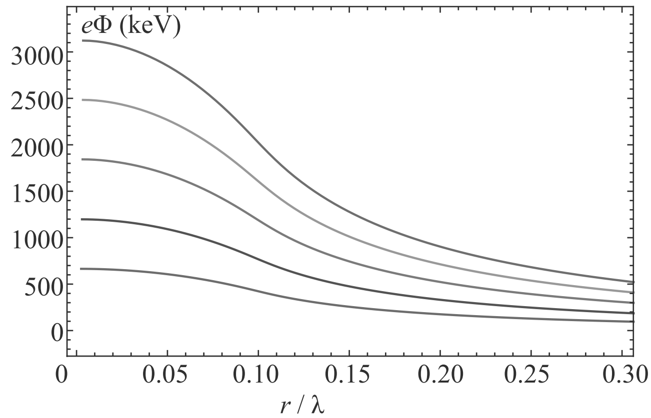

Рис. 6. (Цветной онлайн) Распределение электрического потенциала вблизи отдельного микрокластера (потенциальная энергия выражена в кэВ) при $a = 1.2$ (красный), 2 (синий), 3 (зеленый), 4 (оранжевый), 5 (фиолетовый), полученное численным решением нелинейного уравнения (10)–(11)

Выводы. В работе установлено условие согласования лазер-кластерных параметров, позволяющее максимизировать выход горячих электронов требуемой энергии при облучении ансамбля кластеров субмикронного размера ультракоротким лазерным импульсом (см. условия (1)–(6)). Оптимальный режим, отвечающий такому согласованию, характеризуется ярко выраженным стохастическим блужданием электронов в кулоновских полях кластеров, в результате которого после прохождения лазерного импульса формируется впервые обнаруженное плато с признаком квазимоноэнергетичности в энергетическом спектре электронов. Такое обогащение спектра электронов горячими частицами важно для применений. Проведенный количественный анализ, опирающийся на трехмерное численное моделирование в зависимости от интенсивности при заданной энергии лазера, позволяет описать динамику вылетающих из микрокластеров электронов, а также вклад в энергосодержание плазмы блуждающих между микрокластерами и рециркулирующих вблизи них частиц. Продемонстрировано, что выход горячих электронов достигает значения $5.5\cdot 10^{12}$ электронов на 1 Дж вложенной энергии лазера (или в пересчете на заряд – 0.9 мкКл/Дж) для электронов с энергией свыше 100 кэВ. Для электронов с энергией свыше 300 кэВ этот выход соответствует 0.5 мкКл/Дж. Применение достаточно больших кластеров из тяжелых атомов позволяет за счет инертности ионов достаточно продолжительное время (пока не произойдет их разлет) поддерживать квазиравновестное состояние электронов, характеризуемое областью плато в спектре, что обуславливает возможность эффективной генерации вторичного излучения кластерной плазмой и планируется к будущему изучению.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант # 17-12-01283.

1. V. Yu. Bychenkov, V. T. Tikhonchuk, and S. V. Tolokonnikov, JETP **88**, 1137 (1999).
2. K. W. D. Ledingham, P. McKenna, and R. P. Singhal, Science **300**, 16 (2003).
3. M. Roth, T. E. Cowan, M. H. Key et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **86**, 436 (2001).
4. V. Yu. Bychenkov, W. Rozmus, A. Maksimchuk, D. Umstadter, and C. E. Capjack, Plasma Phys. Rep. **27**, 1017 (2001).
5. A. J. Mackinnon, P. K. Patel, R. P. Town, et al. (Collaboration), Rev. Sci. Instrum. **75**, 3531 (2004).
6. T. Fuchs, H. Szymanowski, U. Oelfke, Y. Glinec, C. Rechatin, J. Faure, and V. Malka, Phys. Med. Biol. **54**, 3315 (2009).
7. S. V. Bulanov and V. S. Khoroshkov, Plasma Phys. Rep. **28**, 453 (2002).
8. K. Nemoto, A. Maksimchuk, S. Banerjee, K. Flippo, G. Mourou, D. Umstadter, and V. Yu. Bychenkov, Appl. Phys. Lett. **78**, 595 (2001).
9. A. Soloviev, K. Burdonov, S. N. Chen, et al. (Collaboration), Sci. Rep. **7**, 12144 (2017).
10. A. Curtis, C. Calvi, J. Tinsley, R. Hollinger, V. Kaymak, A. Pukhov, S. Wang, A. Rockwood, Y. Wang, V. N. Shlyaptsev, and J. J. Rocca, Nature Comm. **9**, 1077 (2018).
11. K. A. Ivanov, S. A. Shulyapov, I. N. Tsymbalov, A. A. Akunets, N. G. Borisenko, I. M. Mordvintsev, I. V. Bozh'ev, R. V. Volkov, S. G. Bochkarev, V. Yu. Bychenkov, and A. B. Savel'ev, Quantum Electron. **50**, 169 (2020).
12. D. Zou, M. Yu, X. Jiang, N. Zhao, T. Yu, H. Zhuo, A. Pukhov, Y. Ma, F. Shao, C. Zhou, and S. Ruan, Highly Efficient Heavy Ion Acceleration from Laser Interaction with Dusty Plasma. Adv. Photonics Res. 2000181; https://doi.org/10.1002/adpr.202000181 (2021).
13. A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz, Y. Fukuda, et al. (Collaboration), Contrib. Plasma Phys. **53**(2), 148 (2013).
14. S. G. Bochkarev, A. Faenov, T. Pikuz, A. V. Brantov, V. F. Kovalev, I. Skobelev, S. Pikuz, R. Kodama, K. I. Popov, and V. Yu. Bychenkov, Sci. Rep. **8**(1), 9404 (2018).
15. A. A. Andreev and K. Y. Platonov, JETP Lett. **112**, 550 (2020).
16. J. Hah, J. A. Nees, M. D. Hammig, K. Krushelnick, and A. G. R. Thomas, Plasma Phys. Control. Fusion **60**, 054011 (2018).
17. L. M. Chen, W. C. Yan, D. Z. Li et al. (Collaboration), Sci. Rep. **3**, 1912 (2013).
18. S. Namba, N. Hasegawa, K. Nagashima, T. Kawachi, M. Kishimoto, K. Sukegawa, and K. Takiyama, Phys. Rev. A **73**, 013205 (2006).
19. D. A. Gozhev, S. G. Bochkarev, N. I. Busleev, A. V. Brantov, S. I. Kudryashov, A. B. Savel'ev, and V. Yu. Bychenkov, High Energy Density Physics **37**, 75 (2020).
20. Zs. Lécz, A. Andreev, and N. Hafz, Phys. Rev. E **102**, 053205 (2020).
21. Zs. Lécz, and A. Andreev, Phys. Rev. Research **2**, 023088 (2020).
22. Y. Hayashi, A. S. Pirozhkov, M. Kando, Y. Fukuda, A. Faenov, K. Kawase, T. Pikuz, T. Nakamura, H. Kiriyama, H. Okada, and S. V. Bulanov, Opt. Lett. **36**, 1614 (2011).
23. Y. Fukuda, K. Yamakawa, Y. Akahane, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, J. Abdallah, Jr., G. Csanak, A. Ya. Faenov, A. I. Magunov, T. A. Pikuz, I. Yu. Skobelev, A. S. Boldarev, and V. A. Gasilov, JETP Letters **78**, 115 (2003).
24. S. Ter-Avetisyan, M. Schnürer, D. Hilscher, U. Jahnke, S. Busch, P. V. Nickles, and W. Sandner, Phys. Plasmas **12**, 012702 (2005).
25. A. Izadi and R. J. Anthony, Plasma Process Polym. **16**, e1800212 (2019).
26. M. Dasgupta, P. Fortugno, and H. Wiggers, Plasma Process Polym. **17**, e1900245 (2020).
27. V. M. Romanova, G. V. Ivanenkov, E. V. Parkevich, I. N. Tilikin, M. A. Medvedev, T. A. Shelkovenko, S. A. Pikuz, and A. S. Selyukov, J. Phys. D: Appl. Phys. **54**, 175201 (2021).
28. Y. Fukuda, Y. Akahane, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, Y. Nakai, K. Tsuji, K. Yamakawa, Y. Hironaka, H. Kishimura, H. Morishita, K. Kondo, and K. G. Nakamura, Appl. Phys. Lett. **85**, 5099 (2004).
29. S. Yu. Mironov, M. V. Starodubtsev, and E. A. Khazanov, Opt. Lett. **46**, 1620 (2021).
30. T. Esirkepov, M. Borghesi, S. V. Bulanov, G. Mourou, and T. Tajima, Phys. Rev. Lett. **92**, 175003 (2004).
31. S. V. Bulanov, F. Califano, G. I. Dudnikova, et al. (Collaboration), Reviews of Plasma Physics **22**, 227 (2001).
32. A. V. Brantov, P. A. Ksenofontov, and V. Yu. Bychenkov, Phys. Plasmas **24**, 113102 (2017).
33. C. D. Decker, W. B. Mori, K. C. Tzeng, and T. Katsouleas, Phys. Plasmas **3**, 2047 (1996).
34. D. V. Romanov, V. Yu. Bychenkov, W. Rozmus, C. E. Capjack, and R. Fedosejevs, Phys. Rev. Lett. **93**, 215004 (2004).
35. A. A. Balakin and G. M. Friman, Phys.-Uspekhi **60**, 1197 (2017).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 242 – 249

О нетрадиционном подходе к улучшению удержания плазмы в токамаке

В. П. Пастухов[1], *Д. В. Смирнов*

Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 июля 2021 г.
После переработки 23 июля 2021 г.
Принята к публикации 26 июля 2021 г.

Представлено концептуальное предложение по улучшению удержания турбулентной плазмы в токамаке при использовании разрядов с большой величиной запаса устойчивости q_L на внешней границе плазмы. Проведен анализ ряда экспериментов, выполненных при повышенной величине q_L на токамаках разного масштаба и свидетельствующих об улучшении удержания плазмы в таких режимах. Проведено компьютерное моделирование эволюции турбулентной плазмы, включающее переход от омической стадии к стадии мощного нагрева методом электронного циклотронного резонанса, для трех разрядов с параметрами плазмы, характерными для токамака Т-10, и величинами q_L от 3 до 8.5, которое подтвердило возможность улучшения удержания плазмы и повышения ее параметров при высоких q_L.

DOI: 10.31857/S1234567821160072

1. Введение. Изучение аномальных процессов переноса частиц и энергии в системах магнитного удержания высокотемпературной плазмы и анализ возможных путей повышения эффективности удержания плазмы в таких системах остается одной из актуальных задач в исследованиях по управляемому термоядерному синтезу (УТС). В качестве основной интегральной характеристики удержания плазмы традиционно рассматривают энергетическое время удержания τ_E, которое для стационарной стадии разряда определяют как отношение полной тепловой энергии плазмы E_T к полной мощности нагрева P_E:

$$\tau_E^{st} \equiv 3V\langle n(T_e + T_i)\rangle / 2P_E, \tag{1}$$

где V – объем основной горячей области плазмы, n – плотность плазмы, $T_{e,i}$ – температуры электронов и ионов, а угловые скобки означают усреднение по объему плазмы. Полная вводимая мощность P_E включает мощности омического нагрева P_{OH}, а также мощности P_{ECR} возможного дополнительного нагрева методом электронного циклотронного резонанса (ЭЦР) и нагрева пучком быстрых атомов P_{NBI}.

Гигантский объем экспериментальных данных, накопленных в исследованиях на установках токамак, позволил выяснить основные эмпирические закономерности удержания турбулентной плазмы в токамаках и получить различные скейлинги для времени τ_E, соответствующие различным модам (или режимам) удержания плазмы. В частности, были обнаружены и исследованы такие явления, приводящие к повышению τ_E, как L-H переходы, связанные с формированием внешнего транспортного барьера (ETB), и формирование внутренних транспортных барьеров (ITB). В большинстве экспериментальных, а также теоретических исследований основное внимание уделялось изучению разрядов с умеренными значениями коэффициента запаса устойчивости q_L на внешней границе горячей плазмы (отделяющей основную область плазмы от "слоя обдирки" (SOL)). Для токамаков с дивертором в качестве q_L рассматривают величину q на магнитной поверхности, соответствующей 0.95 от величины тороидального магнитного потока на сепаратрисе. Согласно (1), при фиксированной мощности P_E величина τ_E зависит от величины и пространственного распределения полного давления плазмы. Принято полагать, что в разрядах с q_L в диапазоне $3 \leq q_L \leq 4$ в основном объеме удержания горячей плазмы формируются профили температур и плотности с умеренными градиентами (за исключением возможных узких областей транспортных барьеров), что обеспечивает довольно равномерное заполнение этого объема плазмой с достаточно высокой температурой. Согласно обзору ITER Physics Basis [1], базовые режимы работы строящегося реактора ИТЭР также ориентируются на этот традиционный диапазон параметра q_L.

В отличие от такого традиционного подхода к выбору базовых режимов работы токамаков, мы хотим привлечь внимание к иной возможности для улучшения удержания плазмы в токамаке и повышения

[1]e-mail: Pastukhov_VP@nrcki.ru

ее ключевых параметров, основанной на использовании разрядов с большими величинами q_L. Для начала напомним, что еще в 1980-х гг. Б. Коппи обратил внимание на важный эффект самоорганизации плазмы в токамаке, который приводит к формированию самосогласованных или "канонических" профилей полного давления плазмы [2]. Такие профили давления обладают существенной универсальностью, что позволяет выяснить некоторые общие закономерности, влияющие на максимальные значения температур и плотности, а также величину τ_E при фиксированной величине мощности нагрева P_E. Весьма убедительным свидетельством в пользу существования "канонических" профилей стали работы [3–6], где был представлен анализ профилей полного давления плазмы (суммы давлений электронов и ионов), наблюдавшихся во многих экспериментах на различных токамаках. В частности, в работе [5] на рис. 5 приведены результаты экспериментов на установке Т-10 в режимах с омическим нагревом и показано, что нормированные профили давления, представленные как функции нормированного малого радиуса $\hat{\rho} = r/\sqrt{I_p R/B_0}$, где текущий малый радиус r и большой радиус плазмы R выражены в сантиметрах, а полный ток плазмы I_p и тороидальное магнитное поле B_0 в амперах и гауссах, оказываются достаточно близкими для разрядов с различными значениями q_L.

Первыми шагами в теоретическом обосновании концепции "канонических" профилей стали работы Д. Бискампа [7] и Б. Б. Кадомцева [8], в которых на основе предложенных ими вариационных принципов были получены некоторые выделенные профили давления плазмы, близкие к профилям, наблюдавшимся в экспериментах. В настоящее время феноменологическая 1D транспортная модель на основе концепции "канонических профилей", изложенная в работах [9, 10], активно используется для анализа процессов переноса в экспериментах на различных токамаках. В работах [11, 12] было показано, что наблюдаемое в экспериментах формирование "канонических профилей" давления и "пинчевание" плотности плазмы могут быть связаны с инвариантами движения частиц в магнитном поле токамаков и тенденцией к формированию турбулентного равнораспределения (*turbulent equipartition* – TEP).

Позднее, в работах [13–16], в рамках цилиндрической модели токамака, была развита упрощенная адиабатически-редуцированная динамическая (ARD) модель низкочастотной (НЧ) нелинейной турбулентной конвекции плазмы и результирующих процессов переноса в токамаках с большим аспектным отношением и почти круглым сечением магнитных поверхностей. Как отмечалось в этих работах, моделирование турбулентно-транспортных процессов, выполненное на основе ARD-модели с использованием кода CONTRA-C для условий ряда реальных экспериментальных разрядов на токамаке Т-10, продемонстрировало целый ряд свойств, близких к наблюдаемым в моделируемых экспериментах. При этом следует отметить, что численное моделирование НЧ-турбулентности плазмы с использованием кода CONTRA-C требует существенно более скромных компьютерных ресурсов по сравнению с известными гирокинетическими кодами и позволяет моделировать эволюцию турбулентной плазмы на макроскопических временах, превышающих τ_E.

Одним из наиболее важных свойств, присущих ARD-модели и проявляющихся при моделировании с использованием кода CONTRA-C, является тенденция к самосогласованному формированию и поддержанию турбулентно-релаксированных (TR) состояний с профилями давления и плотности плазмы, близкими к "каноническим профилям" давления, наблюдаемым в экспериментах, а также к профилю плотности плазмы, следующему из концепции TEP. На рисунке 7 работы [17] представлены расчетные профили давления, полученные при моделировании удержания плазмы в трех разрядах с величиной q_L от 3 до 8.5 на токамаке Т-10, которые обсуждались в работе [5]. Этот рисунок демонстрирует, что при существенных различиях в профилях полного давления, полученных при моделировании указанных разрядов, профили давления, представленные как функции нормированного малого радиуса $\hat{\rho}$, почти не отличаются друг от друга и демонстрируют достаточно универсальную зависимость от $\hat{\rho}$. Более того, эти нормированные профили демонстрируют достаточно хорошее согласие с нормированными экспериментальными профилями, полученными в работе [5].

Наконец, в работе [18] было отмечено, что, при самосогласованном поддержании турбулентной плазмы вблизи TR-состояния, величины поперечных потоков тепла из основной горячей области плазмы в SOL, в силу их непрерывности на границе, должны определяться потерями плазмы из SOL. Поскольку в SOL силовые линии магнитного поля выходят на проводящий лимитер или диверторные пластины, то разумно ожидать, что главным каналом тепловых потерь из SOL должна быть продольная классическая электронная теплопроводность, при которой продольный поток тепла пропорционален $T_e^{7/2}$. В работе [18], в предположении о таком механизме тепловых потерь из SOL, было проведено моделирование переходных режимов для трех реальных разрядов с включением ЭЦР-нагрева различной мощности в токамаке Т-10. Моделирование показало, что в процессе эволюции турбулентной плазмы после включения дополнительного нагрева, величины τ_E в этих разрядах выходят на квазистационарные уровни, при которых различие между расчетными и экспериментальными величинами τ_E не превышает пределов погрешности экспериментальных измерений при всех уровнях вводимой ЭЦР-мощности. При этом отношение величин τ_E на омической стадии и в стадии ЭЦР-нагрева примерно соответствовало зависимости τ_E от полной вводимой мощности P_E в известном "многомашинном скейлинге" стационарной H-моды в ИТЭР H(ITER-98(y,2)).

В последующих разделах зависимость удержания плазмы от величины q_L будет проанализирована с учетом тенденции к формированию TR-состояний в турбулентной плазме и указанному выше механизму продольных тепловых потерь из SOL.

2. Аналитические оценки. Совокупность представленных выше результатов экспериментальных исследований и компьютерного моделирования эволюции турбулентной плазмы в токамаке дает предпосылки для предложения по нетрадиционному пути повышения энергосодержания плазмы и улучшения ее удержания в токамаке на основе перехода к разрядам с повышенной величиной q_L. Гранично-устойчивое TR-состояние в ARD-модели определяется условием $\bar{S} = \bar{p}U^\gamma = \text{const}$, где $\bar{p} = \overline{n(T_e + T_i)}$ – полное давление плазмы, усредненное по магнитной поверхности, n – плотность электронов плазмы, $T_{e,i}$ – температуры электронов и ионов, $U(\psi) = dV(\psi)/d\psi = \oint dl/B_p$ – удельный объем силовой трубки, а ψ – полоидальный магнитный поток. Поскольку в дальнейшем обсуждаем только поверхностно-усредненные равновесные значения p, n и T, то черту в обозначениях опускаем. Сжимаемость плазмы характеризуется показателем адиабаты γ. Согласно работам [13–18], в случае токамака разумно выбрать эффективное значение $\gamma = 2$.

В рамках цилиндрической модели токамака, используемой в коде CONTRA-C, уравнение Грэда–Шафранова может быть записано в форме одномерного уравнения для удельного объема $U(r)$:

$$\frac{\pi}{U}\,\partial_r\left(\frac{r^2}{U}\right) + \partial_r\, p(r) + \pi\,\frac{q(r)R}{U}\,\partial_\rho\left(\frac{q(r)R}{U}\right) = 0, \quad (2)$$

позволяющее сразу выписать решение для $U(r)$:

$$U = U_0\left[\frac{q^2(r)R^2 + r^2 + 2S(r)/\pi}{q_0^2R^2 + 2S/\pi}\right]^{1/2} \times \\ \times \exp\left\{\int\limits_0^r \frac{r\,dr}{q^2(r)R^2 + r^2 + 2S(r)/\pi}\right\}. \quad (3)$$

Приведенные выражения позволяют получить достаточно простые аналитические соотношения, демонстрирующие существо предлагаемого подхода и величину ожидаемого эффекта. Для этого полагаем, что в плазме поддерживаются TR-профили полного давления $S = pU^2 = \text{const}$, а также плотности $D = nU = \text{const}$. Пренебрегая для простоты поправками масштаба $r^2/q^2R^2 \ll 1$, а также $S/q^2R^2 \ll 1$, можно для первых оценок использовать приближенное выражение $U(r) \approx U_0 q(r)/q_0$ и параболический профиль запаса устойчивости $q(r) = q_0(1+k^2r^2)$. Тогда легко вычислить полное энергосодержание (тепловую энергию) плазмы E_T, выраженное через давление плазмы p_L и q_L на границе с SOL (при $r = a$):

$$E_T = \frac{3}{2}\int\limits_0^a p(r)(2\pi)^2 Rrdr = 3\pi^2a^2R\,p_L\frac{q_L}{q_0}. \quad (4)$$

При вполне разумном предположении, что главным каналом тепловых потерь из SOL является продольная классическая электронная теплопроводность (см., например, работу [18]), нетрудно заключить, что суммарный тепловой поток, входящий из основной области плазмы в SOL, должен сильно зависеть от температуры электронов T_{eL} на границе с SOL (примерно как $T_{eL}^{7/2}$) и практически не зависеть от плотности n_L. Соответственно, при одинаковой полной мощности нагрева P_E в разрядах с различными q_L, температура электронов T_{eL} на границе с SOL (как и ионная температура T_{iL}) также должны быть примерно одинаковыми. В этом случае давление плазмы на внешней границе p_L в сравниваемых разрядах должно быть пропорциональным n_L. Далее, как это делается во многих экспериментах, будем сравнивать параметры удержания плазмы в разрядах с одинаковой среднехордовой плотностью, которая в рассматриваемой модели с TR-распределением профилям плотности имеет вид:

$$\langle n\rangle_{ch} = \frac{1}{2a}\int\limits_{-a}^a n_L\frac{q_L dr}{q_0(1+k^2r^2)} = n_L\frac{q_L\arctan(ka)}{q_0ka}. \quad (5)$$

Теперь проведем оценочное сравнение профилей давления, энергосодержания плазмы E_T и времени удержания τ_E для двух разрядов с $q_L^{(1)} = 3$ и $q_L^{(2)} = 9$

при одинаковой полной мощности нагрева P_E (а, соответственно, и температуре на границе) и одинаковой среднехордовой плотности $\langle n\rangle_{ch}$. Как следует из выражений (4) и (5), для выполнения оценок дополнительно требуется знать отношения q_0/q_L для каждого из разрядов, поскольку в реальных экспериментах q_0, как правило, растет с увеличением q_L. Для определенности будем ориентироваться на эмпирическую закономерность для радиуса инверсии пилообразных колебаний, установленную в экспериментах на Т-10 и представленную на рис. 6 работы [5]. Эта закономерность позволяет получить следующее оценочное выражение для q_0/q_L:

$$\frac{q_0}{q_L} \approx \frac{1 - 0.35(1 - 0.15 q_L)}{q_L - 0.35(1 - 0.15 q_L)} \ . \tag{6}$$

На рисунке 1 представлены TR-профили полного давления $p(r) = S/U^2(r)$, полученные в указанных выше предположениях для разрядов с $q_L^{(1)} = 3$ и $q_L^{(2)} = 9$ и нормированные на $p^{(1)}(0)$ в разряде с $q_L^{(1)} = 3$.

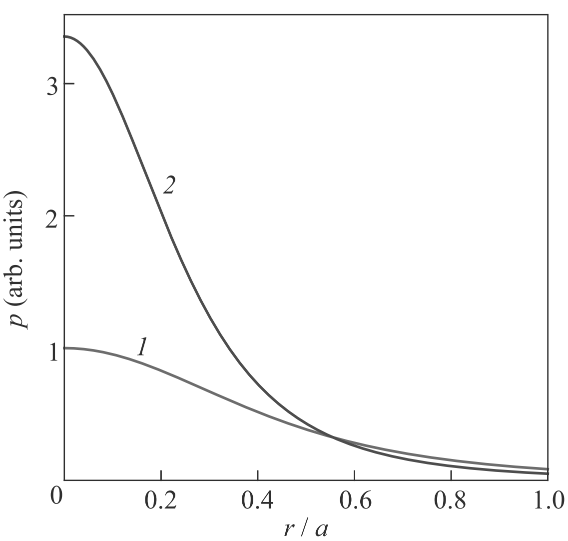

Рис. 1. (Цветной онлайн) Турбулентно-релаксированные профили полного давления $p(r) = S/U^2(r)$ в относительных единицах для разрядов с: *1* – $q_L = 3$, *2* – $q_L = 9$ при одинаковой среднехордовой плотности $\langle n\rangle_{ch}$ и с одинаковой полной мощностью нагрева P_E

Видно, что профиль в разряде с $q_L^{(2)} = 9$ значительно пикирован в центральной части плазменного шнура (при $r \le a/2$), так что отношение максимальных давлений в сравниваемых разрядах составляет $p_0^{(2)}/p_0^{(1)} \approx 3.36$. Полное энергосодержание E_T и время удержания плазмы τ_E также выше в разряде с $q_L^{(2)} = 9$, так что отношение составляет $E_T^{(2)}/E_T^{(1)} = \tau_E^{(2)}/\tau_E^{(1)} \approx 1.44$. При этом более 70 % полной тепловой энергии в разряде с $q_L^{(2)} = 9$ должно быть сконцентрировано в центральном керне плазменного шнура при $r < a/2$, в результате чего отношение тепловой энергии в керне для этих двух разрядов должно составить ${E_T}^{(2)}(a/2)/{E_T}^{(1)}(a/2) \approx 2.16$.

Таким образом, представленные относительно простые оценки показывают, что в токамаках в разрядах с неизменной мощностью нагрева в условиях развитой турбулентной конвекции, поддерживающей плазму вблизи TR-состояния, путем увеличения коэффициента запаса устойчивости q_L на внешней границе можно существенно повысить тепловую энергию плазмы в центральном керне ($r \le a/2$). Более того, в соответствии с выражениями (4)–(6), достаточно высокие параметры плазмы могут быть получены даже при значительном снижении полной мощности нагрева. Так, если в разряде с $q_L^{(2)} = 9$ снизить мощность нагрева $P_E^{(2)}$ в 3 раза (т.е. полагать $P_E^{(2)}/P_E^{(1)} = 1/3$), то, при учете связи между стационарной температурой плазмы на границе с SOL и мощностью нагрева вида $P_E \propto T_L^{7/2}$, ожидаемой в соответствии с результатами работы [18], преимущество по параметрам плазмы в горячем керне (при $r < a/2$) сохранится за разрядом с $q_L^{(2)} = 9$, а именно: $p_0^{(2)}/p_0^{(1)} \approx 2.45$, ${E_T}^{(2)}(a/2)/{E_T}^{(1)}(a/2) \approx 1.58$, а отношение энергетических времен удержания даже увеличится почти вдвое до $\tau_E^{(2)}/\tau_E^{(1)} \approx 3.15$, как это и должно быть при уменьшении мощности нагрева.

3. Экспериментальные свидетельства влияния больших q_L на удержание плазмы. Во Введении уже упоминались работы [2–6], в которых подробно обсуждались эксперименты, свидетельствующие в пользу существования “канонических” профилей давления плазмы, на поддержании которых базируются приведенные выше оценки удержания плазмы при больших q_L. На первый взгляд, можно было бы ожидать, что в гигантском объеме экспериментальных данных, накопленных в исследованиях на установках токамак, нетрудно отыскать и данные об удержании плазмы при больших q_L, существенно выходящих за пределы стандартных величин $3.0 \le q_L \le 4$. Однако оказалось, что число таких экспериментов относительно невелико, и направлены они были, в основном, на исследование иных вопросов.

Для реализации режима с повышенным q_L во многих экспериментах применялся метод быстрого снижения полного тока плазмы за времена, меньшие времени диффузии магнитного поля. Одним из первых детальных и качественных исследований в этом направлении стали эксперименты 1990-го г. на относительно небольшой установке Tokamak de Varennes [19]. В этих экспериментах исследовалось влияние быстрого шестикратного снижения полного тока на возбуждение и параметры пилообразных колебаний. Дополнительно в статье отмечено, что в ходе снижения полного тока наблюдалось усиление пикированности профилей плотности тока, температур электронов T_e и ионов T_i и плотности плазмы n, что говорит в пользу приведенных выше аналитических оценок предыдущего раздела. Однако в статье не приведено никаких сведений об изменениях величины τ_E.

К числу содержательных примеров реализации режима с повышенным q_L в небольших установках следует также отнести исследование влияния радиального распределения тока на параметры плазмы в токамаке Туман-3, представленные в работе [20]. Исследовался переход из одного стационарного состояния плазмы в условиях омического нагрева в другое квазистационарное состояние путем быстрого двукратного снижения полного тока плазмы. Как и в экспериментах на Tokamak de Varennes, в процессе снижения тока наблюдалось усиление пикированности профилей плотности тока, температуры электронов T_e и плотности плазмы n. При этом в статье отмечено, что переход сопровождался увеличением времени удержания энергии τ_E в 1.5 – 2 раза по сравнению с ее исходным стационарным значением.

В качестве еще более весомого свидетельства в пользу режимов с высокими q_L можно рассматривать результаты некоторых экспериментов на крупных токамаках. Весьма показательны результаты экспериментов на токамаке TFTR, представленные в работе [21]. Основной целью работы было исследование равновесных конфигураций с высоким "полоидальным β_p" (отношением среднего давления плазмы к среднему давлению полоидального магнитного поля). Примечательно, что максимальные значения β_p в этой серии экспериментов были получены при нагреве плазмы пучком быстрых нейтральных атомов в режимах со сниженным полным током и, соответственно, с повышенным $q^* > 8$, где q^* является аналогом величины q_L для систем с существенно некруглым сечением плазменного шнура, в частности, для токамаков с дивертором. При этом в режимах со сниженным током и высоким q^* величины β_p превышали уровень предшествующих разрядов типа "supershot" на TFTR примерно в 1.75 раза. В этих режимах также наблюдался существенный прирост величины τ_E и полного энергосодержания плазмы. Кроме того, были выявлены определенные преимущества по величине нейтронного выхода в D-D реакции в изучаемых режимах с высоким β_p при сниженном токе и высоком q^* по сравнению со стандартными разрядами supershot в TFTR.

Статья [22] посвящена оптимизации разрядов на JET – самом крупном из современных токамаков. Целью этой серии экспериментов было повышение МГД-устойчивости как в центральной области, так и на периферии, что было необходимо для выполнения рекордных разрядов по термоядерной мощности в H-режиме с горячими ионами в отсутствии периферийно-локализованных мод (ELM). Теоретический анализ предсказывал, что уменьшение плотности тока на границе, которое может быть достигнуто за счет уменьшения полного тока плазмы во время фазы нагрева, должно улучшать устойчивость относительно внешней винтовой моды и задерживать развитие ELM. Это действительно было подтверждено проведением разрядов с снижением полного тока (и, соответственно, увеличением величины q_L с 2.7 до 4.5). Это позволило повысить энергосодержание плазмы в разряде и поднять нейтронный выход на 45 %. Данный результат также косвенно свидетельствует в пользу разрядов с повышенным q_L.

Наряду со снижением тока, переход к режимам с увеличенным q_L возможен также и при увеличении тороидального магнитного поля. Так в экспериментах с двукратным увеличением тороидального магнитного поля, проведенных на компактном сферическом токамаке Глобус-М2 [23], было достигнуто десятикратное увеличение тройного "термоядерного" произведения $nT\tau_E$ при неизменном значении мощности дополнительного нагрева.

Приведенный краткий обзор результатов экспериментов с повышенной величиной q_L, выполненных с разными исходными целями и на токамаках разного масштаба, в целом указывает на необходимость более внимательного исследования разрядов с повышенным q_L. В ряде случаев результаты отмеченных выше экспериментов качественно подтверждают возможность улучшения удержания плазмы с повышением ее тепловой энергии E_T и времени удержания τ_E в разрядах с увеличенной величиной q_L. На такую возможность мы и пытаемся обратить внимание в данной работе.

4. Результаты компьютерного моделирования. Для подтверждения аналитических оценок, указывающих на возможность повышения эффективности удержания плазмы при использовании разрядов с большими величинами q_L, было проведено компьютерное моделирование самосогласованной эволюции турбулентной плазмы для параметров трех разрядов в токамаке Т-10. Поскольку Т-10 относится к токамакам с большим аспектным отношением (большой радиус $R \approx 1.5$ м и малый радиус $a \approx 0.3$ м) и почти круглым сечением плазменного шнура, то моделирование, как и ранее, проводилось доказавшим свою надежность кодом CONTRA-C в последней модернизированной версии CONTRA-CM, позволяющей раздельно описывать перенос тепла по электронному и ионному каналам. За основу для моделирования были взяты разряды # 33889 с $q_L = 3$, # 39652 с $q_L = 4$ и # 22888 с $q_L = 8.5$, обсуждавшиеся в статье [5]. Тороидальное магнитное поле в указанных разрядах несколько различалось и составляло, соответственно, 21.5, 24.6 и 22 кГс, однако это не должно было существенно повлиять на τ_E в омическом режиме. Среднехордовая плотность плазмы в двух разрядах поддерживалась примерно одинаковой и составляла $\langle n \rangle_{ch} \approx 1.8 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$, а в разряде с $q_L = 4$ была несколько ниже. Поэтому при моделировании эволюции плазмы в этом разряде $\langle n \rangle_{ch}$ была повышена до уровня двух других разрядов с соответствующей корректировкой τ_E на омической стадии.

Сценарии моделирования аналогичны описанным в работе [18]. Эволюция турбулентной плазмы в расчетах, как и в экспериментах, стартует со стадии омического нагрева (ОН), на которой мощности омического нагрева в указанных разрядах составляли соответственно 273, 224 и 135 кВт. После выхода каждого из разрядов на квазистационарный уровень времена удержания τ_E на ОН-стадии составляли соответственно 22.7, 29.5 и 37.4 мс. Профили температур электронов и ионов на стационарной ОН-стадии представлены на рис. 2. Температуры электронов T_{e0} и ионов T_{i0} в центре плазмы в разряде с $q_L = 4$ выше, чем в разряде с $q_L = 3$, несмотря на меньшую мощность нагрева. Профиль температуры электронов в разряде с $q_L = 8.5$ более пикирован по сравнению с разрядами с меньшими q_L, однако существенно меньшая мощность омического нагрева не позволяет величине T_{e0} в этом разряде подняться выше, чем в других разрядах. Тем не менее, в соответствии с ожиданиями, τ_E в этом разряде было существенно выше, чем в двух других разрядах. Профиль ионной температуры в разряде с $q_L = 8.5$ оказался довольно плоским, поскольку при малой мощности P_{OH} турбулентное размешивание ионов в этом разряде мало, и в переносе тепла по ионному каналу доминирует фоновая неоклассическая теплопроводность.

В реальных экспериментах указанные разряды в Т-10 изучались только на омической стадии. Однако, для корректного сравнения удержания плазмы в разрядах с разными q_L в сценарии моделирования, аналогично работе [18], было добавлено включение

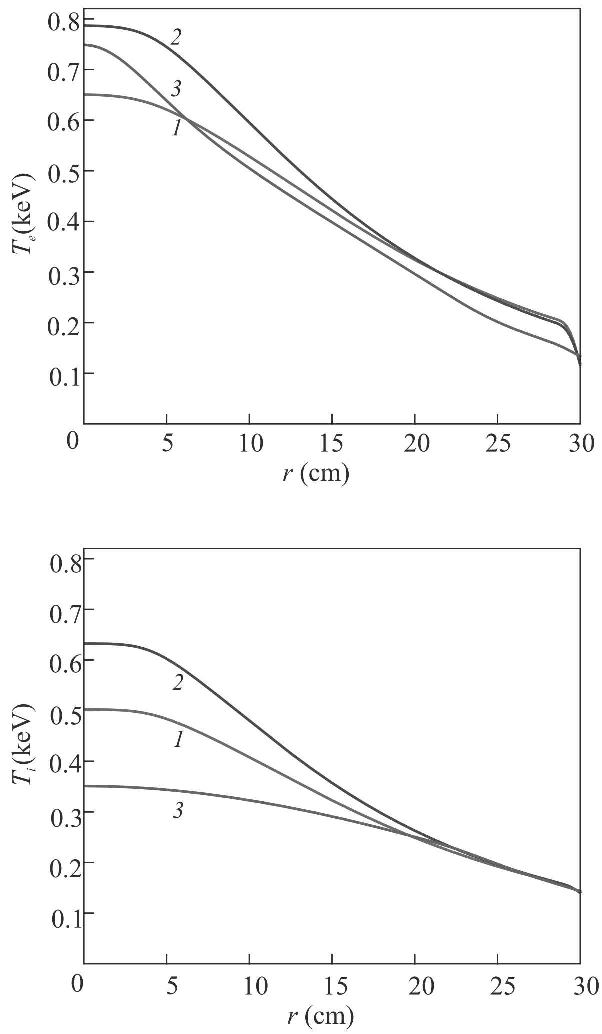

Рис. 2. (Цветной онлайн) Расчетные профили температур электронов T_e и ионов T_i при численном моделировании разрядов с: *1* – $q_L = 3.0$; *2* – $q_L = 4.0$; *3* – $q_L = 8.5$ на стационарной стадии омического нагрева плазмы в токамаке Т-10 при одинаковой среднехордовой плотности $\langle n \rangle_{ch}$ и мощностях омического нагрева равных, соответственно, 273, 224 и 135 кВт

ЭЦР-нагрева в предположении, что суммарная мощность нагрева P_E на ЭЦР-стадии будет одинакова для всех трех разрядов и составит 1 МВт. На рисунке 3 представлены профили температур электронов и ионов на стационарной стадии ЭЦР-нагрева. Видно, что на этой стадии пикированность профилей и электронной, и ионной температур, а также величины T_{e0} и T_{i0} существенно растут с увеличением q_L. Величины τ_E во всех моделируемых разрядах падают на ЭЦР-стадии по сравнению с ОН-стадией, как это происходит и во всех экспериментах, однако в разрядах с бо́льшими q_L величины времен удержания τ_E также остаются более высокими и составля-

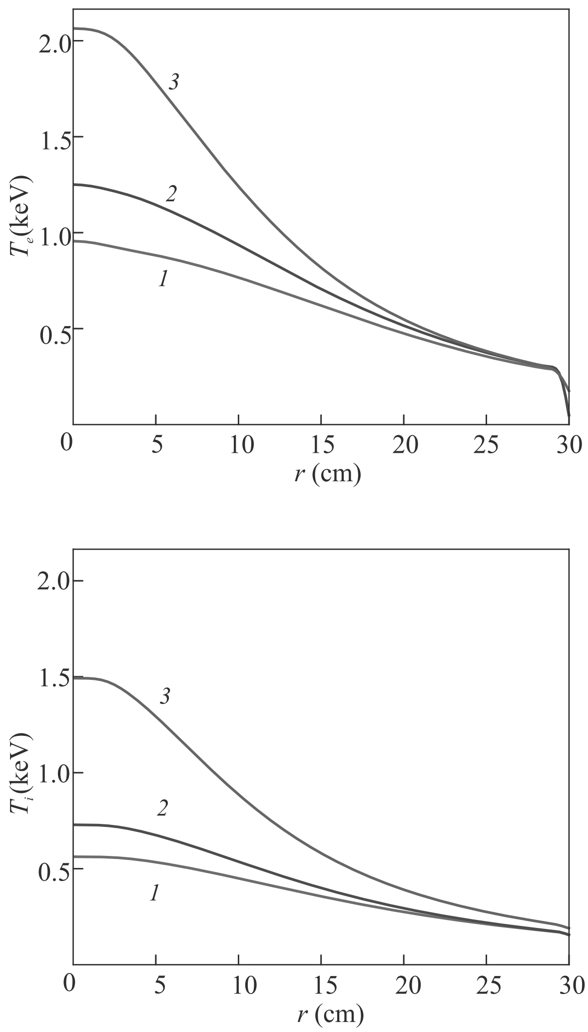

Рис. 3. (Цветной онлайн) Расчетные профили температур электронов T_e и ионов T_i при численном моделировании разрядов с: *1* – $q_L = 3.0$; *2* – $q_L = 4.0$; *3* – $q_L = 8.5$ на стационарной стадии ЭЦР-нагрева плазмы в токамаке Т-10 при одинаковой среднехордовой плотности $\langle n\rangle_{ch}$ и с одинаковой полной мощностью нагрева $P_E = 1$ МВт

ют, соответственно, 8.0, 9.0 и 11.8 мс. На рисунке 3 также видно, что в разряде с $q_L = 8.5$, вследствие бо́льшего τ_E, отношение T_{i0}/T_{e0} выше, чем в разрядах с меньшей величиной q_L. И, в целом, величина T_{i0} в разряде с $q_L = 8.5$ значительно отрывается от величин T_{i0} в разрядах с меньшими q_L.

Таким образом, численное моделирование, в котором профили давлений и температур электронов и ионов в различных условиях могут несколько отклоняться от точного TR-состояния, тем не менее продемонстрировало, что простые аналитические оценки в целом правильно описывают возможность улучшения удержания плазмы и повышения ее энергосодержания и величины τ_E в разрядах с увеличенным запасом устойчивости q_L на внешней границе плазмы.

6. Заключение. На основе анализа теоретических представлений о физических основах турбулентной релаксации плазмы в токамаках и результатов экспериментов, свидетельствующих о формировании самосогласованных профилей давления, сделано предложение по улучшению удержания плазмы в токамаке и повышению ее параметров при использовании разрядов с повышенными q_L на границе основной горячей плазмы с SOL.

На основе аналитических оценок, подтвержденных компьютерным моделированием турбулентной эволюции плазмы при ЭЦР-нагреве в разрядах с повышенными q_L, продемонстрировано формирование пикированных профилей давления и температур со значительным увеличением тепловой энергии плазмы в горячем керне ($r < a/2$) и повышением энергетического времени удержания плазмы.

Получение повышенных параметров плазмы в центральном горячем керне позволяет снизить мощность дополнительного нагрева, необходимую для получения нужного нейтронного выхода, в частности, при использовании токамака в качестве источника термоядерных нейтронов для гибридного реактора с относительно небольшим Q, соответствующим отношению мощности, получаемой в термоядерной реакции, к полной мощности нагрева. Снижение теплового потока, выходящего в SOL, также может стать полезным свойством систем с умеренными величинами Q и повышенными значениями q_L, позволяющим снизить нагрузку на диверторные пластины и другие принимающие поверхности.

Компьютерное моделирование было выполнено с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, http://ckp.nrcki.ru/.

Авторы выражают благодарность В. В. Янькову за полезные обсуждения, а также Н. А. Кирневой и Н. В. Касьяновой за предоставленные материалы по экспериментам на Т-10.

---

1. ITER Physics Basis Editors, Nucl. Fusion **39**, 2137 (1999).
2. B. Coppi, Comments Plasma Phys. Control. Fusion **5**, 261 (1980).
3. Yu. V. Esiptchuk and K. A. Razumova, Plasma Phys. Control. Fusion **28**, 1253 (1986).
4. K. A. Razumova, V. F. Andreev, A. J. H. Donne, G. M. D. Hogeweij, S. E. Lysenko, D. A. Shelukhin,

G. W. Spakman, V. A. Vershkov, and V. A. Zhuravlev, Plasma Phys. Control. Fusion **48**, 1373 (2006).

5. K. A. Razumova, V. F. Andreev, A. Yu. Dnestrovskij, A. Ya. Kislov, N. A. Kirneva, S. E. Lysenko, Yu. D. Pavlov, V. I. Poznyak, T. V. Shafranov, E. V. Trukhina, V. A. Zhuravlev, A. J. H. Donne, G. M. D. Hogeweij, the T-10 team and the RTP team, Plasma Phys. Control. Fusion **50**, 105004 (2008).
6. K. A. Razumova, V. F. Andreev, A. Ya. Kislov, N. A. Kirneva, S. E. Lysenko, Yu. D. Pavlov, T. V. Shafranov, the T-10 Team, A. J. H. Donne, G. M. D. Hogeweij, G. W. Spakman, R. Jaspers, the TEXTOR team, M. Kantor, and M. Walsh, Nucl. Fusion **49**, 065011 (2009).
7. D. Biscamp, Comments Plasma Phys. Control. Fusion **10**, 165 (1986).
8. Б. Б. Кадомцев, Физика плазмы **13**, 771 (1987).
9. Ю. Н. Днестровский, А. Ю. Днестровский, С. Е. Лысенко, С. В. Черкасов, М. Д. Уолш, Физика плазмы **30**, 3 (2004).
10. Ю. Н. Днестровский, А. Ю. Днестровский, С. Е. Лысенко, Физика плазмы **31**, 579 (2005).
11. В. В. Яньков, Письма в ЖЭТФ **60**, 169 (1994).
12. V. V. Yankov and J. Nycander, Phys. Plasmas **4**, 2907 (1997).
13. V. P. Pastukhov and N. V. Chudin, *Proc. 22-nd IAEA Fusion Energy Conf. Geneva, Switzerland* (2008). Report TH/P8-26.
14. В. П. Пастухов, Н. В. Чудин, Письма в ЖЭТФ **90**, 722 (2009).
15. V. P. Pastukhov and N. V. Chudin, *Proc. 23-nd IAEA Fusion Energy Conf. Daejeon, Republic of Korea* (2010). Report THC/P4-22.
16. V. P. Pastukhov, N. V. Chudin, and D. V. Smirnov, Plasma Phys. Control. Fusion **53**, 054015 (2011).
17. В. П. Пастухов, Д. В. Смирнов, Физика плазмы **42**, 307 (2016).
18. В. П. Пастухов, Н. А. Кирнева, Д. В. Смирнов, Физика плазмы **45**, 1072 (2019).
19. M. M. Shoucri, I. P. Shkarofsky, G. W. Pacher et al. (Collaboration), Nucl. Fusion **30**, 2563 (1990).
20. N. V. Sakharov, T. Yu. Akatova, L. G. Askinazi et al. (Collaboration), Plasma Phys. Control. Fusion **35**, 411 (1993).
21. S. A. Sabbagh, R. A. Gross, M. E. Mauel et al. (Collaboration), Phys. Fluids B **3**, 2277 (1991).
22. M. F. F. Nave, P. J. Lomas, G. T. A. Huysmans, B. Alper, D. Borba, B. De Esch, C. W. Gowers, H. Y. Guo, T. T. C. Jones, M. Keilhacker, V. V. Parail, F. G. Rimini, B. Schunke, P. Smeulders, and P. R. Thomas, Nucl. Fusion **39**, 1567 (1999).
23. G. S. Kurskiev, V. K. Gusev, N. V. Sakharov et al. (Collaboration), Nucl. Fusion **61**, 064001 (2021).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 250 – 262

Сверхбыстрая динамика доменных границ в антиферромагнетиках и ферримагнетиках с температурами компенсации магнитного и углового моментов (Миниобзор)

З. В. Гареева[+*1)], *С. М. Чен*[× 2)]

[+]*Федеральное государственное бюджетное научное учреждение Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, 450075 Уфа, Россия*

[*]*Башкирский государственный университет, 450076 Уфа, Россия*

[×]*Laboratory of Dielectric Materials, School of Materials Science and Engineering, Zhejiang University, 310027 Hangzhou, People's Republic of China*

Поступила в редакцию 18 июня 2021 г.
После переработки 17 июля 2021 г.
Принята к публикации 17 июля 2021 г.

Большая роль в динамике намагниченности принадлежит доменным границам, которые в настоящее время рассматриваются в качестве активных элементов перспективных спинтронных устройств со сверхбыстрым переключением намагниченности. Представлен обзор результатов исследования динамики доменных границ, индуцированной действием магнитного поля и спин-поляризованных токов в антиферромагнетиках и ферримагнетиках в области компенсации углового момента. На основе решений уравнений Ландау–Лифшица с использованием метода эффективного Лагранжиана получены основные уравнения нелинейной динамики доменных границ в антиферромагнетиках и ферримагнетиках, решение которых позволяет объяснить экспериментально наблюдаемые аномалии в области компенсации. Обсуждаются основные механизмы воздействия спин-поляризованных токов на динамику доменных границ, а также перспективы дальнейших исследований в этом направлении.

DOI: 10.31857/S1234567821160084

I. Введение. Сверхскоростная спиновая динамика является одним из наиболее привлекательных направлений спинтроники. Процессы сверхбыстрого переключения намагниченности могут быть использованы при разработке многих устройств хранения, обработки и записи информации. В качестве ключевых элементов таких устройств рассматриваются магнитные доменные границы (ДГ) [1, 2], динамические свойства которых составляют предмет настоящего обзора.

Одной из активно разрабатываемых в этой области идей является магнитная память RTM (*Race Track Memory*), в которой передача информации осуществляется за счет ДГ, перемещающихся по магнитной ленте под действием электрических спин-поляризованных токов [3]. Можно сказать, что именно развитие концепции RTM дало толчок большинству исследовательских работ по динамике ДГ.

Как оказалось, практической реализации RTM препятствует ряд сложностей, таких как: энергетические потери, обусловленными тепловыми затратами; ограничение предела токов высокой плотности и соответствующее понижение скорости ДГ на ферромагнитных носителях, что вынуждает исследователей искать новые пути управления и приложения микромагнитных объектов.

Другая концепция, озвученная в работе [4], рассматривает ДГ в качестве основного инструмента переключения магнитных состояний в элементе оперативной памяти при условии высоких скоростей перемещения ДГ. Доменные стенки, являясь зародышами новой магнитной фазы, при достижении скоростей порядка нескольких км/с могут обеспечить высокочастотное переключение магнитных состояний.

Для создания платформы таких устройств необходимы материалы, в которых реализуется сверхскоростная динамика намагниченности, оптимальными в этом отношении являются антиферромагнетики и

1)e-mail: zukhragzv@yandex.ru
2)X. M. Chen.

компенсированные ферримагнетики, в которых скорости доменных границ измеряются в км/с [4–9].

Активное развитие антиферромагнитной спинтроники [10–12] позволило выделить критерии и требования к материалам и микромагнитным объектам, необходимые для практических приложений. К недостаткам антиферромагнетиков можно отнести отсутствие результирующего магнитного момента, что затрудняет экспериментальное обнаружение ДГ и приводит к сложностям в осуществлении целенаправленного управления антиферромагнитной динамикой.

В настоящее время внимание исследователей привлекают ферримагнетики, в которых из-за разницы температур упорядочения магнитных подрешеток реализуются условия компенсации магнитных и угловых моментов. В ферримагнетиках, так же как и в антиферромагнетиках, ДГ могут достигать сверхвысоких скоростей порядка нескольких км/с [4, 5, 7, 9, 13–16], а переключение магнитных состояний занимать доли пикосекунд [4].

Изучению процессов сверхбыстрого переключения намагниченности и спиновой динамики в антиферромагнетиках и ферримагнетиках посвящено большое число научных работ, результаты исследований обсуждаются в ряде обзоров [10, 11, 17–23]. Однако в большей части обзорных работ динамика ДГ рассматривается как частный случай, в качестве одной из иллюстраций особенностей динамических свойств ферримагнетиков в области компенсации. В то же время, накопленный за последние годы материал по движению ДГ в ферри- и антиферромагнетиках требует обобщения и более детального анализа.

В целом, в исследованиях сверхскоростной магнитодинамики можно выделить следующие основные направления: 1) традиционные способы переключения намагниченности и управления динамикой ДГ под действием магнитного поля, исследованные в классических работах [24–28] (II параграф); 2) переключение намагниченности и динамика ДГ, индуцированная действием спин-поляризованных токов, составляющая предмет современных исследований, начало которым было положено в работах Берже [29, 30] (III параграф); 3) оптическое переключение намагниченности, в основе которого лежат работы [31] по сверхбыстрому переключению намагниченности под действием лазерных импульсов фемтосекундного диапазона.

II. Солитонный механизм динамики ДГ в антиферромагнетиках. Поскольку механизмы, лежащие в основе антиферромагнитодинамики, независимо от способов ее возбуждения, в первую очередь связаны с особенностями магнитного упорядочения, вначале мы обратимся к классическим работам по исследованию движения ДГ в антиферромагнетиках, которые позволяют выделить основные направления и подходы к дальнейшему изучению динамики ДГ.

Эксперименты 1970–1980 гг. [24–26, 32, 33] по динамике ДГ показали, что в слабых ферромагнетиках ДГ могут достигать скоростей выше 10 км/с, что указывало на принципиальные отличия динамики антиферромагнетиков от ферромагнетиков, проявляющиеся в отсутствии пороговой скорости Уокера и значительном возрастании скорости ДГ до высоких пороговых скоростей насыщения. Кривые зависимости скорости ДГ от магнитного поля, полученные в экспериментах [33], показаны на рис. 1. Особенностью кривой $V(H)$ в $YFeO_3$ является наличие насыщения зависимости $V(H)$ при $V = 20$ км/с, что кардинально отличает ее от подобной кривой для ферромагнетиков.

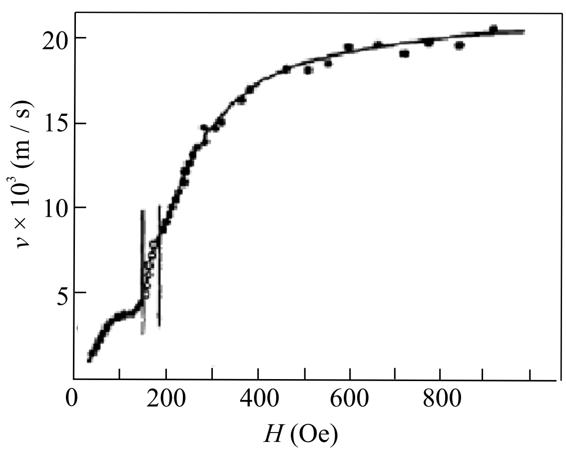

Рис. 1. Зависимость скорости ДГ от магнитного поля в антиферромагнетике $YFeO_3$ [33]

В ферромагнитных материалах скорости ДГ ограничены величиной порядка 1 км/с, что объясняется наличием в них так называемого поля Уокера (*Walker breakdown field*) [28] $H_W = 2\pi M_s$, где M_s – намагниченность насыщения. При достижении поля Уокера стационарный процесс движения ДГ с постоянной скоростью прекращается и сменяется нестационарным, что приводит к резкому понижению средней скорости ДГ. Ничего подобного не наблюдается в $YFeO_3$ вплоть до полей $H > 10^3$ Э, используемых в эксперименте [24–26, 32, 33].

Остановимся на теоретическом описании наблюдаемых эффектов на примере $YFeO_3$ (рис. 1) или других редкоземельных ортоферритов (ортохромитов).

В работе [27] на основе уравнения Ландау–Лифшица для двухподрешеточного ферромагнетика было получено уравнение для пространственно-временной зависимости компонент единичного антиферромагнитного вектора $\mathbf{l} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$, который является естественным параметром порядка, применимым для описания магнитной динамики антиферромагнетиков

$$\ddot{\varphi} - c^2\nabla^2\varphi + \frac{2}{\tau}\dot{\varphi} + \omega_R^2 \sin\varphi\cos\varphi = \\ = \gamma\dot{H}_z - \omega_H\omega_D \sin\varphi, \qquad (1)$$

где $\omega_E = \gamma H_E$, H_E – поле межподрешеточного обменного взаимодействия, $\omega_D = \gamma H_D$, γ – гиромагнитное отношение, H_D – поле Дзялошинского, $\omega_R = = \gamma\sqrt{H_E H_A} = \gamma\sqrt{2K_u\lambda}$, $H_A = 2K_u/M$, K_u – приведенная энергия магнитной анизотропии в плоскости XY, в которой также учитывается вклад взаимодействия Дзялошинского–Мория, λ – константа обменного взаимодействия между подрешетками, $\omega_H = = \gamma H$, H – внешнее магнитное поле, $c = \gamma\sqrt{\frac{2A}{\chi_\perp}}$ – скорость магнонов, A – константа неоднородного обменного взаимодействия, $\chi_\perp = 1/\lambda$. Первое слагаемое в уравнении (1) является специфическим вращательным моментом для возбуждения спиновой динамики в антиферромагнетиках, по симметрии оно аналогично действию спиновых токов и подробно описано в статье [35].

Уравнение (1) является основным уравнением динамики антиферромагнетиков, именно это уравнение легло в основу σ-алгебры Холдейна и в дальнейшем было широко использовано в работах, посвященных динамике слабых ферромагнетиков и антиферромагнетиков [16, 34–41].

На основе решений уравнения (1) получаются важные физические следствия, которые мы перечислим ниже.

1. Рассмотрим динамику ДГ в отсутствии магнитного поля и диссипации ($H = 0, \alpha = 0$). При таком условии уравнение (1) преобразуется в известное уравнение синус-Гордона, собственные функции которого

$$\varphi(x,t) = 2\arctan\exp\left(-\frac{x - \dot{q}t}{\Delta(\dot{q})}\right), \qquad (2)$$

описывают солитонные решения, а спектр собственных значений – скоростей $\dot{q}$, является непрерывным

$$-c < \dot{q} < c. \qquad (3)$$

Ширина солитона (т.е. движущейся доменной границы) определяется выражением

$$\Delta = \Delta_0\left(1 - \frac{\dot{q}^2}{c^2}\right)^{1/2},$$

где $\Delta_0 = c/\omega_R$ – ширина покоящейся ДГ, для $YFeO_3$ $\Delta_0 \approx 10^{-6}$ см.

Таким образом, при отсутствии магнитного поля и диссипации, движущиеся ДГ являются солитонами, скорости ДГ-солитонов непрерывно изменяются в диапазоне, определяемым соотношением (3), направление движения ДГ не выделяется, при движении ДГ со скоростями, близкими к скорости магнонов c (квазирелятивистском движении), уменьшается ширина ДГ.

2. Далее рассмотрим движение ДГ в стационарном магнитном поле при наличии диссипации ($H \neq \neq 0$, $\alpha \neq 0$, но $\dot{H}_z = 0$). При этом нелинейное уравнение (1) – уравнение двойного синус-Гордона с диссипацией и магнитным полем ($\omega_H \neq 0$) имеет точное автомодельное решение (2), которое описывает движущуюся ДГ с определенной (!) постоянной скоростью

$$\dot{q} = \frac{\mu H}{(1 + \frac{\mu H}{c^2})^{1/2}}, \qquad (4)$$

где $\mu = \frac{M_s\tau}{m_W}$ – подвижность ДГ, $m_W = \frac{\sigma_W}{c^2}$ – масса движущейся ДГ, $\sigma_W = \frac{4\sqrt{AK_u}}{\sqrt{1-\frac{\dot{q}^2}{c^2}}}$ – энергия движущейся ДГ.

Мы видим, что постоянное магнитное поле снимает вырождение скоростей, имеющее место в отсутствии поля (случай *1*) и выделяет единственную скорость ДГ, зависящую от величины и направления магнитного поля, а также скорости магнонов c.

3. В общем случае, при действии нестационарного магнитного поля ($H \neq 0$, $\alpha \neq 0$, $\dot{H}_z \neq 0$) динамика ДГ, как было показано в работе [27], описывается квазиньютоновским уравнением вида

$$\frac{d}{dt}(m_W\dot{q}) + \frac{m_W\dot{q}}{\tau} = 2M_s H, \qquad (5)$$

где

$$m_W = \frac{2M_s}{H_d\gamma^2\Delta(\dot{q})} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \dot{q}^2/c^2}}, \tau = \frac{2}{\alpha\omega_E}. \qquad (6)$$

Это уравнение является аналогом уравнения маятника, все слагаемые уравнения (5) имеют очевидный физический смысл: m_W – инерция, $m_W\dot{q}/\tau$ – сила трения, действующая на ДГ, $2M_s H$ – давление, оказываемое на ДГ со стороны магнитного поля. Полагая $\frac{d}{dt}(m\dot{q}) = 0$, из (5) получим уравнение (4).

Описанный выше подход позволяет объяснить ряд экспериментов Четкина, Тсанга, Кониши [24–26, 32, 33], формула (4) при параметрах $YFeO_3$ $c = 2 \cdot 10^6$ м/с, $M_s = 2$ Гс, $H_D = 2 \cdot 10^5$ Э, $H_E \approx 10^7$ Э, $\chi_\perp = 10^{-5}$, $\gamma = 1.7$ рад/с хорошо описывает экспериментальные кривые, приведенные на рис. 1. Как видно из уравнения (4), эффекты насыщения скорости ДГ в антиферромагнетиках объясняются квазирелятивистскими эффектами, в данном случае зависимостью массы ДГ от скорости, определяемой формулой (5), такой же зависимостью обладает энергия ДГ $\sigma_W = m_W c^2$.

На возникновение квазирелятивистских эффектов в динамике антиферромагнетиков и их влияние на движение антиферромагнитных ДГ, в том числе интерпретацию экспериментально наблюдаемых эффектов насыщения (рис. 1) обращалось внимание в работе [27], позднее к подобным выводам о квазирелятивизме в антиферромагнетиках пришли и другие авторы [36, 42].

В заключение этого параграфа отметим, что условия применимости рассмотренного подхода к описанию динамики ДГ в антиферромагнетике выполняются при

$$\Delta \gg a, \alpha \ll 1, \tag{7}$$

где a – постоянная решетки кристалла, α – параметр затухания. С более общей точки зрения можно сказать, что малыми параметрами должны быть углы скоса магнитных подрешеток, возникающие как под действием внешнего магнитного поля, поля Дзялошинского, так и в динамике ДГ.

III. Динамика ДГ под действием спин-поляризованных токов. Спиновые токи и вращательные моменты. В современных технологических устройствах движение ДГ, в том числе антиферромагнитных ДГ, осуществляется под действием спин-поляризованных токов (СПТ). При этом сохраняется солитонный режим, релятивистские эффекты и другие особенности динамики, обнаруженные при движении ДГ под действием магнитного поля [18, 27, 36].

СПТ – магнитодинамика, развитие которой было положено в работах Грюнберга, Ферта, Слончевского и Берже [43–46], имеет неоспоримые преимущества по сравнению с традиционной динамикой намагниченности, что связано с возможностью записи и считывания информации на магнитных носителях посредством электрического тока. Ее важными составляющими являются спиновые токи и создаваемые ими вращательные моменты. Спиновые токи в магнетиках могут формироваться за счет действия нескольких механизмов: транспорта спин-поляризованных электронов, спиновых эффектов Холла и Зеебека, спиновых волн-магнонов, оптических возбуждений и шумовых эффектов [29, 45, 47–57]. Определение иерархии взаимодействий, отвечающих за динамику ДГ в сложных многокомпонентных системах, является достаточно сложной задачей.

В пленках металлических магнетиков спиновый транспорт осуществляется, в основном, за счет спин-поляризованных электронов и вращательных моментов, обусловленных передачей спина электрона (*spin transfer torques* – STT). В синтетических структурах, содержащих компоненты тяжелых металлов (Pt, W, Ta, Se, Ir), важную роль играют спин-орбитальные эффекты (взаимодействие Дзялошинского–Мория (ВДМ) и эффекты Рашбы), приводящие к возникновению спин-орбитальных вращательных моментов и связанных с ними спиновых токов Холла. В диэлектрических антиферромагнетиках вращательные моменты, действующие на намагниченности подсистем, могут формироваться за счет спинового тока магнонов.

Модель актуальной СПТ динамики основана на уравнении Ландау–Лифшица – Слончевского [45], в котором учитываются вращающие моменты, связанные с действием СПТ

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt} + \mathbf{T}_{ST}, \tag{8}$$

где $\mathbf{T}_{ST}$ – вращательный момент СПТ, состоящий из двух компонент

$$\mathbf{T}_{ST} = \mathbf{T}_{DL} + \mathbf{T}_{FL},$$
$$\mathbf{T}_{DL} = -\gamma \frac{a_J}{M_s} \mathbf{M} \times \mathbf{M} \times \boldsymbol{\sigma},$$
$$\mathbf{T}_{FL} = -\gamma b_J \mathbf{M} \times \boldsymbol{\sigma},$$
$$a_J = \frac{\hbar J P_{DL}}{2 M_s e t}, \quad b_J = \frac{\hbar J P_{FL}}{2 M_s e t},$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – единичный вектор, определяющий направление СПТ, J – плотность тока, $e > 0$ – заряд электрона, t – толщина магнитного слоя, P – поляризация спинов электронов, для ферромагнетиков отношение поляризации спинов $P_{FL}/P_{DL} \sim 0.1$.

Рассмотрим вращательные моменты $\mathbf{T}_{DL}$ и $\mathbf{T}_{FL}$, руководствуясь историческим аспектом и физическими соображениями.

A. STT управляет ДГ. Первой, в работах Берже [29, 30], была предложена концепция α-STT, рассматривающая адиабатический процесс передачи углового вращательного момента спин-поляризованных электронов проводимости локальной намагниченности образца, так что при прохождении тока через ДГ под действием $\mathbf{T}_{DL}$ намагниченность поворачивается вокруг СПТ, что приводит к движению ДГ.

Экспериментальные подтверждения движения ДГ под действием коротких (микросекундных) импульсов электрического тока были получены на Py-пленках [29, 30]. Впоследствии была проведена серия работ по исследованию динамики ДГ в Py-пленках и нанопроволоках, Co–Gd, а также Co–Tb системах [1, 3, 58–61].

Теоретическое описание динамики ДГ под действием α-STT впервые было предложено в работе [62], где в уравнения Ландау—Лифшица–Гильберта был введен вращательный момент

$$\mathbf{T}_\alpha = -u\nabla\mathbf{M},$$

где $u = \frac{g\mu_B P J_e}{2|e|M_s}$ – дрейфовая скорость, P – поляризация спинов, J_e – плотность тока, μ_B – магнетон Бора, g – фактор Ланде. Дальнейшие исследования показали, что α-STT оказывает влияние на движение ДГ в ферро- и ферримагнетиках, однако в антиферромагнетиках адиабатическая компонента $\mathbf{T}_{DT}$, инвариантная по отношению к операции обращения времени, отсутствует [63].

Несколько позже, в работах [64, 65], было исследовано воздействие на динамику намагниченности вращательного момента β-STT, связанного с релаксацией спинов электронов проводимости

$$\mathbf{T}_\beta = -\beta\boldsymbol{\sigma} J_s\mathbf{M}\times\nabla\mathbf{M}.$$

При движении ДГ под действием тока намагниченность выходит из плоскости ДГ, что приводит к появлению размагничивающих полей, которые в свою очередь создают неадиабатический вращающий момент β-STT, оказывающий влияние на динамику ДГ. Этот эффект, названный в работе [66] эффектом внутреннего пиннинга, накладывает ограничения на предельно допустимые плотности токов, необходимые для движения ДГ. По своей природе β-STT аналогичен вращательному моменту, индуцированному действием магнитного поля в ферромагнетике, соответственно при увеличении величины β-STT трансляционное движение ДГ может сопровождаться прецессией.

В общем случае, трансляционное движение ДГ осуществляется за счет α- и β-компонент STT, однако величина относительного вклада каждого из них зависит от свойств конкретного материала, оптимальные соотношения $1 < \beta/\alpha < 10$ [67, 68].

B. SHE управляет ДГ. В магнетиках с выраженными спин-орбитальными эффектами наряду с вращательными моментами, связанными с переносом спина (STT), реализуются спин-орбитальные вращательные моменты (SOT) [23, 51, 69–72]. Здесь также можно выделить две основные составляющие SOT, связанные с 1) эффектом Эдельштейна–Рашбы или обратным спин-гальваническим эффектом [73, 74] и 2) спиновым эффектом Холла (SHE) [50, 75, 76], при этом в обоих случаях могут реализовываться $\mathbf{T}_{FL}$ и $\mathbf{T}_{DL}$ [77].

Вращательные моменты, связанные с эффектом Эдельштейна–Рашбы, создаются спиновыми токами, индуцированными в приграничной области магнитного слоя в пленках синтетических магнетиков, при прохождении электрического тока вдоль границ раздела. Вращательные моменты, связанные со спиновым эффектом Холла (SHE), создаются спиновыми токами, проникающими в приграничную область немагнитного слоя [78–81].

Выделение конкретных спин-орбитальных эффектов при прохождении электрических токов через синтетический антиферромагнетик или ферримагнетик является непростой задачей, СПТ не только оказывают прямое воздействие на магнитную подсистему, но также могут приводить к формированию магнитных подслоев в немагнитной подсистеме [82, 83], вносящих свой вклад в антиферро- и ферримагнитодинамику.

Рассмотрим более подробно действие вращательных моментов $\mathbf{T}_{SL}$, связанных с SHE-эффектом, которые вызывают прецессию намагниченности и последующее движение ДГ. В соответствии с работой [78] будем считать, что электрический ток j_e протекает в x-направлении, тогда вращательный момент, создаваемый спиновым эффектом Холла, аналогичен действию вращательного момента Слончевского

$$\mathbf{T}_{SL} = -\gamma\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{SL}, \tag{9}$$

где

$$\mathbf{H}_{SL} = -\frac{\hbar\theta_{SH}j_e}{2\mu_0|e|M_s t}\mathbf{m}\times\mathbf{n}_y \tag{10}$$

– эффективное магнитное поле Слончевского, j_e – плотность электрического тока, направленного вдоль x – оси, M_s – намагниченность насыщения, $\theta_{SH} = j_s/j_e$ – эффективный угол Холла, определяемый соотношением плотности спинового тока (j_s) и плотности электрического тока (j_e), $\mathbf{m}$ – единичный вектор намагниченности, t – толщина магнитного слоя, $\mathbf{n}_y$ – единичный вектор, направленный вдоль y-оси, $|e|$ – величина заряда электрона, $\hbar$ – постоянная Планка, μ_0 – магнитная постоянная.

Как видно из соотношения (10), для возбуждения динамики ДГ посредством спинового эффекта Холла требуются ДГ с неблоховской структурой. Неблоховская структура ДГ может быть стабилизирована за счет магнитной анизотропии [23, 48, 69–71, 81, 84–86] и реализована, например, в Co-пленках (Ta/CoFe/MgO, Co/Ni/Co, Pt/[Co/Ni], Co/Rh/Co). Именно с этим обстоятельством связан высокий интерес к исследованию динамики ДГ в Co-содержащих системах, изученных в работах [23, 60, 70, 71, 78, 87].

Наиболее интересный результат был получен в работе [88], в которой высокие скорости ДГ (750 м/с) наблюдались в пленках на основе Co/Ni слоев на Pt-подложке, разделенных Ru прослойкой. В этой системе ВДМ, индуцированное Pt-подложкой, приводило к стабилизации ДГ неелевского типа, которые перемещались под действием спиновых токов Холла. Предполагалось, что значительное увеличение скорости ДГ достигалось за счет АФМ упорядочения, полученного вследствие введения Ru-слоя.

Результаты, полученные авторами [88], стимулировали активный интерес к изучению динамики ДГ в синтетических магнетиках с антиферромагнитным упорядочением спинов в области границы раздела слоев. Одно из первых теоретических исследований динамики ДГ синтетических антиферромагнетиков с учетом обменных взаимодействий магнитных подрешеток было проведено в работе [89], где была показана возможность достижения сверхвысоких скоростей неблоховских ДГ до 10 и более км/с, а также определен скоростной предел движения ДГ, ограниченный излучением магнонов.

C. Контактное воздействие тока на ДГ. NSOT эффект. В антиферромагнетиках спин-поляризованный ток, наряду с STT- и SHE-эффектами, может индуцировать вращательный момент обменной природы – неелевский спин-орбитальный вращательный момент NSOT, обусловленный наличием нескольких магнитных подрешеток.

Первые теоретические работы по NSOT-эффекту [49] относятся к изучению антиферромагнетиков Mn_2Au и CuMnAs с нарушенной PT-симметрией (рис. 2).

В антиферромагнетиках такого типа СПТ индуцирует эффективное магнитное поле и вращательный момент у каждой магнитной подрешетки $\mathbf{M}^A = -\mathbf{M}^B$

$$\mathbf{B}^{A/B} = \mathbf{M}^{A/B} \times (\mathbf{z} \times \mathbf{J}),$$
$$\mathbf{T}^{A/B} = \mathbf{M}^{A/B} \times \mathbf{B}^{A/B}, \tag{11}$$

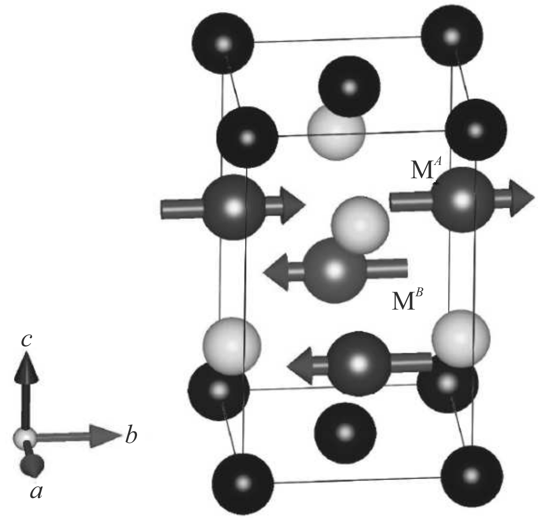

Рис. 2. (Цветной онлайн) Магнитные подрешетки CuMnAs

что приводит к возникновению эффективного магнитного поля Нееля

$$\mathbf{B}^{\mathrm{Neel}} = \mathbf{B}^B - \mathbf{B}^A$$

и связанного с ним неелевского спин-орбитального вращательного момента (NSOT)

$$\mathbf{T}^{\mathrm{Neel}} = \mathbf{L} \times \mathbf{B}^{\mathrm{Neel}}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{M}^B - \mathbf{M}^A.$$

Наличие локального эффективного поля $\mathbf{B}^{\mathrm{Neel}}$ и вращающего момента $\mathbf{T}^{\mathrm{Neel}}$ делает принципиально возможным переключение антиферромагнитно-упорядоченных магнитных состояний за счет зеемановского взаимодействия [49, 90–93] и реализацию связанных с этими процессами магниторезистивных эффектов.

Однако, как показывают экспериментальные исследования, прямому переключению магнитных состояний могут препятствовать различные факторы: внутренние напряжения, дефекты, многодоменность исследуемых образцов, как в случае CuMnAs [94], что может приводить к многошаговому переключению намагниченности.

В экспериментальных работах [90–96] было продемонстрировано переключение антиферромагнитного порядка в CuMnAs под действием импульсов электрического тока (рис. 3), за счет действия NSOT [92, 93], вращения 90° доменов [90, 94] или предполагаемого движения ДГ [96]. В работах [90, 91] было показано, что в зависимости от характера магнитной анизотропии пленок CuMnAs возможно как 90°, так и 180° переключение антиферромагнитных состояний. В последние годы проводятся экспериментальные исследования магниторезистивных эффектов в этих материалах, связанных с процессами спиновой переориентации под действием оптических импульсов и импульсов СПТ [97, 93]. Индуцированное импульсами СПТ переключение магнитных состояний также наблюдалось в антиферромагнетике Mn_2Au [98], магнитная симметрия которого совпадает с симметрией CuMnAs. Результаты исследования этих процессов в пленках и гетероструктурах на основе Mn_2Au с обсуждением возможных физических механизмов спиновой динамики содержатся в работах [99–104]. Переключение магнитных состояний под действием СПТ также наблюдается в антиферромагнетиках с ненарушенной PT-симметрией (NiO/Pt-пленках) [105, 106, 133].

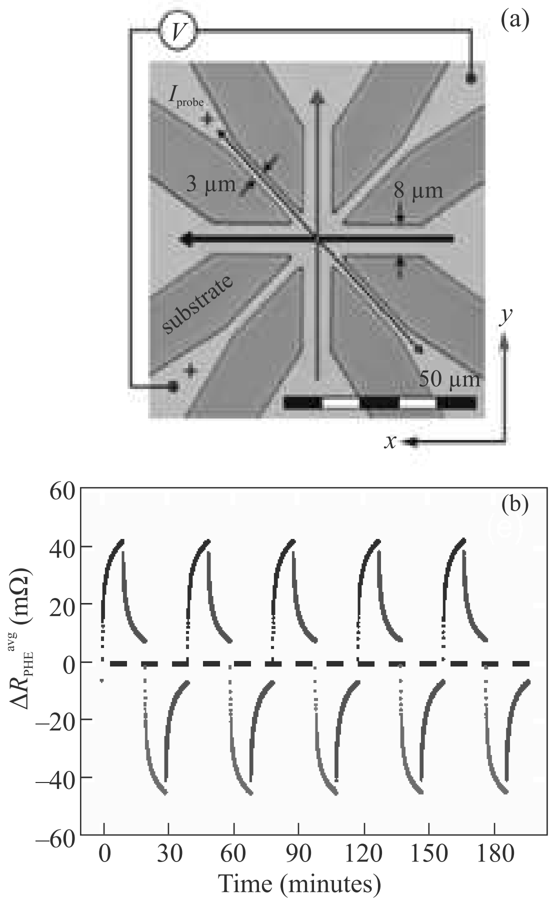

Рис. 3. (Цветной онлайн) Переключение магнитных состояний под действием СПТ в пленках CuMnAs [92]: (a) – оптическая микрофотография структурированной пленки GaAs/CuMnAs/Ti, импульсы тока могут подаваться на линии, параллельные оси x или y; (b) – зависимость усредненной величины планарного сопротивления Холла $\Delta R_{\rm PHE}^{\rm avg}$ от времени, $T_s = 260\,$K, $j = 5.9 \cdot 10^{10}$ A/м^2, $\Delta t = 5\,$мкс

Физическая природа процессов СПТ-переориентации антиферромагнетиков не достаточно ясна. Механизм переключения антиферромагнитных состояний в рассмотренных структурах (CuMnAs, Mn_2Au, NiO/Pt), связанный с движением ДГ обсуждается в работах [91, 96, 107, 108], однако детализация этого процесса требует проведения дополнительных исследований. При пропускании тока через многодоменный образец создается не только NSOT-эффект, на границе 90° доменов благодаря анизотропному магнитосопротивлению возникает градиент температуры, который также вносит вклад в движение ДГ [109]. Результаты моделирования, представленные в работе [110], указывают на необычную сложную динамику ДГ под действием градиента температуры в области компенсации ангулярного момента ферримагнетиков.

В последние годы разрабатывается интересный подход по идентификации антиферромагнитной структуры и целенаправленному переключению магнитных состояний за счет лазерного нагрева системы и одновременного действия СПТ. Как было показано в работах [111–113], локализованное изменение градиента температуры позволяет контролировать антиферромагнитное состояние за счет аномальных эффектов Нернста и Зеебека. При этом одновременное использование СПТ определенной геометрии может индуцировать переключение намагниченности, разворот доменов и движение ДГ. В работах [106, 108, 114] был исследован динамический отклик системы на локальное термическое воздействие в неколлинеарных (Mn_3Sn) и коллинеарных (CuMnAs) антиферромагнетиках, гетероструктурах NiO/Pt, Pt/NiO/Pt; определены условия, необходимые для выделения заданного механизма переключения магнитных состояний. В частности, исследования, проведенные в [106], показали, что в гетероструктурах механизм переключения магнитных состояний зависит от величины плотности тока $\mathbf{J}$, в зависимости от $\mathbf{J}$, переключение магнитных состояний может осуществляться через движение ДГ или разворот магнитных доменов.

IV. Динамика ДГ в ферримагнетиках с точками компенсации магнитного и углового моментов. В ферримагнетиках с двумя температурами компенсации – компенсации намагниченности T_M ($\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2$) и компенсации углового магнитного момента T_A ($\mathbf{M}_1/\gamma_1 = \mathbf{M}_2/\gamma_2$) – следует ожидать выраженных динамических эффектов, проявляющихся, в том числе, в сверхбыстром движении ДГ. Первые эксперименты по сверхскоростной динамике в ферримагнетиках [115–117] были проведены на сплавах FeGdCo, в которых, вследствие различия температур магнитного упорядочения редкоземельных ионов (Gd) и ионов переходных металлов (Fe), достигаются T_M и T_A.

Наибольший резонанс имела работа 2017 г. группы K. J. Kim [7], в которой было продемонстрировано значительное увеличение скорости ДГ до 2 км/с при приближении к точке компенсации углового момента T_A.

В ходе дальнейших исследований динамики микромагнитных структур (ДГ, вихрей и скирмионов) в ферримагнитных сплавах и пленках синтетических магнетиков, содержащих Gd, Tb и Fe, Co-ионы [4, 13, 14, 17, 55, 88, 119, 134], в пленках ферритов-гранатов [56, 120–123], пленках ($Mn_{4-x}Ni_xN$) [8] также было обнаружено значительное увеличение скорости ДГ до 4–5 км/с в окрестности T_A.

На сегодняшний день общепринятой модели для описания динамики ДГ в компенсированных ферримагнетиках пока не существует. Результаты экспериментов объясняются на основе атомистических расчетов, решения уравнений Ландау–Лифшица и использовании методов Лагранжева формализма [7, 17, 41, 124, 125]. Несмотря на некоторые различия, применение этих подходов позволяет объяснить основные механизмы динамики ферримагнетиков в области T_A.

Приведем краткое описание динамики ДГ в ферримагнетиках, основываясь на методе, разработанном в работах [41, 126, 16] с использованием эффективных функций Лагранжа и Рэлея, справедливых в окрестности компенсации углового момента T_A

$$L_{\mathrm{eff}} = \frac{\chi_\perp}{2\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}}^2}\dot{\mathbf{l}}^2 + \frac{\chi_\perp}{\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}}}\mathbf{H}[\mathbf{l}\times\dot{\mathbf{l}}] + \frac{\chi_\perp}{2\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}}^2}(\mathbf{H}^2 - (\mathbf{H}\cdot\mathbf{l})) + \\ + m(H - \frac{\dot{\varphi}}{\gamma_{\mathrm{eff}}}) - \Phi(\mathbf{l}),$$
$$R_{\mathrm{eff}} = \frac{\alpha_{\mathrm{eff}}}{2\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}}}\dot{\mathbf{l}}^2, \tag{12}$$

где

$$m = \frac{M_2 - M_1}{2}, \quad M = \frac{M_2 + M_1}{2},$$
$$\alpha_{\mathrm{eff}} = \bar{\alpha}\frac{m}{m - m_0}, \ \gamma_{\mathrm{eff}} = \bar{\gamma}\frac{m}{m - m_0},$$
$$\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}} = \bar{\gamma}(1 - \frac{mm_0}{M^2})^{-1}, \ m_0 = M\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2},$$
$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_1}{\gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2}, \ \frac{1}{\bar{\gamma}} = \frac{1}{2}(\frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2}). \tag{13}$$

Уравнения Эйлера–Лагранжа для функционалов (12), как было показано в работе [126], могут быть преобразованы в уравнения динамики ДГ, аналогичные уравнениям Слончевского [127]

$$\dot{q}\frac{\bar{\alpha}M}{\bar{\gamma}\Delta} = m(H - \frac{\dot{\varphi}}{\gamma_{\mathrm{eff}}}),$$
$$\ddot{\varphi}\frac{\chi_\perp}{\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}}^2} - \frac{m}{\bar{\gamma}_{\mathrm{eff}}}\frac{\dot{q}}{\Delta} - K_\perp\sin(2\varphi) + \frac{\bar{\alpha}M}{\bar{\gamma}} = 0. \tag{14}$$

Как следует из уравнений (14), скорость и подвижность ДГ при малых $\chi_\perp << 1$ определяются соотношениями

$$\dot{q} = \frac{m}{M}\bar{\gamma}\Delta H\frac{\bar{\alpha}}{\bar{\alpha}^2 + (\frac{m-m_0}{M})^2},$$
$$\mu = \frac{m}{M}\bar{\gamma}\Delta\frac{\bar{\alpha}}{\bar{\alpha}^2 + (\frac{m-m_0}{M})^2}, \tag{15}$$

которые имеют особенности при $m \to m_0$ (рис. 4). На основе решения уравнений (14) можно показать,

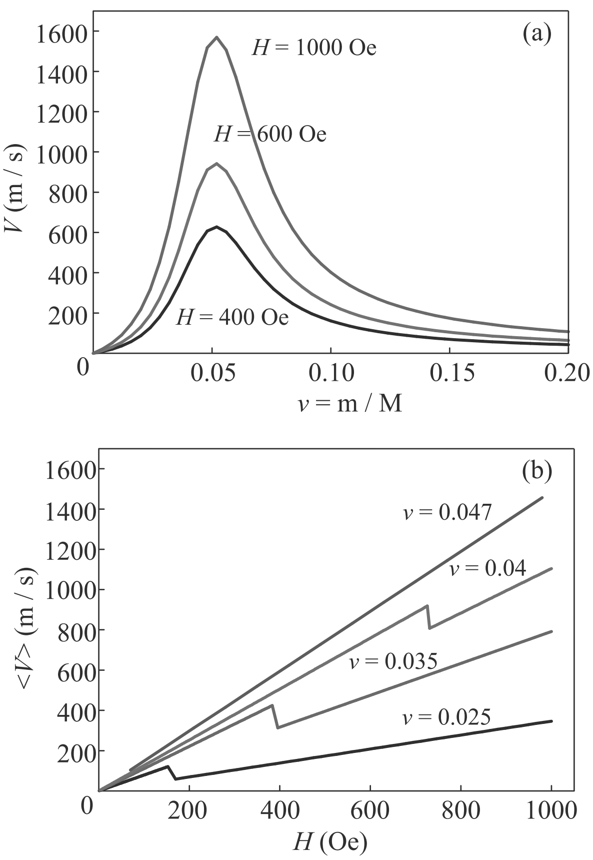

Рис. 4. (Цветной онлайн) Графики зависимости скорости ДГ в ферримагнетике: (a) – от удельной намагниченности ферримагнетика $\nu(T)$ при разных значениях магнитного поля; (b) – магнитного поля при разных значениях ν, теория (аналитическая модель) [126]

что в окрестности T_A динамика ДГ переходит в беспрецессионный режим (рис. 5), а также наблюдается резкое увеличение поля Уокера [126]. Исчезновение прецессии намагниченности ДГ вблизи T_A экспериментально наблюдалось в работе [14].

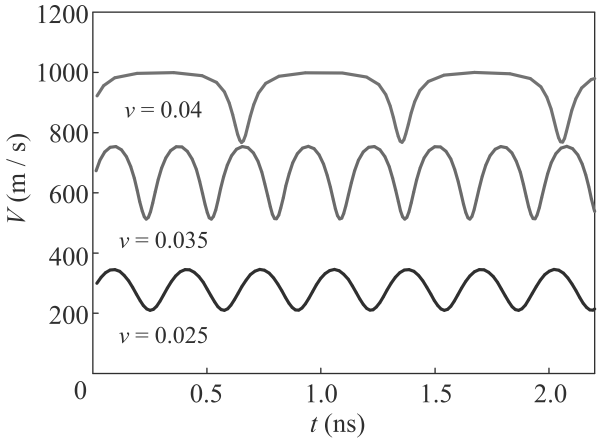

Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость скорости ДГ от времени при разных значениях удельной намагниченности ферримагнетика ν, $H = 800$ Э [126]

Кратко остановимся на особенностях динамики ДГ под действием СПТ в пленках синтетических ферримагнетиков с двумя точками компенсации, имеющих большой научный интерес [4, 55, 128, 129]. В ферримагнетиках, так же как в ферро- и антиферромагнетиках, передача вращательных моментов, возникающих при прохождении СПТ, осуществляется за счет механизмов – STT, SOT, SHE, однако в ферримагнетиках они имеют свою специфику.

1) STT, действующие на ДГ в ферримагнетиках, аналогичны STT ферромагнетиков, т.е. в них также выделяются две компоненты $\mathbf{T}_{DT}$, $\mathbf{T}_{ST}$. Это отличает их от антиферромагнетиков, в которых, как было упомянуто в предыдущем параграфе, адиабатическая компонента $\mathbf{T}_{DT}$ отсутствует. Однако, в отличие от ферромагнетиков, в которых ДГ под действием STT перемещается в одном направлении, в ферримагнетиках в области T_A наблюдается попятное движение ДГ [6, 16, 118, 130]. Качественно этот эффект объясняется тем, что движение ДГ осуществляется, в основном, под действием β-компоненты STT (так же, как и в антиферромагнетике), но в окрестности T_A реализуется α-компонента STT, которая влияет на динамику ДГ и приводит к изменению направления ее движения.

2) SHE, реализующиеся в пленках синтетических ферримагнетиков, оказывают преимущественное воздействие на прецессионную динамику ДГ. При температурах, далеких от T_A, динамика ДГ имеет трансляционный характер, ДГ перемещается в одном направлении; при увеличении плотности тока скорость ДГ и угол выхода намагниченности из плоскости ДГ – угол прецессии φ, выходят на насыщение. Однако при температурах, приближающихся к T_A, как следует из расчетов [16, 130, 131], скорость ДГ неограниченно возрастает, наблюдается увеличение подвижности ДГ, прецессия намагниченности исчезает (угол прецессии становится равным нулю). Данные наблюдения подтверждаются результатами экспериментальных исследований динамики ДГ в Pt/CoTb/SiN, Pt/CoGd/TaO_x, CoFeGd/Pt – пленках с существенным SHE [5, 14, 55].

Резюмируя, ферримагнетики являются перспективными материалами спинтроники, наличие нескольких магнитных подрешеток с различными температурами Кюри приводит к нетривиальной спиновой динамике. За счет наличия двух точек компенсации (температуры компенсации углового момента и температуры компенсации намагниченности) в ряде ферримагнетиков, удается реализовать высокие скорости движения ДГ при условии сохранения нескомпенсированного магнитного момента, что делает их достойной альтернативой материалам антиферромагнитной спинтроники.

V. Перспективы исследований динамики ДГ. Высокие скорости движения ДГ при малых энергозатратах, возможность детектирования магнитных возбуждений за счет результирующего магнитного момента делает использование антиферромагнитных и ферримагнитных материалов с температурой компенсации основой прорывных технологий спинтроники. Для внедрения результатов научных исследований в технологический процесс наряду с устойчивой повторяемостью результатов и пониманием управляющих физических механизмов, необходимо разнообразие материалов, в которых могут быть реализованы требуемые эффекты.

Несмотря на достигнутые успехи, продолжается активный поиск новых материалов с двумя точками компенсации, в том числе среди ферримагнитных диэлектриков и полупроводников. Хотя основные результаты по динамике компенсированных ферримагнетиков были получены в соединениях на основе металлов, которые являются проводниками, для ряда практических приложений интерес представляют диэлектрические материалы. В пользу реализации высоких динамических свойств в области компенсации у диэлектрических магнетиков говорят результаты исследований высокоскоростной динамики ДГ в кристаллах и пленках ферритов-гранатов [56, 120–123].

Другой стороной вопроса является величина интервала между точками компенсации ферримагнетиков. В редкоземельных сплавах на основе переходных металлов (типа Gd–Co–Fe) разница между температурами компенсации является небольшой, что связано с близкими значениями факторов Ланде редкоземельных ионов (Gd) и ионов переходных металлов (Fe), однако теоретически возможна ситуация, при которой гиротропные свойства ионов, входящих в структуру магнетика, будут существенно различны, что должно привести к расширению диапазона температур компенсации.

К перспективам дальнейших исследований следует отнести изучение роли взаимодействия Дзялошинского–Мория (ВДМ) в магнитодинамике компенсированных ферримагнетиков. Актуальное сегодня ВДМ реализуется в оксидных магнетиках определенной симметрии, в синтетических многослойных пленках, в состав которых входят тяжелые химические элементы (Pt, Ir, ...) [52, 55, 70, 121, 132]. С одной стороны, ВДМ способствует устойчивости ДГ, что приводит к увеличению величины порога неустойчивости ДГ при действии внешних факторов (магнитное поле, спин-поляризованный ток) и, как следствие, увеличению предельной скорости ДГ в ферромагнетиках [57, 69]. С другой стороны, инверсное ВДМ может служить одной из причин магнитоэлектрических эффектов в мультиферроиках, которые, являясь многоподрешеточными магнетиками, также могут выступать в роли кандидатов на сверхскоростные эффекты, реализуемые в дважды компенсированных ферримагнетках.

Останавливаясь на новых материалах ферримагнитной динамики, следует упомянуть топологические диэлектрики, которые могут служить буферным элементом в устройствах спинтроники, так как взаимодействие Рашбы позволяет усилить спин-орбитальные эффекты, важные для стабилизации киральных магнитных структур, включающих одномерные и двумерные ДГ, и по аналогии с ВДМ [57, 69], улучшающих устойчивость и подвижность ДГ. Использование мультиферроиков и топологических изоляторов в качестве платформы для динамики ДГ позволит реализовать идею бестоковой спинтроники, основанную на энергоэффективном управлении магнитными ДГ электрическим полем.

Изучение динамики намагниченности в диэлектрических антиферромагнетиках в последние годы приобретает все больший интерес, поскольку в диэлектриках вращательные моменты связаны с движением магнонов и в них отсутствуют потери на джоулево тепло, увеличивается длина пробега магнонов, а действие вращательных моментов магнонного тока, также может приводить к переключению намагниченности [72]. Отметим, что сверхскоростная динамика ДГ, реализованная в антиферромагнитных материалах под действием СПТ, также может быть интересна в нескольких аспектах, высокоскоростные ДГ являются посредниками сверхбыстрого переключения магнитных состояний [98, 105, 107], движение ДГ сопровождается тепловыми волнами, что позволяет использовать их для обмена энергией между различными подсистемами антиферромагнетиков [57].

В материалах, структура и симметрия которых допускает реализацию топологических структур, обусловленных релятивистскими, спин-орбитальными и обменными взаимодействиями, механизмы, отвечающие за стабилизацию неоднородных магнитных конфигураций и их динамику, достаточно сложны и требуют дальнейших экспериментальных и теоретических исследований.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 20-12-50256. Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 19-52-80024 и National Natural Science Foundation of China (Grant # 51961145105).

Авторы выражают благодарность А. К. Звездину за обсуждение материалов и полезные рекомендации при подготовке обзора.

1. S. S. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Science **320**, 190 (2008).
2. D. A. Allwood, G. Xiong, C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, and R. Cowburn, Science **309**, 1688 (2005).
3. M. Hayashi, L. Thomas, R. Moriya, C. Rettner, and S. S. Parkin, Science **320**, 209 (2008).
4. K. Cai, Z. Zhu, J. M. Lee, R. Mishra, L. Ren, S. D. Pollard, P. He, G. Liang, K. L. Teo, and H. Yang, Nature Electronics **3**, 37 (2020).
5. L. Caretta, M. Mann, F. Büttner et al. (Collaboration), Nat. Nanotechnol. **13**, 1154 (2018).
6. D.-H. Kim, D.-H. Kim, K.-J. Kim, K.-W. Moon, S. Yang, K.-J. Lee, and S. K. Kim, J. Magn. Magn. Mater. **514**, 167237 (2020).
7. K.-J. Kim, S. K. Kim, Y. Hirata, S.-H. Oh, T. Tono, D.-H. Kim, T. Okuno, W. S. Ham, S. Kim, G. Go, Y. Tserkovnyak, A. Tsukamoto, T. Moriyama, K.-J. Lee, and T. Ono, Nat. Mater. **16**, 1187 (2017).
8. S. Ghosh, T. Komori, A. Hallal, J. Peña Garcia, T. Gushi, T. Hirose, H. Mitarai, H. Okuno, J. Vogel, M. Chshiev, J.-P. Attané, L. Vila, T. Suemasu, and S. Pizzini, Nano Lett. **21**, 2580 (2021).
9. M. Imai, H. Chudo, M. Matsuo, S. Maekawa, and E. Saitoh, Phys. Rev. B **102**, 014407 (2020).

10. Е. В. Гомонай, В. М. Локтев, Физика низких температур **40**(1), 422 (2014).
11. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, Rev. Mod. Phys. **90**, 015005 (2018).
12. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, Nat. Nanotechnol. **11**, 231 (2016).
13. S. K. Kim, Nature Electronics **3**, 18 (2020).
14. E. Haltz, J. Sampaio, S. Krishnia, L. Berges, R. Weil, and A. Mougin, Sci. Rep. **10**, 1 (2020).
15. B. Ivanov, E. Galkina, V. Kireev, N. Kulagin, R. Ovcharov, and R. Khymyn, Low Temp. Phys. **46**, 841 (2020).
16. V. Yurlov, K. Zvezdin, P. Skirdkov, and A. Zvezdin, Phys. Rev. B **103**, 134442 (2021).
17. B. Ivanov, Low Temp. Phys. **45**, 935 (2019).
18. B. Ivanov, Low Temp. Phys. **40**, 91 (2014).
19. А. Р. Сафин, С. А. Никитов, А. И. Кирилюк, Д. В. Калябин, А. В. Садовников, П. А. Стремоухов, М. В. Логунов, П. А. Попов, ЖЭТФ **158**, 85 (2020).
20. А. М. Калашникова, А. В. Кимель, Р. В. Писарев, Успехи физических наук **185**, 1064 (2015).
21. A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro, and B. Hillebrands, J. Magn. Magn. Mater. **509**, 166711 (2020).
22. Ю. С. Орлов, С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, А. И. Нестеров, Письма в ЖЭТФ **112**, 268 (2020).
23. S.-H. Yang, R. Naaman, Y. Paltiel, and S. S. Parkin, Nature Reviews Physics **3**, 3281 (2021).
24. S. Konishi, T. Miyama, and K. Ikeda, Appl. Phys. Lett. **27**, 258 (1975).
25. C. H. Tsang, R. L. White, and R. M. White, J. Appl. Phys. **49**, 6052 (1978)
26. М. В. Четкин, А. Н. Шалыгин, де ла Кампа, ЖЭТФ **75**, 2345 (1978).
27. А. К. Звездин, Письма в ЖЭТФ **29**(10), 605 (1979); arXiv preprint arXiv:1703.01502 (2017).
28. N. L. Schryer and L. R. Walker, J. Appl. Phys. **45**, 5406 (1974).
29. L. Berger, J. Appl. Phys. **55**, 1954 (1984).
30. C.-Y. Hung and L. Berger, J. Appl. Phys. **63**, 4276 (1988).
31. C. D. Stanciu, F. Hansteen, A. V. Kimel, A. Kirilyuk, A. Tsukamoto, A. Itoh, and T. Rasing, Phys. Rev. Lett. **99**, 047601 (2007).
32. H. Umebayashi and Y. Ishikawa, J. Phys. Soc. Jpn. **20**, 2193 (1965).
33. M. Chetkin and A. de la Kampa, Письма в ЖЭТФ **27**(3), 168 (1978).
34. А. К. Звездин, А. Ф. Попков, Письма в ЖЭТФ **39**, 348 (1984).
35. А. К. Звездин, А. А. Мухин, Краткие сообщ. по физике, ФИАН **12**, 10 (1981).
36. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, М. В. Четкин, Успехи физических наук **146**(3), 417 (1985).
37. А. К. Звездин, А.Ф. Попков, Письма в ЖЭТФ **41**, 90 (1985).
38. А. К. Звездин, А. А. Мухин, Письма в ЖЭТФ **89**, 385 (2009).
39. А. Ю. Галкин, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **88**, 286 (2008).
40. Е. Г. Галкина, К. Э. Заспел, Б. А. Иванов, Н. Е. Кулагин, Л. М. Лерман, Письма в ЖЭТФ **110**, 474 (2019).
41. M. Davydova, K. Zvezdin, A. Kimel, and A. Zvezdin, J. Phys. Condens. Matter **32**, 01LT01 (2019).
42. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
43. F. Saurenbach, U. Walz, L. Hinchey, P. Grünberg, and W. Zinn, J. Appl. Phys. **63**, 3473 (1988).
44. M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
45. J. C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
46. L. Berger, Phys. Rev. B **54**, 9353 (1996).
47. Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh, Nature **464**, 262 (2010).
48. L. Liu, O. Lee, T. Gudmundsen, D. Ralph, and R. Buhrman, Phys. Rev. Lett. **109**, 096602 (2012).
49. J. Železný, H. Gao, K. Vỳbornỳ, J. Zemen, J. Mašek, A. Manchon, J. Wunderlich, J. Sinova, and T. Jungwirth, Phys. Rev. Lett. **113**, 157201 (2014).
50. J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. Back, and T. Jungwirth, Rev. Mod. Phys. **87**, 1213 (2015).
51. S. DuttaGupta, T. Kanemura, C. Zhang, A. Kurenkov, S. Fukami, and H. Ohno, Appl. Phys. Lett. **111**, 182412 (2017).
52. R. Bläsing, T. Ma, S.-H. Yang, C. Garg, F. K. Dejene, A. T. N'Diaye, G. Chen, K. Liu, and S. S. Parkin, Nat. Commun. **9**, 1 (2018).
53. J. Železný, P. Wadley, K. Olejník, A. Hoffmann, and H. Ohno, Nat. Phys. **14**, 220 (2018).
54. T. Jungwirth, J. Sinova, A. Manchon, X. Marti, J. Wunderlich, and C. Felser, Nat. Phys. **14**, 200 (2018).
55. S. A. Siddiqui, J. Han, J. T. Finley, C. A. Ross, and L. Liu, Phys. Rev. Lett. **121**, 057701 (2018).
56. C. O. Avci, E. Rosenberg, L. Caretta, F. Büttner, M. Mann, C. Marcus, D. Bono, C. A. Ross, and G. S. Beach, Nat. Nanotechnol. **14**, 561 (2019).
57. R. M. Otxoa, U. Atxitia, P. E. Roy, and O. Chubykalo-Fesenko, Communications Physics **3**, 1 (2020).
58. P. Hansen, C. Clausen, G. Much, M. Rosenkranz, and K. Witter, J. Appl. Phys. **66**, 756 (1989).
59. P. Hansen, C. Clausen, G. Much, M. Rosenkranz, and K. Witter, J. Magn. Magn. Mater. **113**, 227 (1992).

60. D. Bang and H. Awano, Appl. Phys. Express **5**, 125201 (2012).
61. D. Bang, P. Van Thach, and H. Awano, Journal of Science: Advanced Materials and Devices **3**, 389 (2018).
62. A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat, and Y. Suzuki, Europhys. Lett. **69**, 990 (2005).
63. K. M. Hals, Y. Tserkovnyak, and A. Brataas, Phys. Rev. Lett. **106**, 107206 (2011).
64. S. Zhang and Z. Li, Phys. Rev. Lett. **93**, 127204 (2004).
65. G. Tatara, T. Takayama, H. Kohno, J. Shibata, Y. Nakatani, and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 064708 (2006).
66. T. Koyama, D. Chiba, K. Ueda, K. Kondou, H. Tanigawa, S. Fukami, T. Suzuki, N. Ohshima, N. Ishiwata, Y. Nakatani, K. Kobayashi, and T. Ono, Nat. Mater. **10**, 194 (2011).
67. G. Meier, M. Bolte, R. Eiselt, B. Krüger, D.-H. Kim, and P. Fischer, Phys. Rev. Lett. **98**, 187202 (2007).
68. M. Eltschka, M. Wötzel, J. Rhensius, S. Krzyk, U. Nowak, M. Kläui, T. Kasama, R. E. Dunin-Borkowski, L. J. Heyderman, H. J. van Driel, and R. A. Duine, Phys. Rev. Lett. **105**, 056601 (2010).
69. A. Thiaville, S. Rohart, É. Jué, V. Cros, and A. Fert, EPL (Europhysics Letters) **100**, 57002 (2012).
70. S.-H. Yang and S. Parkin, J. Phys. Condens. Matter **29**, 303001 (2017).
71. A. Cohen, A. Jonville, Z. Liu, C. Garg, P. C. Filippou, and S.-H. Yang, J. Appl. Phys. **128**, 053902 (2020).
72. Y. Wang, D. Zhu, Y. Yang et al. (Collaboration), Science **366**, 1125 (2019).
73. V. M. Edelstein, Solid State Commun. **73**, 233 (1990).
74. V. Bel'kov and S. D. Ganichev, Semicond. Sci. Technol. **23**, 114003 (2008).
75. M. I. Dyakonov and V. Perel, Physics Letters A **35**, 459 (1971).
76. J. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834 (1999).
77. A. Manchon, J. Železný, I. M. Miron, T. Jungwirth, J. Sinova, A. Thiaville, K. Garello, and P. Gambardella, Rev. Mod. Phys. **91**, 035004 (2019).
78. S. Emori, U. Bauer, S.-M. Ahn, E. Martinez, and G. S. Beach, Nat. Mater. **12**, 611 (2013).
79. A. Schellekens, A. van den Brink, J. Franken, H. Swagten, and B. Koopmans, Nat. Commun. **3**, 1 (2012).
80. K.-S. Ryu, L. Thomas, S.-H. Yang, and S. S. Parkin, Appl. Phys. Express **5**, 093006 (2012).
81. P. Haazen, E. Murè, J. Franken, R. Lavrijsen, H. Swagten, and B. Koopmans, Nat. Mater. **12**, 299 (2013).
82. R. M. Rowan-Robinson, A. Stashkevich, Y. Roussigné, M. Belmeguenai, S.-M. Chérif, A. Thiaville, T. Hase, A. Hindmarch, and D. Atkinson, Sci. Rep. **7**, 1 (2017).
83. T. Kim, I. H. Cha, Y. J. Kim, G. W. Kim, A. Stashkevich, Y. Roussigné, M. Belmeguenai, S. M. Chérif, A. S. Samardak, and Y. K. Kim, Nat. Commun. **12**, 1 (2021).
84. J. Kim, J. Sinha, M. Hayashi, M. Yamanouchi, S. Fukami, T. Suzuki, S. Mitani, and H. Ohno, Nat. Mater. **12**, 240 (2013).
85. P. Sethi, S. Krishnia, S. Li, and W. Lew, J. Magn. Magn. Mater. **426**, 497 (2017).
86. F. Luo, S. Goolaup, W. C. Law, S. Li, F. Tan, C. Engel, T. Zhou, and W. S. Lew, Phys. Rev. B **95**, 174415 (2017).
87. K.-S. Ryu, L. Thomas, S.-H. Yang, and S. Parkin, Nat. Nanotechnol. **8**, 527 (2013).
88. S.-H. Yang, K.-S. Ryu, and S. Parkin, Nat. Nanotechnol. **10**, 221 (2015).
89. T. Shiino, S.-H. Oh, P. M. Haney, S.-W. Lee, G. Go, B.-G. Park, and K.-J. Lee, Phys. Rev. Lett. **117**, 087203 (2016).
90. P. Wadley, B. Howells, J. Železný et al. (Collaboration), Science **351**, 587 (2016).
91. J. Godinho, H. Reichlová, D. Kriegner, V. Novák, K. Olejník, Z. Kašpar, Z. Šobáň, P. Wadley, R. P. Campion, R. M. Otxoa, P. E. Roy, J. Železný, T. Jungwirth, and J. Wunderlich, Nat. Commun. **9**, 1 (2018).
92. T. Matalla-Wagner, M.-F. Rath, D. Graulich, J.-M. Schmalhorst, G. Reiss, and M. Meinert, Phys. Rev. Appl. **12**, 064003 (2019).
93. Z. Kašpar, M. Surýnek, J. Zubáč, F. Krizek, V. Novák, R. P. Campion, M. S. Wörnle, P. Gambardella, X. Marti, P. Němec, K. W. Edmonds, S. Reimers, O. J. Amin, F. Maccherozzi, S. S. Dhesi, P. Wadley, J. Wunderlich, K. Olejník, and T. Jungwirth, Nature Electronics **4**, 30 (2021).
94. K. Olejník, V. Schuler, X. Marti, V. Novák, Z. Kašpar, P. Wadley, R. P. Campion, K. W. Edmonds, B. L. Gallagher, J. Garces, M. Baumgartner, P. Gambardella, and T. Jungwirth, Nat. Commun. **8**, 1 (2017).
95. M. J. Grzybowski, P. Wadley, K. W. Edmonds, R. Beardsley, V. Hills, R. P. Campion, B. L. Gallagher, J. S. Chauhan, V. Novak, T. Jungwirth, F. Maccherozzi, and S. S. Dhesi, Phys. Rev. Lett. **118**, 057701 (2017).
96. P. Wadley, S. Reimers, M. J. Grzybowski, C. Andrews, M. Wang, J. S. Chauhan, B. L. Gallagher, R. P. Campion, K. W. Edmonds, S. S. Dhesi, F. Maccherozzi, V. Novak, J. Wunderlich, and T. Jungwirth, Nat. Nanotechnol. **13**, 362 (2018).
97. J. Volný, D. Wagenknecht, J. Železný, P. Harcuba, E. Duverger-Nedellec, R. Colman, J. Kudrnovský, I. Turek, K. Uhlířová, and K. Výborný, Physical Review Materials **4**, 064403 (2020).

98. S. Y. Bodnar, L. Šmejkal, I. Turek, T. Jungwirth, O. Gomonay, J. Sinova, A. Sapozhnik, H.-J. Elmers, M. Kläui, and M. Jourdan, Nat. Commun. **9**, 1 (2018).
99. M. Meinert, D. Graulich, and T. Matalla-Wagner, Phys. Rev. Appl. **9**, 064040 (2018).
100. X. Zhou, X. Chen, J. Zhang, F. Li, G. Shi, Y. Sun, M. Saleem, Y. You, F. Pan, and C. Song, Phys. Rev. Appl. **11**, 054030 (2019).
101. X.-T. Jia, X.-L. Cai, W.-Y. Yu, L.-W. Zhang, B.-J. Wang, G.-H. Cao, S.-Z. Wang, H.-M. Tang, and Y. Jia, J. Phys. D: Appl. Phys. **53**, 245001 (2020).
102. F. Thöle, A. Keliri, and N. A. Spaldin J. Appl. Phys. **127**, 213905 (2020).
103. S. Y. Bodnar, Y. Skourski, O. Gomonay, J. Sinova, M. Kläui, and M. Jourdan, Phys. Rev. Appl. **14**, 014004 (2020).
104. R. M. Otxoa, P. E. Roy, R. Rama-Eiroa, J. Godinho, K. Y. Guslienko, and J. Wunderlich, J. Comput. Phys. **3**, 1 (2020).
105. L. Baldrati, O. Gomonay, A. Ross, M. Filianina, R. Lebrun, R. Ramos, C. Leveille, F. Fuhrmann, T. R. Forrest, F. Maccherozzi, S. Valencia, F. Kronast, E. Saitoh, J. Sinova, and M. Kläui, Phys. Rev. Lett. **123**, 177201 (2019).
106. I. Gray, T. Moriyama, N. Sivadas, G. M. Stiehl, J. T. Heron, R. Need, B. J. Kirby, D. H. Low, K. C. Nowack, D. G. Schlom, D. C. Ralph, T. Ono, and G. D. Fuchs, Phys. Rev. X **9**, 041016 (2019).
107. O. Gomonay, T. Jungwirth, and J. Sinova, Phys. Rev. Lett. **117**, 017202 (2016).
108. T. Janda, J. Godinho, T. Ostatnicky et al. (Collaboration), Physical Review Materials **4**, 094413 (2020).
109. S. Selzer, U. Atxitia, U. Ritzmann, D. Hinzke, and U. Nowak, Phys. Rev. Lett. **117**, 107201 (2016).
110. A. Donges, N. Grimm, F. Jakobs, S. Selzer, U. Ritzmann, U. Atxitia, and U. Nowak, Physical Review Research **2**, 013293 (2020).
111. S. Seki, T. Ideue, M. Kubota, Y. Kozuka, R. Takagi, M. Nakamura, Y. Kaneko, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **115**, 266601 (2015).
112. S. M. Wu, W. Zhang, K. Amit, P. Borisov, J. E. Pearson, J. S. Jiang, D. Lederman, A. Hoffmann, and A. Bhattacharya, Phys. Rev. Lett. **116**, 097204 (2016).
113. M. Ikhlas, T. Tomita, T. Koretsune, M.-T. Suzuki, D. Nishio-Hamane, R. Arita, Y. Otani, and S. Nakatsuji, Nat. Phys. **13**, 1085 (2017).
114. H. Reichlova, T. Janda, J. Godinho, A. Markou, D. Kriegner, R. Schlitz, J. Zelezny, Z. Soban, M. Bejarano, H. Schultheiss, P. Nemec, T. Jungwirth, C. Felser, J. Wunderlich, and S. T. B. Goennenwein, Nat. Commun. **10**, 1 (2019).
115. T. Tono, T. Taniguchi, K.-J. Kim, T. Moriyama, A. Tsukamoto, and T. Ono, Appl. Phys. Express **8**, 073001 (2015).
116. D.-H. Kim, T. Okuno, S. K. Kim, S.-H. Oh, T. Nishimura, Y. Hirata, Y. Futakawa, H. Yoshikawa, A. Tsukamoto, Y. Tserkovnyak, Y. Shiota, T. Moriyama, K.-J. Kim, K.-J. Lee, and T. Ono, Phys. Rev. Lett. **122**, 127203 (2019).
117. S. Fukuda, H. Awano, and K. Tanabe, Appl. Phys. Lett. **116**, 102402 (2020).
118. E. Martínez, V. Raposo, and Ó. Alejos, J. Phys. Condens. Matter **32**, 465803 (2020).
119. V. V. Yurlov, K. A. Zvezdin, G. A. Kichin, M. D. Davydova, A. E. Tseplina, N. T. Hai, J.-C. Wu, S.-Z. Ciou, Y.-R. Chiou, L.-X. Ye, T.-H. Wu, R. C. Bhatt, and A. K. Zvezdin, Appl. Phys. Lett. **116**, 222401 (2020).
120. V. Randoshkin, V. Polezhaev, N. Sysoev, and Y. N. Sazhin, Phys. Solid State **45**, 513 (2003).
121. S. Ding, A. Ross, R. Lebrun, S. Becker, K. Lee, I. Boventer, S. Das, Y. Kurokawa, S. Gupta, J. Yang, G. Jakob, and M. Kläui, Phys. Rev. B **100**, 100406 (2019).
122. H.-A. Zhou, Y. Dong, T. Xu, K. Xu, L. Sánchez-Tejerina, L. Zhao, Y. Ba, P. Gargiani, M. Valvidares, Y. Zhao, M. Carpentieri, O. A. Tretiakov, X. Zhong, G. Finocchio, S. K. Kim, and W. Jiang, arXiv:1912.01775 [cond-mat.mtrl-sci].
123. L. Caretta, S.-H. Oh, T. Fakhrul, D.-K. Lee, B. H. Lee, S. K. Kim, C. A. Ross, K.-J. Lee, and G. S. Beach, Science **370**, 1438 (2020).
124. C. Zaspel, E. Galkina, and B. Ivanov, Phys. Rev. Appl. **12**, 044019 (2019).
125. D. Loss, D. P. DiVincenzo, and G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. **69**, 3232 (1992).
126. A. Zvezdin, Z. Gareeva, and K. Zvezdin, J. Magn. Magn. Mater. **509**, 166876 (2020).
127. А. Малоземов, Д. Слонзуски, *Доменные стенки в материалах с цилиндрическими магнитными доменами*, Мир, М. (1982), 382 с.
128. T. Okuno, *Magnetic Dynamics in Antiferromagnetically-Coupled Ferrimagnets: The Role of Angular Momentum*, Springer, Singapore (2020).
129. S. A. Siddiqui, J. Sklenar, K. Kang, M. J. Gilbert, A. Schleife, N. Mason, and A. Hoffmann, J. Appl. Phys. **128**, 040904 (2020).
130. E. Haltz, S. Krishnia, L. Berges, A. Mougin, and J. Sampaio, Phys. Rev. B **103**, 014444 (2021).
131. E. Martínez, V. Raposo, and Ó. Alejos, J. Magn. Magn. Mater. **491**, 165545 (2019).
132. A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. **2**, 1 (2017).
133. X. Z. Chen, R. Zarzuela, J. Zhang, C. Song, X. F. Zhou, G. Y. Shi, F. Li, H. A. Zhou, W. J. Jiang, F. Pan, and Y. Tserkovnyak, Phys. Rev. Lett. **120**, 207204 (2018).
134. R. Mishra, J. Yu, X. Qiu, M. Motapothula, T. Venkatesan, and H. Yang, Phys. Rev. Lett. **118**, 167201 (2017).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 263 – 268

Лазерный эффект при взрыве пористого кремния[1)]

Г. Г. Зегря[+], *Е. В. Шашков*[*], *А. А. Карпова*[+ 2)], *Н. С. Воробьев*[*], *В. М. Фрейман*[+], *А. Г. Зегря*[+], *Ю. С. Соломонов*[×]

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

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

[×]*Московский институт теплотехники, 127273 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 мая 2021 г.
После переработки 12 июля 2021 г.
Принята к публикации 15 июля 2021 г.

При взрывчатом превращении композитов на основе пористого кремния с перхлоратными окислителями был обнаружен новый эффект: интенсивность, сопровождающая взрывчатое превращение, достигает максимального значения за десятки микросекунд с момента возбуждения взрывчатого превращения, далее наблюдается резкий провал интенсивности до нулевого уровня, длящийся десятки микросекунд ("нулевая полка"), и в заключение происходит одновременное излучение коротких светового и электромагнитного импульсов. Регистрируемая ширина линии излучения порядка 1 нм позволяет интерпретировать световой импульс как лазерный эффект. Обсуждаются условия, при которых происходит наблюдение "нулевой полки", возможная причина ее возникновения, а также механизм излучения короткого светового импульса.

DOI: 10.31857/S1234567821160096

1. Введение. Способность пористого кремния к взрывчатому превращению была впервые обнаружена в 1992 г. [1]. С тех пор были проведены многочисленные исследования, направленные на изучение зависимости энергетических и временных характеристик взрывчатого превращения пористого кремния, заполненного окислителем, от типа использованного окислителя, стабилизации окислителя в порах, присутствия водорода на поверхности кремния, инициирования экзотермической реакции термическим, оптическим способами и т.д. [2]. Как предположили Клемент с коллегами, при взрывчатом превращении композита на основе пористого кремния, заполненного окислителем, за основным событием детонации следует этап охлаждения, соответствующий расширению слабо взаимодействующих продуктов экзотермической реакции – горячих газов или частиц [3]. Это отражается в постепенном снижении интенсивности вспышки света, сопровождающей взрывчатое превращение. В настоящей работе мы сообщаем о новом и необычном сценарии развития взрывчатого превращения композита на основе пористого кремния и окислителя, при котором интенсивность световой вспышки неожиданно исчезает на десятки микросекунд с последующим излучением коротких светового и электромагнитного импульсов.

2. Экспериментальная часть. Для исследования взрывчатого превращения композитов на основе пористого кремния с перхлоратами кальция и бария в качестве окислителей были приготовлены более 100 образцов. Каждый из образцов представлял собой политетрафторэтиленовый контейнер цилиндрической формы с углублением, которое заполнялось определенной массой композита. Размеры контейнера: высота – 8 мм, внешний диаметр – 8 мм, внутренний диаметр – 6 мм. Также в дне контейнера имелось отверстие с диаметром 0.8 мм. Технология получения пористого кремния и описание подготовки образцов приведены в работе [4].

Экспериментальная установка позволяла как инициирование, так и детектирование взрывчатого превращения энергонасыщенных композитов. Был выбран оптический способ инициирования: композит на основе пористого кремния, находящийся в контейнере, устанавливался на мишень и облучался единичным импульсом Nd : YAG лазера. Детектирование взрывчатого превращения включало в себя регистрацию:

1) временной зависимости интенсивности световой вспышки с помощью трех фотодиодов, расположенных под углами 45°, 90° и 180° к оптической оси;

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

[2)]e-mail: va7059va@yandex.ru

2) панорамного спектра вспышки света в диапазоне 185–1110 нм на протяжении времени экспозиции 10 мс;

3) формы световой вспышки путем ее фотографирования;

4) импульса отдачи, сопровождающего взрывчатое превращение.

Подробное описание и схематическое изображение экспериментальной установки приведено в дополнительном материале.

Отдельное внимание было уделено исследованию влияния различного рода наводок на систему регистрации взрывчатого превращения композитов на основе пористого кремния. Основными наводками, влияющими на фотодиоды, регистрирующие временную зависимость световых вспышек, являются световые засветки от ламп накачки Nd : YAG лазера и импульсы электромагнитного излучения от источника его питания. При работе экспериментальной установки в обычном режиме с установкой контейнера с композитом на мишень, но при одновременном перекрытии лазерного излучения фотодиодами не были зарегистрированы какие-либо сигналы, т.е. линии временной развертки были нулевыми. Если установка контейнера с композитом на мишень не производилась, однако при этом лазерные импульсы могли достигать поверхности мишени, то происходила регистрация только инициирующих лазерных импульсов. На основании полученных результатов по изучению влияния наводок на результаты измерений можно заключить, что все зарегистрированные данные достоверно характеризуют взрывчатые превращения композитов на основе пористого кремния и окислителя.

3. Результаты. Среди более чем ста экспериментов по инициированию и детектированию взрывчатого превращения композитов на основе пористого кремния и окислителя в большинстве случаев экспериментальные данные были зарегистрированы без искажений, связанных с высокой интенсивностью регистрируемых сигналов. В отдельных случаях взрывчатое превращение образца сопровождалось механическим разрушением контейнера, содержащего исходный композит.

Зарегистрированные сигналы без искажений характеризовали взрывчатые превращения 50 композитов, содержащих от 5 до 30 мг пористого кремния. В 20 случаях при испытаниях, проводимых с использованием одного из этих 50 композитов, нами был обнаружен один и тот же эффект, информация о котором отсутствует в более ранних работах по исследованию взрывчатого превращения композитов на основе пористого кремния [5, 6]. Эффект заключается в том, что интенсивность световой вспышки исчезает на десятки микросекунд. Как показано на рис. 1, период нулевой интенсивности световой вспышки, который мы назвали “нулевой полкой”, заканчивается одновременным возбуждением светового и электромагнитного импульсов.

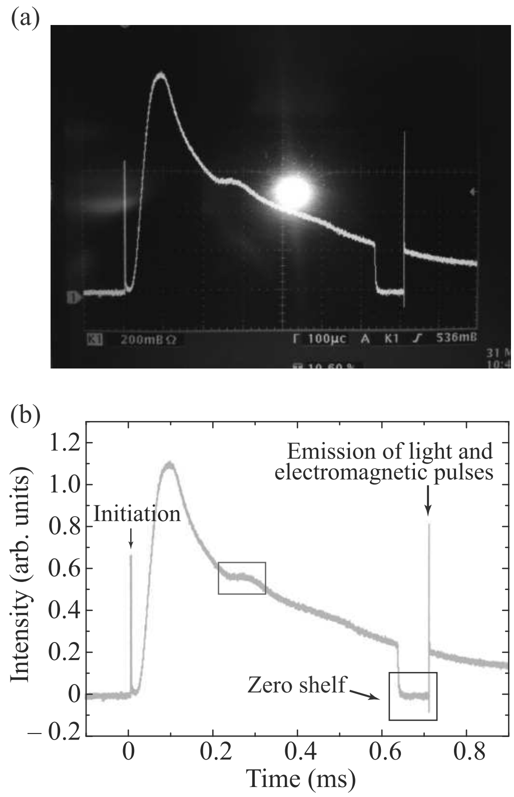

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Фотография экрана осциллографа Tektronix TDS 3032, на котором показана “нулевая полка”, возникающая во временной зависимости световой вспышки, которая сопровождает взрывчатое превращение. Длительность “нулевой полки” составляет примерно 60 мкс. (b) – Фотография экрана осциллографа Tektronix TDS 3032 после постобработки с указанием некоторых особенностей зарегистрированной осциллограммы. Период практически постоянной интенсивности световой вспышки выделен на осциллограмме на рис. 1b красной рамкой без дополнительных комментариев

На рисунке 1 малые отрицательные значения сигнала интенсивности вспышки на конце “нулевой полки” можно объяснить наложением светового и электромагнитного импульсов. Важно отметить, что длительность “нулевой полки” может изменяться в пределах от 40 до 60 мкс, а сама “нулевая полка” появляется через 0.5–0.6 мс после того, как интенсивность световой вспышки достигает своего максимального значения (см. дополнительный материал).

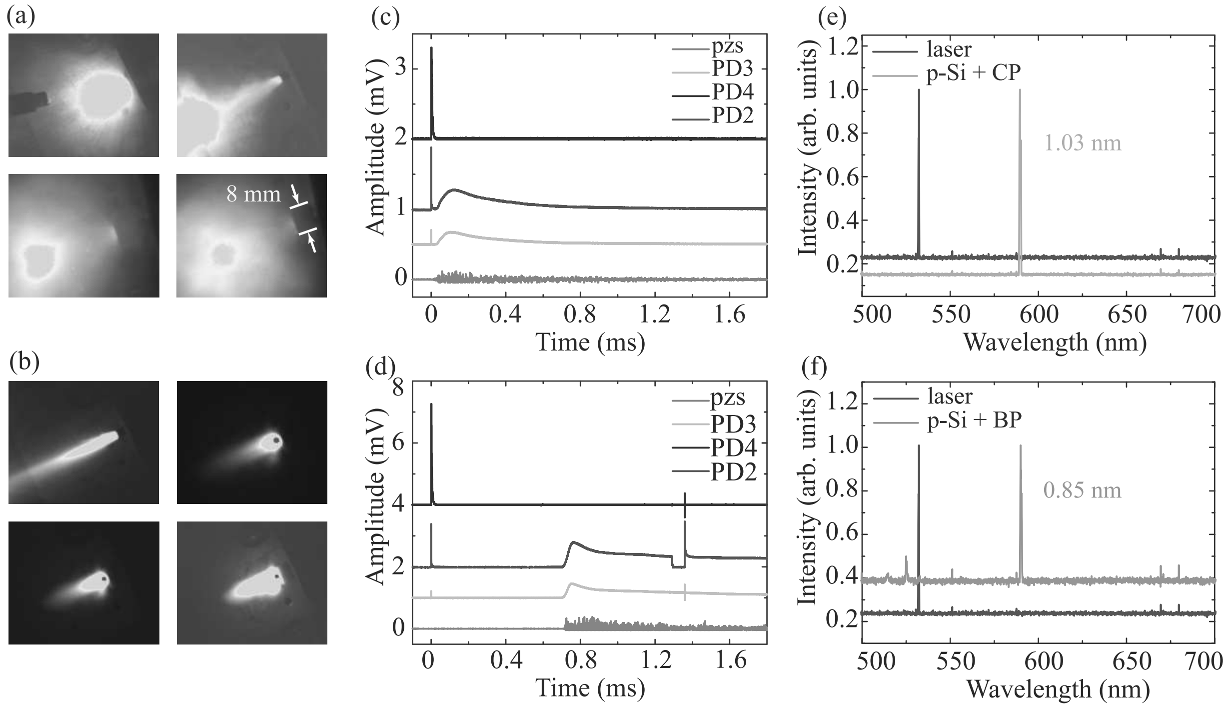

Рис. 2. (Цветной онлайн) (a)–(d) – Фотографии и временные зависимости интенсивности вспышек света для композитов, демонстрирующих вспышку сферической (a), (c) или вытянутой (b), (d) форм. Области высокой и еще более высокой температуры по сравнению с фоном на рис. 2a, b выделены желтым и красным цветами, соответственно. Длительность "нулевой полки" на рис. 2d равна 63 мкс. (e), (f) – Спектральный состав вспышек света, сопровождающих взрывчатые превращения композитов пористый кремний (p-Si) + перхлорат кальция (CP) (e) и пористый кремний + + перхлорат бария (BP) (f)

Мы установили, что успешная регистрации "нулевой полки" соответствует композитам с массой порошка пористого кремния, равной 15 мг (8 из 20 успешных испытаний) и перхлоратом бария в качестве окислителя (20 из 20 успешных испытаний). Использование перхлората кальция в качестве окислителя ни разу не привело к наблюдению "нулевой полки". Более подробная информация о результатах регистрации "нулевой полки" приведена в дополнительном материале.

На рисунке 2 показаны два типичных набора экспериментальных данных, зафиксированных при взрывчатых превращениях композитов на основе пористого кремния и окислителя, при которых "нулевая полка" не наблюдается (верхний ряд) и наблюдается (нижний ряд).

Как видно на рис. 2a, b, взрывчатое превращение композита может сопровождаться световой вспышкой как сферической, так и вытянутой формы. Известно, что форма световой вспышки зависит от типа окислителя [7, 8]. Мы обнаружили, что вспышка вытянутой формы характерна для композитов с перхлоратом бария. Сферическая форма световой вспышки наблюдалась при взрывчатых превращениях композитов на основе пористого кремния и перхлората кальция.

Перейдем к обсуждению спектрального состава световых вспышек. Спектры световых вспышек, сопровождающих взрывчатые превращения композитов на основе пористого кремния и перхлората кальция или бария, состоят из интенсивной линии на длине волны 590 нм и сателлитов, относящихся к остаткам окислителя. Ряд этих спектров приведен на рис. 2e, f и в дополнительном материале. Примечательно, что единичный пик на длине волны 590 нм (2.10 эВ) не зависит от типа использованного окислителя. Авторами других работ при исследовании взрывчатых превращений композитов на основе пористого кремния и перхлората натрия, нитрата гадолиния и нитрата алюминия [5, 9] была зарегистрирована близкая спектральная линия на длине волны 589 нм. В качестве причины ее присутствия в спектрах световых вспышек авторы указали наличие натрия в атмосфере лаборатории или кремниевом каркасе образцов. Другая близкая спектральная линия 2.08 эВ (596 нм) была зарегистрирована при взрывчатом превращении пористого кремния, заполненного жидким кислородом [10]. Возможной причиной ее появления авторы работы [10] назвали излучение однократно ионизированного атомарного кремния.

Мы не связываем происхождение линии излучения 590 нм в зарегистрированных нами спектрах ни с излучением натрия, ни с излучением однократно ионизированного атомарного кремния. Во-первых, спектральное разрешение спектрометра ASP-150TF, используемого в экспериментальной установке, составляет 0.2 нм; следовательно, при использовании этого прибора можно ожидать разрешения натриевого дублета. Во-вторых, при использовании программного обеспечения ASTRA 4, разработанного в Московском государственном техническом университете им. Н. Э. Баумана, нами была оценена максимальная температура в области взрывчатого превращения композита на основе пористого кремния и перхлората бария. Рассчитанное значение температуры 3600 K, т.е. 0.31 эВ, оказалось намного меньше величины первого ионизационного потенциала кремния, равного 8.149 эВ.

4. Обсуждение. В первую очередь необходимо обратить внимание на тот факт, что число случаев регистрации "нулевой полки" во временной зависимости интенсивности световой вспышки, сопровождающей взрывчатое превращение, является различным для разных значений массы порошка пористого кремния в составе энергонасыщенного композита. Например, увеличение массы порошка пористого кремния в композите до 20 мг уменьшило количество случаев регистрации "нулевой полки" приблизительно в полтора раза по сравнению с использованием 15 мг порошка пористого кремния. Это говорит о том, что появление "нулевой полки" тесным образом связано с энергетическим выходом и энергетическим балансом взрывчатого превращения. Также стоит отметить, что "нулевая полка" наблюдалась только при таких взрывчатых превращениях, которые сопровождались световыми вспышками вытянутой формы. Следовательно, форма световой вспышки также существенно влияет на появление "нулевой полки". В частности, вытянутая форма вспышки говорит о разбросе продуктов взрывчатого превращения в меньшем телесном угле.

Мы полагаем, что наиболее вероятной причиной появления "нулевой полки" во временной зависимости интенсивности световой вспышки является взаимодействие выделившегося излучения с продуктами экзотермической реакции. Поскольку максимальная температура в области взрывчатого превращения композита на основе пористого кремния и перхлората бария 3600 K превышает температуру испарения кремния 2873 K, то при взрывчатом превращении композита неизбежно должно происходить испарение кремниевого каркаса образцов. После достижения своего максимального значения температура в области взрывчатого превращения снижается, что должно приводить к конденсации и дальнейшему росту наноразмерных частиц кремния.

На рисунке 1 можно заметить период практически постоянной интенсивности вспышки, начинающийся приблизительно через 0.2 мс после начала взрывчатого превращения и выделенный на рис. 1b красной рамкой. Мы связываем указанный период времени с началом формирования наночастиц кремния. Эта особенность временной зависимости интенсивности вспышки была также зарегистрирована ранее Клементом и др. [3] и Ковалевым и др. [10]. Такой метод получения наноразмерных кремниевых частиц сходен с испарением кристаллического кремния пучком ускоренных электронов [11] с той лишь разницей, что энергия, затрачиваемая на плавление и испарение кремниевой составляющей энергонасыщенного композита, выделяется при его взрывчатом превращении.

Предположение об испарении кремниевого каркаса подтверждают результаты исследования продуктов взрывчатого превращения композита на основе пористого кремния и перхлората кальция методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) (см. дополнительный материал). Как видно на рис. 3, в результате взрывчатого превращения произошло формирование материала с преобладающим содержанием кремния и кислорода и наноструктурированной поверхностью, который отличен от исходного порошка пористого кремния [12].

Взаимодействие выделившегося излучения с кремниевыми наноразмерными частицами действительно может быть причиной появления наблюдаемого на конце "нулевой полки" светового импульса. Усиление излучения в среде за счет многократного рассеяния на частицах, занимающих случайное пространственное положение, было предсказано В. С. Летоховым в 1968 г. [13]. Как известно, эффект случайной лазерной генерации (*random lasing*) наблюдался при использовании порошков различных полупроводниковых материалов ZnO, ZnSe, GaAs, GaN, причем наночастицы, составляющие порошок, выполняли как функцию рассеивателей, так и функцию активной среды [14]. В 2019 году было показано, что массив кремниевых нанопроволок способен обеспечивать достаточно эффективное рассеяние излучения коллоидных квантовых точек

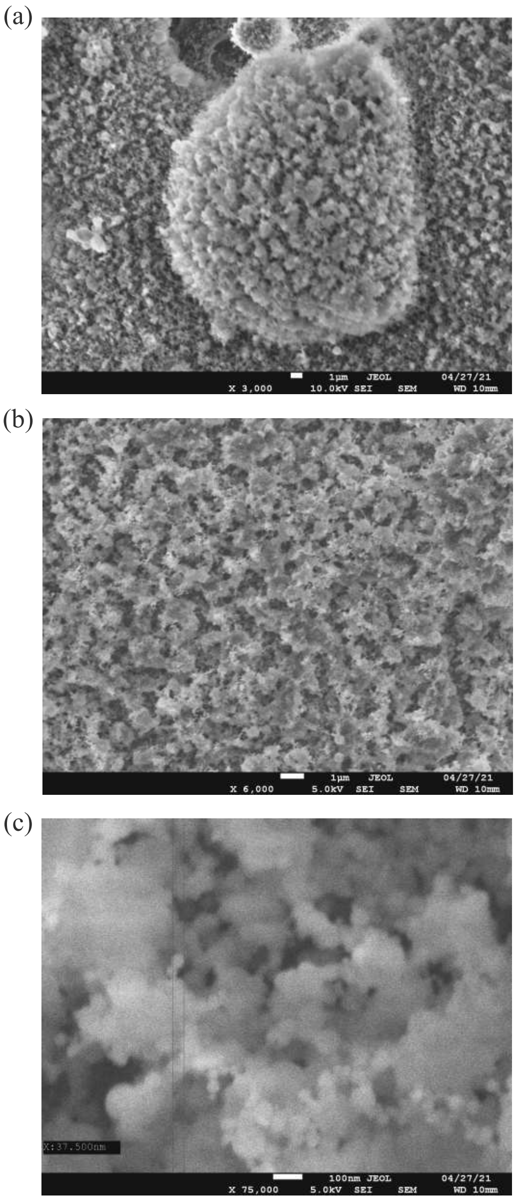

Рис. 3. СЭМ-изображение поверхности кремниевого наноструктурированного материала с увеличением 3× (a), 6× (b) и 75× (c)

CdSe/CdS/ZnS для реализации случайного лазера (*random laser*) [15].

Мы считаем, что интерпретация наблюдаемого нами эффекта как "случайной" лазерной генерации для объяснения излучения светового импульса, возникающего на конце "нулевой полки", очень привлекательна по нескольким причинам.

Во-первых, формирование экстремально узких спектральных линий с величиной полной ширины на уровне полувысоты порядка 1–2 нм (см. дополнительный материал) случайного лазера возможно при наличии в системе как резонансной, так и нерезонансной положительной обратной связи [16].

Во-вторых, различную длительность регистрируемых "нулевых полок" можно было бы объяснить различным временем рассеяния излучения в неупорядоченной среде из кремниевых рассеивателей до того момента, в который усиление излучения превысит потери, и произойдет излучение светового импульса.

В-третьих, хорошо известно, что излучение случайного лазера происходит в полном телесном угле [17]. Как видно на осциллограммах, приведенных на рис. 2c, d, интенсивный сигнал на конце "нулевой полки" регистрируют все три фотодиода, которые расположены под различными углами к оптической оси.

В-четвертых, повышенная температура в области взрывчатого превращения по сравнению с комнатной температурой также должна способствовать эффективному усилению излучения в кремниевом случайном лазере, поскольку, как было продемонстрировано в недавней работе, лазерно-индуцированный нагрев кремниевых нанокристаллов в матрице оксида кремния приводит к более чем троекратному увеличению скорости излучательной рекомбинации [18].

5. Заключение. В настоящей работе наблюдался новый эффект, возникающий при взрывчатом превращении энергонасыщенного композита на основе пористого кремния и перхлоратного окислителя – исчезновение интенсивности световой вспышки, сопровождающей взрывчатое превращение, на десятки микросекунд с последующим излучением лазерного и электромагнитного импульсов. Установлены требования к композиту, взрывчатое превращение которого позволит наблюдать данный эффект, а также обсуждена возможная причина возникновения этого эффекта.

Авторы благодарят Ю. М. Михайлова, Г. Г. Савенкова и В. П. Улина за советы по подготовке образцов, Ю. К. Куриленкова, В. Е. Фортова, М. М. Глазова и А. Я. Вуля – за обсуждение работы, А. В. Нащекина – за проведение исследования продуктов взрывчатого превращения методом сканирующей электронной микроскопии.

1. P. McCord, S. L. Yau, and A. J. Bard, Science **257**, 68 (1992).
2. L. Canham, *Handbook of Porous Silicon* Springer, Cham (2014), p. 975.
3. D. Clement, J. Diener, E. Gross, N. Künzner, V. Y. Timoshenko, and D. Kovalev, Phys. Status Solidi A **202**, 1357 (2005).

4. G. G. Zegrya, G. G. Savenkov, A. G. Zegrya, V. A. Bragin, I. A. Os'kin, and U. M. Poberezhnaya, Tech. Phys. **65**, 1636 (2020).
5. A. Plummer, H. Cao, R. Dawson, R. Lowe, J. Shapter, and N. H. Voelcker, Proc. SPIE 7267, Smart Materials V **7267**, 72670P (2008).
6. S. K. Lazarouk, A. V. Dolbik, V. A. Labunov, and V. E. Borisenko, JETP Lett. **84**, 581 (2007).
7. M. du Plessis, Propellants Explos. Pyrotech. **39**, 348 (2014).
8. M. du Plessis, Sens. Actuators A **135**, 666 (2007).
9. F. V. Mikulec, J. D. Kirtland, and M. J. Sailor, Adv. Mater. **14**, 38 (2002).
10. D. Kovalev, V. Y. Timoshenko, N. Künzner, E. Gross, and F. Koch, Phys. Rev. Lett. **87**, 068301 (2001).
11. S. P. Bardakhanov, A. I. Korchagin, N. K. Kuksanov, A. V. Lavrukhin, R. A. Salimov, S. N. Fadeev, and V. V. Cherepkov, Mater. Sci. Eng. B **132**, 204 (2006).
12. G. G. Savenkov, A. G. Zegrya, G. G. Zegrya, B. V. Rumyantsev, A. B. Sinani, and Y. M. Mikhailov, Tech. Phys. **64**, 361 (2019).
13. V. S. Letokhov, Sov. Phys. JETP **26**, 835 (1968).
14. F. Luan, B. Gu, A. S.L. Gomes, K. T. Yong, S. Wen, and P. N. Prasad, Nano Today **10**, 168 (2015).
15. Z. Xu, H. Zhang, C. Chen, G. Aziz, J. Zhang, X. Zhang, J. Deng, T. Zhai, and X. Zhang, RSC Adv. **9**, 28642 (2019).
16. S. Mujumdar, M. Ricci, R. Torre, and D. S. Wiersma, Phys. Rev. Lett. **93**, 053903 (2004).
17. D. S. Wiersma, Nature **406**, 133 (2000).
18. E. M. de Jong, H. Rutjes, J. Valenta, M. T. Trinh, A. N. Poddubny, I. N. Yassievich, A. Capretti, and T. Gregorkiewicz, Light: Sci. Appl. **7**, 17133 (2018).

Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 4, с. 269 – 272

Расщепление сверхтекучего перехода в жидком ^{3}He нематическим аэрогелем

И. А. Фомин[1)]

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 июля 2021 г.
После переработки 14 июля 2021 г.
Принята к публикации 14 июля 2021 г.

Рассмотрено влияние неоднородных возмущений, создаваемых нематическим аэрогелем в жидком ^{3}He на вид параметра порядка, возникающего при переходе жидкости в сверхтекучее состояние. Показано, что граница устойчивости полярно искаженной АБМ (Андерсон–Бринкман–Морела) фазы в зависимости от свойств нематического аэрогеля может начинаться непосредственно от линии сверхтекучего перехода. Приведен симметрийный аргумент для отбора аэрогелей, наиболее подходящих для стабилизации полярной фазы.

DOI: 10.31857/S1234567821160102

1. Введение. В последние годы в жидком ^{3}He были успешно стабилизированы новые сверхтекучие фазы [1] (см. также обзор [2]). Возможность образования разных фаз – это типичное проявление необычного куперовского спаривания. В случае ^{3}He – это спаривание в состоянии с орбитальным моментом $l = 1$ и спином $s = 1$. Соответствующий параметр порядка пропорционален комплексной 3×3 матрице $A_{\mu j}$, ее первый индекс нумерует одну из трех возможных проекций спина, а второй – из трех возможных проекций орбитального момента. Согласно теории Ландау фазовый переход происходит, когда меняет знак коэффициент при инварианте второго порядка в разложении выигрыша свободной энергии по степеням параметра порядка. В ^{3}He член второго порядка в этом разложении – $\delta f \sim a(P,T)A^*_{\mu j}A_{\mu j}$. Температура перехода T_c при заданном давлении P определяется из условия $a(P,T_c) = 0$. Найденная таким образом температура "вырождена" в том смысле, что при этой температуре нормальная фаза неустойчива по отношению к образованию куперовских пар с тремя возможными проекциями спина $s_z = 0$, $s_z = \pm 1$ и тремя проекциями орбитального момента: $l_z = 0$, $l_z = \pm 1$. Надлежащая комбинация этих базисных функций находится путем минимизации вклада инвариантов четвертого порядка в выигрыш энергии. В ^{3}He таких инвариантов 5: $I_1 = A_{\mu j}A_{\mu j}A^*_{\nu l}A^*_{\nu l}$, $I_2 = A_{\mu j}A^*_{\mu j}A_{\nu l}A^*_{\nu l}$, $I_3 = A_{\mu j}A_{\nu j}A^*_{\mu l}A^*_{\nu l}$, $I_4 = A_{\mu j}A^*_{\nu j}A_{\nu l}A^*_{\mu l}$, $I_5 = A_{\mu j}A^*_{\nu j}A_{\mu l}A^*_{\nu l}$. В свободную энергию они входят в виде комбинации $\sum_{s=1}^{5}\beta_s I_s$, где $\beta_1, ..., \beta_5$ – феноменологические коэффициенты. В общем случае у этой комбинации много экстремумов и среди них несколько минимумов [3, 4]. При тех значениях коэффициентов $\beta_1, ..., \beta_5$, которые реализуются в ^{3}He, фактически используются только два минимума. Они соответствуют фазам Андерсона–Бринкмана–Морела (АБМ) и Бальяна и Вертхаммера (БВ) [4].

Среди других минимумов имеется *полярная* фаза. Эта фаза соответствует куперовскому спариванию с проекцией орбитального момента $l_z = 0$ и ее параметр порядка имеет вид $A_{\mu j} = \Delta \exp(i\varphi) d_\mu m_j$, где Δ – общая амплитуда, d_μ – единичный спиновый вектор, а m_j – единичный вектор в пространстве волновых векторов. В свободном от примесей объеме жидкого ^{3}He этот минимум по энергии сильно проигрывает двум другим и не может реализоваться. Вместе с тем соответствующая ему фаза обладает интересными физическими свойствами, такими как топологически устойчивая линия нулей в спектре фермиевских возбуждений [5], возможность существования в этой фазе полуквантовых вихрей [6] (и ссылки в статье) и т.п.

Аояма и Икеда [7] предложили теоретически метод, позволяющий стабилизировать полярную фазу в некотором интервале температур вблизи T_c. Идея метода состоит в том, чтобы понизить симметрию нормальной фазы от сферической до аксиальной. Тогда возможные сверхтекучие фазы и соответствующие им температуры переходов будут классифицироваться не по абсолютной величине орбитального момента l, а по его проекции l_z на ось симметрии. Если теперь добиться того, чтобы самой высокой была температура перехода для $l_z = 0$, то в некотором интервале

[1)]e-mail: fomin@kapitza.ras.ru

температур ниже этой T_c должна быть устойчивой полярная фаза. Для понижения орбитальной симметрии жидкого ^{3}He Аояма и Икеда предложили использовать ориентированные анизотропные примеси. Конкретно они рассмотрели ансамбль примесей, для которых среднее сечение рассеяния фермиевских квазичастиц имеет вид: $\sigma(\hat{k}) \sim [1 + \delta(\hat{k} \cdot \hat{z})^2]$. Здесь $\hat{z}$ – это направление анизотропии, а $\hat{k}$ – передача импульса при рассеянии. Следуя рассуждениям теории сверхпроводящих сплавов [8], Аояма и Икеда пришли к выводу, что температура перехода расщепится на две – T_{c0}, соответствующую проекции $l_z = 0$ и T_{c1} – проекциям $l_z = \pm 1$. Если $\delta < 0$, то $T_{c0} > T_{c1}$ и даже при небольших значениях δ для каждого давления существует конечный интервал температур, начинающийся от T_c, в котором куперовские пары имеют $l = 1$ и $l_z = 0$, т.е. в этом интервале температур должна реализовываться полярная фаза ^{3}He. Этот результат стимулировал эксперименты по стабилизации полярной фазы (см. обзор [2]). Глобальная анизотропия в этих экспериментах создавалась с помощью различных образцов так называемых *нематических* аэрогелей. Эти аэрогели образованы длинными и почти параллельными нитями. В первых экспериментах использовались образцы "обнинского" аэрогеля [9]. Нити этого аэрогеля имеют диаметры $d \approx 9$ нм, они состоят из аморфного AlOOH. Степень анизотропии этого аэрогеля, если судить по отношению длин свободных пробегов фермиевских квазичастиц вдоль и поперек нитей $l_\parallel / l_\perp \approx 1.4$, намного превышает ту, которую предполагали в своих расчетах Аояма и Икеда. Тем не менее при переходе гелия в сверхтекучее состояние возникала не полярная, а полярно-искаженная АБМ-фаза, которая содержит компоненты всех трех проекций орбитального момента. Когда в последующих экспериментах для создания анизотропии в ^{3}He был использован другой нематический аэрогель *нафен*, имеющий еще большую анизотропию, была успешно стабилизирована полярная фаза, которая впоследствии наблюдалась и в других экспериментах [10, 6].

Цель настоящей работы – попытаться понять, какие именно свойства и характеристики заданного нематического аэрогеля, погруженного в жидкий ^{3}He, определяют вид среднего параметра порядка той фазы, которая возникает при переходе ^{3}He в сверхтекучее состояние.

2. Локальная анизотропия. В большинстве теоретических работ, где обсуждается в рамках теории Ландау фазовая диаграмма сверхтекучего ^{3}He [11–13], аэрогель считается непрерывной средой, анизотропной, но не киральной, т.е. не различающей правую и левую ориентации. В этом случае член второго порядка в разложении выигрыша свободной энергии по степеням параметра порядка можно записать как $\delta f \sim \Lambda_{jl}(P,T) A^*_{\mu j} A_{\mu l}$, где $\Lambda_{jl}(P,T)$ – это *вещественная симметричная* матрица. Такую матрицу можно диагонализовать, причем ее диагональные элементы $\tau_x(P,T), \tau_y(P,T), \tau_z(P,T)$ вещественны. Направления ее собственных векторов, которые также вещественны и взаимно ортогональны, можно выбрать в качестве направлений координатных осей. Формально можно определить три температуры перехода, когда один из диагональных элементов меняет знак. Фактически переход происходит при наибольшей из трех температур. В цитированных выше статьях аэрогель считался аксиально симметричным, таким что z – ось симметрии, а $\tau_x(P,T) = \tau_y(P,T)$. Такое "среднеполевое" описание влияния аэрогеля не учитывает эффекты, связанные с дискретной структурой аэрогеля, в частности, возможное пространственное изменение параметра порядка на масштабах порядка расстояния между нитями.

В соответствии с результатами работы [14] нити аэрогеля возмущают конденсат вблизи себя на расстояниях порядка длины корреляции ξ_0. В сверхтекучем ^{3}He в зависимости от давления эта длина изменяется в интервале 20÷80 нм. Конденсат реагирует на это возмущение на расстояниях порядка зависящей от температуры длины когерентности, которая вблизи T_c удовлетворяет условию $\xi(T) \gg \xi_0$. При таком условии произведенное нитью возмущение можно считать локальным и описывать дополнительным членом в разложении свободной энергии вида $f_{ag} = N(0)\Lambda_{jl}(\mathbf{r})A^*_{\mu j}A_{\mu l}$. Здесь $N(0)$ – плотность состояний на уровне Ферми. Матрица $\Lambda_{jl}(\mathbf{r})$ зависит от координаты $\mathbf{r}$ и должна быть *эрмитовой*, поскольку плотность свободной энергии – вещественна. Предполагается, что нити аэрогеля не взаимодействуют непосредственно со спинами квазичастиц. В эксперименах [2] такое взаимодействие исключалось путем покрытия нитей тонкой пленкой ^{4}He. Удобно представить матрицу $\Lambda_{jl}(\mathbf{r})$ в виде суммы ее среднего по ансамблю $\tau_{jl} = \langle \Lambda_{jl} \rangle$ и флуктуирующей локальной анизотропии $\eta_{jl}(\mathbf{r}) = \Lambda_{jl}(\mathbf{r}) - \tau_{jl}$ так, что $\langle \eta_{jl} \rangle = 0$. В дальнейшем будет считаться, что рассматриваемые аэрогели в среднем не обладают киральностью, т.е. не различают правую и левую ориентации. В этом случае матрица τ_{jl} – симметричная и вещественная, ее главные значения τ_x, τ_y, τ_z – вещественные функции температуры, а главные направления, как было объяснено выше, можно принять за направления координатных осей (x,y,z): $\tau_{jl} = \tau_x \hat{x}_j \hat{x}_l + \tau_y \hat{y}_j \hat{y}_l + \tau_z \hat{z}_j \hat{z}_l$.

В этих обозначениях разложение плотности свободной энергии в окрестности температуры неустойчивости нормальной фазы можно записать как:

$$\frac{f_S - f_N}{N(0)} = [\tau_{jl} + \eta_{jl}(\mathbf{r})]A^*_{\mu j}A_{\mu l} + $$
$$+ \xi_s^2 \left(\frac{\partial A^*_{\mu l}}{\partial x_n}\frac{\partial A_{\mu l}}{\partial x_n}\right) + \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{5}\beta_s I_s. \quad (1)$$

Чтобы избежать несущественных усложнений для вклада градиентных членов, здесь принято модельное изотропное выражение. Равновесный параметр порядка находится из уравнений

$$[\tau_{jl}+\eta_{jl}(\mathbf{r})]A_{\mu l} - \xi_s^2\left(\frac{\partial^2 A_{\mu j}}{\partial x_n^2}\right) + \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{5}\beta_s\frac{\partial I_s}{\partial A^*_{\mu j}} = 0. \quad (2)$$

При решении системы уравнений (2) ограничимся случаем, когда случайную анизотропию $\eta_{jl}(\mathbf{r})$ можно считать возмущением. Решение уравнения (2) будем искать в виде $A_{\mu j}(\mathbf{r}) = \bar{A}_{\mu j} + a_{\mu j}(\mathbf{r})$, где $\bar{A}_{\mu j}$ – это усредненный по ансамблю параметр порядка. Это среднее значение следует рассматривать как параметр порядка рассматриваемой фазы ^{3}He в аэрогеле, оно описывает термодинамические свойства жидкости. Флуктуирующая часть параметра порядка $a_{\mu j}(\mathbf{r})$ при усреднении исчезает. Условие неустойчивости нормальной фазы ^{3}He следует выразить непосредственно через $\bar{A}_{\mu j}$. Для этого надо подставить $A_{\mu j} = \bar{A}_{\mu j} + a_{\mu j}(\mathbf{r})$ в уравнение (2) и усреднить его, удерживая члены не выше второго порядка по $a_{\mu j}$ и $\eta_{jl}(\mathbf{r})$ и линейные по $\bar{A}_{\mu j}$. В результате получится:

$$\tau_{jl}\bar{A}_{\mu l} + \langle\eta_{jl}(\mathbf{r})a_{\mu l}(\mathbf{r})\rangle = 0. \quad (3)$$

Греческий индекс μ входит в написанное уравнение как параметр. Для фаз, обсуждавшихся в связи с экспериментами [2] параметр порядка факторизуется на спиновую и орбитальную части. Спиновая часть – это вещественный вектор d_μ. Орбитальная анизотропия влияет на ориентацию d_μ только через слабое дипольное взаимодействие, которое здесь не учитывается. В дальнейшем будет рассматриваться только орбитальная часть $A_{\mu j}$ и индекс μ будет опускаться:

$$\tau_{jl}\bar{A}_l + \langle\eta_{jl}a_l\rangle = 0. \quad (4)$$

Флуктуирующая часть a_l находится из линейного уравнения

$$\tau_{jl}a_l - \xi_s^2\left(\frac{\partial^2 a_j}{\partial x_n^2}\right) = -\eta_{jl}\bar{A}_l, \quad (5)$$

оно решается переходом к фурье-образам

$$a_l(\mathbf{k}) = -(\tau_{ln} + \delta_{ln}\xi^2k^2)^{-1}\eta_{nm}(\mathbf{k})\bar{A}_m. \quad (6)$$

Подстановка этого решения в

$$\langle\eta_{jl}a_l\rangle = \int \eta_{jl}(-\mathbf{k})a_l(\mathbf{k})\frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (7)$$

дает линейное уравнение для параметра порядка в точке неустойчивости нормальной фазы:

$$(\tau_{jl} - V_{jl})\,\bar{A}_l = 0, \quad (8)$$

где

$$V_{jl} = \left\langle \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\eta^*_{mj}(\mathbf{k})(\tau_{mn} + \delta_{mn}\xi^2k^2)^{-1}\eta_{nl}(\mathbf{k})\right\rangle. \quad (9)$$

Здесь было использовано соотношение $\eta_{jl}(-\mathbf{k}) = \eta^*_{lj}(\mathbf{k})$. Уравнение (8) имеет решение, если

$$\det(\tau_{jl} - V_{jl}) = 0. \quad (10)$$

Таким образом, это – задача на собственные значения по отношению к температуре перехода $T = T_c$, от которой зависит τ_{jl}. Для решения задачи можно использовать стандартную теорию возмущений (см., например, [15]). В нулевом приближении $\tau_{jl}\bar{A}_l = 0$ имеются три собственных значения $\tau_x = 0$, $\tau_y = 0$, $\tau_z = 0$ с соответствующими им собственными векторами $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ и $(0,0,1)$. Допустим, что $\tau_x \geq \tau_y > \tau_z$ и при понижении температуры первым происходит переход в точке $\tau_z(T = T_c) = 0$. В духе теории Ландау $\tau_z(T)$ можно разложить в окрестности T_c. Можно выбрать нормировку так, что $\tau_z = (T - T_c)/T_c$. Поправка первого порядка к температуре перехода имеет вид $(T - T_c) = T_cV_{zz}$. Возникающий при переходе параметр порядка в этом приближении имеет следующие компоненты $\bar{A}_x = \frac{V_{13}}{\tau_x}$, $\bar{A}_y = \frac{V_{23}}{\tau_y}$ и $\bar{A}_z = 1$. Согласно определению (9) матрица V_{jl} эрмитова. Это значит, что ее симметричная часть $(V_{jl} + V_{lj})/2$ вещественна, а антисимметричная – $(V_{jl} - V_{lj})/2$ – чисто мнимая. Если элементы V_{13} и V_{23} вещественны, то их возникновение можно рассматривать как изменение направления $\bar{A}_l$. Возникающая фаза – полярная, но с измененной ориентацией. Мнимые добавки к поперечным компонентам нельзя включить в параметр порядка полярной фазы. Вместе с z-компонентой $\bar{A}_z = 1$ они образуют параметр порядка полярно-искаженной АБМ-фазы, которая при дальнейшем понижении температуры переходит в АБМ-фазу непрерывно, без дальнейших фазовых переходов. Чисто полярная фаза образуется, если $V_{13} = V_{31}$ и $V_{23} = V_{32}$. Это условие выполняется для обсуждавшихся в литературе [7, 16] модельных выражений $\eta_{jl}(\mathbf{k})$. Рассмотренные модели основаны на обобщениях теории сверхпроводящих сплавов [8], где аэрогель считается ансамблем независимых примесей, причем тензор $\eta_{jl}(\mathbf{r})$ в них – вещественный симметричный. Это требование обеспечивает отсутствие мнимой части V_{jl}, но ему трудно найти физическое обоснование. Симметрийные аргументы позволяют понять, каким должен быть идеальный для стабилизации полярной фазы аэрогель. Это – нематический аэрогель с бесконечно длинными и гладкими нитями. Такой аэрогель обладает симметрией по отношению к отражению в плоскости, ортогональной нитям. В этом случае при преобразовании $z \to (-z)$ компоненты V_{xz} и V_{yz} тензора V_{jl} должны изменить знак, но в силу предположенной симметрии они не могут измениться, т.е. эти компоненты должны быть равными нулю. Согласно обзору [2] аэрогели нафен и муллит имеют структуру более близкую к идеальной, чем обнинский аэрогель. Этим может объясняться то, что полярную фазу наблюдают в двух первых случаях и не наблюдали в последнем. Полезно также иметь в виду, что идеальный нематический аэрогель не должен понижать температуру перехода ^{3}He в сверхтекучее состояние [17] и величина понижения T_c в аэрогеле может служить индикатором качества образца.

В заключение, средняя одноосная анизотропия, наведенная в жидком ^{3}He погруженным в него аэрогелем еще не гарантирует стабилизации полярной фазы. Пространственные флуктуации локальной анизотропии в зависимости от структуры аэрогеля могут способствовать возникновению мнимых компонент параметра порядка и образованию вблизи T_c полярно-искаженной АБМ фазы. Наиболее надежным для стабилизации чисто полярной фазы является использование идеального нематического аэрогеля.

Автор благодарен В. В. Дмитриеву, А. А. Солдатову и А. Н. Юдину за полезные дискуссии и конструктивную критику.

---

1. V. V. Dmitriev, A. A. Senin, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, Phys. Rev. Lett. **115**, 165304 (2015).
2. V. V. Dmitriev, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, ЖЭТФ **158**, 6 (2020).
3. В. И. Марченко, ЖЭТФ **93**, 141 (1987) [JETP **66**, 79 (1987)].
4. D. Vollhardt and P. Woelfle, *The superfluid Phases of Helium 3*, London, N.Y., Taylor and Francis (1990).
5. V. B. Eltsov, T. Kamppinen, J. Rysti, and G. E. Volovik, arXiv:1908.01645.
6. S. Autti, V. V. Dmitriev, J. T. Mäkinen, A. A. Soldatov, G. E. Volovik, A. N. Yudin, V. V. Zavjalov, and V. B. Eltsov, Phys. Rev. Lett. **117**, 255301 (2016).
7. K. Aoyama and R. Ikeda, Phys. Rev. B **73**, 060504 (2006).
8. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **35**, 1558 (1958) [Sov. Phys. JETP **9**, 220 (1959)].
9. R. Sh. Askhadullin, V. V. Dmitriev, D. A. Krasnikhin, P. N. Martynov, A. A. Osipov, A. A. Senin, and A. N. Yudin, Письма в ЖЭТФ **95**, 355 (2012).
10. N. Zhelev, M. Reichl, T. S. Abhilash, E. N. Smith, K. X. Nguen, E. J. Mueller, and J. M. Parpia, Nat. Commun. **7**, 12975 (2016).
11. J. A. Sauls, Phys. Rev. B **88**, 214503 (2013).
12. I. A. Fomin and E. V. Surovtsev, Письма в ЖЭТФ **97**, 742 (2013).
13. И. А. Фомин, ЖЭТФ **145**, 871 (2014).
14. D. Rainer and M. Vuorio, J. Phys. C: Solid State Phys. **10**, 3093 (1977).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, М. (1963), гл. VI.
16. R. C. Regan, J. J. Wiman, and J. A. Sauls, arXiv: 2105.01257 v1.
17. И. А. Фомин, ЖЭТФ **154**, 1034 (2018) [JETP **127**, 933 (2018)].

Pis'ma v ZhETF, vol. 114, iss. 4, pp. 273 – 274

Type-II Weyl semimetal vs gravastar

G. E. Volovik[1)]

Low Temperature Laboratory, Aalto University, P.O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland

L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 16 June 2021
Resubmitted 13 July 2021
Accepted 15 July 2021

DOI: 10.31857/S1234567821160114

There are different scenarios of the development of the black hole in the process of evaporation by Hawking radiation. In particular, the end of the evaporation can result in a macroscopic quantum tunnelling from the black hole to the white hole, see [1] and references therein. Another scenario is the formation of compact object – the vacuum star, where event horizon can be considered as the boundary separating different phases of the quantum vacuum [2]. Such consideration was based on the condensed matter analogies, which in particular are presented by the superfluid ^{3}He [3]. Topological materials such as the Weyl and Dirac semimetals bring a new twist to this analogy. They provide new support for the scenario of the formation of a vacuum star after the end of Hawking evaporation.

The analog of the event horizon emerges on the boundary between type I and type II Weyl semimetals [4–11]. The energy spectrum of electrons in Weyl semimetals becomes relativistic in the vicinity of the Weyl point. In its simplest form the Hamiltonian near the Weyl point at $\mathbf{p} = 0$ is:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{v}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}, \tag{1}$$

where $\boldsymbol{\sigma}$ are the Pauli matrices; $c = 1$ is the analog of the speed of light; $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ is the analog of the shift velocity in this effective metric, which for spherical horizon is:

$$ds^2 = -dt^2 + (dr - v(r)dt)^2 + r^2 d\Omega^2. \tag{2}$$

The horizon is at the boundary between the region with $|v(r)| < 1$ (type I Weyl semimetal), and the region with the overtilted Dirac cone, $|v(r)| > 1$ (type II Weyl semimetal [12]). The overtilted Dirac cone $E(\mathbf{p}) = p_r v \pm pc$ produces Fermi surface $E(\mathbf{p}) = 0$ in Fig. 1.

When the type II region is formed, the Fermi surface is still not occupied by electronic quasiparticles: the negative energy states are empty, while the positive energy states are occupied, Fig. 1 (left). The initial

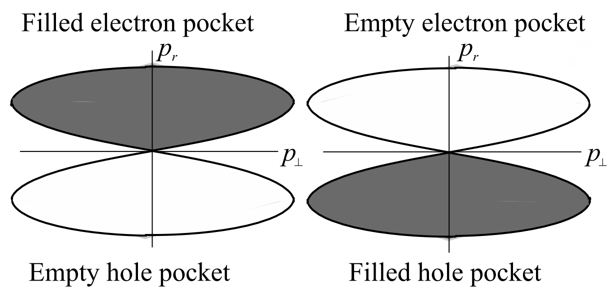

Fig. 1. Fermi surface $E(\mathbf{p}) = 0$ in the type II Weyl semimetal inside the horizon. Left: Nonequilibrium state in the first moment after formation of the event horizon. The positive energy states in the newly formed Fermi surface are fully occupied, while the negative energy states are empty. The relaxation of this highly nonequilibrium state is accompanied by Hawking radiation and reconstruction of the vacuum state. Right: Final equilibrium state after reconstruction. The positive energy states are empty, and the negative energy states are occupied. There is no Hawking radiation after this final state is reached

stage of the process of equilibration is the filling of the negative energy states by the fermions occupying the positive energy states. This process corresponds to the creation of the particle-hole pairs at the horizon, which is the analog of the Hawking radiation with the Hawking temperature $T_H = v'/2\pi$, where v' is the derivative of the shift velocity at the horizon. Finally the equilibrium "vacuum" state is formed, in which all the negative energy states inside the Fermi surface become occupied, Fig. 1 (right). In this final vacuum state, there is no Hawking radiation, while the horizon still exists.

Applying this scheme to the black holes (BH), one comes to the following "circle of the life of a BH" [13]. At the beginning of its formation, the BH appears in a non-equilibrium state. This is the conventional state of a BH with the singularity at the origin. This state is quasi-equilibrium, since it is accompanied by Hawking radiation. The interior of the horizon contains the Fermi surfaces [13–16]. The filling of negative energy states will

1) e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

be accompanied not only by the Hawking radiation, but also by the back reaction of the gravitational field inside the horizon, which again will be followed by the reconstruction of spectrum. As a result, the black hole interior arrives at the equilibrium state. The analog of the homogeneous ground state in the type-II semimetal is the state with the homogeneous vacuum energy density, that is the de Sitter vacuum.

Different configurations with the de Sitter quantum vacuum in the core of the black hole have been discussed in [2], [17–19] and [20–24]. These firewall objects serve as an alternative to the conventional black holes, and they can resolve the information loss problem [25–28]. In its simplest form the shift velocity has the form:

$$v(r) = -\sqrt{\frac{r_h}{r}},\ r > r_h,\ v(r) = -\frac{r}{r_h},\ r < r_h. \qquad (3)$$

Here $r_h = 1/(2M)$ is the horizon radius, and $H = -1/r_h$ is the Hubble parameter of the (collapsing) de Sitter vacuum inside the horizon (in units $\hbar = G = c = 1$).

The jump in the velocity gradient is resolved by the thin layer, which is either outside the "horizon" [17, 18] (the type I gravastar), or inside the horizon [23] (the type II gravastar). The analogy between the Weyl semimetal black hole and the real black hole is in favour of the type II gravastar. The shell inside the horizon is made of the vacuum fields. We considered the vacuum field using the q-field describing the phenomenology of the quantum vacuum [29].

In conclusion, we considered the possible scenario of the formation of the equilibrium final state of the black hole. This scenario is inspired by the consideration of the black hole analog in Weyl semimetals, where the analog of the event horizon separates two topologically different types of the Weyl materials: type I and type II. The relaxation of the initial state of the black hole analog is accompanied by the Hawking radiation and by the reconstruction of vacuum state inside the horizon. In the final equilibrium state, the event horizon separates two different vacuum states, and there is no more Hawking radiation. Such final state in Weyl semimetals is analogous to the dark energy stars discussed earlier. In such black hole there is the real event horizon. The interior of the horizon contains the de Sitter vacuum and thin shell, both made of the vacuum fields.

This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement # 694248).

This is an excerpt of the article "Type-II Weyl semimetal vs gravastar". Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021160013

1. F. Soltani, C. Rovelli, and P. Martin-Dussaud, arXiv:2105.06876.
2. G. Chapline, E. Hohlfeld, R. B. Laughlin, and D. I. Santiago, Int. J. Mod. Phys. A **18**, 3587 (2003).
3. G. E. Volovik, Phys. Rep. **351**, 195 (2001).
4. G. E. Volovik, JETP Lett. **104**, 645 (2016).
5. L. Liang and T. Ojanen, Phys. Rev. Research **1**, 032006(R) (2019).
6. K. Hashimoto and Y. Matsuo, Phys. Rev. B **102**, 195128 (2020).
7. Y. Kedem, E. J. Bergholtz, and F. Wilczek, Phys. Rev. Research **2**, 043285 (2020).
8. C. De Beule, S. Groenendijk, T. Meng, and T. L. Schmidt, arXiv:2106.14595.
9. D. Sabsovich, P. Wunderlich, V. Fleurov, D. I. Pikulin, R. Ilan, and T. Meng, arXiv:2106.14553.
10. C. Morice, A. G. Moghaddam, D. Chernyavsky, J. van Wezel, and J. van den Brink, Phys. Rev. Research **3**, L022022 (2021).
11. C. Sims, Condens. Matter **6**, 18 (2021).
12. G. E. Volovik and M. A. Zubkov, Nucl. Phys. B **881**, 514 (2014).
13. M. Zubkov, Universe **4**, 135 (2018).
14. P. Huhtala and G. E. Volovik, JETP **94**, 853 (2002).
15. M. A. Zubkov, Mod. Phys. Lett. A **33**, 1850047(2018).
16. M. Lewkowicz and M. Zubkov, Symmetry **11**, 1294 (2019).
17. P. O. Mazur and E. Mottola, arXiv: gr-qc/0109035.
18. P. O. Mazur and E. Mottola, Proc. Natl. Acad. Sci. **101**, 9545 (2004).
19. M. Visser and D. L. Wiltshire, Class. Quantum Gravity **21**, 1135 (2004).
20. V. P. Frolov, M. A. Markov, and V. F. Mukhanov, Phys. Rev. D **41**, 383 (1990).
21. I. Dymnikova, Gen. Relativ. Gravit. **24**, 235 (1992).
22. I. Dymnikova, Class. Quantum Gravity **19**, 725 (2002).
23. I. Dymnikova, Universe **6**, 101 (2020).
24. H. Maeda, arXiv:2107.04791.
25. A. Almheiri, D. Marolf, J. Polchinski, and J. Sully, JHEP **02**, 06202 (2013).
26. G. 't Hooft, Found. Phys. **47**, 1503 (2017).
27. V. Cardoso and P. Pani, Living. Rev. Relativ. **22**, 4 (2019).
28. G. 't Hooft, arXiv:2106.11152.
29. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, Phys. Rev. D **78**, 063528 (2008).

Текущий авторский указатель томов 113–114 [1)]

[1)] В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 113(1)–113(9).

Информация для авторов

Журнал “Письма в ЖЭТФ” (и его англоязычная версия “JETP Letters”) публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.

- Миниобзоры на наиболее актуальные “горячие” темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.

- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

“Письма в ЖЭТФ” является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках[1)]. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В “JETP Letters” все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК “Наука/Интерпериодика”. Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двухколоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер миниобзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи[2)], с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF-8[3)], кодировка KOI8-R[4)]).

Статьи в редакцию можно направлять

- по электронной почте letters@kapitza.ras.ru – направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (..ps), EncapsulatedPostScript (..eps) или PaintBrush (..pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроенными рисунками.

- по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, “Письма в ЖЭТФ” – два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, может быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

---

1) http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml#sub1
2) http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/example.tex
3) http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/jetpl.cls
4) http://www.jetpletters.ru/tex/koi/jetpl.cls

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов или членов Редколлегии.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу, с учетом мнения рецензентов. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала "JETP Letters", наш журнал "Письма в ЖЭТФ" с середины 2016 года лишен возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в "Письмах в ЖЭТФ" расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале "JETP Letters".

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — *Учреждения, где работают авторы* (*включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов*)

Дата поступления

Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. B. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP **71**, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать $P_{\rm opt}$, а не $P_{\rm опт}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из "Писем в ЖЭТФ" в "JETP Letters" все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторов, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются "on-line" в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно найти на WWW-странице "Писем в ЖЭТФ" (http://www.jetpletters.ru/).

Дополнительный материал

Журнал "Письма в ЖЭТФ" предоставляет авторам возможность публикации **Дополнительного материала**. **Дополнительный материал**, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В **Дополнительный материал** помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. **Дополнительный материал** не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается **на английском языке** в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы **Дополнительного материала** могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано "Дополнительный материал". В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла **Дополнительного материала** совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано "Дополнительный материал к статье {название статьи}". Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами **Дополнительный материал** рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка Дополнительного материала ответственность ложится на авторов.

Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес **Дополнительного материала** приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}

Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

Дополнительный материал не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение **Дополнительного материала** должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

Комментарии в журнале "Письма в ЖЭТФ"

Журнал "Письма в ЖЭТФ" публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария – если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)[5].

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его ошибочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

[5] http://www.jetpletters.ru/ru/supp.shtml

Миниобзоры

Журнал “Письма в ЖЭТФ” в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал “заказные” миниобзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РНФ. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению миниобзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров – см. на

http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml

Миниобзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

Содержание

Том 114, выпуск 3

Оптика, лазерная физика

Плазма, гидро- и газодинамика

Конденсированное состояние

Содержание
Том 114, выпуск 4
Поля, частицы, ядра

Оптика, лазерная физика

Плазма, гидро- и газодинамика

Конденсированное состояние

Мультидисциплинарное