

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 116

Выпуск 7

10 октября 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора

Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

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

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2022

Спиновый навигатор на базе корректирующих диполей Нуклотрона/ОИЯИ

Ю. Н. Филатов⁺¹⁾, А. М. Кондратенко^{+*}, М. А. Кондратенко^{+*}, Е. Д. Цыплаков⁺, А. В. Бутенко[×],
С. А. Костромин[×], В. П. Ладыгин[×], Е. М. Сыресин[×], И. Л. Гурылева[×], А. А. Мельников[°], А. Е. Аксентьев[°]

⁺Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

^{*}Научно-техническая лаборатория “Заряд”, 630090 Новосибирск, Россия

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

[°]Институт ядерных исследований РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 июля 2022 г.

После переработки 23 августа 2022 г.

Принята к публикации 28 августа 2022 г.

Предложен спиновый навигатор на основе корректирующих диполей, позволяющий манипулировать направлением спинов протонов во время проведения экспериментов в синхротроне Нуклотрон (г. Дубна, ОИЯИ). Управление поляризацией осуществляется за счет контролируемого искажения замкнутой орбиты пучка с помощью корректирующих диполей, вследствие чего обеспечивается многократное усиление действия навигатора на спины частиц. Предложена методика измерения когерентного влияния несовершенства структуры синхротрона на динамику спина с помощью навигатора. Продемонстрирована идея спинового компенсатора на основе корректирующих диполей, позволяющего нивелировать действие несовершенства структуры на поляризацию. Представленные навигатор и спиновый компенсатор позволят провести серию экспериментов в Нуклотроне по верификации нового режима управления поляризацией – режима спиновой прозрачности. Результаты актуальны для коллайдеров NICA (г. Дубна, Россия), EIC (г. Брукхейвен, США) и синхротрона COSY (г. Юлих, Германия) для проведения экспериментов с поляризованными пучками в режиме спиновой прозрачности.

DOI: 10.31857/S1234567822190016, EDN: kgzhlt

Введение. Для выполнения программы исследований с поляризованными пучками протонов и дейтронов в ускорительном комплексе NICA (ОИЯИ, г. Дубна) [1–4] планируется использовать новый режим управления поляризацией – режим спиновой прозрачности (ST режим) [5, 6]. В этом режиме полностью компенсируется действие структурных магнитов на спин при движении частицы по равновесной орбите – любое направление спина повторяется при каждом обороте частицы. Последнее означает, что частицы находятся в области спинового резонанса (ST резонанс). Для обеспечения ST режима в непрерывном диапазоне энергий пучка вводятся две соленоидальные сибирские змейки в противоположные прямолинейные промежутки коллайдера [7]. Управление поляризацией пучка в ST режиме осуществляется с помощью спиновых навигаторов на основе слабых магнитных полей, позволяющих стабилизировать любое направление поляризации во время проведения экспериментов [8].

В ОИЯИ планируется провести экспериментальную верификацию ST режима на синхротроне Нуклотрон [9, 10], который является инжектором поляризованных протонов и дейтронов в коллайдер NICA. В Нуклотроне ST режим можно организовать без использования соленоидальных змеек на дискретных энергиях, которые соответствуют точкам целых спиновых резонансов [10]

$$\nu = \gamma G = k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где ν – спиновая частота в единицах частоты обращения частицы, G – аномальная часть гиромагнитного отношения, γ – релятивистский фактор.

При ускорении частиц до энергии эксперимента необходимо обеспечить сохранение поляризации пучка. Основная деполяризация связана с пересечением спиновых резонансов линейного приближения, наиболее сильными из которых являются целые спиновые резонансы, обусловленные неточностями изготовления и выставки магнитных элементов синхротрона, а также внутренние резонансы, возникающие из-за бетатронных колебаний пучка.

¹⁾e-mail: filatov.iun@mipt.ru

Возможность экспериментальной проверки ST режима для протонов в диапазоне импульсов до 3 ГэВ/с с помощью двух слабых соленоидов была проанализирована в работе [11]. В указанном диапазоне отсутствуют внутренние резонансы Нуклотрона. Навигаторные соленоиды с интегралом поля порядка 0.3 Тл·м помимо управления поляризацией протонов позволяют обеспечить адиабатическое пересечение целых резонансов с сохранением поляризации в процессе ускорения пучка [12].

В данной работе предложен спиновый навигатор, который не использует дополнительные магнитные поля, а создается на основе имеющихся в магнитной структуре Нуклотрона корректирующих диполей.

Спиновый навигатор на базе слабых поперечных полей. Методика расчета спиновых навигаторов с помощью спиновых функций отклика [13–16] приведена в работе [17]. Корректирующие диполи с радиальным b_x и вертикальным b_y магнитными полями индуцируют спиновое навигаторное поле \mathbf{h}_{nav} . Спин частицы, направленный вдоль навигаторного поля, будет повторять свое направление каждый оборот частицы при ее движении вдоль замкнутой орбиты. Спин частицы, направленный поперечно к навигаторному полю, через оборот поворачивается вокруг направления навигаторного поля на малый угол $2\pi\nu_{\text{nav}}$, который определяет навигаторную частоту $\nu_{\text{nav}} = |\mathbf{h}_{\text{nav}}|$. Навигаторное поле является периодической функцией координаты z вдоль расчетной замкнутой орбиты

$$\mathbf{h}_{\text{nav}}(z) = \mathbf{h}_{\text{nav}}(z + L), \quad (2)$$

где L – длина расчетной орбиты.

Спины частиц, направленные вдоль оси навигатора \mathbf{n} , будут совершать устойчивое периодическое движение, в то время как спины частиц, направленные поперечно к оси навигатора, будут размещиваться из-за разброса навигаторной частоты и частот орбитального движения.

Компоненты навигаторного поля постоянны в спиновой системе координат [18], единичные орты которой \mathbf{s}_i описывают собой реальную динамику спинов при движении частицы по расчетной орбите:

$$\mathbf{h}_{\text{nav}} = \sum_{i=1}^3 h_{\text{nav},i} \mathbf{s}_i, \quad h_{\text{nav},i} = (\mathbf{h}_{\text{nav}} \cdot \mathbf{s}_i),$$

$$h_{\text{nav},i} = \frac{1}{2\pi} \int_0^L \left(\frac{b_x}{B\rho} F_{xi} + \frac{b_y}{B\rho} F_{yi} \right) dz, \quad (3)$$

где $B\rho$ – магнитная жесткость, $F_{xi} = (\mathbf{F}_x \cdot \mathbf{s}_i)$, $F_{yi} = (\mathbf{F}_y \cdot \mathbf{s}_i)$ – компоненты функций отклика вдоль радиального и вертикального направлений.

Для Нуклотрона, который представляет собой 8-ми суперпериодный синхротрон с вертикальным ведущим полем, компоненты вертикальной функции отклика равны нулю: $F_{yi} = 0$. Поэтому вклад в навигаторное поле связан лишь с радиальными магнитными полями b_x . В ускорительной системе ортов $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$, связанной со скоростью частицы, спиновый орт \mathbf{s}_2 постоянен и направлен вдоль вертикали, а спиновые орты \mathbf{s}_1 и \mathbf{s}_3 вращаются вокруг вертикального направления \mathbf{e}_y в арочных диполях

$$\mathbf{s}_2 = \mathbf{e}_y,$$

$$\mathbf{s}_1 + i\mathbf{s}_3 = (\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_z) \exp \left(i\gamma G \int_0^z \frac{B_y}{B\rho} dz \right). \quad (4)$$

Корректирующий диполь с радиальным полем искажает замкнутую орбиту в вертикальной плоскости Нуклотрона, в результате чего спины частиц, кроме прямого действия магнитного поля диполя, будут испытывать дополнительное действие магнитных полей, возникающих при движении частицы вдоль этой искаженной орбиты. Парциальный вклад в навигаторное поле $\mathbf{h}_i = \nu_i \mathbf{n}_i$ от короткого корректирующего диполя с радиальным полем $b_{x,i}$ длиной L_i , расположенного в месте с координатой z_i , определяется функцией отклика

$$\nu_i = \frac{|\mathbf{F}_x(z_i)| b_{x,i} L_i}{2\pi B\rho} = \frac{\varphi_{x,i}}{2\pi} k_x(z_i),$$

$$\mathbf{n}_i(z) = \sum_{j=1}^3 \frac{F_{xj}(z_i)}{|\mathbf{F}_x(z_i)|} \mathbf{s}_j(z), \quad (5)$$

где $\varphi_{x,i} = \gamma G \alpha_{\text{orb}}$ – угол поворота спина, α_{orb} – угол поворота орбиты корректирующим диполем. Здесь введен коэффициент усиления навигаторной частоты k_x , вызванный искажением замкнутой орбиты

$$k_x(z) = \frac{|\mathbf{F}_x(z)|}{\gamma G}. \quad (6)$$

На рисунке 1 приведены графики зависимости коэффициентов усиления k_x протонов от координаты z на одном суперпериоде Нуклотрона для ST-резонансов $\gamma G = k$ в диапазоне импульсов до 3 ГэВ/с. Для резонансов с номерами 2, 3, 4 коэффициент усиления $k_x < 1$ в любом месте орбиты, т.е. оптическая структура Нуклотрона будет частично компенсировать прямое действие на спин корректирующих диполей. Для резонанса с номером 5 коэффициент усиления $k_x \sim 1$, т.е. оптическая структура практически не будет оказывать дополнительного воздействия на спины по сравнению с прямым

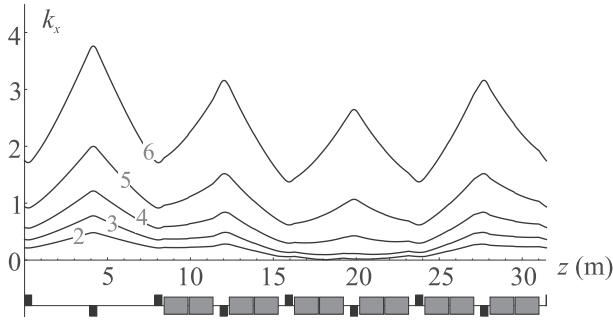


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости коэффициентов усиления навигаторной частоты k_x от координаты z для ST-резонансов $\gamma G = k$ ($k = 2, 3, 4, 5, 6$) на одном суперпериоде Нуклотрона

действием корректирующих диполей. Для резонанса с номером 6 коэффициент усиления $k_x > 1$ и оптическая структура будет усиливать прямое действие корректирующих диполей примерно в 2–3 раза.

В линейном приближении по малым навигаторным полям $b_{x,i}$ (парциальным навигаторным частотам ν_i) итоговое навигаторное поле от N_{dip} корректирующих диполей будет задаваться суммой парциальных полей:

$$\mathbf{h}_{\text{nav}}(z) = \sum_{i=1}^{N_{\text{dip}}} \mathbf{h}_i(z) = \sum_{i=1}^{N_{\text{dip}}} \nu_i \mathbf{n}_i(z). \quad (7)$$

Для стабилизации спинового движения необходимо, чтобы действие навигатора на спин значительно превосходило действие возмущающих магнитных полей, вызванных несовершенством изготовления и выставки магнитных элементов Нуклотрона, а также бетатронными колебаниями, т.е. навигаторная частота должна значительно превосходить мощность ST-резонанса [5]

$$\nu_{\text{nav}} \gg \omega. \quad (8)$$

Влияние синхротронных колебаний в ST режиме на целых резонансах. В ST режиме на целых резонансах спиновая частота пропорциональна энергии, что приводит к дополнительным ограничениям на поля спиновых навигаторов из-за синхротронных колебаний, которые расщепляют ST-резонанс на серию сателлитных резонансов [10, 11]. При учете синхротронных колебаний спины частиц вращаются вокруг поля

$$\mathbf{h} = \mathbf{h}_{\text{nav}} + \varepsilon_{\text{rf}} \mathbf{e}_y, \quad (9)$$

где ε_{rf} выполняет роль отстройки от ST-резонанса вдоль вертикального направления на величину

$$\varepsilon_{\text{rf}} = \sigma \cos \Psi_\gamma, \quad \Psi_\gamma = 2\pi\nu_\gamma z/L + \Psi_0, \quad (10)$$

где $\sigma = G\Delta\gamma$ – амплитуда синхротронной модуляции спиновой частоты, ν_γ , Ψ_0 – частота и начальная фаза синхротронных колебаний. Сателлитные резонансы возникают при условии

$$h_m = \sqrt{\nu_{\text{nav}}^2 + \varepsilon_{\text{rf}}^2} = m\nu_\gamma, \quad m = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (11)$$

Динамика спинов существенно зависит от частоты навигатора ν_{nav} и от скорости пересечения центрального резонанса $\sigma\nu_\gamma$ [19]. При быстром пересечении ($\nu_{\text{nav}}^2 \ll \sigma\nu_\gamma$) учет синхротронных колебаний приводит к пересечению σ/ν_γ сателлитных резонансов, мощность которых, в том числе и центрального резонанса, ослаблена в $J_m(\sigma/\nu_\gamma)$ раз. Отметим, что при $\nu_{\text{nav}} \ll \sigma$ направление спинового поля (9) будет испытывать значительное отклонение от оси навигатора при удалении от центрального резонанса.

В другом предельном случае ($\nu_{\text{nav}}^2 \gg \sigma\nu_\gamma$) можно осуществить адиабатический захват спинов навигатором. В этом случае при

$$\nu_{\text{nav}} \gg \max(\nu_\gamma, \sigma) \quad (12)$$

условие (11) выполнено только для больших номеров сателлитных резонансов, мощности которых резко уменьшаются с ростом номера резонанса. При этом направление спинового поля (9) незначительно отклоняется от оси навигатора.

Мощность ST резонанса в Нуклотроне. Анализ деполяризующего влияния несовершенства структуры Нуклотрона на поляризацию протонов с помощью спиновых функций отклика для ST-режима на целых резонансах в диапазоне импульсов до 3 ГэВ/с приведен в работе [10].

Мощность ST-резонанса определяется величиной поля ST-резонанса ω , которое связано с отклонением траектории частицы от расчетной орбиты из-за ошибок изготовления и выставки магнитных элементов коллайдера, а также эмиттансов пучка. Без навигаторных полей, спин поворачивается на угол $2\pi\omega$ вокруг направления ω за один оборот частицы. Поле ST-резонанса состоит из двух частей:

$$\omega = \omega_{\text{coh}} + \omega_{\text{emitt}}, \quad (13)$$

когерентной части ω_{coh} , возникающей из-за дополнительных поперечных и продольных полей на траектории, отклоненной от расчетной орбиты и некогерентной части ω_{emitt} , связанной с эмиттансами бетатронных и синхротронных колебаний пучка.

В Нуклотроне к возмущению радиального поля ΔB_x могут приводить случайные сдвиги квадруполь в вертикальном направлении Δy_q и повороты

магнитов $\Delta\alpha_z$ вокруг продольного направления. К возмущению продольного поля ΔB_z приводят случайные повороты магнитов $\Delta\alpha_x$ вокруг радиального направления. Величина некогерентной части спинового поля ω_{emitt} , вызванной бетатронными колебаниями, не равна нулю только во втором порядке приближения по амплитуде колебаний частицы и пропорциональна бетатронным эмиттансам пучка. Расчет некогерентной части мощности осуществлялся с помощью спин-трекинг кода Zgoubi [20]. В таблице 1 приведены значения когерентной ω_{coh} и некогерентной ω_{emitt} частей для целых спиновых резонансов. При расчетах полагалось, что $\Delta y_q \sim 0.1$ мм, $\Delta\alpha_z \sim 0.1$ мрад, $\Delta\alpha_x \sim 0.3$ мрад, а значения нормализованных бетатронных эмиттансов в вертикальном и радиальном направлениях равны 4.5π мм · мрад.

Таблица 1. Мощности целых спиновых резонансов в Нуклотроне

$\gamma G = k$	2	3	4	5	6
p_c , ГэВ	0.46	1.26	1.87	2.44	3.00
ω_{coh} , 10^{-4}	0.24	0.57	1.27	2.81	6.88
ω_{emitt} , 10^{-4}	0.36	0.26	0.35	0.55	1.07

Спиновый навигатор в Нуклотроне. В Нуклотроне отсутствует вертикальная компонента радиальной функции отклика $F_{x2} = 0$. Это означает, что парциальные навигаторные поля лежат в плоскости Нуклотрона, каждое из которых можно характеризовать двумя параметрами: коэффициентом усиления навигаторной частоты $k_{x,i}$ и углом α_i между направлениями скорости и парциальной оси \mathbf{n}_i

$$\nu_i = \frac{\varphi_{x,i}}{2\pi} k_{x,i}, \quad \mathbf{n}_i = (\sin \alpha_i, 0, \cos \alpha_i). \quad (14)$$

Таким образом, достаточно двух корректирующих диполей для получения любого требуемого направления итоговой оси навигатора и навигаторной частоты. Интегралы радиальных полей этих корректоров вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} b_{x,1} L_1 &= \frac{2\pi\nu_{\text{nav}}}{\gamma G k_{x,1}} \frac{\sin(\alpha - \alpha_2)}{\sin(\alpha_1 - \alpha_2)} B\rho, \\ b_{x,2} L_2 &= \frac{2\pi\nu_{\text{nav}}}{\gamma G k_{x,2}} \frac{\sin(\alpha - \alpha_1)}{\sin(\alpha_2 - \alpha_1)} B\rho, \end{aligned} \quad (15)$$

где α – угол между итоговой осью навигатора и направлением скорости. Из приведенных формул следует, что лучше выбирать диполи с поперечными друг другу парциальными навигаторными осями: $|\sin(\alpha_2 - \alpha_1)| = 1$.

Продемонстрируем, как можно реализовать спиновый навигатор на базе корректирующих диполей в

Нуклотроне на примере ST-резонанса $\gamma G = 6$. Будем полагать, что место наблюдения поляризации (поляриметр, канал инжекции или место вывода пучка из Нуклотрона и т.п.) выбрано в начале координат.

На рисунках 2 и 3 приведены значения коэффициентов усиления $k_{x,i}$ и углов α_i для этого резонанса

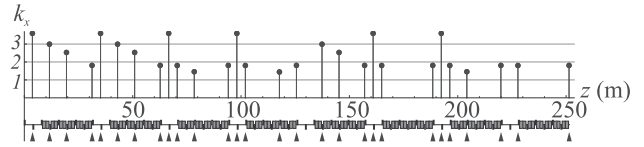


Рис. 2. (Цветной онлайн) Коэффициенты усиления навигаторной частоты протонов k_x корректирующих диполей Нуклотрона для ST-резонанса $\gamma G = 6$

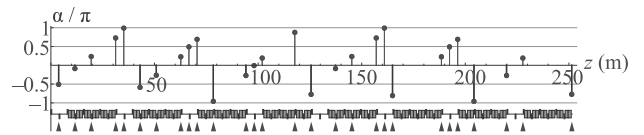


Рис. 3. (Цветной онлайн) Углы отклонения парциальных осей навигаторного поля корректирующих диполей от продольного направления в Нуклотроне для ST-резонанса $\gamma G = 6$

нанса. Места расположения 28 корректирующих диполей в структуре Нуклотрона обозначены треугольниками. Максимальный коэффициент усиления, равный примерно 3.6, осуществляется вблизи дефокусирующих линз в пустых промежутках суперпериодов Нуклотрона. В качестве пары для управления поляризацией протонов можно выбрать 1-й и 5-й корректирующие диполи, оси которых практически перпендикулярны друг другу: $\alpha_1 \approx -\pi/2$, а $\alpha_5 \approx \pi$. В таком спиновом навигаторе 1-й диполь будет отвечать за радиальную поляризацию в начале координат, а 5-й диполь – за продольную.

Максимальное значение навигаторной частоты ограничено апертурой магнитных элементов Нуклотрона. На рисунке 4 приведены графики отклонения замкнутой орбиты при стабилизации радиальной (сплошная линия) и продольной (пунктирная линия) поляризации в начале координат спиновым навигатором с частотой $\nu_{\text{nav}} = 2 \cdot 10^{-3}$. Требуемый интеграл радиального поля в корректирующем диполе для обеспечения указанной частоты навигатора составляет примерно 6 мТл · м. Максимальное отклонение замкнутой орбиты от расчетной в обоих случаях не превышает 15 мм.

Отметим, что апертурные ограничения спадают с ростом энергии. Уже для резонанса $\gamma G = 7$ с помощью корректирующих диполей можно индуцировать

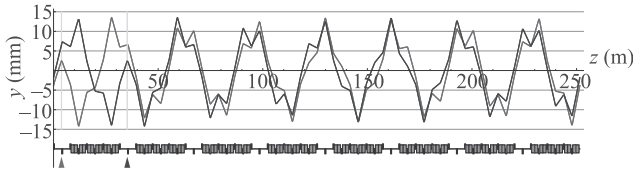


Рис. 4. (Цветной онлайн) Отклонение замкнутой орбиты при стабилизации радиальной (сплошная линия) и продольной (пунктирная линия) поляризацій спиновым навигатором

навигаторную частоту $\nu_{\text{nav}} \approx 10^{-2}$ при максимальном отклонении замкнутой орбиты, равном 15 мм.

Компенсация мощности ST резонанса. В реальной ситуации спин вращается в поле $\boldsymbol{\omega}_{\text{tot}}$, являющимся суммой полей навигатора и ST-резонанса:

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{tot}} = \nu_{\text{nav}} \mathbf{n} + \boldsymbol{\omega}. \quad (16)$$

Спины частиц, направленные вдоль поля навигатора, будут вращаться внутри конуса вокруг его оси

$$\mathbf{n}_{\text{tot}} = \frac{\boldsymbol{\omega}_{\text{tot}}}{|\boldsymbol{\omega}_{\text{tot}}|} \approx \mathbf{n} + \frac{\boldsymbol{\omega}_{\perp}}{\nu_{\text{nav}}}, \quad \boldsymbol{\omega}_{\perp} = \boldsymbol{\omega} - (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}. \quad (17)$$

Малый угол раствора ψ конуса поляризации определяется поперечной к \mathbf{n} -оси компонентой поля ST-резонанса $\boldsymbol{\omega}_{\perp}$ (см. рис. 5):

$$\psi \approx \omega_{\perp} / \nu_{\text{nav}}. \quad (18)$$

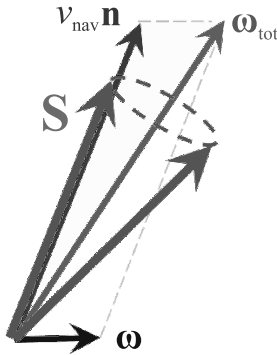


Рис. 5. (Цветной онлайн) Динамика спина в присутствии навигатора и поля ST-резонанса

Когерентную часть мощности ST-резонанса можно скомпенсировать с помощью слабых стационарных магнитных полей (спиновый компенсатор). В этом случае достигается минимальный угол раствора конуса поляризации, который определяется лишь некогерентной частью поля ST-резонанса.

После усреднения по спином ансамбля частиц вектор поляризации \mathbf{P} будет направлен вдоль оси \mathbf{n}_{tot} . Степень поляризации P определяется средней

проекцией спинов на эту ось. Для полностью поляризованного пучка (все спины направлены вдоль \mathbf{n}_{tot} оси) степень поляризации $P_{\text{max}} = \pm 1$. Анализ измеренных проекций вектора поляризации позволяет определить компоненты поля $\boldsymbol{\omega}_{\text{coh}}$. В Нуклотроне когерентная часть поля $\boldsymbol{\omega}_{\text{coh}} = (\omega_x, 0, \omega_z)$ лежит в плоскости орбиты (xz) и ее компоненты ω_x и ω_z могут быть измерены различными способами.

Например, радиальную ω_x компоненту можно определить, измеряя последовательно радиальные компоненты поляризации $P_{x+}^{(x)}$, $P_{x-}^{(x)}$ при стабилизации навигатором в детекторе продольных осей с противоположными знаками $\mathbf{n}_{z+} = +\mathbf{e}_z$, $\mathbf{n}_{z-} = -\mathbf{e}_z$ соответственно:

$$P_{x+}^{(x)} = P \sin \alpha_+, \quad P_{x-}^{(x)} = P \sin \alpha_-,$$

$$\omega_x = \frac{2 \operatorname{tg} \alpha_+ \operatorname{tg} \alpha_-}{\operatorname{tg} \alpha_+ + \operatorname{tg} \alpha_-} \nu_{\text{nav}}. \quad (19)$$

Здесь α_+ , α_- – углы между осями навигатора \mathbf{n}_{z+} , \mathbf{n}_{z-} и направлением оси конуса поляризации \mathbf{n}_{tot} . Перестройка оси навигатора с направления \mathbf{n}_{z+} в \mathbf{n}_{z-} должна осуществляться адиабатически. При этом резонансная деполяризация пучка исключается, если частота навигатора поддерживается постоянной во время перестройки оси навигатора [10].

Аналогично, продольную компоненту ω_z можно определить по последовательному измерению радиальных компонент поляризации $P_{x+}^{(z)}$, $P_{x-}^{(z)}$ при стабилизации навигатором в детекторе радиальных осей с противоположными знаками $\mathbf{n}_{x+} = +\mathbf{e}_x$, $\mathbf{n}_{x-} = -\mathbf{e}_x$, соответственно:

$$P_{x+}^{(z)} = P \cos \beta_+, \quad P_{x-}^{(z)} = P \cos \beta_-,$$

$$\omega_z = \frac{2 \operatorname{tg} \beta_+ \operatorname{tg} \beta_-}{\operatorname{tg} \beta_+ + \operatorname{tg} \beta_-} \nu_{\text{nav}}, \quad (20)$$

где β_+ , β_- – углы между осями навигатора \mathbf{n}_{x+} , \mathbf{n}_{x-} и направлением оси конуса поляризации \mathbf{n}_{tot} .

После измерения ω_x и ω_z можно скомпенсировать когерентную часть поля ST-резонанса с помощью корректирующих диполей Нуклотрона. По своей сути спиновый компенсатор представляет собой спиновый навигатор с навигаторной частотой ν_{comp} и осью \mathbf{n}_{comp} :

$$\nu_{\text{comp}} = \omega_{\text{coh}}, \quad \mathbf{n}_{\text{comp}} = -\frac{\boldsymbol{\omega}_{\text{coh}}}{\omega_{\text{coh}}}. \quad (21)$$

Моделирование динамики спина в ST-резонансе. Приведем результаты численного моделирования спиновой динамики в области ST-резонанса $\gamma G = 6$ для Нуклотрона с навигатором, выполненные с помощью спин-трекинг кода Zgoubi [20].

На рисунке 6 показана зависимость радиальной компоненты спина S_x от числа оборотов протона N

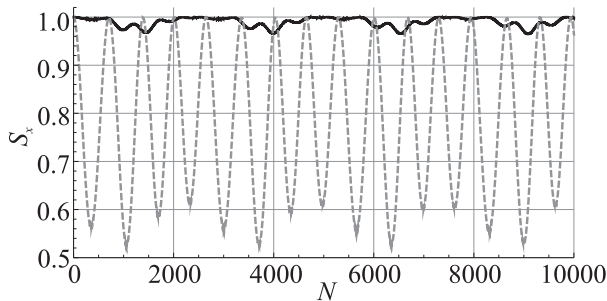


Рис. 6. Стабилизация радиальной поляризации спиновым навигатором в Нуклотроне

при стабилизации радиальной поляризации навигатором с $\nu_{\text{нав}} = 2 \cdot 10^{-3}$ для двух случаев: без компенсации когерентной мощности резонанса (пунктирная линия) и с ее компенсацией (сплошная линия). Спиновый компенсатор был реализован с помощью 9-го и 13-го корректирующих диполей, которые соответственно позволяли скомпенсировать радиальную и продольную компоненты поля ST-резонанса. Компенсация осуществлялась до уровня 10^{-4} , что соответствует значению некогерентной части мощности резонанса.

Как показывают расчеты, без компенсации мощности ω_{coh} угол раствора конуса поляризации (18) составляет порядка $\psi \approx 0.5$ и проекция спина S_x испытывает значительные отклонения от значения “+1”. После компенсации ω_{coh} угол раствора становится порядка $\psi \approx 0.05$ и проекция спина S_x практически не отклоняется от своего исходного положения. Небольшое отклонение радиальной проекции спина от значения “+1” связано с бетатронным движением пучка (некогерентной частью поля ST-резонанса).

Аналогичные зависимости продольной компоненты спина S_z от числа оборотов при стабилизации продольной поляризации спиновым навигатором представлены на рис. 7.

На рисунке 8 приведены расчеты адиабатического захвата поляризации навигатором при учете синхротронных колебаний. При расчетах полагалось, что $\nu_{\text{нав}} = 2 \cdot 10^{-3}$, $\nu_{\gamma} = 2.5 \cdot 10^{-4}$. Сплошная толстая линия соответствует нулевому импульсному разбросу ($\sigma = 0$). Сплошная тонкая линия соответствует случаю $\sigma = 1.5 \cdot 10^{-3}$, когда условие адиабатического захвата (12) не выполнено: $\nu_{\text{нав}} \sim \sigma$. В этом случае происходит значительное отклонение спина от стабилизируемого радиального направления. Пунктирная линия соответствует случаю $\sigma = 3 \cdot 10^{-4}$, когда усло-

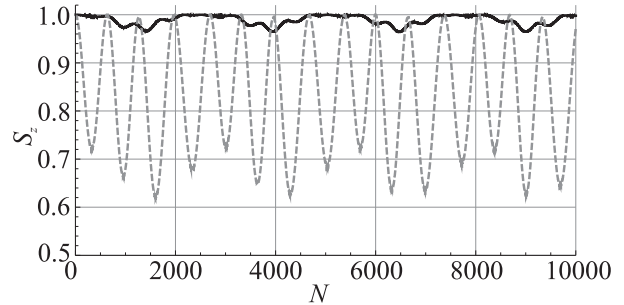


Рис. 7. Стабилизация продольной поляризации спиновым навигатором в Нуклотроне

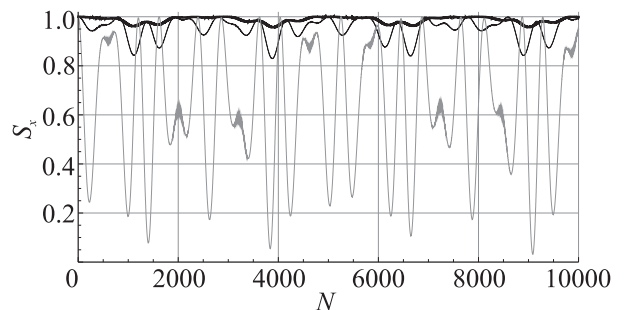


Рис. 8. Стабилизация радиальной поляризации спиновым навигатором с учетом синхротронных колебаний

вие адиабатического захвата (12) выполнено и максимальное отклонение спина от радиального направления не превышает значения $\sigma/\nu_{\text{нав}} \sim 0.1$ радиан.

В приведенном примере допустимый энергетический разброс, позволяющий осуществить адиабатический захват спинов протонов, определяется частотой навигатора и составляет $\Delta\gamma/\gamma \approx 5 \cdot 10^{-5}$. Допустимая величина энергетического разброса может быть увеличена за счет увеличения частоты навигатора, что может быть достигнуто, например, увеличением допустимых поперечных отклонений замкнутой орбиты от равновесной, либо оптимизацией значений полей имеющихся корректирующих диполей. Расчеты показывают, что при одновременном использовании 1, 5, 9, 13, 20-ого корректирующих диполей в результате оптимизации при максимальном отклонении замкнутой орбиты, равном 15 мм, индуцированная частота навигатора составляет величину $\nu_{\text{нав}} \approx 5 \cdot 10^{-3}$, что позволяет увеличить допустимый разброс по энергиям до $\Delta\gamma/\gamma \sim 10^{-4}$.

Выводы. Предложен спиновый навигатор на базе существующих корректирующих диполей, позволяющий управлять поляризацией протонов в плоскости кольца Нуклотрона в режиме спиновой прозрачности на целых резонансах.

Идея навигатора основана на интерференционном усилении действия корректирующих диполей на спин за счет возникновения дополнительных полей на возмущенной замкнутой орбите. На низких энергиях навигаторная частота ограничивается апертурой камеры синхротрона. Апертурные ограничения снимаются с ростом энергии. В отличие от продольных полей требуемые интегралы дипольных навигаторных полей не растут с энергией при фиксированном значении навигаторной частоты.

Представленный навигатор позволит провести экспериментальную проверку в ускорительном комплексе NICA (ОИЯИ, г. Дубна) нового способа управления поляризацией адронов – режима спиновой прозрачности.

Продемонстрирована идея компенсации когерентной части мощности ST-резонанса, вызванной несовершенством структуры синхротрона, с помощью спинового компенсатора на базе корректирующих диполей. Компенсация несовершенства структуры позволяет свести к минимуму угол раствора конуса поляризации, который будет определяться лишь орбитальными эммитансами пучка, что в конечном счете позволит вывести эксперименты с поляризованными протонами на новый уровень точности.

Предложенный спиновый навигатор актуален в ST-режиме на целых резонансах для управления поляризацией дейтронов в коллайдере EIC (г. Брукхейвен, США) [21], а также для управления поляризацией протонов в коллайдере NICA (г. Дубна, Россия) [7] и синхротроне COSY (г. Юлих, Германия) [22].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-42-04419, <https://rscf.ru/project/22-42-04419/>.

1. I. A. Savin, A. V. Efremov, D. V. Peshekhonov, A. D. Kovalenko, O. V. Teryaev, O. Yu. Shevchenko, A. P. Nagajcev, A. V. Guskov, V. V. Kukhtin, and N. D. Topilin, EPJ Web Conf. **85**, 02039 (2015).
2. V. V. Abramov, A. Aleshko, V. A. Baskov et al. (Collaboration), PEPAN **52**(6), 1044 (2021).
3. Е. М. Сыресин, А. В. Бутенко, П. Р. Зенкевич, О. С. Козлов, С. Д. Колокольчиков, С. А. Костромин, И. Н. Мешков, Н. В. Митянина, Ю. В. Сеничев, А. О. Сидорин, Г. В. Трубников, ЭЧАЯ **52**(5), 1305 (2021).
4. E. Syresin, A. Butenko, S. Kostromin, O. Kozlov, I. Meshkov, A. Sidorin, G. Trubnikov, A. Tuzikov, P. Zenkevich, N. Mityanina, S. Kolokochikov, Y. Senichev, Yu. Filatov, A. Kondratenko, and

- M. Kondratenko, in *Proc. IPAC2022, Bangkok, Thailand* (2022), p. 1822.
5. Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Y. S. Derbenev, and V. S. Morozov, Phys. Rev. Lett. **124**, 194801 (2020).
6. Y. S. Derbenev, Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, and V. S. Morozov, Symmetry **13**(3), 1 (2021).
7. Yu. N. Filatov, A. D. Kovalenko, A. V. Butenko, E. M. Syresin, V. A. Mikhaylov, S. S. Shimanskiy, A. M. Kondratenko, and M. A. Kondratenko, EPJ Web Conf. **204**, 10014 (2019).
8. A. D. Kovalenko, A. V. Butenko, V. D. Kekelidze, V. A. Mikhaylov, Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, and M. A. Kondratenko, in *Proc. IPAC2015, Richmond, VA, USA* (2015), p. 2031.
9. A. A. Smirnov and A. D. Kovalenko, Particles and Nuclei, Letters **1**(6 (123)), 11 (2004).
10. Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, V. V. Vorobyov, S. V. Vinogradov, E. D. Tsyplakov, and V. S. Morozov, Phys. Rev. Acc. and Beams **24**(6), 061001 (2021).
11. Y. Filatov, A. Kondratenko, M. Kondratenko, V. Vorobyov, S. Vinogradov, E. Tsyplakov, A. Butenko, E. Syresin, S. Kostromin, Y. Derbenev, and V. Morozov, JINST **16**(12), P12039 (2021)
12. Y. N. Filatov, A. V. Butenko, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, A. D. Kovalenko, and V. A. Mikhaylov, in *Proc. IPAC2017, Copenhagen, Denmark* (2017), p. 2349.
13. Yu. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Ya. S. Derbenev, V. S. Morozov, and A. D. Kovalenko, Eur. Phys. J. C **80**, 778 (2020).
14. V. I. Ptitsyn, Yu. M. Shatunov, and S. R. Mane, Nucl. Instrum. Methods A **608**, 225 (2009).
15. Yu. M. Shatunov and S. R. Mane, Phys. Rev. ST Accel. Beams **12**, 024001 (2009).
16. V. S. Morozov, Y. S. Derbenev, F. Lin, Y. Zhang, Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, and M. A. Kondratenko, in *Proc. of IPAC2018, Vancouver, BC* (2018), p. 400.
17. Yu. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Y. S. Derbenev, V. S. Morozov, A. V. Butenko, E. M. Syresin, and E. D. Tsyplakov, Eur. Phys. J. C **81**(11), 986 (2021).
18. A. M. Kondratenko, Y. N. Filatov, M. A. Kondratenko, A. D. Kovalenko, and S. V. Vinogradov, J. Phys.: Conf. Ser. **1435**, 012037 (2020).
19. Y. S. Derbenev, A. M. Kondratenko, and A. N. Skrinskii, ZhETF **60**, 1216 (1971) [Sov. Phys. JETP **33**, 658 (1971)].
20. F. Méot, Nucl. Instrum. Methods A **427**, 353 (1999).

21. A. Accardi, J.L. Albacete, M. Anselmino et al. (Collaboration), Eur. Phys. J. A **52**, 268 (2016).
22. A. Lehrach, U. Bechstedt, J. Dietrich, R. Gebel, B. Lorentz, R. Maier, D. Prasuhn, A. Schnase, H. Schneider, R. Stassen, H. Stockhorst, and R. Tolle, AIP Conf. Proc. **675**, 153 (2003).

Угловая зависимость переданной протону поляризации в процессе $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$

М. В. Галынский¹⁾

Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны НАНБ, 220109 Минск, Беларусь

Поступила в редакцию 28 июля 2022 г.

После переработки 30 августа 2022 г.

Принята к публикации 1 сентября 2022 г.

Исходя из результатов JLab-поляризационных экспериментов по измерению отношения формфакторов Сакса в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$ с использованием параметризаций Kelly (2004) и Qattan (2015) для их отношения, в кинематике эксперимента коллаборации SANE (2020) по измерению двойной спиновой асимметрии в процессе $\vec{e}p \rightarrow ep$, проведен численный анализ зависимости от угла рассеяния протона переданной протону продольной поляризации в процессе $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$ в случае, когда начальный покоящийся протон частично поляризован вдоль направления движения детектируемого протона отдачи. Показано, что нарушение скейлинга формфакторов Сакса приводит к заметному увеличению абсолютного значения переданной протону поляризации по сравнению со случаем дипольной зависимости.

DOI: 10.31857/S1234567822190028, EDN: khiwbj

Введение. Эксперименты по изучению электрического G_E и магнитного G_M формфакторов протона, так называемых формфакторов Сакса (ФФС), ведутся с 1950-х гг. в процессе упругого рассеяния неполяризованных электронов на протоне. При этом все экспериментальные данные о поведении ФФС были получены с применением техники Розенблюта (ТР), основанной на использовании сечения Розенблюта в приближении однофотонного обмена для процесса $ep \rightarrow ep$ в системе покоя начального протона [1]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_e} = \frac{\alpha^2 E_2 \cos^2(\theta_e/2)}{4E_1^3 \sin^4(\theta_e/2)} \frac{1}{1 + \tau_p} \left(G_E^2 + \frac{\tau_p}{\varepsilon} G_M^2 \right). \quad (1)$$

Здесь $\tau_p = Q^2/4M^2$, $Q^2 = 4E_1 E_2 \sin^2(\theta_e/2)$ – квадрат переданного протону 4-импульса; M – масса протона; E_1 , E_2 – энергии начального и конечного электронов, θ_e – угол рассеяния электрона; ε – степень линейной (поперечной) поляризации виртуального фотона [2–5]; $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры.

При больших значениях Q^2 , как это следует из формулы (1), основной вклад в сечение процесса $ep \rightarrow ep$ дает член, пропорциональный G_M^2 , что уже при $Q^2 \geq 2 \text{ ГэВ}^2$ приводит к значительным трудностям при извлечении вклада G_E^2 [6, 7].

С помощью ТР была установлена дипольная зависимость ФФС от Q^2 в области $Q^2 \leq 6 \text{ ГэВ}^2$ [6, 7]. Как оказалось, G_E и G_M связаны масштабным соотношением (соотношением скейлинга) $G_M \approx \mu_p G_E$,

вследствие чего для их отношения $R \equiv \mu_p G_E/G_M$ справедливо приближенное равенство

$$R \approx 1, \quad (2)$$

где $\mu_p = 2.79$ – магнитный момент протона.

В работе Ахиезера и Рекало [3] предложен метод измерения отношения R , основанный на явлении передачи поляризации от начального электрона к конечному протону в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$. Прецизионные эксперименты с использованием этого метода, проведенные в Лаборатории им. Т. Джефферсона (JLab, США) [8–10] обнаружили довольно быстрое убывание отношения R с ростом Q^2 , что свидетельствует о нарушении дипольной зависимости (скейлинга) ФФС. В интервале $0.4 \text{ ГэВ}^2 \leq Q^2 \leq 5.6 \text{ ГэВ}^2$, как оказалось, это убывание является линейным.

Повторные, более точные измерения отношения R , проведенные в [11–15] в широкой по Q^2 области вплоть до 8.5 ГэВ^2 с использованием как метода Ахиезера–Рекало [3], так и ТР [15], лишь подтвердили расхождение результатов.

В [16] экспериментальные значения R получены коллаборацией SANE третьим способом [17] путем их извлечений из результатов измерений двойной спиновой асимметрии в процессе $\vec{e}p \rightarrow ep$ в случае, когда электронный пучок и протонная мишень частично поляризованы. При этом степень поляризации протонной мишени P_t была равна $P_t = (70 \pm 5) \%$. Эксперимент проводился при двух энергиях электронного пучка E_1 , 5.895 и 4.725 ГэВ и двух значениях Q^2 , 2.06 и 5.66 ГэВ². Извлеченные значения R в [16] нахо-

¹⁾e-mail: galynski@sosny.bas-net.by

дятся в согласии с результатами предыдущих JLab-поляризационных экспериментов [8–14].

В [18–22] предложен 4-й метод измерения отношения R , основанный на передаче поляризации от начального к конечному протону в упругом процессе

$$e(p_1) + \vec{p}(q_1, s_1) \rightarrow e(p_2) + \vec{p}(q_2, s_2) \quad (3)$$

в случае, когда начальный покоящийся и конечный протоны полностью либо частично поляризованы и имеют общую ось квантования спинов, совпадающую с направлением движения детектируемого протона отдачи. Этот метод работает и в приближении двух-фотонного обмена и позволяет измерить квадраты модулей обобщенных ФФС [20]. Начало данному направлению исследований было положено в [18].

Отметим, что в монографии [4] (с. 211–215) ее авторами также был проведен общий расчет сечения процесса $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$ в системе Брейта в случае, когда начальный и конечный протоны частично поляризованы. Однако в [4] при анализе этого сечения авторы действовали по аналогии с [3] и не заметили более интересный случай, обсуждаемый здесь и в [18–22].

В работах [21, 22], исходя из результатов JLab-поляризационных экспериментов по измерению отношения R в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$, проведен численный анализ Q^2 -зависимости отношения сечений без переворота и с переворотом спина протона, поляризационной асимметрии в процессе $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$, а также переданной протону продольной поляризации в кинематике эксперимента [16] в случае, когда покоящийся начальный и конечный протоны поляризованы и имеют общую ось квантования спинов, совпадающую с направлением движения конечного протона (детектируемого протона отдачи). При этом было показано, что переданная протону поляризация обладает заметной чувствительностью к виду зависимости отношения ФФС R от Q^2 , т.е. к выбору параметризации для отношения R .

В настоящей работе, исходя из результатов JLab-поляризационных экспериментов по измерению отношения ФФС в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$ с использованием параметризаций Kelly [23] (2004) и Qattan [24] (2015) для их отношения, в кинематике эксперимента коллаборации SANE [16] по измерению двойной спиновой асимметрии в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$ проведен численный анализ зависимости от угла рассеяния протона переданной протону продольной поляризации в процессе $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$ в случае, когда начальный покоящийся протон частично поляризован вдоль направления движения детектируемого протона отдачи.

Сечение процесса $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$ в системе покоя начального протона. Рассмотрим спиновые

4-векторы s_1 и s_2 начального и конечного протонов с 4-импульсами q_1 и q_2 в процессе (3) в произвольной системе отсчета. Условия ортогональности ($s_i q_i = 0$) и нормировки ($s_i^2 = -1$) позволяют однозначно определить выражения для их временных и пространственных компонент $s_i = (s_{i0}, \mathbf{s}_i)$ через их 4-скорости $v_i = q_i/M$ ($i = 1, 2$):

$$s_i = (s_{i0}, \mathbf{s}_i), \quad s_{i0} = \mathbf{v}_i \mathbf{c}_i, \quad \mathbf{s}_i = \mathbf{c}_i + \frac{(\mathbf{c}_i \mathbf{v}_i) \mathbf{v}_i}{1 + v_{i0}}, \quad (4)$$

где единичные 3-векторы \mathbf{c}_i ($\mathbf{c}_i^2 = 1$) – оси квантования спинов.

В лабораторной системе отсчета (ЛСО), где $q_1 = (M, \mathbf{0})$, $q_2 = (q_{20}, \mathbf{q}_2)$, выберем оси квантования спинов \mathbf{c}_1 и \mathbf{c}_2 так, чтобы они совпадали с направлением движения конечного протона:

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2 = \mathbf{n}_2 = \mathbf{q}_2/|\mathbf{q}_2|. \quad (5)$$

Тогда спиновые 4-векторы начального (s_1) и конечного протонов (s_2) принимают вид

$$s_1 = (0, \mathbf{n}_2), \quad s_2 = (|\mathbf{v}_2|, v_{20} \mathbf{n}_2), \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{q}_2/|\mathbf{q}_2|. \quad (6)$$

Метод [18–22] основан на выражении для дифференциального сечения процесса (3) в ЛСО в случае, когда начальный и конечный протоны поляризованы и имеют общую ось квантования спинов \mathbf{c} (5):

$$\frac{d\sigma_{\delta_1, \delta_2}}{d\Omega_e} = \omega_+ \sigma^{\uparrow\uparrow} + \omega_- \sigma^{\downarrow\downarrow}, \quad (7)$$

$$\sigma^{\uparrow\uparrow} = \sigma_M G_E^2, \quad \sigma^{\downarrow\downarrow} = \sigma_M \frac{\tau_p}{\epsilon} G_M^2, \quad (8)$$

$$\sigma_M = \frac{\alpha^2 E_2 \cos^2(\theta_e/2)}{4E_1^3 \sin^4(\theta_e/2)} \frac{1}{1 + \tau_p}. \quad (9)$$

Здесь ω_{\pm} – поляризационные множители:

$$\omega_+ = (1 + \delta_1 \delta_2)/2, \quad \omega_- = (1 - \delta_1 \delta_2)/2, \quad (10)$$

где $\delta_{1,2}$ – удвоенные значения проекций спина начального и конечного протонов на ось квантования спинов \mathbf{c} (5). Отметим, что формула (7) справедлива при $-1 \leq \delta_{1,2} \leq 1$.

Отметим, что формула (7) так же, как и (1), разбивается на сумму двух слагаемых, содержащих только G_E^2 и G_M^2 . Усредняя и суммируя выражение (7) по поляризациям начального и конечного протонов, для сечения Розенблюта (1), $\sigma_R = d\sigma/d\Omega_e$, получаем другое представление [19, 20]:

$$\sigma_R = \sigma^{\uparrow\uparrow} + \sigma^{\downarrow\downarrow}. \quad (11)$$

Следовательно, физический смысл разбиения формулы Розенблюта (1) на сумму двух слагаемых, содержащих только G_E^2 и G_M^2 , заключается в том, что

она является суммой сечений без переворота ($\sigma^{\uparrow\uparrow}$) и с переворотом спина протона ($\sigma^{\downarrow\uparrow}$) в случае, когда начальный покоящийся протон полностью поляризован вдоль направления движения конечного протона. Отметим, что в литературе, в том числе и в пособиях по физике элементарных частиц, часто утверждается, что использование ФФС является просто удобным, так как они придают формуле Розенблюта простой и компактный вид. Поскольку такие формальные соображения об их преимуществах содержатся в том числе и в написанных много лет назад известных монографиях [25, 26], то они не подвергаются сомнениям и воспроизводятся в литературе, например, в [27], вплоть до настоящего времени.

Сечение (7) можно представить в виде

$$d\sigma_{\delta_1, \delta_2}/d\Omega_e = (1 + \delta_2 \delta_f)(\sigma^{\uparrow\uparrow} + \sigma^{\downarrow\uparrow}), \quad (12)$$

$$\delta_f = \delta_1(R_\sigma - 1)/(R_\sigma + 1), \quad (13)$$

$$R_\sigma = \sigma^{\uparrow\uparrow}/\sigma^{\downarrow\uparrow}, \quad (14)$$

где δ_f – степень продольной поляризации конечного протона. В случае полностью поляризованного начального протона ($\delta_1 = 1$) δ_f совпадает с обычным определением поляризационной асимметрии

$$A = (R_\sigma - 1)/(R_\sigma + 1). \quad (15)$$

Отношение сечений без переворота и с переворотом спина протона R_σ (14), как это следует из (8), можно выразить через экспериментально измеряемую величину $R \equiv \mu_p G_E/G_M$:

$$R_\sigma = \frac{\sigma^{\uparrow\uparrow}}{\sigma^{\downarrow\uparrow}} = \frac{\varepsilon}{\tau_p} \frac{G_E^2}{G_M^2} = \frac{\varepsilon}{\tau_p \mu_p^2} R^2. \quad (16)$$

С целью использования стандартных обозначений формулу (13) для степени продольной поляризации конечного протона перепишем в другом виде:

$$P_r = P_t(R_\sigma - 1)/(R_\sigma + 1), \quad (17)$$

заменяв δ_f на P_r и δ_1 на P_t .

Формула (17) позволяет выразить отношение R через P_r/P_t . Действительно, обращая связь в (17), имеем:

$$R^2 = \mu_p^2 \frac{\tau_p}{\varepsilon} \frac{1 + R_p}{1 - R_p}, \quad R_p = \frac{P_r}{P_t}. \quad (18)$$

Полученное выражение (18) позволяет извлечь R^2 из результатов эксперимента по измерению переданной протону поляризации P_r в процессе $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}$ в случае, когда начальный покоящийся протон частично поляризован вдоль направления движения детектируемого протона отдачи.

Ниже будут проведены численные расчеты переданной протону поляризации P_r (17) как функции от угла рассеяния протона как при сохранении скейлинга, т.е. в случае дипольной зависимости ($R = R_d$), так и при его нарушении, при этом будут рассмотрены две параметризации ($R = R_j$ и $R = R_k$):

$$R_d = 1, \quad (19)$$

$$R_j^{-1} = 1 + 0.1430 Q^2 - 0.0086 Q^4 + 0.0072 Q^6, \quad (20)$$

где выражение для R_j (20) предложено в [24]; R_k соответствует параметризации Kelly [23], формулы для которой мы не приводим.

Кинематика процесса. Рассмотрим зависимости энергий конечных электронов и протонов от энергии начального пучка электронов и углов рассеяния электрона и протона в ЛСО, где $q_1 = (M, \mathbf{0})$. Пользуясь законом сохранения 4-импульса $p_1 + q_1 = p_2 + q_2$, получаем выражения для энергии рассеянного электрона E_2 и переданного протону квадрата 4-импульса $Q^2 = -(q_1 - q_2)^2$ как функций от угла рассеяния электрона θ_e :

$$E_2 = E_1/(1 + \frac{E_1}{M}(1 - \cos(\theta_e))), \quad (21)$$

$$Q^2 = 2E_1^2(1 - \cos(\theta_e))/(1 + \frac{E_1}{M}(1 - \cos(\theta_e))), \quad (22)$$

где угол θ_e есть угол между векторами \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 , $\cos(\theta_e) = \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 / |\mathbf{p}_1| |\mathbf{p}_2|$.

Энергия конечного электрона E_2 и протона E_{2p} связаны в ЛСО с Q^2 :

$$E_2 = E_1 - Q^2/2M, \quad E_{2p} = M + Q^2/2M, \quad (23)$$

$$E_2 = E_1 - 2M\tau_p, \quad E_{2p} = M(1 + 2\tau_p), \quad \tau_p = Q^2/4M^2. \quad (24)$$

Зависимость E_{2p} и Q^2 от угла рассеяния протона θ_p , т.е. от угла между векторами \mathbf{p}_1 и \mathbf{q}_2 , $\cos(\theta_p) = \mathbf{p}_1 \mathbf{q}_2 / |\mathbf{p}_1| |\mathbf{q}_2|$, имеет вид:

$$E_{2p} = M \frac{(E_1 + M)^2 + E_1^2 \cos^2(\theta_p)}{(E_1 + M)^2 - E_1^2 \cos^2(\theta_p)}, \quad (25)$$

$$Q^2 = \frac{4M^2 E_1^2 \cos^2(\theta_p)}{(E_1 + M)^2 - E_1^2 \cos^2(\theta_p)}. \quad (26)$$

Соотношения для обратной связи между $\cos(\theta_e)$, $\cos(\theta_p)$ и E_2 , E_{2p} имеют вид:

$$\cos(\theta_e) = 1 - \frac{Q^2}{2E_1 E_2} = 1 - \frac{MQ^2}{E_1(2ME_1 - Q^2)}, \quad (27)$$

$$\cos(\theta_p) = \frac{E_1 + M}{E_1} \sqrt{\frac{\tau_p}{1 + \tau_p}}. \quad (28)$$

В упругом процессе (3) угол рассеяния электрона θ_e изменяется от 0° до 180° , при этом Q^2 изменяется в области $0 \leq Q^2 \leq Q_{\max}^2$ ($0 \leq \tau_p \leq \tau_{\max}$), где

$$Q_{\max}^2 = \frac{4ME_1^2}{(M+2E_1)}, \quad \tau_{\max} = \frac{E_1^2}{M(M+2E_1)}. \quad (29)$$

Приведем полезное соотношение

$$\sqrt{\frac{\tau_{\max}}{1+\tau_{\max}}} = \frac{E_1}{M+E_1}. \quad (30)$$

Из выражения (22) при $\theta_e = 0$ имеем: $Q^2 = 0$, $\tau_p = 0$. Но из соотношения (28) следует, что в этом случае $\cos(\theta_p) = 0$, что соответствует рассеянию протона на 90° .

При рассеянии электрона назад ($\theta_e = 180^\circ$), когда $\tau_p = \tau_{\max}$, из (28) и (30) следует, что $\cos(\theta_p) = 1$, $\theta_p = 0^\circ$. Таким образом, при рассеянии электрона на угол от 0° до 180° ($0^\circ \leq \theta_e \leq 180^\circ$) угол рассеяния протона изменяется от 90° до 0° .

Результаты расчетов зависимости углов рассеяния электрона θ_e и протона θ_p от квадрата переданного протону импульса Q^2 при энергиях электронного пучка в эксперименте коллаборации SANE [16], $E_1 = 4.725$ и $E_1 = 5.895$ ГэВ, представлены графиками на рис. 1. Им соответствуют линии с метками θ_{e4} , θ_{p4} и θ_{e5} , θ_{p5} .

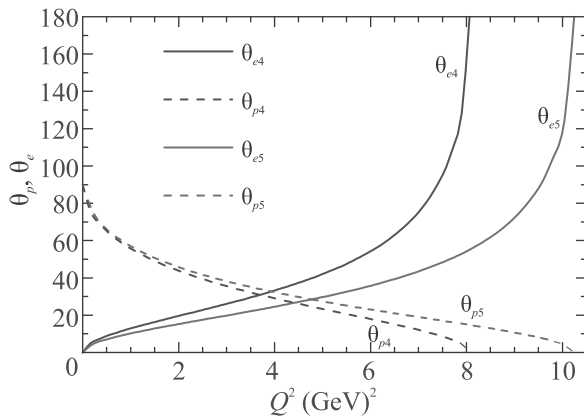


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости углов рассеяния электрона θ_e и протона θ_p от Q^2 при энергиях электронного пучка в эксперименте [16]. Линии θ_{e4} , θ_{p4} и θ_{e5} , θ_{p5} построены для $E_1 = 4.725$ и 5.895 ГэВ

Информация об углах рассеяния электрона и протона (в радианах) при энергиях электронного пучка $E_1 = 5.895$ и 4.725 ГэВ и $Q^2 = 2.06$ и 5.66 ГэВ² представлена в табл. 1. В ней также приведены значения Q_{\max}^2 (29) для максимально возможных Q^2 при $E_1 = 5.895$ и 4.725 ГэВ.

Таблица 1. Углы рассеяния электрона θ_e и протона θ_p (в радианах) в кинематике эксперимента [16]

E_1 (ГэВ)	Q^2 (ГэВ ²)	θ_e (рад)	θ_p (рад)	Q_{\max}^2 (ГэВ ²)
5.895	2.06	0.27	0.79	10.247
5.895	5.66	0.59	0.43	10.247
4.725	2.06	0.35	0.76	8.066
4.725	5.66	0.86	0.35	8.066

Поляризация виртуального фотона в процессе $ep \rightarrow ep$. Величина ε , входящая в выражение для сечения Розенблюта

$$\varepsilon = (1 + 2(1 + \tau_p) \tan^2(\theta_e/2))^{-1} \quad (31)$$

с областью изменений $0 \leq \varepsilon \leq 1$, в литературе, как правило, отождествляется со степенью продольной поляризации виртуального фотона. Иногда ее также называют параметром поляризации или просто поляризацией виртуального фотона. Правильное понимание физического смысла величины ε встречается довольно редко, в этой связи процитируем абсолютно правильные слова из работы [28]: “Let us introduce another set of kinematical variables: Q^2 , and the degree of the linear polarization of the virtual photon, ε ”.

Выражение (31) для ε является функцией от угла рассеяния электрона θ_e . Отличное от (31) выражение для ε , позволяющее проводить расчеты зависимости интересующих величин, например, от Q^2 или от угла рассеяния протона θ_p , приведено ниже, оно получено при использовании результатов работы [5]:

$$\varepsilon^{-1} = 1 + \frac{(E_1 - E_2)^2 + 2(E_1 - E_2)M}{2E_1E_2 - (E_1 - E_2)M}. \quad (32)$$

Здесь E_1, E_2 – энергии начального и конечного электронов, причем, для E_2 необходимо использовать выражения (23), (24), в явном виде зависящие только от Q^2 ; в свою очередь, зависимость Q^2 от углов θ_e и θ_p определяется формулами (22) и (26).

Зависимость степени линейной (поперечной) поляризации виртуального фотона ε (32) от квадрата переданного протону импульса Q^2 при энергиях электронного пучка в эксперименте коллаборации SANE [16] представлена на рис. 2.

Из рисунка 2 следует, что ε является убывающей от 1 до 0 функцией от Q^2 . При рассеянии электрона вперед ($\theta_e = 0^\circ$), когда $Q^2 = 0$, $\varepsilon = 1$; при рассеянии электрона назад ($\theta_e = 180^\circ$), когда $Q^2 = Q_{\max}^2$, $\varepsilon = 0$. Значения Q_{\max}^2 для энергий $E_1 = 4.725$ и 5.895 ГэВ приведены в табл. 1, они равны 8.066 и 10.247 ГэВ². Именно в этих точках линии на рис. 2 пересекаются с осью абсцисс.

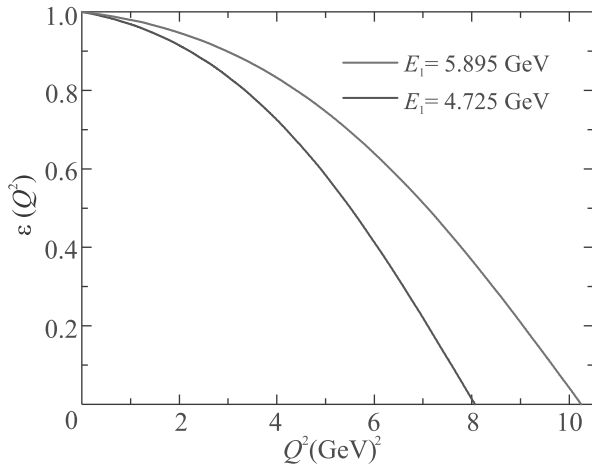


Рис. 2. (Цветной онлайн) Q^2 -зависимость степени линейной поляризации виртуального фотона ε (32) для энергий электронного пучка 4.725 и 5.895 ГэВ в эксперименте [16]

На рисунке 3 представлена зависимость степени линейной поляризации виртуального фотона ε от углов рассеяния электрона θ_e и протона θ_p при энергиях электронного пучка в эксперименте коллаборации SANE [16]. Отметим, что на левой панели рис. 3 угол θ_e изменяется от 0° до 180° , а на правой θ_p изменяется от 90° до 0° . Такой порядок отсчета углов θ_e и θ_p соответствует области изменения $0 \leq Q^2 \leq Q_{\max}^2$ для каждого из приведенных рисунков.

Графики на рис. 3 позволяют установить следующие закономерности: для одного и того же угла θ_e (θ_p) большему значению энергии электронного пучка E_1 отвечает меньшее (большее) значение ε .

Угловая зависимость переданной протону поляризации в процессе $e\bar{p} \rightarrow e\bar{p}$. В ЛСО степень продольной поляризации, переданной от начального к конечному протону в процессе (3) в случае, когда протонная мишень частично поляризована вдоль направления движения детектируемого протона отдачи, определяется формулой (17). В настоящее время эксперимент по ее измерению представляется вполне реальным, поскольку такая мишень с высокой степенью поляризации $P_t = (70 \pm 5)\%$ принципиально создана и уже использовалась в эксперименте коллаборации SANE [16]. По этой причине наиболее целесообразно было бы провести предлагаемый эксперимент на установке, использованной в [16], при тех же $P_t = 0.70$, энергиях электронного пучка $E_1 = 4.725$ и 5.895 ГэВ и значениях квадратов переданных протону импульсов $Q^2 = 2.06$ и 5.66 ГэВ². Разница между проведением предлагаемого и эксперимента [16] заключается в том, что электронный пучок должен

быть неполяризованным, а детектируемый продольно поляризованный протон отдачи должен двигаться строго вдоль направления оси квантования спина протонной мишени. Это условие является следствием требований, налагаемых на ось квантования спинов у начального и конечного протонов (5). Процедура измерения степени продольной и поперечной поляризации конечного протона отработана и использовалась в экспериментах [8–13]. Для извлечения отношения R (18) в предлагаемом эксперименте необходимо измерить только степень продольной поляризации протона отдачи, что является преимуществом по сравнению с методом [3], использованным в [8–13].

Результаты расчетов зависимости переданной протону продольной поляризации P_T (17) от угла рассеяния протона θ_p для энергий 5.895 и 4.725 ГэВ электронного пучка и $P_t = 0.70$ представлены графиками на рис. 4. На рисунке (а) показана зависимость во всей области изменения углов $\theta_p \in (90^\circ, 0^\circ)$. На рисунке (b) область изменения $\theta_p \in (47^\circ, 18^\circ)$ соответствует кинематике эксперимента [16], где $2.06 \text{ ГэВ}^2 \leq Q^2 \leq 5.66 \text{ ГэВ}^2$, см. табл. 1. При этом линии $Pd5$, $Pk5$, $Pj5$ ($Pd4$, $Pk4$, $Pj4$) соответствуют энергии электронного пучка $E_1 = 5.895$ ($E_1 = 4.725$) ГэВ. В свою очередь линии $Pd5$, $Pd4$ построены для $R = R_d$ (19) в случае дипольной зависимости; линии $Pk5$ и $Pk4$ соответствуют параметризации Kelly [23] ($R = R_k$); линии $Pj5$ и $Pj4$ построены для $R = R_j$ (20) в случае параметризации Qattan [24].

Из графиков на рис. 4 следует, что переданная протону поляризация весьма существенно зависит от вида параметризации отношения R . В случае нарушения скейлинга ФФС, т.е. при $R = R_k$ и $R = R_j$ она заметно увеличивается по абсолютному значению по сравнению со случаем дипольной зависимости, когда $R = R_d$, при этом для всех θ_p имеют место неравенства: $|Pd5| < |Pk5| < |Pj5|$, $|Pd4| < |Pk4| < |Pj4|$. Таким образом, линии Pk в случае параметризации Kelly [23] занимают промежуточное положение между Pd и Pj .

Для количественной оценки разницы между Pj , Pk и Pd составлена табл. 2, в которой приведены значения для степени продольной поляризации конечного протона $Pj5$, $Pd5$, $Pj4$, $Pd4$, $Pk5$, $Pk4$ и их относительной разницы Δ_{dj} , Δ_{dk} (выраженной в процентах) при двух энергиях электронного пучка 5.895 и 4.725 ГэВ и двух значениях Q^2 , равных 2.06 и 5.66 ГэВ², где $\Delta_{dj} = (Pj - Pd)/Pj$, $\Delta_{dk} = (Pk - Pd)/Pk$.

Из таблицы 2 следует, что при $Q^2 = 2.06 \text{ ГэВ}^2$ относительная разница между $Pj5$ и $Pd5$ составляет

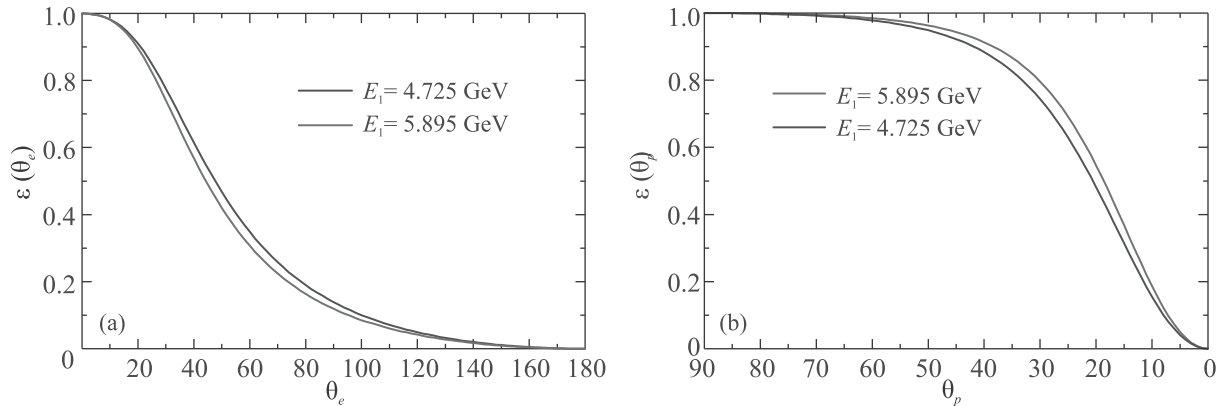


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость степени линейной поляризации виртуального фотона ε от углов рассеяния электрона θ_e (левый рисунок) и протона θ_p (правый рисунок), выраженных в градусах, при энергиях электронного пучка 5.895 и 4.725 ГэВ в эксперименте [16]

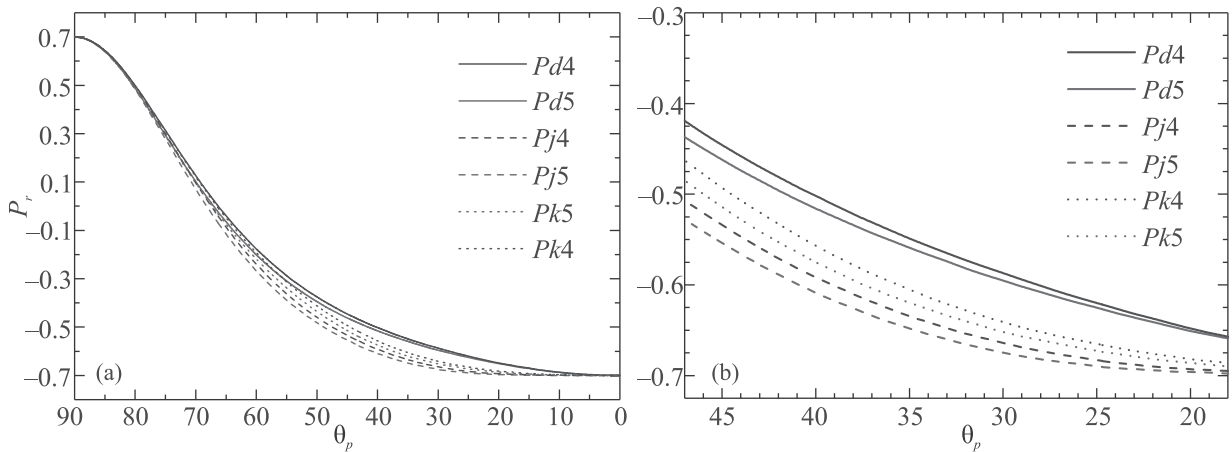


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость P_r (17) от угла рассеяния протона θ_p для E_1 и P_t в эксперименте [16] во всей области изменения углов $\theta_p \in (90^\circ, 0^\circ)$. (b) – Та же зависимость в интервале $\theta_p \in (47^\circ, 18^\circ)$, в котором $2.06 \text{ ГэВ}^2 \leq Q^2 \leq 5.66 \text{ ГэВ}^2$. Линии Pd , Pj и Pk соответствуют дипольной зависимости (19), параметризациям (20) Qattan [24] и Kelly [23]

16.6 %, между $Pj4$ и $Pd4$ примерно такая же: 16.1 %. При $Q^2 = 5.66 \text{ ГэВ}^2$ эта разница уменьшается и становится равной 9.1 и 6.4 % соответственно.

Разница между Δ_{dj} и Δ_{dk} в табл. 2 является небольшой, она варьируется от 2 до 6 %. Объяснить ее можно тем, что параметризация Kelly [23] появилась в 2004 г. до проведения экспериментов [12, 13], результаты которых были учтены в [24] и позволили получить более точную параметризацию.

Заключение. В настоящей работе, исходя из результатов JLab-поляризационных экспериментов по измерению отношения ФФС в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$ с использованием параметризаций Kelly [23] (2004) и Qattan [24] (2015) для их отношения, в кинематике эксперимента коллаборации SANE [16] (2020) по измерению двойной спиновой асимметрии в процес-

се $\vec{e}p \rightarrow ep$, проведен численный анализ зависимости от угла рассеяния протона переданной протону продольной поляризации в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$ в случае, когда начальный покоящийся протон частично поляризован вдоль направления движения детектируемого протона отдачи. Установлена заметная чувствительность переданной протону поляризации к виду параметризации отношения ФФС, что открывает возможности для проведения нового независимого эксперимента по его измерению в процессе $\vec{e}p \rightarrow e\vec{p}$.

Из расчетов следует, что нарушение скейлинга ФФС приводит к заметному увеличению абсолютного значения переданной протону поляризации $|P_r|$ по сравнению со случаем дипольной зависимости, при этом $|P_r|$ в случае параметризации Kelly [23] занимает промежуточное положение между результата-

Таблица 2. Степень продольной поляризации протона отдачи P_T (17) при энергиях электронного пучка $E_1 = 5.895$ и 4.725 ГэВ и значениях $Q^2 = 2.06$ и 5.66 ГэВ². Значения в столбцах для Pd , Pj и Pk соответствуют дипольной зависимости (19), параметризациям (20) Qattan [24] и Kelly [23]. Соответствующие углы рассеяния электронов и протонов (в градусах) приведены в столбцах для θ_e и θ_p

E_1 (ГэВ)	Q^2 (ГэВ ²)	θ_e (°)	θ_p (°)	Pd	Pj	Pk	Δ_{dj} %	Δ_{dk} %
5.895	2.06	15.51	45.23	-0.460	-0.552	-0.511	16.6	9.98
5.895	5.66	33.57	24.48	-0.628	-0.691	-0.675	9.1	6.96
4.725	2.06	19.97	43.27	-0.467	-0.556	-0.517	16.1	9.67
4.725	5.66	49.50	19.77	-0.649	-0.693	-0.682	6.4	4.84

ми для дипольной зависимости и параметризацией Qattan [24]. Очевидно, что параметризация [24] основана на более широкой базе экспериментальных данных по сравнению с параметризацией Kelly, включая в том числе и результаты работ [12, 13], является более точной и объективной и приводит к небольшим отличиям от результатов для параметризации Kelly.

1. M. N. Rosenbluth, Phys. Rev. **79**, 615 (1950).
2. N. Dombey, Rev. Mod. Phys. **41**, 236 (1969).
3. А. И. Ахиезер, М. П. Рекало, ЭЧАЯ **4**, 662 (1973).
4. А. И. Ахиезер, М. П. Рекало, *Электродинамика адронов*, Наукова думка, Киев (1977), 497 с.
5. М. В. Галынский, М. И. Левчук, ЯФ **60**(11), 2028 (1997).
6. S. Pacetti, R. Baldini Ferroli, and E. Tomasi-Gustafsson, Phys. Rep. **550-551**, 1 (2015).
7. V. Punjabi, C. F. Perdrisat, M. K. Jones, E. J. Brash, and C. E. Carlson, Eur. Phys. J. A **51**, 79 (2015).
8. M. K. Jones, K. A. Aniol, F. T. Baker et al. (The Jefferson Lab Hall A Collaboration), Phys. Rev. Lett. **84**, 1398 (2000).
9. O. Gayou, K. Wijesooriya, A. Afanasev et al. (The Jefferson Lab Hall A Collaboration), Phys. Rev. C **64**, 038202 (2001).
10. O. Gayou, E. J. Brash, M. K. Jones et al. (The Jefferson Lab Hall A Collaboration), Phys. Rev. Lett. **88**, 092301 (2002).
11. V. Punjabi, C. F. Perdrisat, K. A. Aniol et al. (The Jefferson Lab Hall A Collaboration), Phys. Rev. C **71**, 055202 (2005).
12. A. Puckett, J. Brash, O. Gayou et al. (GEP-III Collaboration), Phys. Rev. Lett. **104**, 242301 (2010).
13. A. J. R. Puckett, E. J. Brash, O. Gayou et al. (GEP-III Collaboration), Phys. Rev. C **85**, 045203 (2012).
14. A. J. R. Puckett, E. J. Brash, M. K. Jones et al. (GEP-III Collaboration), Phys. Rev. C **96**, 055203 (2017).
15. I. A. Qattan, J. Arrington, R. E. Segel et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **94**, 142301 (2005).
16. A. Liyanage, W. Armstrong, H. Kang et al. (SANE Collaboration), Phys. Rev. C **101**, 035206 (2020).
17. T. W. Donnelly and A. S. Raskin, Ann. Phys. **169**, 247 (1986).
18. М. В. Галынский, Э. А. Кураев, Ю. М. Быстрицкий, Письма в ЖЭТФ **88**(8), 555 (2008).
19. М. В. Галынский, Письма в ЖЭТФ **109** (1), 3 (2019).
20. М. В. Галынский, Р. Е. Герасимов, Письма в ЖЭТФ **110**(10), 699 (2019).
21. М. В. Галынский, Письма в ЖЭТФ **113**(9), 579 (2021).
22. М. В. Галынский, Письма в ЭЧАЯ **19**(1), 8 (2022).
23. J. J. Kelly, Phys. Rev. C **70**, 068202 (2004).
24. I. A. Qattan, J. Arrington, and A. Alsaad, Phys. Rev. C **91**, 065203 (2015).
25. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1969), 624 с.
26. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Курс теоретической физики, Т. 4. Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1989), 724 с.
27. A. J. R. Puckett, arXiv: 1508.01456 [nucl-ex].
28. G. I. Gakh and E. Tomasi-Gustafsson, Nucl. Phys. A **799**(1-4), 127 (2008).

О лазерно-индуцированной генерации высших гармоник и смещении волн высокого порядка в графеновой квантовой точке

Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян¹⁾, К. А. Саргсян, Х. В. Седракан

Центр Физики Сильных Полей, Ереванский Государственный Университет, 0025 Ереван, Армения

Поступила в редакцию 15 августа 2022 г.

После переработки 23 августа 2022 г.

Принята к публикации 26 августа 2022 г.

Мы представляем результаты численных исследований смещения волн высокого порядка/генерации высших гармоник (СВВ/ГВГ) с учетом процесса многочастичного взаимодействия, вызванным двухчастотным циркулярным сильным лазерным полем в графеновой квантовой точке (ГКТ). Показано влияние относительной фазы такого лазерного поля на спектр генерируемых в ГКТ гармоник высокого порядка. Это может позволить управлять поляризацией генерируемых гармоник. ГКТ описывается моделью ближайшего соседа с сильной связью (СС). Многочастичное взаимодействие рассматривается в расширенном приближении Хаббарда. Мы использовали уже примененный нами метод решения квантовых кинетических уравнений в локальных представлениях для заряженных носителей и получили общую формулу для процессов СВВ/ГВГ в ГКТ. Анализ полученных результатов подтверждает достаточную эффективность ГВГ в треугольной и шестиугольной ГКТ с зигзагообразными краями при определенных фазах двухчастотного циркулярного лазерного поля.

DOI: 10.31857/S123456782219003X, EDN: khrkpg

С появлением лазеров возрос интерес к основным процессам взаимодействия сильных лазерных полей с кристаллами в нелинейной оптике и нанооптике. Последнее представляет собой преобразование несколько фотонов накачки в один фотон с более высокой энергией, генерация высших гармоник (ГВГ) или, более обобщенно, смещением волн более высокого порядка: генерация суммарно-разностной частоты [1]. ГВГ [2] представляет собой строго нелинейный процесс, выходящий за рамки режимов нелинейной оптики. Вплоть до последнего десятилетия исследования были сосредоточены на ГВГ в атомарных и молекулярных газах [3]. Недавно изучение ГВГ начали распространять на двумерные кристаллы и другие наноструктуры. Уникальные электронные и оптические свойства графена как эффективного нелинейно-оптического материала обсуждаются во многих теоретических [4–21] и экспериментальных [22, 23] исследованиях, рассматривающих различные экстремальные нелинейно-оптические эффекты, в частности, смещение волн высокого порядка (СВВ)/ГВГ, происходящее в полях сильного когерентного излучения в многофотонном режиме при возбуждении таких наноструктур [24]. Однако нулевая ширина запрещенной зоны монослойного полуметаллического графена ограничивает возможно-

сти применения исходного графена в отличие, например, от двухслойного графена [25]. Для многих нелинейных эффектов отсутствие энергетической щели в графене является фундаментальным ограничением, например, для вальейтроники. Последнее невозможно из-за инверсионной симметрии такой системы [26]. В работе [27] продемонстрированы индуцированные светом селективные по долинам возбуждения, и ожидается значительная селективная по долинам ГВГ в обычном графене при использовании комбинации двух полей, основной и ее второй гармоники, циркулярно поляризованных, вращающихся в противоположных направлениях, так называемого бициркулярного лазерного поля. С другой стороны, проблема нулевой энергетической щели в графене также была решена за счет уменьшения поперечного размера графена [28]. Среди углеродных наноструктур в качестве нелинейной среды интерес представляют графеновые наноленты [28, 29], графеноподобные квантовые точки, такие как замкнуто-выпуклые фуллерены различной базовой симметрии [20, 21], и графеновая квантовая точка (ГКТ) различных конечных размеров. Наноструктура графена может быть охарактеризована тем, сохранена ли симметрия подрешетки. ГКТ со щелью можно управлять с помощью его поперечного размера, формы и типа края [28, 30, 31]. В то же время такая наноструктура обладает оптическими свойствами, прин-

¹⁾e-mail: amarkos@ysu.am

ципально отличными от свойств исходного графена [32, 33], но не менее выдающимися свойствами, чем однослойный графен [4]. Преимущество ГКТ перед графеновыми нанолентами [34, 35] заключается в ограничении квазичастиц в пространстве. Так как ограниченность в пространстве препятствует распространению электронного волнового пакета, замкнутого еще в одном дополнительном измерении, и увеличивает эффективность ГВГ [36–39]. Таким образом, представляет интерес исследование в ГКТ влияния относительной фазы двухчастотного циркулярного лазерного поля на спектр генерируемых гармоник высокого порядка. Согласование симметрии системы свет–квантовая точка может иметь место для ГКТ с определенной групповой симметрией. Последнее имеет решающее значение для выхода ГВГ и может увеличить вероятность генерации гармоник. Им можно управлять с помощью относительной фазы между двумя частотами волны накачки. Это может позволить управлять поляризацией генерируемых гармоник, как это обычно делается при ГВГ в газах [40].

В настоящей работе рассматривается многофотонная ГВГ в плоской квази-нулемерной ГКТ треугольной и шестиугольной форм с зигзагообразными краями, управляемой двухчастотным циркулярным полем, созданным двумя вращающимися навстречу циркулярно поляризованными полями интенсивного когерентного излучения. Изучается роль фазы двухчастотного циркулярного поля высокой интенсивности на процесс ГВГ в плоскости ГКТ. Замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии ГКТ и сильного лазерного поля решается численно в рамках микроскопической теории. Кулоновское электрон–электронное взаимодействие (ЭЭВ) описывается в приближении Хаббарда. Полученные решения указывают на значимость влияния полной симметрии волны накачки на нелинейно-оптический отклик ГКТ, учитывая, что последние имеют различную форму с различной точечно-групповой симметрией, а вероятности многофотонной ГВГ будут контролироваться относительной фазой двухчастотного циркулярного сильного когерентного излучения.

Мы изучим нейтральную плоскую ГКТ, ограниченную в плоскости xy . Будем рассматривать сильную электромагнитную (ЭМ) волну, распространяющуюся перпендикулярно плоскости xy . В этом случае ЭМ волна становится однородным квазипериодическим электрическим полем – двухчастотное циркулярное поле с напряженностью $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$:

$$E_x(t) = f(t) (E_{01} \cos(\omega t + \phi) + E_{02} \cos(2\omega t + \phi)), \quad (1)$$

$$E_y(t) = f(t) (E_{01} \sin(\omega t + \phi) - E_{02} \sin(2\omega t + \phi)), \quad (2)$$

где ϕ – фаза и E_{01}, E_{02} – амплитуды напряженностей двух вращающихся в противоположных направлениях циркулярно поляризованных полей основной волны накачки с соответствующими несущими частотами ω и 2ω , формирующих так называемый “трилистник” [27], $f(t) = \sin^2(\pi t/T)$ – медленно меняющаяся огибающая с длительностью импульса T . Последняя равна 20 периодам волны: $T = 40\pi/\omega$.

Далее используем метод, уже примененный в ранних работах [37, 38]. Начальную матрицу плотности определим из эмпирического гамильтониана с сильной связью (СС), т.е. “одетого” кулоновским взаимодействием СС-гамильтониана [28]. Этот подход широко используется в физике сильных полей [12, 21, 41–47]. Вкратце, это предложение обосновывается следующим образом. Свободный гамильтониан ГКТ имеет вид:

$$\hat{H}_0 = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} n_i n_j + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \quad (3)$$

где операторы $c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}$ удовлетворяют правилам антикоммутируемости. Оператор электронной плотности имеет вид $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ и $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ – полная электронная плотность для узла i . Первый член в свободном гамильтониане (3) представляет собой кинетическую энергетическую часть СС гамильтониана с нулевыми туннельными матричными элементами t_{ij}^0 . Второе и третье слагаемые в (3) соответствуют ЭЭВ в рамках расширенного приближения Хаббарда с межузельной $\sim V_{ij}$ и внутриузловой $\sim U$ кулоновскими энергиями отталкивания. Межузловое кулоновское отталкивание описывается переменным по системе расстоянием d_{ij} между парами ближайших соседей: $\sim V_{ij} = V d_{\min}/d_{ij}$ (d_{\min} – минимальное расстояние до ближайшего соседа). Член ЭЭВ взаимодействия в (3) содержит произведения четырех фермионных операторов. Мы рассмотрели кулоновское взаимодействие в рамках феноменологического приближения Хартри–Фока. Используя разложение Хартри–Фока [28], гамильтониан (3) можно аппроксимировать как:

$$\hat{H}_0^{HF} \simeq - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i (\bar{n}_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \bar{n}_{i\downarrow} n_{i\uparrow}) + \sum_{i,j} V_{ij} \bar{n}_j n_i - \sum_{i,j,\sigma} V_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle, \quad (4)$$

где $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$ – усредненная в поле матрица плотности и $\bar{n}_{i\sigma} = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$. Теперь в (4) у нас есть только произведение двух фермионных операторов и гамильтониана (4) можно записать как

$$\hat{H}_0^{HF} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \left(\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \right) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (5)$$

Фактически это одночастичный гамильтониан СС, заданный с нормированной энергией переноса t_{ij} , которая зависит от матрицы плотности, усредненной в поле. Можно самосогласованно определить матрицу плотности основного состояния $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$ [45], а затем вычислить перенормированную энергию переноса $t_{ij} \left(\rho_{0ij}^{(\sigma)} \right)$ или применить феноменологический подход [28]. Таким образом, можно принять t_{ij} , равным экспериментально измеренному интегралу перехода для графеновых наноструктур, и перейти к оценке элементов матрицы плотности по отношению к основному состоянию – полностью заполненной валентной зоне эмпирического СС-гамильтониана (5). Отметим, что это приближение неприменимо для систем, основное состояние которых существенно отличается от полностью заполненной валентной зоны. Например, экситонный конденсат [45]. Однако для графеновых наноструктур экспериментальные доказательства таких явлений отсутствуют. Поэтому в качестве свободного гамильтониана мы взяли:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{HF} \simeq & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i (\bar{n}_{i\uparrow} - \bar{n}_{0i\uparrow}) n_{i\downarrow} + \\ & + U \sum_{i\sigma} (\bar{n}_{i\downarrow} - \bar{n}_{0i\downarrow}) n_{i\uparrow} + \sum_{\langle i,j \rangle} V_{ij} (\bar{n}_j - \bar{n}_{0j}) n_i - \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} V_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \left(\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle - \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle_0 \right). \quad (6) \end{aligned}$$

В этом представлении начальное значение матрицы плотности $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle_0$ вычисляется относительно гамильтониана СС (5) при фиксированном t_{ij} . Таким образом, в статическом пределе гамильтониан Хартри–Фока для ЭЭВ обращается в нуль. Таким образом, ЭЭВ в приближении Хартри–Фока актуально только для квантовой динамики, инициируемой лазерным полем. Взаимодействие света с ГКТ описывается в терминах калибровки длины через истинный скалярный потенциал:

$$\hat{H}_{\text{int}} = e \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i \mathbf{E}(t) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$$

с радиус-вектором \mathbf{r}_i и элементарным зарядом e . Из уравнения Гейзенберга $i\hbar \partial \hat{L} / \partial t = [\hat{L}, \hat{H}]$ мы получим эволюционные уравнения для одночастичной

матрицы плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$. Будем также считать, что система релаксирует со скоростью γ к равновесному $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$. Чтобы описать замкнутую систему уравнений для одночастичной матрицы плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)}$, будем рассматривать ЭЭВ в рамках приближения Хартри–Фока и гамильтониан (3) аппроксимируем как (6). Таким образом, получается следующее уравнение для матрицы плотности:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}}{\partial t} = & \sum_k \left(\tau_{kj\sigma} \rho_{ik}^{(\sigma)} - \tau_{ik\sigma} \rho_{kj}^{(\sigma)} \right) + (V_{i\sigma} - V_{j\sigma}) \rho_{ij}^{(\sigma)} + \\ & + e \mathbf{E}(t) (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho_{ij}^{(\sigma)} - i\hbar \gamma \left(\rho_{ij}^{(\sigma)} - \rho_{0ij}^{(\sigma)} \right), \quad (7) \end{aligned}$$

и матрицы $V_{i\sigma}$, $\tau_{ij\sigma}$ определяются через матрицу плотности $\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}$:

$$V_{i\sigma} = \sum_{j\alpha} V_{ij} \left(\rho_{jj}^{(\alpha)} - \rho_{0jj}^{(\alpha)} \right) + U \left(\rho_{ii}^{(\bar{\sigma})} - \rho_{0ii}^{(\bar{\sigma})} \right), \quad (8)$$

$$\tau_{ij\sigma} = t_{ij} + V_{ij} \left(\rho_{ji}^{(\sigma)} - \rho_{0ji}^{(\sigma)} \right). \quad (9)$$

Далее численно диагонализуем СС гамильтониан \hat{H}_0 . Отметим, что ЭЭВ в пределе Хартри–Фока входит в эмпирический интеграл переноса между ближайшими атомами t_{ij} , который выбирается близким к экспериментальным данным $t_{ij} = 2.7$ эВ [28]. Для всех расчетов мы приняли $V = 0.3U$ [48, 49]. В гамильтониане мы пренебрегли колебаниями решетки. С помощью численной диагонализации находим собственные состояния $\psi_\mu(i)$ и собственные энергии ε_μ ($\mu = 0, 1, \dots, N-1$). Результаты численной диагонализации показаны на соответствующем рисунке. Видно, что без туннелирования все энергетические уровни вырождаются. Так, туннелирование сняло вырождение и привело к образованию зоны валентных состояний ниже уровня Ферми $\varepsilon_\mu = 0$, и зоны состояний проводимости выше уровня Ферми, и щели на уровне Ферми (см. также [28]). Квантовая динамика ГКТ в сильном периодическом волновом поле управляется замкнутой системой дифференциальных уравнений (7), которые должны быть решены с правильными начальными условиями. Мы строим преимущественно матрицу плотности $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$ через заполнение электронных состояний в валентной зоне в соответствии с распределением Ферми–Дирака при нулевой температуре $\rho_{0ij}^{(\sigma)} = \sum_{\mu=N/2}^{N-1} \psi_\mu^*(j) \psi_\mu(i)$, с собственным состоянием $\psi_\mu(i)$ гамильтониана \hat{H}_0^{TB} . Уравнение движения для матрицы плотности решается путем интегрирования по времени уравнения (7) при помощи стандартного алгоритма Рунге–Кутты

четвертого порядка. Определим спектр ГВГ, оценивая преобразованием Фурье $\mathbf{a}(\Omega)$ дипольного ускорения $\mathbf{a}(t) = d^2\mathbf{d}/dt^2$. Дипольный момент определяется как $\mathbf{d}(t) = \left\langle \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right\rangle$. Мы нормируем дипольное ускорение коэффициентом $a_0 = \bar{\omega}^2 \bar{d}$, где $\bar{\omega} = 1 \text{ эВ}/\hbar$ и $\bar{d} = 1 \text{ \AA}$. Сила, излучаемая на данной частоте, пропорциональна $|\mathbf{a}(\Omega)|^2$. ГКТ имеют зигзагообразные края для всех случаев. Примем частоту возбуждения $\omega = 0.1 \text{ эВ}/\hbar$, что значительно меньше типичных энергий щелей $U \simeq 3 \text{ эВ}$, $V \simeq 0.3U$. Вероятность релаксации принята равной $\hbar\gamma = 50 \text{ мэВ}$. Для большинства расчетов волновое поле (1), (2) предполагается двухчастотным циркулярным полем. Фаза волны равна $\phi = 0$ почти во всех случаях. Изначально рассмотрена компонента $|a_x(\Omega)|$, результаты для $|a_y(\Omega)|$ идентичны. Ось x лежит в плоскости рис. 1 и 2 и направлена вдоль оси x вправо.

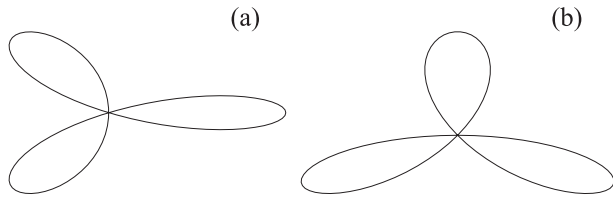


Рис. 1. Схема двухчастотного циркулярного поля ЭМ волны при (a) – $\phi = 0$; (b) – $\phi = 3\pi/2$

На рисунке 1 схематично показано двухчастотное циркулярное ЭМ поле, на рис. 2 и 3 соответственно показаны решетка графена и энергетический спектр СС в окрестности уровня Ферми, $\varepsilon_\mu = 0$, для тре-

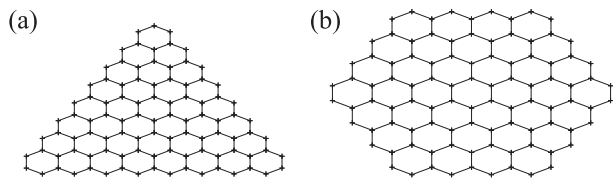


Рис. 2. Схема решеток (a) – треугольной; (b) – шестиугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с соответственно $N = 97$ и $N = 96$ атомами. Расстояние между ближайшими соседними атомами равно $a \simeq 1.42 \text{ \AA}$

угольной и шестиугольной ГКТ для почти одинакового числа атомов углерода. Чтобы сравнить вероятности ГВГ, на последующих рисунках мы представили все результаты для спектров испускания гармоник через нормализованное число атомов N . Далее, мы исследовали зависимость спектров ГВГ от относительной фазы двухчастотного циркулярного поля (1), (2). На рисунке 4a и b компонента $|a_x(\Omega)|$ построена в зависимости от номера гармоники и фа-

зы ϕ соответственно для треугольной и шестиугольной ГКТ. Частоты двух циркулярно поляризованных полей основной волны приняты $\omega = 0.1 \text{ эВ}/\hbar$ и $2\omega = 0.2 \text{ эВ}/\hbar$, а две амплитуды напряженности поля равны $E_{01} = E_{02} = 0.1 \text{ В}/\text{\AA}$. Полное ЭМ поле одинаково для $\phi = 0$ и $\phi = 2\pi$. Как и ожидалось, общая вероятность гармоник модулируется при вращении “трилистника” двухчастотного циркулярного поля. Для неограниченного в пространстве графена в низкочастотной волне накачки спектр ГВГ изотропен относительно вектора поляризации двухчастотного циркулярного поля. Для высоких частот зависимость не изотропна, но из-за симметрии углеродной шестиугольной ячейки оптический отклик относительно вектора поляризации двухчастотного циркулярного поля носит периодический характер с периодом $2\pi/3$, а управляемые током гармоники относительно низшего порядка следуют ожидаемому образцу, достигая максимума, когда электроны устремляются к более крутым стенкам [27]. Для ГКТ в “трилистнике” двухчастотного циркулярного поля мы видим совсем другую картину. В этом случае мы имеем сильную анизотропию. Разные ϕ приводят к разным вероятностям ГВГ для одной и той же гармоники. Для наглядности на рис. 5 показана вероятность ГВГ для эффективных относительно невысоких гармоник H19 и H20 в зависимости от фазы. В частности, для треугольной ГКТ мы имеем максимум для H20 на фазе $\phi = 5\pi/12$, а для шестиугольной ГКТ предпочтительнее фазы $\phi = 2\pi/3, 5\pi/3$. Для последнего спектр идентичен при $\phi = 0$ и $\phi = \pi$ из-за трехкратной симметрии. Здесь каждое изменение в фазе ϕ на π приводит к повороту трилистника на $2\pi/3$, что дает эквивалентную конфигурацию (как для неограниченного графена [27]). Как видно из рис. 5, при $\phi = 3\pi/2$ (конфигурация поля дана на рис. 1b) для треугольной ГКТ соответствующая кривая для H19, т.е. $(3n + 1)$ гармоника, индуцируемая основным импульсом частоты ω , имеет максимум, когда симметрии “трилистника” двухчастотного циркулярного поля и треугольного ГКТ совпадают, и электроны устремляются к более крутым стенкам “трилистника” двухчастотного циркулярного поля. Гармоника H20 (как и для любого $(3n + 2)$), индуцируемая 2ω -импульсом, не имеет максимума при $\phi = 3\pi/2$ из-за симметрии (см. также [27]). Рисунок 5 показывает, что в обоих ГКТ максимум на заданной фазе для H19 соответствует минимуму на той же фазе для H20, и наоборот, в силу периодичности волны накачки и сохранения полной энергии системы. Рисунок 4b показывает, что для любой фазы ϕ в шестиугольной ГКТ из-за симметрии отсутству-

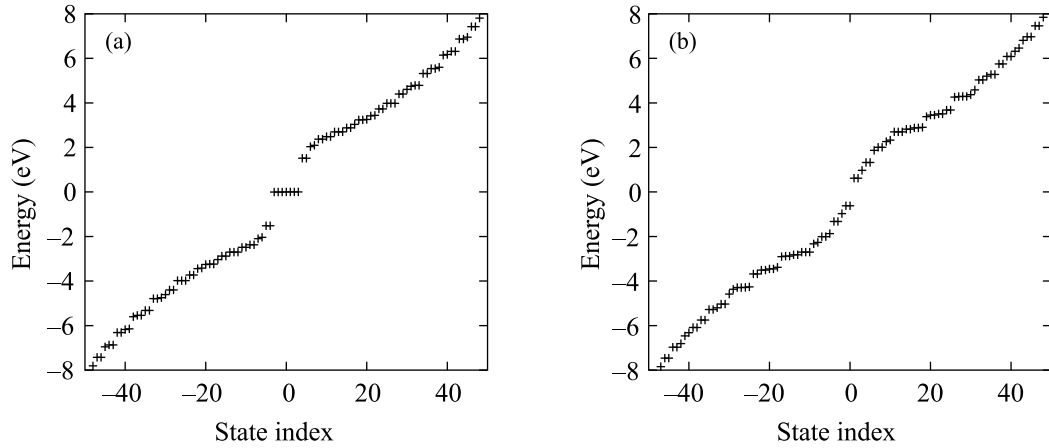


Рис. 3. Собственные энергии в (a) – треугольной; (b) – шестиугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с соответственно $N = 97$ и $N = 96$ атомами

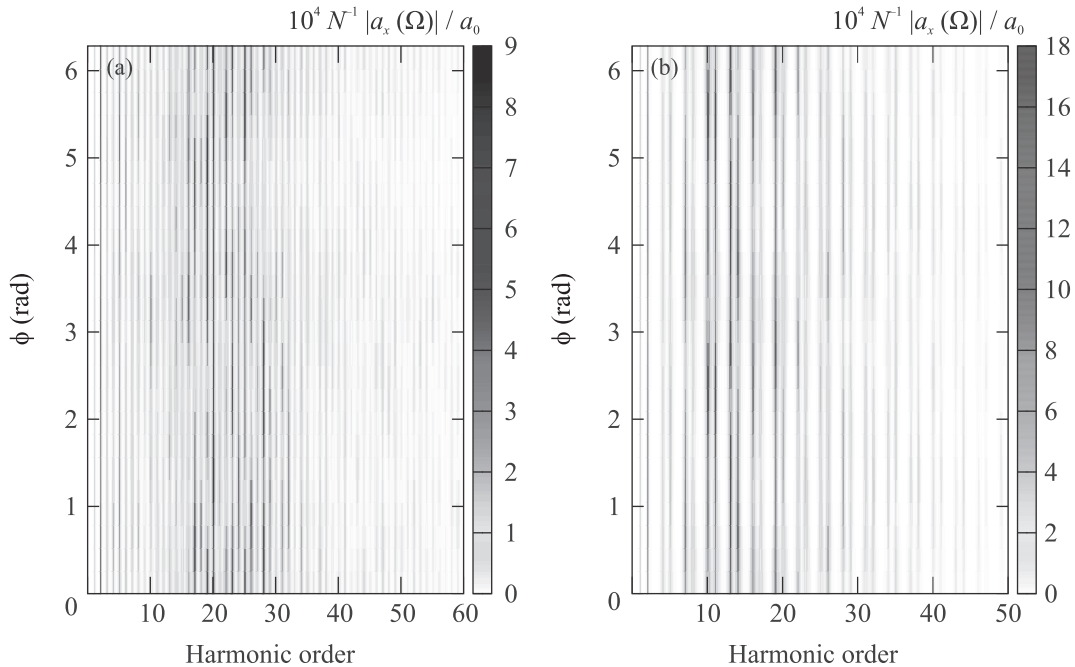


Рис. 4. (Цветной онлайн) Гармоническое испускание как функция двухчастотной фазы ϕ . Спектр излучения ГВГ в режиме сильного поля, выраженный через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$ (в относительных единицах) в зависимости от номера гармоники и относительной фазы ϕ двухчастотного циркулярного поля волны накачки, в (a) – треугольной и (b) – шестиугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с соответственно $N = 97$ и $N = 96$ атомами. Частоты двух компонент волны равны $\omega = 0.1/\hbar$ и $2\omega = 0.2$ эВ/ \hbar , а напряженности полей равны $E_{01} = E_{02} = 0.1$ В/Å. Энергии ЭЭВ равны $U = 3$ эВ, $V = 0.9$ эВ. Вероятность релаксации есть $\hbar\gamma = 50$ мэВ

ют гармоники $3n$. Мы также проверили, что все полученные результаты не зависят от конкретных направлений вращения двух вращающихся в противоположных направлениях циркулярно поляризованных полей волны накачки. То есть мы имеем одинаковые результаты при одновременном изменении направлений вращения обоих полей (см. [27]). Далее, для выяснения основных аспектов ГВГ двухчастот-

ного циркулярного поля в ГКТ на рис. 6 компонента $|a_x(\Omega)|$ построена при разных амплитудах E_{01}, E_{02} . На рисунке 7 спектры ГВГ представлены для шестиугольной ГКТ. Как показано на рис. 6 и 7, в сильном лазерном поле многофотонные гармоники становятся одинаково значимыми как для треугольной, так и для шестиугольной ГКТ в двухчастотном циркулярном поле волны накачки, а энергии отсечки смеща-

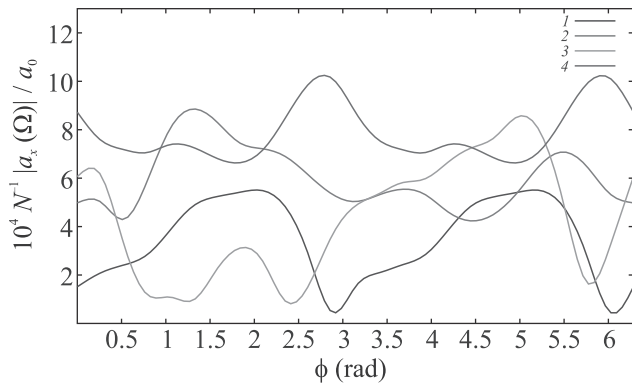


Рис. 5. (Цветной онлайн) Вероятность излучения для гармоник H19 и H20 в режиме сильного поля, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$ (в относ. ед.) в зависимости от фазы ϕ . (1–4) представлены соответственно для H20 в шестиугольной, H20 в треугольной, H19 в треугольной и H19 в шестиугольной ГКТ. Вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ. Частоты волны $\omega = 0.1$ эВ/ \hbar и $2\omega = 0.2$ эВ/ \hbar , напряженности полей равны $E_{01} = E_{02} = 0.1$ В/Å. Спектры показаны для умеренных типичных энергий ЭЭВ $U = 3$ эВ, $V = 0.9$ эВ. Кривые представлены в порядке их пересечения с осью y

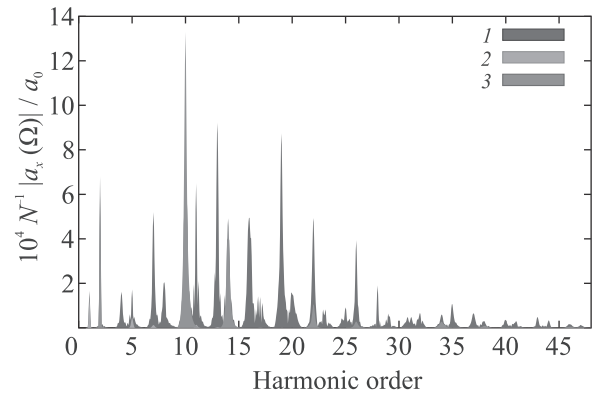


Рис. 7. (Цветной онлайн) То же, что и на рис. 6, но для шестиугольной ГКТ с $N = 96$ атомами

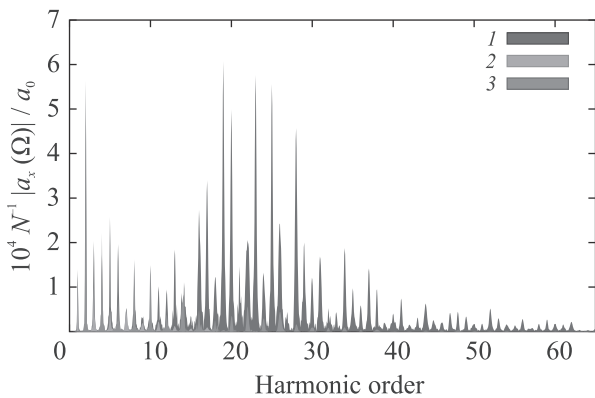


Рис. 6. (Цветной онлайн) То же, что и на рис. 4, но в зависимости от номера гармоники волны накачки для треугольной ГКТ с $N = 97$ атомами, и фаза равна $\phi = 0$. Напряженности поля для (1) $E_{01} = E_{02} = 0.1$ В/Å, (2) $E_{01} = 0.1$ В/Å, $E_{02} = 0$, и (3) $E_{02} = 0.1$ В/Å, $E_{01} = 0$

ются в синюю область. Значительное усиление спектра ГВГ за счет согласования симметрии системы свет–точка имеет место как для треугольной, так и для шестиугольной ГКТ с определенной групповой симметрией. В обоих случаях спектры ГВГ имеют многоступенчатую структуру плато, что связано с возбуждениями собственных энергетических состояний между незанятыми энергетическими уровнями и занятым уровнем [28]. Энергия отсечки гармоник $\hbar\omega N_{\text{cut}}$ существенно возрастает по сравнению с энер-

гиями отсечки ГВГ в линейно поляризованном лазерном поле при $E_{01} = 0$ или $E_{02} = 0$. На рисунках 6 и 7 видно, что в линейно поляризованной волне для рассматриваемых ГКТ с зигзагообразными краями из-за отсутствия инверсионной симметрии в спектре излучения ГВГ присутствуют как нечетные, так и четные гармоники. В отличие от линейно поляризованной волны накачки, как показано на рис. 7, для шестиугольной ГКТ в двухчастотном циркулярном поле спектр излучения ГВГ имеет гармоники $(3n+1)$, вызванные основной ω -составляющей импульса (левая круговая поляризация), и $(3n+2)$ гармоники, вызванные второй 2ω -составляющей импульса (правая круговая поляризация). На рисунке 7 $3n$ гармоники отсутствуют из-за симметрии, как и в двухчастотном циркулярном поле в атомарной среде [50, 51] и обычном графене [27]. На рисунке 6 для треугольной ГКТ $3n$ -гармоники появляются из-за нарушения инверсионной симметрии. Чтобы наглядно показать различия, на рис. 8а и б отдельно показаны результаты для спектров излучения ГВГ, генерируемых сильным двухчастотным циркулярным полем волны накачки в соответственно треугольной и шестиугольной ГКТ при почти одинаковом числе атомов. Как видно из рис. 8, для рассматриваемого значения фазы $\phi = 0$ вероятности ГВГ возрастают для шестиугольной структуры. Рисунок 8 демонстрирует типичное нелинейное поведение ГВГ со множеством плато. Отметим, что спектры, показанные на рис. 8а, как и на рис. 6, богаче. Это является следствием не только интерференции двух разных вкладов, внутрizonного и межzонного [21], но и нарушения инверсионной симметрии в треугольной ГКТ, приведшего к появлению $3n$ -гармоник. При этом рис. 8 показывает, что доминирующее плато сместилось в сторону более высоких частот, в частности, при $N = 97$ для

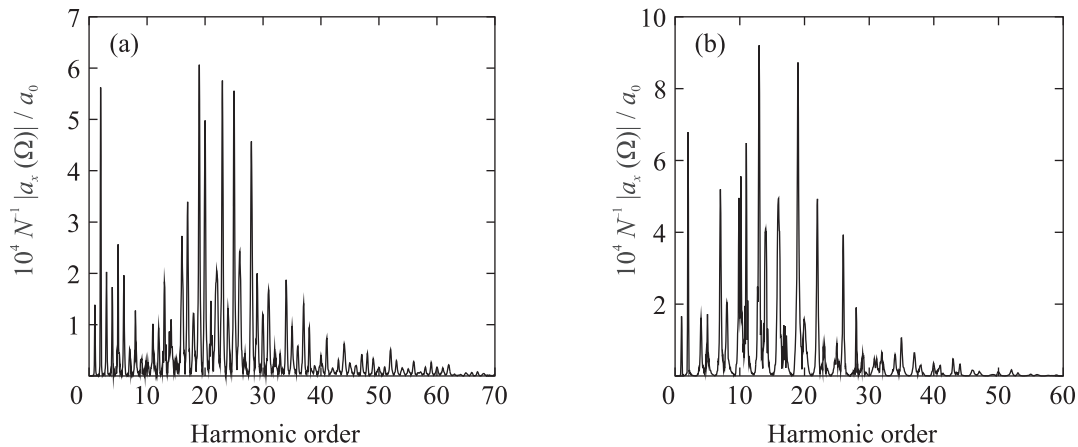


Рис. 8. То же, что и на рис. 6, но только в двухчастотном циркулярном поле при фазе, равной $\phi = 0$ для (a) – треугольной и (b) – шестиугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с соответственно $N = 97$ и $N = 96$ атомами. На рис. (b), $3n$ гармоники отсутствуют из-за симметрии в шестиугольной ГКТ

треугольной ГКТ и $N = 96$ для шестиугольной ГКТ мы имеем эффективную многофотонную генерацию гармоник соответственно с 15-й по 40-ю и с 10-й по 30-ю.

Подводя итоги, отметим, что мы изучили влияние на ГКТ двухчастотного циркулярного поля, образованного двумя вращающимися навстречу циркулярно поляризованными полями основной волны накачки, в частности, а также фазы такого поля. Микроскопическая теория была использована для описания крайне нелинейного отклика такой наноструктуры на интенсивное когерентное излучение. Замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии ГКТ с сильным лазерным полем решена численно для ГКТ треугольной и шестиугольной формы с зигзагообразными краями. Как показывают численные результаты, из-за разной симметрии подрешетки одни и те же фазы дают разные парциальные выходы в спектрах ГВГ для треугольной и шестиугольной форм ГКТ с близким числом атомов. Фаза $\phi \neq 0$ двухчастотного циркулярного поля не нарушает инверсионной симметрии, и в шестиугольной ГКТ гармоники $3n$ отсутствуют вне зависимости от ϕ . Полученные результаты показывают, что ГКТ с ограничением квазичастиц в пространстве могут служить эффективной средой для генерации четных и нечетных гармоник высокого порядка в двухчастотном циркулярном поле волны уже умеренной интенсивности. Вероятность ГВГ возрастает на определенных фазах. Полная вероятность ГВГ может модулироваться при вращении “трилистника” двухчастотного циркулярного поля. Энергия отсечки гармоник $\hbar\omega N_{\text{cut}}$ существенно возрастает по сравнению

с энергией отсечки ГВГ в случае линейно поляризованного лазерного поля. Из-за отсутствия инверсионной симметрии подрешетки в треугольных ГКТ во всех рассмотренных случаях, а также в шестиугольных ГКТ в линейно поляризованной волне при генерации появляются гармоники как нечетного, так и четного порядка вне зависимости от двухцветовой фазы. Для двухчастотного циркулярного лазерного поля, взаимодействующего с шестиугольной ГКТ, мы видим совершенно другую картину. В этом случае мы имеем спектры излучения высоких гармоник, так как $3n + 1$, вызванные основной, $3n + 2$, вызванные второй гармоникой волны накачки, а $3n$ гармоники отсутствуют из-за симметрии для шестиугольной ГКТ. Таким образом, мы предлагаем интересные системы для световолновой наноэлектроники и нелинейной оптики. Это потенциальный способ увеличения квантового выхода и энергии испускаемых фотонов при ГВГ в графеноподобных квантовых точках, что также должно позволить управлять поляризацией генерируемых гармоник.

Авторы глубоко признательны проф. Г. К. Аветисяну и док. физ.-мат. наук Г. Ф. Мкртчяну за постоянные обсуждения и ценные рекомендации.

Работа поддержана Комитетом науки Республики Армения в рамках исследовательского проекта 20TTWS-1C010.

1. R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, San Diego (2003).
2. P. B. Corkum and F. Krausz, *Nat. Phys.* **3**, 381 (2007).
3. G. Mourou, *Appl. Phys. B* **65**, 205 (1997).

4. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
5. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 384204 (2008).
6. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and K. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **6**, 061702 (2012).
7. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov, S. A. Maksimenko, and A. Hoffmann, *Phys. Rev. B* **88**, 165411 (2013).
8. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, *New J. Phys.* **17**, 113018 (2015).
9. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **94**, 075412 (2016).
10. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **11**, 016004 (2017).
11. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 035405 (2017).
12. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **97**, 115454 (2018).
13. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **100**, 035434 (2019).
14. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 036010 (2019).
15. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **14**, 026004 (2020).
16. A. G. Ghazaryan, H. H. Matevosyan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **14**, 046009 (2020).
17. H. K. Avetissian, *Relativistic nonlinear electrodynamics, The QED vacuum and matter in super-strong radiation fields*, Springer, Berlin (2016).
18. B. R. Avchyan, A. G. Ghazaryan, K. A. Sargsyan, and Kh. V. Sedrakian, *JETP* **132**(6), 883 (2021).
19. A. G. Ghazaryan, *JETP* **132**(5), 843 (2021).
20. G. P. Zhang and Y. H. Bai, *Phys. Rev. B* **101**, 081412(R) (2020).
21. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **104**, 125436 (2021).
22. P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann, T. Elsaesser, and M. Woerner, *Phys. Rev. B* **89**, 041408 (2014).
23. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, *Science* **356**, 736 (2017).
24. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *Phys. Rev. B* **85**, 115443 (2012).
25. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
26. J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu, *Nat. Rev. Mater.* **1**, 16055 (2016).
27. M. S. Mrudul, A. Jimenez Galan, M. Ivanov, and G. Dixit, *Optica* **8**, 277 (2021).
28. A. D. Guclu, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Graphene quantum dots*, Springer, Berlin (2014).
29. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, G. F. Mkrtchian, and K. A. Sargsyan, *J. Nanophoton.* **14**, 026018 (2020).
30. S. Luryi, J. Xu, and A. Zaslavsky, *Future trends in microelectronics: Frontiers and innovations*, Wiley, N.Y. (2013).
31. A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **82**, 155445 (2010).
32. O. Voznyy, A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **83**, 165417 (2011).
33. W. L. Wang, S. Meng, and E. Kaxiras, *Nano Lett.* **8**, 241 (2008).
34. M. Y. Han, B. Ozyilmaz, and Y. Zhang, Ph. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206805 (2007).
35. S. Reich, C. Thomson, and J. Maultzsch, *Carbon nanotubes, basic concepts and physical properties*, Wiley-VCH, Weinheim (2004).
36. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Y. Ivanov, A. L'Huillier, and P. B. Corkum, *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
37. B. R. Avchyan, A. G. Ghazaryan, K. A. Sargsyan, and Kh. V. Sedrakian, *JETP* **134**, 125 (2022).
38. B. R. Avchyan, A. G. Ghazaryan, S. S. Israelyan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **16**, 036001 (2022).
39. X. Zhang, T. Zhu, H. Du, H.-G. Luo, J. Brink, and R. Ray, *Phys. Rev. Research* **4**, 033026 (2022).
40. O. Kfir, P. Grychtol, E. Turgut, R. Knut, D. Zusin, D. Popmintchev, T. Popmintchev, H. Nembach, J. M. Shaw, A. Fleischer, H. Kapteyn, M. Murnane, and O. Cohen, *Nature Photon* **9**, 99 (2015).
41. G. P. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 176801 (2003).
42. J. D. Cox, A. Marini, and F. de Abajo, *Nat. Commun.* **8**, 14380 (2017).
43. J. D. Cox and F. de Abajo, *Nat. Commun.* **5**, 5725 (2014).
44. E. Malic, T. Winzer, E. Bobkin, and A. Knorr, *Phys. Rev. B* **84**, 205406 (2011).
45. J. Sabio, F. Sols, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **82**, 21413 (2010).
46. P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
47. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and A. Knorr, *Phys. Rev. B* **105**, 1 (2022).
48. R. L. Martin and J. P. Ritchie, *Phys. Rev. B* **48**, 4845 (1993).
49. H. K. Avetissian, S. S. Israelyan, H. H. Matevosyan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. A* **105**, 063504 (2022).
50. A. Fleischer, O. Kfir, T. Diskin, P. Sidorenko, and O. Cohen, *Nat. Photon.* **8**, 543 (2014).
51. O. Neufeld, D. Podolsky, and O. Cohen, *Nat. Commun.* **10**, 1 (2019).

Определение длительности одноциклового световой пули среднего инфракрасного диапазона по структуре индуцированных плазменных каналов или центров окраски

А. Е. Дормидонов^{+*1)}, Е. Д. Залозная^{+*×}, В. О. Компанец^{*}, С. В. Чекалин^{*}, В. П. Кандидов^{*×}

⁺ Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 127055 Москва, Россия

^{*} Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

[×] Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 сентября 2022 г.

После переработки 5 сентября 2022 г.

Принята к публикации 6 сентября 2022 г.

Предложен способ определения длительности и фазы высокоинтенсивных фемтосекундных одноцикловых импульсов среднего инфракрасного диапазона, основанный на записи амплитуды светового поля импульса в пространственной структуре индуцированных плазменных каналов или треков центров окраски в прозрачном диэлектрике. Структура треков записывается и регистрируется при однократном взаимодействии исследуемого импульса со средой, в которой происходит его нелинейная компрессия. Глубина модуляции профиля треков однозначно связана с числом осцилляций светового поля под огибающей распространяющегося импульса, что позволяет определить его длительность. Полученная оценка длительности световой пули среднего инфракрасного диапазона в LiF составляет менее 10 фс. Длительность световой пули, определенная предлагаемым способом, сопоставлена с измерениями автокорреляционным и кросскорреляционным методами.

DOI: 10.31857/S1234567822190041, EDN: khrtbm

Фемтосекундные лазерные импульсы являются уникальным инструментом современной спектроскопии, позволяющим регистрировать сверхбыстрые переходные процессы в атомарных и молекулярных системах, твердом теле и биологических объектах [1–3]. Сокращение длительности лазерных импульсов и переход к так называемым биполярным и униполярным импульсам, длительность которых близка к одному периоду осцилляций светового поля, позволяет изучать фундаментальные свойства вещества, чувствительные к временной структуре поля внутри огибающей импульса. В косинус-моде одноциклового биполярного импульса максимум его огибающей совпадает с максимумом оптических осцилляций и напряженность воздействующего электрического поля существенно выше, чем в синус-моде, при которой в максимуме огибающей поле обращается в нуль. Таким образом, в экспериментах становится необходимым контролировать не только длительность огибающей, но и фазу осцилляций светового поля одноциклового импульса, главным образом определяющую нелинейно-оптический отклик вещества [4]. Следует учитывать, что в процессе распространения

одноциклового импульса в среде с материальной дисперсией происходит периодическая смена косинус- и синус-мод, а, следовательно, и режима нелинейно-оптического взаимодействия вследствие сдвига фазы между огибающей импульса и несущей частотой, вызванного различием фазовой и групповой скоростей [4–6].

Определение длительности и структуры поля одноцикловых импульсов является нетривиальной задачей из-за экстремально широкой спектральной полосы и сложного временного профиля интенсивности. Прохождение такого импульса через любые оптические компоненты неизбежно вносит дисперсионные искажения временного профиля и фазы, что ограничивает точность измерений. Широко используемый автокорреляционный метод измерения длительности ультракоротких импульсов оказывается неприменим для решения поставленной задачи, поскольку позволяет зарегистрировать лишь зависимость интенсивности импульса от времени и является инвариантным к изменению абсолютной фазы. Для прямой регистрации светового поля ультракороткого импульса наиболее перспективными на данный момент являются методы частотно-временного оптического стробирования (FROG) [7],

¹⁾e-mail: dormidonov@gmail.com

спектрально-фазовая интерферометрия для непосредственного восстановления электрического поля (SPIDER) [8] и эволюционная реконструкция фазы по интерферометрическим автокорреляционным измерениям EPRIAC [9]. Несмотря на то, что данные методы позволяют получать информацию не только о временной развертке интенсивности импульса, но и о временной форме его фазы, существует ряд факторов, ограничивающих возможность их применения для характеристики одноциклового импульсов среднего инфракрасного диапазона. К ним относится, например, ограничение на ширину спектра измеряемого импульса и низкий отклик кремниевого детектора в инфракрасном спектральном диапазоне, что требует многоимпульсной регистрации, при которой точность измерений ограничивается стабильностью излучения лазерной системы [10]. В работе [11] предложена модификация классического метода SPIDER, в которой информация о фазе кодируется с помощью пространственной карты спектральной интерференции (X-SEA-F-SPIDER). Такой подход, адаптированный для измерений импульсов среднего инфракрасного (ИК) диапазона, позволяет существенно уменьшить ошибки и избежать артефактов при восстановлении структуры поля сверхкоротких импульсов [10, 12]. Тем не менее, перечисленные методы сложны в реализации, как на этапе создания экспериментальной установки, так и при математической обработке полученных результатов.

Основным механизмом получения одноциклового импульсов является нелинейная самокомпрессия фемтосекундных импульсов ИК диапазона в среде с аномальной дисперсией групповой скорости (АДГС). Одной из возможных реализаций такого метода является солитонное сжатие импульсов ближнего и среднего ИК диапазонов в полых фотонно-кристаллических световодах [13, 14]. Широкополосная аномальная дисперсия, необходимая для солитонного преобразования импульсов, обеспечивается структурой световодной системы, оптимизируемой в классе полых фотонно-кристаллических световодов с антирезонансной оболочкой. Другим способом получения импульса, содержащего одно колебание светового поля, не требующего направляющих волноводных структур, является формирование световой пули (СП) при филаментации фемтосекундных лазерных импульсов в объеме прозрачной среды в условиях АДГС [15]. Наиболее подходящими известными средами, имеющими АДГС в ближнем и среднем ИК диапазоне, являются фториды щелочных металлов: CaF_2 , BaF_2 , LiF . Спектральные окна прозрачности фторидов перекрывают ультрафиолетовый и инфракрасный диапазоны, что необходимо для генерации суперконтинуума – сужения спектра, сопровождающего экстремальное сжатие импульса. Сформированная СП представляет собой волновой пакет, который при дифракции и АДГС экстремально сжимается в пространстве и во времени в отсутствие каких-либо направляющих структур вследствие фазовой самомодуляции в среде с керровской нелинейностью [16]. Световое поле СП локализовано в ее ядре, длительность которого составляет около одного периода оптических осцилляций, диаметр – порядка нескольких длин волн [17]. Ядро СП содержит около 10% энергии начального импульса, пиковая напряженность электрического поля соответствует интенсивности $\sim 100 \text{ ТВт/см}^2$. Распространяясь в среде, высокоинтенсивная СП приводит к фотоионизации и формированию протяженных плазменных каналов, отражающих структуру поля СП [6]. В LiF образуется пунктирный трек долгоживущих центров окраски (ЦО), профиль концентрации которых отражает периодическую смену косинус- и синус-мод одноциклового СП и позволяет получить информацию о трансформации светового поля с расстоянием после воздействия единичного лазерного импульса, избегая тем самым ошибок эксперимента из-за разброса параметров импульсов от выстрела к выстрелу.

В настоящей статье предлагается способ определения длительности и фазы одноциклового СП среднего ИК диапазона по структуре плазменных каналов или треков ЦО, индуцируемых при однократном взаимодействии лазерного импульса со средой. Плазменный канал или трек ЦО записывается и регистрируется непосредственно в среде, в которой происходит формирование одноциклового СП. Данный способ принципиально лишен дисперсионных и нелинейных искажений, связанных с наличием дополнительных оптических элементов в измерительной схеме.

Рассмотрим линейно поляризованный импульс с гауссовой огибающей и гармонической несущей на частоте ω_0 , распространяющийся в линейной прозрачной диэлектрической среде с групповой скоростью v_g . В бегущей системе координат $\tau = t - z/v_g$ эволюция напряженности электрического поля $E(z, \tau)$ описывается выражением:

$$E(z, \tau) = E_0 \exp\left(-\frac{\tau^2}{2\tau_e^2}\right) \exp(-i\omega_0\tau + i\phi(z)) + \text{с.с.}, \quad (1)$$

где E_0 – амплитуда напряженности, τ_e – половинная длительность импульса по уровню e^{-1} квадра-

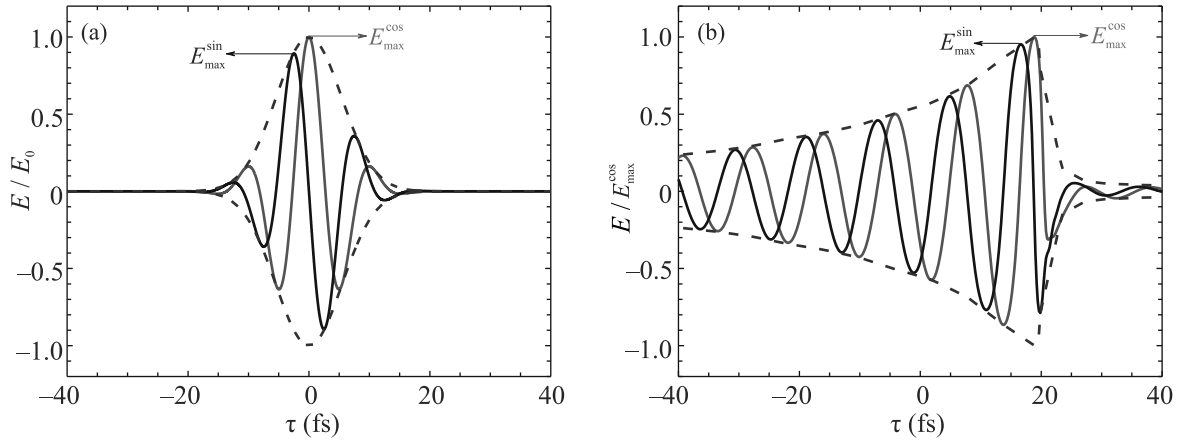


Рис. 1. (Цветной онлайн) Напряженность электрического поля $E(\tau)$ на центральной длине волны $\lambda_0 = 3350$ нм: (а) – в гауссовом импульсе, длительность τ_e которого равна периоду осцилляций T_0 , и (б) – в сформированной в LiF световой пуле. Красная кривая – косинус-мода ($\phi = \pi m$), черная кривая – синус-мода ($\phi = \frac{\pi}{2} + \pi m$)

та модуля амплитуды, $\phi(z) = \omega_0(\frac{1}{v_{ph}} - \frac{1}{v_g})z$ – фаза гармонической несущей, $v_{ph} = c/n(\omega_0)$ – фазовая скорость, $v_{gr} = c/[n(\omega_0) + \omega_0 \frac{\partial n}{\partial \omega}|_{\omega_0}]$ – групповая скорость, $n(\omega)$ – показатель преломления среды.

Фаза $\phi(z)$ определяет положение гармонической несущей светового поля относительно максимума огибающей при распространении с групповой скоростью v_g на расстояние z . При $\phi(z) = \pi m$ ($m \in \mathbb{Z}$) максимум оптических осцилляций несущей совпадает с максимумом огибающей – формируется косинус-мода импульса, а при $\phi(z) = \frac{\pi}{2} + \pi m$ – синус-мода, при которой поле обращается в нуль в максимуме огибающей (рис. 1а). Таким образом, различие фазовой и групповой скоростей приводит к периодической смене косинус- и синус-моды при распространении импульса через каждый пройденный отрезок Δz :

$$\Delta z = \frac{\lambda_0 v_g}{2n(\omega_0)(v_{ph} - v_g)} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial n}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda_0} \right)^{-1}, \quad (2)$$

где $\lambda_0 = c/T_0$ – длина волны несущей, $T_0 = 2\pi/\omega_0$ – ее период. Период Δz определяется материальной дисперсией среды и, как правило, составляет от 10 до 100 мкм, например, в LiF при $\lambda_0 = 3350$ нм $\Delta z \approx 30$ мкм [6].

Как видно из (1), величина максимальной амплитуды электрического поля импульса $E_{\max}(z) = \max_{\tau} (|E(\tau, z)|)$ определяется фазой $\phi(z)$. В косинус-моду величина максимальной амплитуды $E_{\max}^{\cos} = E_{\max}(\phi = \pi m)$ совпадает со значением E_0 . В синус-моду максимум гармонической несущей сдвинут на четверть периода относительно максимума огибающей, и величина максимальной амплитуды $E_{\max}^{\sin} = E_{\max}(\phi = \frac{\pi}{2} + \pi m)$ становится в

эксп $(-T_0^2/32\tau_e^2)$ раз меньше E_0 . Отличие максимальных амплитуд напряженности электрического поля в косинус- и синус-моду импульса резко возрастает с уменьшением в нем числа оптических осцилляций и наиболее существенно для одноцикловых импульсов $\tau_e \leq T_0$.

Параметром, определяющим изменение максимальной амплитуды при периодической смене косинус- и синус-моды импульса, является глубина модуляции G_E квадрата напряженности поля E_{\max}^2 , равная:

$$G_E = \frac{E_{\max}^2(\phi = \pi m) - E_{\max}^2(\phi = \frac{\pi}{2} + \pi m)}{E_{\max}^2(\phi = \pi m) + E_{\max}^2(\phi = \frac{\pi}{2} + \pi m)}. \quad (3)$$

На рисунке 2а сплошной кривой представлена зависимость G_E от отношения τ_e/T_0 , характеризующего число периодов колебаний светового поля, укладываемых под огибающей импульса. Видно, что при $\tau_e/T_0 = 0.3$ глубина модуляции G_E составляет более 30% и падает до величины $G_E = 3\%$ при $\tau_e/T_0 = 1$. Следует отметить, что полученная зависимость не зависит от несущей длины волны λ_0 и определяется только отношением τ_e/T_0 .

Периодическое изменение максимальной амплитуды $E_{\max}(z)$ при распространении импульса приводит к пространственной модуляции нелинейно-оптического воздействия светового поля на диэлектрик. При достаточной величине амплитуды светового поля фотоионизация среды приведет к формированию плазменного канала, концентрация электронов $N_e(z)$ в котором без учета процессов рекомбинации вычисляется интегрированием уравнения:

$$\frac{\partial N_e(z, \tau)}{\partial \tau} = W_F \left(1 - \frac{N_e}{N_0} \right) + W_A N_e, \quad (4)$$

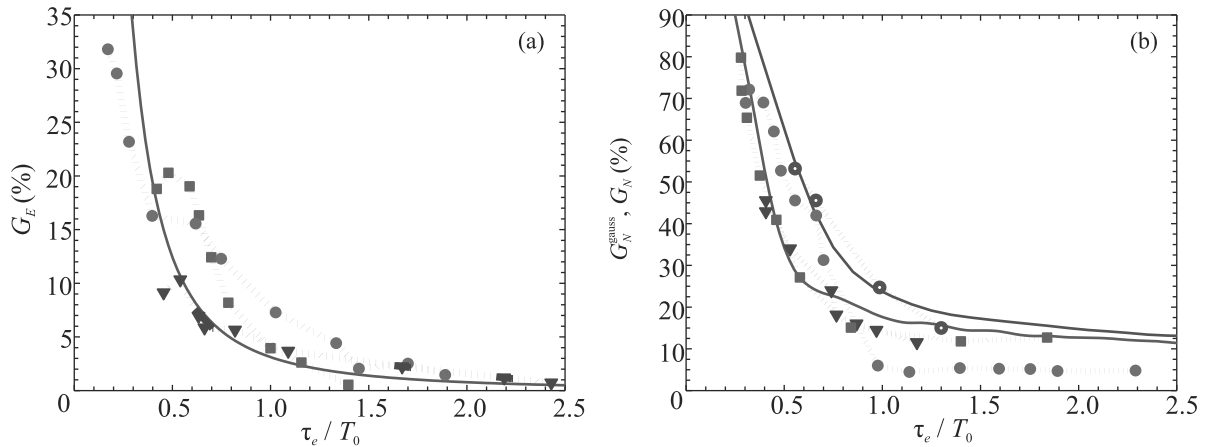


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость (3) глубины модуляции G_E квадрата максимальной напряженности E_{max}^2 электрического поля гауссова импульса (сплошная кривая) и численно рассчитанных световых пуль (символы) на различных длинах волн в LiF от количества периодов поля T_0 под огибающей с длительностью τ_e . (б) – Зависимость глубины модуляции G_N концентрации электронов (аналогично (3)) в плазменном канале от количества периодов поля под огибающей. Сплошные кривые – аналитическая оценка для модельного гауссова импульса для LiF ($\lambda_0 = 3350$ нм) (черная кривая) и SiO₂ ($\lambda_0 = 2600$ нм) (сиреневая кривая), символы – результаты численного моделирования плазменных каналов световых пуль в LiF и SiO₂. Приведены результаты моделирования в LiF на длинах волн 3100 нм (синие треугольники), 3350 нм (зеленые квадраты), 4000 нм (розовые круги) и в SiO₂ на длине волны 2600 нм (сиреневые пустые круги)

где N_0 – концентрация нейтральных атомов, W_F и W_A – соответственно скорости фото- и лавинной ионизации среды, монотонно зависящие от амплитуды действующего светового поля [18]. Следовательно, профиль концентрации электронов $N_e(z)$ в введенном плазменном канале также будет иметь пространственную модуляцию с периодом Δz , “отслеживая” периодическую смену косинус- и синус-мод импульса. Глубина модуляции концентрации электронов G_N^{gauss} определяется выражением, аналогичным (3). На рисунке 2b сплошными кривыми изображены зависимости глубины модуляции G_N^{gauss} концентрации электронов в плазменном канале от отношения τ_e/T_0 действующего гауссова импульса в LiF на длине волны $\lambda_0 = 3350$ нм и в SiO₂ на $\lambda_0 = 2600$ нм. Амплитуда импульса E_0 соответствовала интенсивности, характерной для одноциклового СП $I = 5 \cdot 10^{14}$ Вт/см². В диапазоне изменения центральной длины волны импульса от 2500 до 4000 нм, полученная зависимость $G_N^{\text{gauss}}(\tau_e/T_0)$ практически не зависит от центральной длины волны импульса λ_0 и ставит однозначное соответствие между глубиной модуляции G_N и отношением τ_e/T_0 . Это позволяет по профилю концентрации электронов $N_e(z)$ определять длительность огибающей и фазу несущей для одноцикловых импульсов в случае $\tau_e \leq T_0$ в рассмотренном спектральном диапазоне. Видно, что при $\tau_e < T_0$ глубина модуляции G_N^{gauss} концентра-

ции электронов резко возрастает, достигая значения $G_N^{\text{gauss}} = 35\%$ при $\tau_e/T_0 = 0.5$ и $G_N^{\text{gauss}} = 90\%$ при $\tau_e/T_0 = 0.25$. С увеличением длительности импульса τ_e до периода осцилляций T_0 глубина модуляции G_N^{gauss} падает до 20% и мало меняется с дальнейшим ростом τ_e , сокращаясь до величины $G_N^{\text{gauss}} = 15\%$ при $\tau_e/T_0 = 2$, что ограничивает точность определения длительности импульса по глубине модуляции плазменного канала в случае $\tau_e > T_0$.

Обобщим установленную закономерность на СП, формирующиеся при филаментации фемтосекундных лазерных импульсов в объеме прозрачной среды в условиях АДГС. Распределение напряженности электрического поля на оси пучка $E(r = 0, z, \tau)$ СП (рис. 1b), полученное в результате решения однонаправленного уравнения распространения импульсного излучения [19] на центральной длине волны 3350 нм в LiF средствами компьютерного кода [20], качественно отличается от поля гауссова импульса (рис. 1a). Спектр СП является существенно уширенным вследствие генерации высших гармоник и суперконтинуума [21]. Определим огибающую СП, как гладкую кривую, проходящую через максимумы модуля напряженности электрического поля $E(r = 0, \tau)$ на рассматриваемом расстоянии z , ее длительность τ_e , как половину временного интервала, на котором квадрат напряженности электрического поля на оси СП удовлетворяет условию:

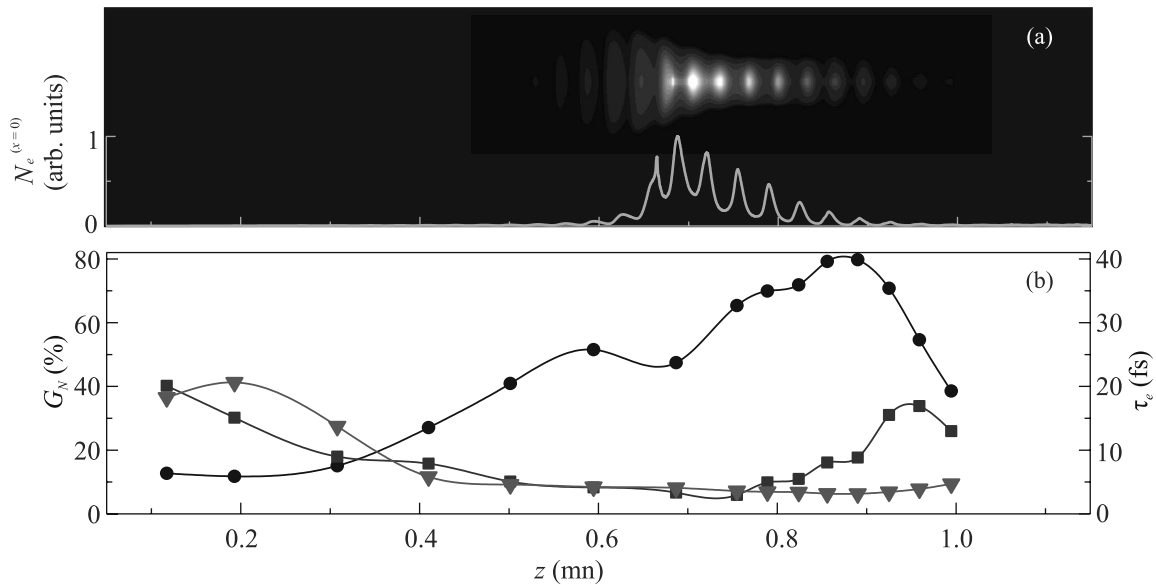


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Численно полученное распределение концентрации свободных электронов $N_e(x, z)$ в LiF при распространении СП на длине волны 3350 нм. Голубая кривая – профиль концентрации электронов на оси плазменного канала $N_e(x = 0, z)$. (б) – Изменение с расстоянием глубины модуляции $G_N(z)$ профиля концентрации свободных электронов (круглые символы), длительности СП $\tau_e(z)$, рассчитанной по профилю светового поля (квадратные символы), и по глубине модуляции плазменного канала $G_N(z)$ (треугольные символы)

$$|E|^2 \geq e^{-1} E_{\max}^2. \quad (5)$$

Такое определение длительности световой пули соответствует длительности τ_e огибающей гауссова импульса (1).

Максимум напряженности электрического поля E_{\max} на оси СП периодически меняется вдоль ее распространения вследствие сдвига фазы несущей относительно огибающей, как и в гауссовом импульсе. На расстоянии z_1 сдвиг фазы несущей относительно огибающей в СП обращается в нуль ($\phi = \pi m$), где $E_{\max} = E_{\max}^{\cos}$ достигает максимума (косинус-мода СП), и равен $\phi = \frac{\pi}{2} + \pi m$ на расстоянии z_2 , где $E_{\max} = E_{\max}^{\sin}$ – минимально (синус-мода СП) (рис. 1b). Глубина модуляции G_E максимального значения квадрата напряженности электрического поля E_{\max}^2 , определяемая по (3), для численно рассчитанных СП на центральных длинах волн λ_0 начального фемтосекундного импульса, равных 3100, 3350 и 4000 нм, представлена на рис. 2а различными символами. Серии значений G_E для каждой длины волны λ_0 на рис. 2а соответствуют различной длительности импульса, изменяющейся в процессе его самокомпрессии и распространения сформировавшейся СП в LiF. Видно, что глубина модуляции E_{\max}^2 в сжимающемся импульсе при формировании СП возрастает с уменьшением длительности τ_e , качественно и количественно соответствуя зависимости $G_E(\tau_e/T_0)$, полученной для гауссова импульса.

Влияние модуляции E_{\max}^2 в СП на распределение концентрации свободных электронов $N_e(x, z)$ в плазменном канале СП иллюстрирует рис. 3а. Здесь представлено в LiF на центральной длине волны $\lambda_0 = 3350$ нм рассчитанное распределение, проинтегрированное по одной из поперечных координат: $N_e(x, z) = \int N_e(r, z) dy$, что обеспечивает прямое сравнение численных результатов с экспериментальными. В распределении $N_e(x, z)$ отчетливо видны регулярные осцилляции, вызванные периодической сменой косинус- и синус-моды одноциклового СП. Голубой линией на рис. 3а изображен профиль концентрации электронов $N_e(x = 0, z)$ на оси плазменного канала. На рисунке 3б черной кривой с круглыми символами изображена глубина модуляции $G_N(z)$, рассчитанная аналогично (3) как отношение разности соседних локальных максимумов профиля концентрации электронов к их сумме, а синей кривой с квадратными символами – длительность СП $\tau_e(z)$, определенная по (5) на протяжении существования СП и плазменного канала. Сопоставляя значения $G_N(z)$ и $\tau_e(z)$, получим зависимость $G_N(\tau_e/T_0)$ для СП в различных точках z плазменного канала (рис. 2б – квадратные точки). Аналогичные расчетные зависимости $G_N(\tau_e/T_0)$ для СП на длинах волн $\lambda_0 = 3100$ и 4000 нм изображены на рис. 2б треугольными и круглыми символами, соответственно. Видно, что глубина модуляции $G_N(\tau_e/T_0)$ плазмен-

ных каналов СП различных длин волн хорошо согласуется с зависимостью $G_N^{\text{gauss}}(\tau_e/T_0)$, полученной для гауссова импульса. Таким образом, зависимость $G_N^{\text{gauss}}(\tau_e/T_0)$ для гауссова импульса может быть использована для определения длительности одноциклового импульса среднего ИК диапазона, записывающего информацию о фазовых соотношениях светового поля и его огибающей в пространственной структуре индуцированных плазменных каналов в среде. Длительность импульса τ_e , определенная по глубине модуляции плазменного канала СП в различных точках z из аналитической зависимости $G_N^{\text{gauss}}(\tau_e/T_0)$, приведена на рис. 3b (треугольные символы). Полученные значения τ_e находятся в хорошем соответствии со значениями длительности СП, рассчитанными по профилю напряженности светового поля $E(r=0, \tau, z)$ (5) (рис. 3b, квадратные символы).

Сплошные кривые на рис. 2 являются градуировочными зависимостями для определения длительности соответственно гауссова импульса и СП одноциклового длительности по измеренной глубине модуляции, наведенной концентрации электронов или ЦО. Из приведенных кривых видно, что при длительности $\tau_e < 0.5T_0$ чувствительность предложенного способа снижается и значительные изменения модуляции слабо влияют на величину определяемой длительности. С другой стороны, при $\tau_e > 1.5T_0$ глубина модуляции мала и погрешность в определении длительности существенно возрастает.

Экспериментально глубина модуляции возмущений, наведенных СП, регистрировалась по трекам ЦО, формируемых в одноимпульсном режиме при распространении СП в LiF. Люминесценция микроструктуры из долгоживущих ЦО в LiF, сформированной при многофотонном воздействии фемтосекундного лазерного импульса, отражает распределение напряжения светового поля в СП [22]. Она столь интенсивна, что созданные при воздействии всего одного фемтосекундного импульса микроструктуры могут быть легко зарегистрированы и исследованы после записи при подсветке слабым излучением в полосе их поглощения. Пространственное распределение интенсивности люминесценции структур ЦО, наведенных в образце одноцикловыми СП, фотографировалось на ПЗС камеру с помощью микроскопа при подсветке непрерывным излучением на длине волны 450 нм [22]. Интенсивность свечения трека в LiF напрямую определяется концентрацией ЦО, записанных в процессе взаимодействия с высокоинтенсивным лазерным импульсом. На рисунке 4 представлены картины люминесценции треков ЦО в LiF, записанные СП на длинах волн 3100, 3350

и 4000 нм. На профилях люминесценции отчетливо видна модуляция, свидетельствующая о периодической смене косинус- и синус-мод светового поля СП. Глубина модуляции $G_N(z)$ профилей люминесценции ЦО, рассчитанная аналогично (3) как отношение разности соседних локальных максимумов профиля, приведена круглыми символами на рис. 4b, d, f, соответственно.

Используя зависимость глубины модуляции $G_N^{\text{gauss}}(\tau_e/T_0)$ от длительности τ_e , установленную для гауссова импульса (сплошная кривая рис. 2b), определена длительность $\tau_e(z)$ СП по значениям $G_N(z)$, полученным экспериментально (рис. 4b, d, f, треугольные символы). Полученная минимальная длительность τ_e СП составляет 6.5 фс (4.5 фс HWHM) на длине волны 3150 нм, 5.3 фс (3.7 фс HWHM) на 3350 нм и 5.9 фс (4 фс HWHM) на 4000 нм, что составляет менее одного периода колебаний светового поля T_0 .

Для апробации предлагаемого способа определена длительность СП в плавленом кварце, которая ранее измерялась автокорреляционным [23], кросс-корреляционным [24] и спектральной интерферометрии [25] методами. Профиль трека плазменного канала, зарегистрированного при одноимпульсной экспозиции излучения в плавленом кварце на длине волны 2600 нм, приведен на рис. 5. Так же как интенсивность люминесценции трека ЦО, интенсивность свечения плазменного трека в диэлектрике напрямую определяется концентрацией свободных электронов, появившихся в процессе фотоионизации среды излучением. Поэтому анализ свечения плазменного канала позволяет получить информацию о распределении концентрации свободных электронов в среде для сравнения с аналитической зависимостью $G_N^{\text{gauss}}(\tau_e/T_0)$ для SiO₂, приведенной на рис. 2b.

Глубина модуляции профиля на рассматриваемом промежутке увеличивается от 8 до 24 %, что при восстановлении длительности импульса с использованием аналитической кривой (сплошная кривая рис. 2b), соответствует его компрессии до $0.97T_0$. Таким образом, длительность СП, сформированной в плавленом кварце, составляет $\tau_e = 8.4$ фс (5.8 фс HWHM), что находится в хорошем соответствии с результатами, полученными в [25].

Предложенный способ позволяет оценить длительность одноциклового светового пули среднего инфракрасного диапазона по глубине модуляции плазменных каналов или треков центров окраски, регистрируемых при одноимпульсной экспозиции при распространении фемтосекундных лазерных импульсов в прозрачном диэлектрике. Способ при-

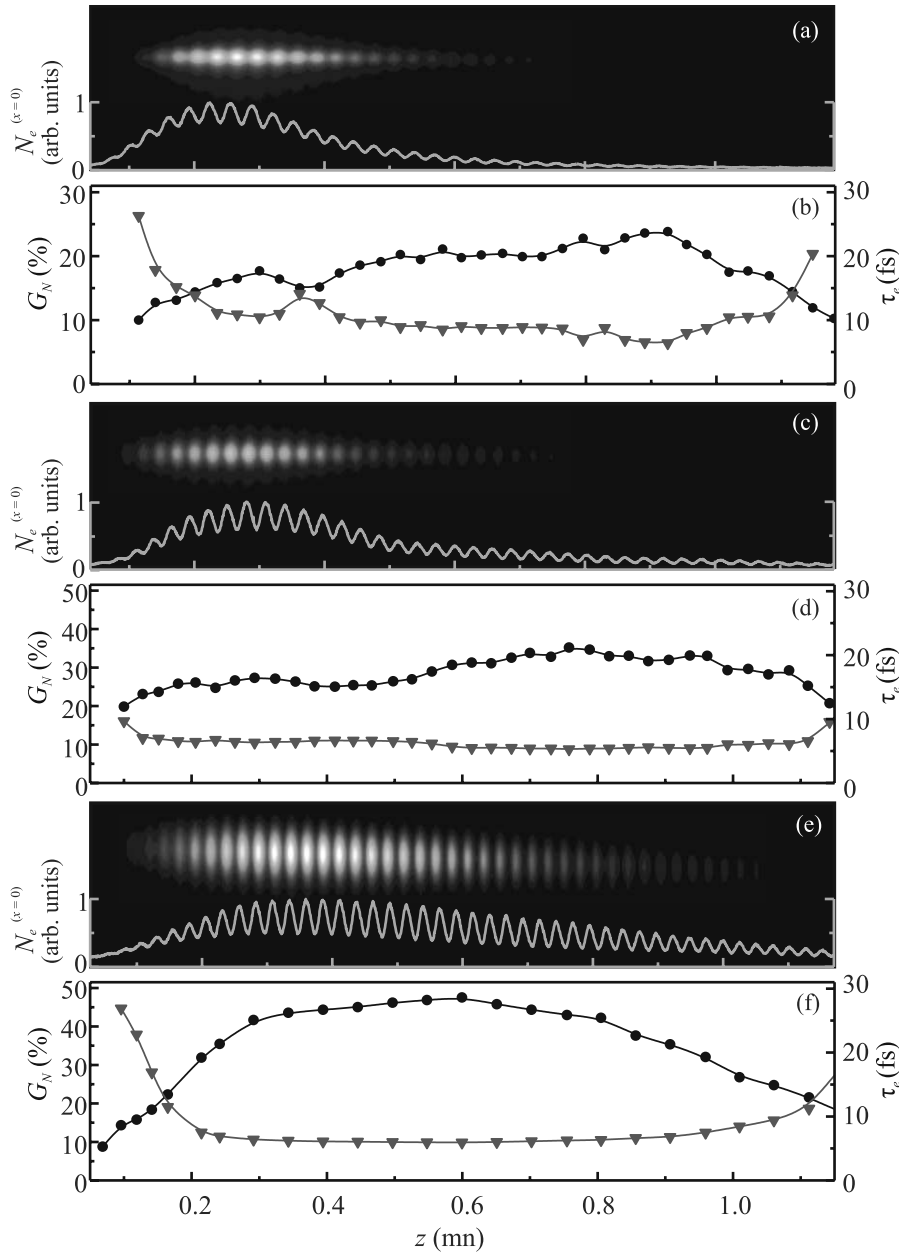


Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментально зарегистрированные при одноимпульсной экспозиции картины люминесценции треков ЦО в LiF и профили люминесценции на оси (a), (c), (e). Изменение с расстоянием глубины модуляции трека (круглые символы) и длительности волнового пакета τ_e (треугольные), восстановленной с помощью рисунка 2b (b), (d), (f). Длины волн: (a), (b) – 3150 нм, (c), (d) – 3350 нм, (e), (f) – 4000 нм

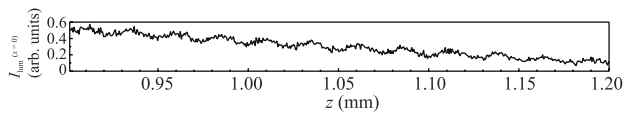


Рис. 5. Профиль свечения экспериментально зарегистрированного плазменного канала в плавленом кварце, наведенного световой пучкой на длине волны 2600 нм

меним для световых пучек, длительность которых составляет менее одного периода оптических осцилляций. Преимуществом представленного способа является простота схемы регистрации треков, отражающих периодическую смену косинус- и синус-мод одноцикловой световой пучки, а также отсутствие сложной математической обработки для восста-

новления фазовых соотношений светового поля и огибающей импульса.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 18-12-00422, Е. Д. Залозная благодарит фонд развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. E. Goulielmakis, M. Schultze, M. Hofstetter, V. S. Yakovlev, J. Gagnon, M. Uiberacker, A. Aquila, E. M. Gullikson, D. Attwood, R. Kienberger, F. Krausz, and U. Kleineberg, *Science* **320**, 1614 (2008).
2. S.-H. Chia, G. Cirimi, S. Fang, G. M. Rossi, O. D. Mücke, and F. X. Kärtner, *Optica* **1**, 315 (2014).
3. A. Wirth, M. T. Hassan, I. Grguraš, J. Gagnon, A. Moulet, T. T. Luu, S. Pabst, R. Santra, Z. A. Alahmed, A. M. Azzeer, V. S. Yakovlev, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Science* **334**, 195 (2011).
4. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
5. T. Brabec and F. Krausz, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 545 (2000).
6. E. Zaloznaya, V. Kompanets, A. Savvin, A. Dormidonov, S. Chekalin, and V. Kandidov, *Laser Phys. Lett.* **19**, 075402 (2022).
7. D. J. Kane and R. Trebino, *IEEE J. Quantum Electron.* **29**, 571 (1993).
8. C. Iaconis and I. A. Walmsley, *Opt. Lett.* **23**, 792 (1998).
9. S. Qu, G. Chaudhary Nagar, W. Li, K. Liu, X. Zou, S. Hon Luen, D. Dempsey, K.-H. Hong, Q. Jie Wang, Y. Zhang, B. Shim, and H. Liang, *Opt. Lett.* **45**, 2175 (2020).
10. G. Fan, T. Balčiūnas, C. Fourcade-Dutin, S. Haessler, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, F. Gérôme, F. Benabid, A. Baltuška, and T. Witting, *Opt. Express* **24**, 12713 (2016).
11. И. В. Савицкий, Е. А. Степанов, А. А. Ланин, А. А. Воронин, Е. Е. Серебрянников, А. А. Иванов, М. Ху, Я. Ли, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 437 (2022).
12. E. M. Kosik, A. S. Radunsky, I. A. Walmsley, and C. Dorrer, *Opt. Lett.* **30**, 326 (2005).
13. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 22 (2020).
14. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, А. А. Воронин, М. В. Рожко, П. Б. Глек, М. М. Назаров, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 304 (2021).
15. Y. Silberberg, *Opt. Lett.* **15**, 1282 (1990).
16. В. П. Кандидов, Е. Д. Залозная, А. Е. Дормидонов, В. О. Компанец, С. В. Чекалин, *Квантовая электроника* **52**, 233 (2022).
17. Е. Д. Залозная, А. Е. Дормидонов, В. О. Компанец, С. В. Чекалин, В. П. Кандидов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 817 (2021).
18. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964).
19. M. Kolesik and J. V. Moloney, *Phys. Rev. E* **70**, 036604 (2004).
20. V. Yu. Fedorov, M. Chanal, D. Grojo, and S. Tzortzakis, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 043902 (2016).
21. S. V. Chekalin, A. E. Dormidonov, V. O. Kompanets, E. D. Zaloznaya, and V. P. Kandidov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, A43 (2019).
22. S. V. Chekalin, V. O. Kompanets, A. V. Kuznetsov, A. E. Dormidonov, and V. P. Kandidov, *Laser Phys. Lett.* **13**, 065401 (2016).
23. E. O. Smetanina, V. O. Kompanets, A. E. Dormidonov, S. V. Chekalin, and V. P. Kandidov, *Laser Phys. Lett.* **10**, 105401 (2013).
24. D. Majus, G. Tamošauskas, I. Gražulevičiūtė, N. Garejev, A. Lotti, A. Couairon, D. Faccio, and A. Dubietis, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 193901 (2014).
25. M. Durand, A. Jarnac, A. Houard, Y. Liu, S. Grabielle, N. Forget, A. Durécue, A. Couairon, and A. Mysyrowicz, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 115003 (2013).

Half-metallic ferromagnetism in Co doped CdS diluted magnetic semiconductor¹⁾

D. Saikia^{+ 2)}, Sugam Parnami, J. P. Borah**

⁺ *Department of Physics, Duliajan College, Dibrugarh, 786602 Duliajan, Assam, India*

^{*} *Department of Physics, National Institute of Technology Nagaland, Chumukedima, 797103 Dimapur, Nagaland, India*

Submitted 17 August 2022
Resubmitted 24 August 2022
Accepted 25 August 2022

DOI: 10.31857/S1234567822190053, EDN: khsmvq

In the present study, magnetic properties of Co doped CdS has been investigated by first principle calculations using GGA + U approximation. The study reveals the ferromagnetic ordering of Co doped CdS at lower concentrations of Co, whereas, at higher concentrations, the antiferromagnetic interactions dominate. The observed ferromagnetic nature in the present study is not due to the presence of any secondary phases as confirmed by the purity of phase revealed in XRD spectra [1]. The magnetic dipoles located on the surface of the nanoparticles having higher surface-to-volume ratio play a crucial role in the formation of the ferromagnetic state. At lower concentrations of Co, a large number of magnetic dipoles are located at the surface of the nanoparticles which tends neighboring dipoles align in the same direction. Subsequently, a prominent ferromagnetic nature is observed for the nanoparticles [2, 3].

The electronic structures reveal the half metallic character with spin up state being semiconducting and spin down state being metallic signifying 100 % spin polarization [4]. The corresponding density of states of the Co doped CdS system shows reasonable p - d hybridization at Fermi level between d states of Co ions and p states of S ions, which implies half metallic ferromagnetism of CdS induced by Co. The estimated de-

fect formation energy of Co doped CdS was found to be -1.10 eV, indicating that the dopant is easily incorporated into the host lattice. The smaller value of formation energy promises superior stability and indicates that Co doped CdS can be easily fabricated experimentally [5].

This is an excerpt of the article “Half-metallic ferromagnetism in Co doped CdS diluted magnetic semiconductor”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601725

-
1. S. Kumar, C. L. Chen, C. L. Dong, Y. K. Ho, J. F. Lee, T. S. Chan, R. Thangavel, T. K. Chen, B. H. Mok, S. M. Rao, and M. K. Wu, *J. Alloy. Compd.* **554**, 357 (2013).
 2. B. Poornaprakash, D. A. Reddy, G. Murali, R. P. Vijayalakshmi, and B. K. Reddy, *Physica E* **73**, 63 (2015).
 3. G. Murali, D. A. Reddy, B. Poornaprakash, R. P. Vijayalakshmi, B. K. Reddy, and R. Venugopal, *Physica B* **407**, 2084 (2012).
 4. S. F. Rabbani and I. B. Shameem Banu, *Comput. Mater. Sci.* **101**, 281 (2015).
 5. H. Q. Xie, L. J. Tang, J. L. Tang, and P. Peng, *J. Magn. Mater.* **377**, 239 (2015).

¹⁾Supplementary materials are available for this article at DOI: 10.1134/S0021364022601725 and are accessible for authorized users.

²⁾e-mail: dipraj.saikia7@gmail.com

Критическая температура наноструктуры сверхпроводник/ферромагнетик вблизи магнитного скирмиона

В. А. Туманов¹⁾, В. Е. Зайцева, Ю. Н. Прошин

Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2022 г.

После переработки 26 августа 2022 г.

Принята к публикации 27 августа 2022 г.

Рассмотрен контакт сверхпроводника с киральным ферромагнетиком, содержащим сложные магнитные структуры: спиральную или коническую текстуру, скирмион, киральный поплавок. Более подробно рассмотрен случай одиночного скирмиона. Влияние таких магнитных неоднородностей на критическую температуру становится существенным только для спиновых структур масштаба порядка 100 нм и ниже. Решетки скирмионов и одиночные скирмионы такого размера недавно наблюдались экспериментально в тонких магнитных слоях. В рамках теории эффекта близости в грязном пределе предлагается приближенный подход, позволяющий рассчитывать критическую температуру в таких системах. Значительное влияние наноразмерных спиновых вихрей на критическую температуру в сочетании с топологической устойчивостью и малой плотностью тока, необходимой для их движения, позволяет эффективно использовать такие системы в качестве сверхпроводящих спиновых вентиляей.

DOI: 10.31857/S1234567822190065, EDN: khvfw

Контакт сверхпроводника (S) с ферромагнитным металлом (F) весьма привлекателен для исследования из-за возможности сосуществования ферромагнитного и сверхпроводящего упорядочения в пределах одного образца [1–7]. Теоретически и экспериментально исследуется возможность применения таких систем в сверхпроводящей микроэлектронике [8–10]. Куперовские пары при этом проникают в однородный ферромагнитный слой на относительно небольшую глубину порядка $\sqrt{D_f/I}$, где D_f – коэффициент диффузии в ферромагнетике, I – эффективное обменное поле. Обменное взаимодействие сверхпроводящих электронов с электронами в магнетике вызывает при этом большое количество интересных и практически важных явлений. В частности, в последние годы возрос интерес к изучению эффекта близости сверхпроводника с киральным магнетиком, в котором возможно существование стабильных магнитных скирмионов. Такой интерес обусловлен, в числе прочего, наблюдением в ряде экспериментальных работ [11–13] магнитных вихрей размером несколько нанометров [14]. В отличие от магнитных неоднородностей микронного масштаба, такие магнитные структуры оказывают существенное влияние на термодинамические и транспортные свойства S/F систем. Так, например, эффект близости сверхпроводника с киральным ферромагнетиком в геликои-

дальной фазе обсуждается в работах [15, 16]. Влияние сверхпроводника на стабильность скирмиона в S/F системе рассмотрено в работе [17]. В работе [18] изучена возможность образования вихря Абрикосова в сверхпроводнике на фоне скирмиона неелевского типа в ферромагнитном слое с учетом спин-орбитального взаимодействия. Связанное состояние скирмиона и вихря рассмотрено в работе [19] и показано, что при определенных условиях возможно смещение вихря относительно центра скирмиона. В работе [20], в числе прочих результатов, методом конечных элементов рассчитано распределение сверхпроводящего тока в S/F/S системе, содержащей скирмион. Теория эффекта близости в S/F системах, содержащих магнитные неоднородности, хорошо разработана [1–3], однако многие трехмерные задачи сложны в техническом отношении. Одна из таких задач – это вычисление критической температуры S/F системы, содержащей магнитный вихрь или доменную стенку [21, 22]. В данной работе мы предлагаем приближенный подход к решению подобных задач. Подход основан на переходе к новому базису путем унитарного преобразования в пространстве спина коллективизированного электрона. Как было показано ранее [23], такой подход можно применить к гамильтониану в приближении эффективного обменного поля, в данной работе мы применим унитарное преобразование к уравнениям Узаделя, полученным в работе [24] для неоднородной по направлению намагни-

¹⁾e-mail: tumanvadim@yandex.ru

ченности. Далее рассмотрим слой сверхпроводника и ферромагнетика в грязном пределе, когда длины когерентности в сверхпроводнике и ферромагнетике $\xi_{s(f)}$ значительно превышают соответствующие длины свободного пробега $l_{s(f)}$ [1, 3]. Уравнение Узаделя в этом случае для ферромагнитного слоя при произвольно направленной в пространстве намагниченности можно записать в виде [24]

$$\frac{D_f}{2} \hat{\nabla}^2 \hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega) - |\omega| \hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega) - \frac{i}{2} \text{sgn} \omega \left\{ (\mathbf{I}, \hat{\sigma}), \hat{F}_f(\mathbf{r}, \omega) \right\} = 0, \quad (1)$$

$$(\mathbf{I}, \hat{\sigma}) = I \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) e^{-i(\varphi)} \\ \sin(\theta) e^{i(\varphi)} & -\cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где \hat{F} – матричная функция Узаделя, D_f – коэффициент диффузии в ферромагнитном слое, \mathbf{I} – эффективное обменное поле, ω – мацубаровская частота. Δ – сверхпроводящий параметр порядка. θ и φ – полярный и азимутальный углы, определяющие направление намагниченности. Здесь и далее для простоты принято, что $k_B = \mu_B = \hbar = 1$, где k_B – постоянная Больцмана, μ_B – магнетон Бора.

Совершим локальный поворот в спиновом базисе:

$$\hat{F}(\mathbf{r}, \omega) = \hat{U}^{-1} \tilde{F}(\mathbf{r}, \omega) \hat{U}, \quad (3)$$

где \hat{U} – унитарная матрица поворота, выбранная таким образом, что $\hat{U}(\mathbf{I}, \hat{\sigma}) \hat{U}^{-1} = I \hat{\sigma}_z$ имеет вид

$$U = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{i\gamma} & \sin(\theta/2) e^{i(\gamma-\varphi)} \\ -\sin(\theta/2) e^{-i(\gamma-\varphi)} & \cos(\theta/2) e^{-i\gamma} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

а $\gamma(\mathbf{r})$ – произвольная действительная функция координат. Произвольность $\gamma(\mathbf{r})$ отвечает инвариантности уравнения относительно локальных поворотов вокруг оси z в пространстве спина коллективизированного электрона. Для преобразованной матричной функции Узаделя \tilde{F} уравнение принимает вид

$$\frac{D_f}{2} \tilde{D}^2 \tilde{F}(\mathbf{r}, \omega) - |\omega| \tilde{F}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{iI}{2} \text{sgn} \omega \left\{ \tilde{F}(\mathbf{r}, \omega), \hat{\sigma}_z \right\} = 0. \quad (5)$$

Удлиненная производная \tilde{D} в данном случае определяется как $\tilde{D} \hat{f} = \nabla \hat{f} + [\hat{A}, \hat{f}]$, $\hat{A} = \hat{U} \nabla \hat{U}^{-1}$. Точно такой же вид она имеет для функций Грина в уравнениях Горькова. Преобразованием (3) уравнение (1) можно привести к виду (5) для произвольной зависимости направления намагниченности от координат.

В обобщенных граничных условиях Куприянова–Лукичева [25] градиент также заменяется на удлиненную производную. Приведем для примера граничные условия для двухслойной S/F системы

$$\frac{4D_s}{v_s \sigma_s} (\nabla \tilde{F}_s, \mathbf{n}) = \frac{4D_f}{v_f \sigma_f} (\tilde{D} \tilde{F}_f, \mathbf{n}) = \tilde{F}_f - \tilde{F}_s, \quad (6)$$

где $v_{s(f)}$ – скорости Ферми, $\sigma_{s(f)}$ – параметры прозрачности границы со стороны S и F слоя [3]. Нормаль в данном случае направлена из S в F слой. Отметим, что при наличии двух и более внутренних границ могут потребоваться повороты функции Узаделя вида (3) для согласования базиса в спиновом пространстве. На свободной границе ферромагнетика и сверхпроводника граничные условия имеют вид

$$(\nabla \tilde{F}_s, \mathbf{n}) = 0, \quad (\tilde{D} \tilde{F}_f, \mathbf{n}) = 0. \quad (7)$$

В краевую задачу также входит уравнение Узаделя в сверхпроводящем слое

$$\frac{D_s}{2} \nabla^2 \tilde{F}(\mathbf{r}, \omega) - |\omega| \tilde{F}(\mathbf{r}, \omega) = -\Delta_s \hat{1}. \quad (8)$$

Краевая задача должна быть дополнена уравнением самосогласования [1, 2]

$$\Delta_s \ln \left(\frac{T_c}{T_{cs}} \right) = \pi T_c \sum_{\omega > 0}^{\omega_D} \text{Tr} \left(\tilde{F}(x, \omega) - \frac{\Delta_s}{\omega} \right), \quad (9)$$

где T_{cs} – критическая температура уединенного сверхпроводника, ω_D – частота Дебая. Уравнение самосогласования оказывается инвариантным относительно унитарных преобразований функции \tilde{F} . В уравнениях (1), (7), (8) явно не учитывается магнитное поле, создаваемое ферромагнитным слоем. Внутри ферромагнитного слоя его вклад мал по сравнению с эффективным обменным полем. В сверхпроводящем слое его напряженность зависит от конфигурации намагниченности во всем образце, в том числе от намагниченности в значительном удалении от рассматриваемой области контакта. Как правило, поле, создаваемое достаточно тонкой ферромагнитной пленкой, слабо и, по мнению большинства авторов (см., например, работу [26] или обзоры [1–3]), в случае хорошего металлического контакта основное влияние на критическую температуру имеет проникновение куперовских пар в ферромагнетик. Нужно отметить однако, что при рассмотрении связанного состояния скирмиона и вихря Абрикосова магнитное поле играет очень важную роль [18, 19]. Таким образом в нашей модели не описываются контакты с сверхпроводниками 2 рода при магнитных полях выше H_{c1} .

Преобразования (3) позволяют значительно упростить краевую задачу для многих магнитных фаз, реализуемых в киральных магнетиках. Так, в частности, если ферромагнетик находится в геликоидальной фазе, волновой вектор которой направлен вдоль границы, все компоненты матричной функции Узаделя зависят только от координаты, перпендикулярной границе. В работе [24] такой подход позволил вычислить ток Джозефсона через слой неоднородного ферромагнетика. Критическая температура S/F системы для такой конфигурации намагниченности была вычислена ранее в работе [15] методом фундаментального решения [27]. Рассматривалась критическая температура при двух различных ориентациях магнитной спирали: вдоль и перпендикулярно границе. Разница критических температур зависела от толщин слоев и качества контакта, а также от периода магнитной спирали. Было показано, что критическая температура оказывается выше в случае расположения спирали вдоль границы. Наши результаты для такой системы, приведенные ниже (см., например, пунктирную и штрих-пунктирную кривые на рис. 1), согласуются с результатами работы [15], что усиливает доверие к использованию предложенного выше метода. Попробуем теперь найти критическую температуру контакта сверхпроводника с ферромагнетиком в конической фазе. Локальное унитарное преобразование в сочетании с произвольным выбором функции $\gamma(\mathbf{r})$ в (4) позволяет свести краевую задачу к одномерной системе уравнений второго порядка с постоянными коэффициентами. Дальнейшие расчеты производятся стандартным способом в приближении постоянного в пределах слоя параметра порядка [28–30]. Оно хорошо зарекомендовало себя за сочетание простоты и хорошего совпадения с более строгим подходом фундаментального решения [27]. Полученная функция Узаделя подставляется в уравнение самосогласования (9), которое решается численно. Приведем зависимость критической температуры двухслойной S/F системы от толщины ферромагнетика для различных ориентаций намагниченности в ферромагнетике относительно S/F границы. Наряду с уже изученными случаями магнитного геликоида, волновой вектор которого направлен нормально к S/F границе или лежит в ее плоскости [15], мы рассмотрели коническую фазу с полярным углом $\pi/6$ (см. рис. 1). Набор использованных параметров теории, выбранных нами в качестве примера, близок к экспериментальным параметрам, полученным в работе [31] для контакта ванадия ($T_{cs} = 5.4$) и железа с характерным значением эффективного обменного поля I порядка 1000 К.

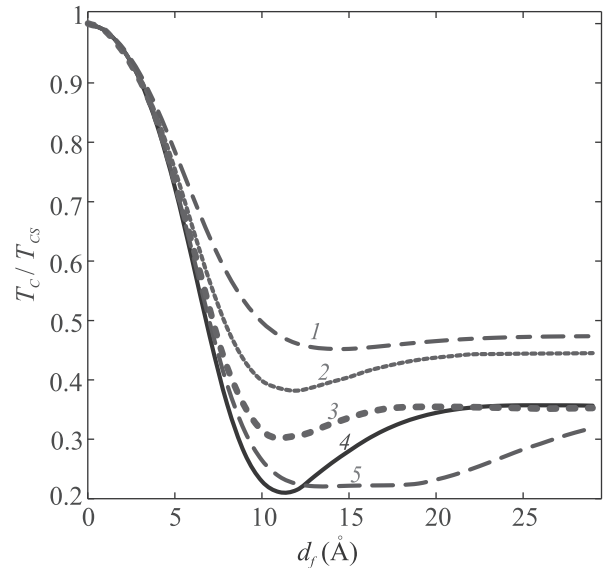


Рис. 1 (Цветной онлайн) Зависимость критической температуры S/F контакта для некоторых геометрий геликоидальной и конической фазы от толщины ферромагнитного слоя d_f . Кривая 1 соответствует геликоидальной намагниченности ферромагнитного слоя, волновой вектор магнитной структуры направлен вдоль S/F границы; 2 – коническая фаза, волновой вектор вдоль границы; 3 – коническая фаза, волновой вектор перпендикулярен границе; 4 – однородная намагниченность; 5 – геликоидальная намагниченность, волновой вектор перпендикулярен границе. Период магнитных текстур $L_D = 52 \text{ \AA}$. Параметры системы: толщина сверхпроводящего слоя $d_s = 113.5 \text{ \AA}$, $l_s = 120 \text{ \AA}$, $\xi_s = 125 \text{ \AA}$, $2I\tau_f = 0.3$, где τ_f – время свободного пробега в ферромагнетике, $\sigma_s = 6$, $n_{sf} = (v_s N_s)/(v_f N_f) = 4$, где $N_{s(f)}$ – плотность состояний на поверхности Ферми

Вычисление критической температуры S/F системы с произвольной конфигурацией намагниченности представляет собой в общем случае существенно более сложную задачу. Для таких спиновых текстур, как магнитные вихри и доменные стенки, уравнение (1) не сводится к уравнению с постоянными коэффициентами преобразованием вида (3). Однако, преобразованная функция Узаделя значительно слабее меняется по фазе вдоль S/F границы. Это связано с тем, что фаза компонент функций Узаделя задается преимущественно направлением намагниченности и толщиной ферромагнитного слоя на данном участке границы. Для модифицированной функции $\tilde{F}(\mathbf{r}, \omega)$ направление намагниченности всегда одинаково в силу определения. Это позволяет нам применить для оценки критической температуры системы приближенный подход. Иерархия слагаемых в уравнении (5) достаточно сложна. Наибольшими слагаемыми,

как правило, являются член со второй производной от функции Узаделя (в перпендикулярном направлении к границе) и выражение, содержащее произведение эффективного обменного поля с функцией Узаделя. Для наиболее значимых в уравнении самосогласования слагаемых, отвечающих небольшим мацубровским частотам, соответствующее слагаемые в уравнении (5) также не слишком велики. Прочие слагаемые в составе удлиненной производной являются поправками по отношению к главным слагаемым для практически реализуемых скирмионов. Изменение в функции Узаделя в плоскости границы в этом случае обусловлено изменением этих поправок от точки к точке. Соответствующие градиенты в силу выше сказанного достаточно малы, особенно для крупных скирмионов ($r \gg \xi_s$). Можно предложить также оценку из более общих соображений, подходящую для мелкомасштабных магнитных вихрей. Сверхпроводящий параметр порядка в толще сверхпроводника может существенно меняться на расстояниях, превышающих сверхпроводящую длину когерентности ξ_s . Тогда, в силу уравнения самосогласования и граничных условий (7), функция Узаделя в ферромагнитном слое меняется по модулю в плоскости границы столь же медленно. В уравнении (5) мы пренебрегаем производными от функции Узаделя в плоскости как величинами порядка $1/\xi_s$. Здесь мы принимаем во внимание, что изменения фазы в плоскости границы мы практически полностью учитываем за счет локального унитарного преобразования (3). Такое достаточно грубое приближение позволяет нам свести уравнение (5) к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Обратимся к величине $\hat{\mathbf{A}}$. В общем случае она имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} = & -\frac{i}{2}(\sin(2\gamma - \varphi)\hat{\sigma}_1 + \cos(2\gamma - \varphi)\hat{\sigma}_2)\nabla\theta + \\ & + i\hat{\sigma}_3 \left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \nabla\varphi - \nabla\gamma \right) + \\ & + \frac{i \sin \theta}{2}(\cos(2\gamma - \varphi)\hat{\sigma}_1 + \sin(2\gamma - \varphi)\hat{\sigma}_2)\nabla\varphi. \end{aligned} \quad (10)$$

В силу произвольности функции $\gamma(\mathbf{r})$ это выражение можно упростить. Потребуем равенства нулю диагональной компоненты эффективного тензорного поля

$$\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \nabla\varphi = \nabla\gamma. \quad (11)$$

В нашем приближении каждая точка плоскости границы независима от других в рамках краевой задачи, и мы можем выбрать значение γ произвольно:

$2\gamma = \phi + \pi/2$. После таких упрощений эффективное тензорное поле принимает вид

$$\hat{\mathbf{A}} = -\frac{i}{2}\hat{\sigma}_1\nabla\theta + \frac{i \sin \theta}{2}\hat{\sigma}_2\nabla\varphi. \quad (12)$$

Учитывая (11), дивергенция эффективного тензорного поля $\hat{\mathbf{A}}$, входящая в выражение $\tilde{D}^2\tilde{F}(\mathbf{r}, \omega)$, запишется в виде

$$\begin{aligned} (\nabla, \hat{\mathbf{A}}) = & -\frac{i}{2}\hat{\sigma}_1\Delta\theta + \frac{i \sin \theta}{2}\sigma_2\Delta\varphi + \\ & + \frac{i \sin 2\theta}{4}\hat{\sigma}_1(\nabla\varphi)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

При решении уравнения Узаделя в сверхпроводящем слое здесь также удобно пользоваться приближением постоянного в пределах слоя сверхпроводящего параметра порядка. Эти приближения позволяют нам разбить нашу задачу на одномерные краевые задачи для каждой пары координат в плоскости границы и решить их стандартным способом для систем второго порядка с постоянными коэффициентами. При решении уравнения самосогласования (9), в рамках этого подхода, мы усредняем функцию Узаделя в S слое по координате, перпендикулярной границе и решаем его численно. В плоскости границы мы усредняем (сглаживаем) функцию Узаделя с гауссовым весом на масштабе ξ_s , так как на меньшем масштабе не представляется возможным определить критическую температуру сверхпроводящего перехода. В дополнении к этому, входящий в уравнение самосогласования след матричной функции Узаделя меняется вдоль границы очень слабо. Несмотря на грубость данного подхода, так можно качественно оценить локальное влияние магнитного вихря на критическую температуру. Для нахождения профиля намагниченности мы воспользовались методом, описанным в работе [13], для экспериментально наблюдаемого мелкомасштабного одиночного скирмиона. Зависимость полярного угла от координаты можно найти из уравнения

$$\begin{aligned} \theta''_{\rho\rho} + \frac{\theta'_\rho}{\rho} + \frac{2 \sin^2 \theta}{\rho} - \frac{\sin 2\theta}{2} \left(\frac{1}{\rho^2} + k \right) - \\ - h \sin \theta = 0; \quad \theta(0) = \pi; \theta(\infty) = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\rho = \frac{2\pi r}{L_D}$, r – расстояние до центра скирмиона, L_D – период магнитного геликоида в отсутствии внешнего поля и анизотропии, k и h – параметры в функционале плотности микромагнитной энергии (см. подробнее [13]). Поведение азимутального угла зависит от типа скирмиона. Радиус скирмиона определяется как [32]

$$r_s = r_0 - \frac{\theta_0}{(\theta'_r)_{r=r_0}}, \quad (15)$$

где (r_0, θ_0) – точка перегиба профиля намагниченности $\theta(r)$.

Как и следовало ожидать, влияние на критическую температуру вблизи магнитной неоднородности определяется ее масштабом по сравнению со сверхпроводящей длиной когерентности. На рисунке 2 представлена критическая температура сверх-

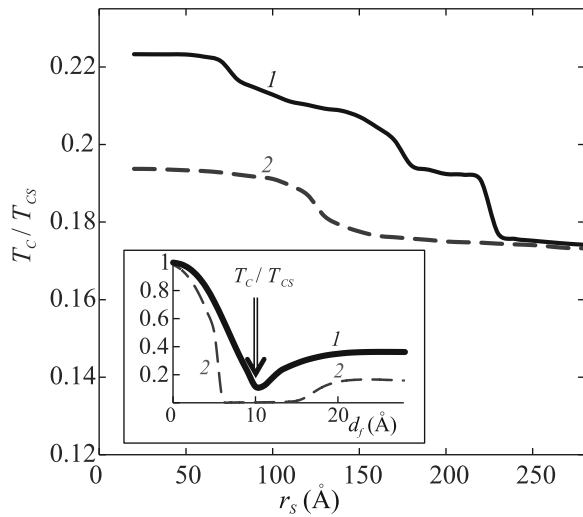


Рис. 2 (Цветной онлайн) Зависимость критической температуры T_c S/F системы от радиуса r_s изолированного скирмиона при различных толщинах ферромагнитного и сверхпроводящего слоя. На вставке показана зависимость T_c контакта S/F от толщины d_f ферромагнитного слоя при однородном намагничивании. Кривая 1 соответствует толщине S слоя $d_s = 112 \text{ \AA}$ и толщине F слоя $d_f = 10 \text{ \AA}$; 2 – S слоя $d_s = 100 \text{ \AA}$, F слоя $d_f = 25 \text{ \AA}$. Параметры системы: $l_s = 120 \text{ \AA}$, $\xi_s = 125 \text{ \AA}$, $2I\tau_f = 0.3$, $\sigma_s = 4$, $n_{sf} = 4$

проводника вблизи одиночного скирмиона, локализованного в соседнем слое ферромагнитного металла, от радиуса скирмиона при различных толщинах S и F слоев. Описанный эффект очень чувствителен к толщине сверхпроводящего слоя и прозрачности границы. Согласно расчетам, наиболее яркий эффект наблюдается при толщинах ферромагнетика (d_f), соответствующих первому минимуму $T_c(d_f)$. При такой толщине ферромагнетика неоднородная намагниченность меняет условия интерференции компоненты функции Узаделя, отвечающей парам, проникшим в ферромагнитный слой из сверхпроводника, и компонентой, отраженной от свободной границы ферромагнетика. Это ожидаемо вызывает достаточно сложную зависимость критической температуры от размера скирмиона. Однако, мы не можем уверенно исключить небольших искажений, вызванных методом усреднения функции Узаделя вдоль

S/F границы при размере скирмиона, близком к ξ_s . Главный качественный результат выглядит вполне разумным: в области локализации скирмиона критическая температура оказывается выше, чем у остальных участков бислоя. Разница температур может быть увеличена путем специального подбора толщин сверхпроводника и ферромагнетика при условии высокой прозрачности границ. Киральный поплавок [33] оказывает качественно схожее влияние на сверхпроводимость, но он может существовать только в достаточно толстых ферромагнитных пленках.

Варьируя толщину сверхпроводящего слоя можно добиться ситуации, когда сверхпроводимость будет проявляться в сверхпроводящем слое только вблизи скирмиона. На рисунке 3 приведено схемати-

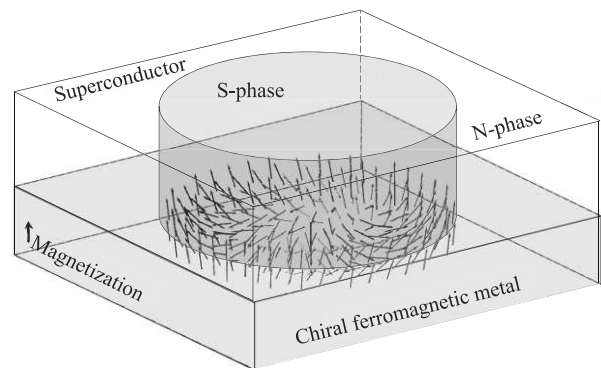


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематическое изображение локализации сверхпроводящей фазы вблизи скирмиона для плоского контакта S/F. Вдали от наноразмерного скирмиона намагниченность в F-слое однородна и над этими областями при значимых температурах сверхпроводимость в S-слое отсутствует

ческое представление своеобразного островка сверхпроводимости. Этот эффект проявляется при контакте с магнитными вихрями, характерный размер которых порядка сверхпроводящей длины когерентности. Нужно отметить, что при других параметрах системы возможно связанное состояние скирмиона с вихрем Абрикосова, эта ситуация рассмотрена в работах [18, 35, 34]. Влияние скирмиона на критическую температуру в этом случае планируется рассмотреть в дальнейших работах наряду с практически важным случаем сильного внешнего магнитного поля. Необходимо отметить также, что рассмотренный в данной работе эффект близости не единственный механизм взаимодействия вихря Абрикосова и магнитного скирмиона. Как показано, в частности, в работах [17–19] электромагнитное взаимодействие играет в таких системах очень важную роль и является достаточным для формирования такого свя-

занного состояния. В случае сверхпроводящего островка, связанного с вихрем нанометрового масштаба, критическая температура составляет примерно 10–20 % критической температуры уединенного сверхпроводника. При удалении от островка концентрация куперовских пар убывает экспоненциально на масштабе ξ_s . На рисунке 4 показана зависимость критической температуры островка от размеров скирмиона.

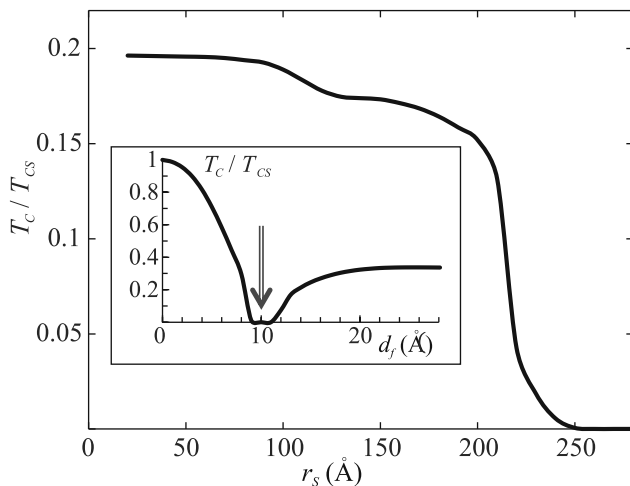


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость критической температуры T_c сверхпроводящего островка от радиуса r_s изолированного скирмиона для S/F контакта. На вставке показана зависимость T_c от d_f при однородном намагничивании. Параметры системы: $d_s = 111 \text{ \AA}$, $l_s = 120 \text{ \AA}$, $\xi_s = 125 \text{ \AA}$, $2I\tau_f = 0.3$, где τ_f , $\sigma_s = 4$, $n_{sf} = 4$, $k = 1.3$, $h = 0.01$, $d_f = 10 \text{ \AA}$

Существенное влияние наноразмерных спиновых вихрей на критическую температуру в сочетании с топологической защищенностью и низкой плотностью тока, необходимой для их движения [36–38], позволяет эффективно использовать такие системы в качестве сверхпроводящих спиновых клапанов [39–41]. Например, сверхпроводящий островок, локализованный между сверхпроводящими берегами, может выступать в качестве подвижного мостика для сверхпроводящего спинового клапана (см. рис. 5). Толщина сверхпроводящего слоя и температура подбираются таким образом, чтобы S/F система была близка к переходу в сверхпроводящее состояние. Появление скирмиона в этой области вызовет переход перемишки в сверхпроводящее состояние.

В рамках теории эффекта близости в грязном пределе предложен приближенный подход, позволяющий рассчитать критическую температуру для контакта сверхпроводника с неоднородным магнетиком. Были рассмотрены контакт с ферромагне-

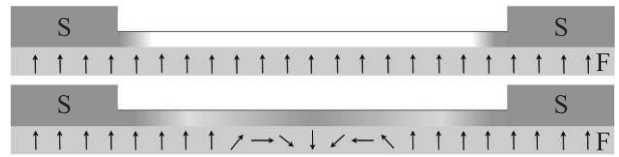


Рис. 5. (Цветной онлайн) Схематическое изображение спинового клапана, основанного на повышении критической температуры сверхпроводника в области локализации скирмиона. Интенсивность заливки в сверхпроводящем слое символизирует концентрацию куперовских пар. Перемещение вихря в область между контактами создает условия для протекания сверхпроводящего тока между сверхпроводящими берегами (нижний рисунок)

тиком в конической фазе и контакт с уединенным скирмионом на фоне однородной намагниченности. Наибольшее влияние на критическую температуру скирмион ожидаемо оказывает в случае достаточно тонких слоев ферромагнетика и высокой прозрачности интерфейса S/F. Путем специального подбора толщин слоев можно добиться, чтобы сверхпроводимость возникала только в области локализации спинового вихря. Получившийся сверхпроводящий островок, связанный с магнитным скирмионом, потенциально может быть использован в качестве подвижного мостика для сверхтока.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

1. A. I. Buzdin, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 935 (2005).
2. K. B. Efetov, I. A. Garifullin, A. F. Volkov, and K. Westerholt, *Springer Tracts Mod. Phys.* **227**, 251 (2008).
3. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Прошин, М. Г. Хусаинов, *УФН* **172**, 113 (2002).
4. Е. А. Кошина, В. Н. Криворучко, *ФНТ* **43**, 754 (2017).
5. V. Krunavakarn, *Phys. Lett. A* **383**, 1341 (2019).
6. Р. Р. Гайфуллин, В. Н. Кушнир, Р. Г. Деминов, Л. Р. Тагиров, М. Ю. Куприянов, А. А. Голубов, *ФТТ* **61**, 1585 (2019).
7. С. В. Миронов, А. В. Самохвалов, А. И. Буздин, А. С. Мельников, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 102 (2021).
8. R. Caruso, D. Massarotti, A. Miano, V. V. Bolginov, A. B. Hamida, L. N. Karelina, G. Campagnano, I. V. Vernik, F. Tafuri, V. V. Ryazanov, and O. A. Mukhanov, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **28**, 1 (2018).
9. А. А. Максимовская, В. И. Ружицкий, Н. В. Кленов, С. В. Бакурский, М. Ю. Куприянов, И. И. Соловьев, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 786 (2022).

10. Л. Н. Карелина, Н. С. Шуравина, А. С. Ионина, С. В. Бакурский, С. В. Егорова, И. А. Головчанский, В. И. Чичкове, В. В. Больгинова, В. В. Рязанова, Письма в ЖЭТФ **116**, 108 (2022).
11. S. Heinze, K. Bergmann, M. Menzel, J. Brede, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, G. Bihlmayer, and S. Blügel, *Nature Phys.* **7**, 713 (2011).
12. N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, *Science* **341**, 636 (2013).
13. A. O. Leonov, T. L. Monchesky, N. Romming, A. Kubetzka, A. N. Bogdanov, and R. Wiesendanger, *New J. Phys.* **18**, 065003 (2016).
14. И. Ф. Шарафуллин, Х. Т. Дъеп, Письма в ЖЭТФ **114**, 610 (2021).
15. N. G. Pugach, M. Safonchik, T. Champel, M. E. Zhitomirsky, E. Lähderanta, M. Eschrig, and C. Lacroix, *Appl. Phys. Lett.* **111**, 162601 (2017).
16. N. G. Pugach, M. O. Safonchik, V. I. Belotelov, T. Ziman, and T. Champel, arXiv 2110.00369 (2021).
17. V. L. Vadimov, M. V. Sapozhnikov, and A. S. Mel'nikov, *Appl. Phys. Lett.* **113**, 032402 (2018).
18. J. Baumard, J. Cayssol, F. S. Bergeret, and A. Buzdin, *Phys. Rev. B* **99**, 014511 (2019).
19. E. S. Andriyakhina and I. S. Burmistrov, *Phys. Rev. B* **103**, 174519 (2021).
20. D. S. Rabinovich, I. V. Bobkova, and A. M. Bobkov, *Phys. Rev. B* **98**, 184511 (2018).
21. M. Houzet and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B* **74**, 214507 (2006).
22. В. А. Туманов, Ю. В. Горюнов, Ю. Н. Прошин, Письма в ЖЭТФ **107**, 449 (2018).
23. V. A. Tumanov and Y. N. Proshin, *J. Low Temp. Phys.* **185**, 460 (2016).
24. Ya. V. Fominov, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, *Phys. Rev. B* **75**, 104509 (2007).
25. М. Куприянов, В. Лукичев, ЖЭТФ **94**, 139 (1988).
26. F. S. Bergeret, K. B. Efetov, and A. I. Larkin, *Phys. Rev. B* **62**, 11872 (2000).
27. Ya. V. Fominov, N. M. Chtchelkatchev, and A. A. Golubov, *Phys. Rev. B* **66**, 014507 (2002).
28. М. В. Авдеев, Ю. Н. Прошин, ЖЭТФ **144**, 1251 (2013).
29. М. В. Авдеев, Ю. Н. Прошин, ЖЭТФ **102**, 106 (2015).
30. О. Н. Борисова, В. А. Туманов, Ю. Н. Прошин, *Физика Металлов и Металловедение* **121**, 482 (2020).
31. I. A. Garifullin, D. A. Tikhonov, N. N. Garif'yanov, L. Lazar, Yu. V. Goryunov, S. Ya. Khlebnikov, L. R. Tagirov, K. Westerholt, and H. Zabel, *Phys. Rev. B* **66**, 020505-R (2002).
32. A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*, Springer, Heidelberg (2008).
33. F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, and N. S. Kiselev, *New J. Phys.* **18**, 045002 (2016).
34. A. P. Petrović, M. Raju, X. Y. Tee, A. Louat, I. Maggio-Aprile, R. M. Menezes, M. J. Wyszyński, N. K. Duong, M. Reznikov, C. Renner, and M. V. Milošević, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 117205 (2021).
35. R. M. Menezes, J. F. Neto, C. C. de Souza Silva, and M. V. Milošević, *Phys. Rev. B* **100**, 014431 (2019).
36. J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, *Nat. Commun.* **4**, 1463 (2013).
37. S. L. Zhang, W. W. Wang, D. M. Burn, H. Peng, H. Berger, A. Bauer, C. Pfleiderer, G. van Der Laan, and T. Hesjedal, *Nat. Commun.* **9**, 2115 (2018).
38. K. W. Moon, D. H. Kim, S. G. Je, B. S. Chun, W. Kim, Z. Q. Qiu, S. B. Choe, and C. Hwang, *Sci. Rep.* **6**, 20360 (2016).
39. S. Oh, D. Youm, and M. Beasley, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2376 (1997).
40. L. R. Tagirov, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2058 (1999).
41. A. I. Buzdin, A. V. Vedyayev, and N. V. Ryzhanova, *Europhys. Lett.* **48**, 686 (1999).

Нелинейный резонанс при возбуждении магнитного наноцилиндра спин-поляризованным током

А. А. Матвеев^{+*1)}, А. Р. Сафин^{+×}, С. А. Никитов^{+°}

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

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

×Национальный исследовательский университет “МЭИ”, 111250 Москва, Россия

°Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 3 августа 2022 г.

После переработки 29 августа 2022 г.

Принята к публикации 29 августа 2022 г.

Теоретически исследован нелинейный резонанс при протекании переменного во времени спин-поляризованного тока через ферромагнитный наноцилиндр, намагниченность которого представляет собой магнитный вихрь. Результаты, полученные на основе динамического уравнения Тилиа для движения ядра вихря, сравниваются с микромагнитным моделированием. Исследованы условия возникновения сдвига резонансной частоты и появления гистерезиса при достаточно большой амплитуде спин-поляризованного тока.

DOI: 10.31857/S1234567822190077, EDN: khybfs

Магнитные вихри являются перспективными конфигурациями намагниченности в наноразмерных структурах для создания различных устройств спинтроники от наноосцилляторов до элементов магнитной памяти с высокой плотностью хранения данных и магнитных логических элементов [1–3]. Описание динамики в таких магнитных системах под действием спин-поляризованного тока представляет собой как фундаментальный, так и прикладной интерес [4–6]. Процессы перемагничивания при протекании спин-поляризованного тока обычно рассматривают в двух конфигурациях. В СРР (*current perpendicular to plane*) конфигурации ток протекает перпендикулярно рассматриваемой структуре, а в СІР (*current in plane*) конфигурации вектор плотности тока лежит в плоскости структуры [7, 8]. Ранее теоретически и экспериментально изучалось поведение вихревой наноточки в линейном режиме как при воздействии спин-поляризованного тока, так и в присутствии переменного во времени внешнего магнитного поля [9–11]. Рассматривался так же и нелинейный режим работы для случая возбуждения намагниченности внешним магнитным полем [12, 13] для СРР и СІР конфигураций [14–16]. Отметим, что в [16] аналитическое исследование нелинейной динамики вихря для СІР

конфигурации проводилось при помощи численного решения уравнения движения для ядра вихря. В данной работе исследуется нелинейный резонанс для СІР конфигурации в магнитном наноцилиндре при изменении амплитуды спин-поляризованного тока. Целью проводимого анализа является получение и верификация аналитических выражений для нелинейного сдвига частоты и зависимости амплитуды колебаний ядра вихря от амплитуды спин-поляризованного тока, а также поиск способа построения амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) вихревой наноточки без численного интегрирования нелинейного уравнения движения ядра вихря, выполненного в работе [16].

Рассматриваемая наноструктура представляет из себя ферромагнитный цилиндр радиуса $R = 100$ нм и толщины $L = 20$ нм. Распределение намагниченности в этом цилиндре имеет вид вихря и характеризуется полярностью p и хиральностью χ [17]. При $p = 1$ направление намагниченности в центре ядра вихря совпадает с осью OZ , перпендикулярной основанию цилиндра, а в случае $p = -1$ эти направления антипараллельны. Хиральность показывает тип закрутки вихря вокруг ядра. Значения $\chi = -1$ или $\chi = 1$ соответствуют закрутке по часовой стрелке или против нее. Везде далее предполагается, что $p = 1$ и $\chi = 1$, а декартова система координат выбрана как показано на рис. 1.

¹⁾e-mail: maa.box@yandex.ru

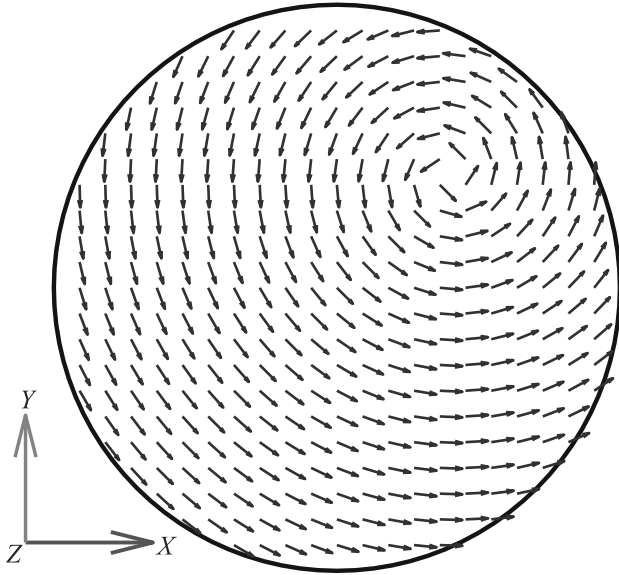


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вихревая наноточка

Описание динамики намагниченности в исследуемой структуре удобно проводить на основе уравнения Гилия для координаты $\mathbf{X} = (x, y, 0)$ ядра вихря [17–19]. В случае СР конфигурации это уравнение запишем в виде [10]

$$\mathbf{F} + \mathbf{G} \times \left(\frac{d\mathbf{X}}{dt} + b_j \mathbf{j} \right) + \hat{D} \left(\alpha \frac{d\mathbf{X}}{dt} + \xi b_j \mathbf{j} \right) = 0, \quad (1)$$

где $\mathbf{G} = G\mathbf{e}_z$ – гировектор, \hat{D} – тензор затухания, $\mathbf{F} = -\nabla \cdot W(|\mathbf{X}|)$ – потенциальная сила, $W(|\mathbf{X}|)$ – магнитная энергия, α – константа затухания Гильберта [20], ξ – степень неадиабатичности [21], $b_j = P\mu_B / (eM_s(1 + \xi^2))$, M_s – намагниченность насыщения, μ_B – магнетон Бора, e – элементарный электрический заряд, P – поляризация тока. Для цилиндра небольшой толщины тензор затухания имеет только две ненулевые компоненты $D_{xx} = D_{yy} = D = -(\pi M_s \mu_0 L \ln(R/l)) / \gamma$, а проекция гировектора на ось OZ представляется в виде $G = -(2\pi M_s \mu_0 L) / \gamma$ [9, 22]. Здесь μ_0 – магнитная постоянная, l – длина обменного взаимодействия. Энергия $W(|\mathbf{X}|)$ в отсутствие внешнего магнитного поля может быть записана как ряд по степеням $|\mathbf{X}|$ [12]

$$W(|\mathbf{X}|) = W_0 + \frac{\kappa}{2} |\mathbf{X}|^2 + \frac{\beta}{4} |\mathbf{X}|^4, \quad (2)$$

где $\kappa > 0$ и $\beta > 0$ – коэффициенты жесткости, а W_0 – магнитная энергия системы, когда ядро вихря находится в центре диска. Заметим, что определение W_0 не существенно для динамики, поскольку при взятии градиента от выражения (2) эта константа зануляется.

Из уравнения (1) выразим скорость $d\mathbf{X}/dt$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = & -\frac{D\alpha}{G^2 + (D\alpha)^2} \mathbf{F} + \frac{1}{G^2 + (D\alpha)^2} \mathbf{G} \times \mathbf{F} - \\ & - \frac{G^2 + D\alpha\xi}{G^2 + (D\alpha)^2} b_j \mathbf{j} + \frac{b_j D(\xi - \alpha)}{G^2 + (D\alpha)^2} \mathbf{G} \times \mathbf{j}. \end{aligned} \quad (3)$$

Если отклонение ядра вихря от положения равновесия, находящегося в центре наноточки, достаточно мало, то слагаемым $\beta/4 |\mathbf{X}|^4$ в энергии $W(|\mathbf{X}|)$ можно пренебречь. В этом случае сила $\mathbf{F} = -\kappa\mathbf{X}$ линейна относительно координаты ядра вихря и уравнение (3) может быть решено аналитически, как это было сделано в [10]. В общем случае необходимо учесть, что $\beta \neq 0$ и $\mathbf{F} = -\kappa\mathbf{X} - \beta |\mathbf{X}|^2 \mathbf{X}$. Для краткости введем обозначения

$$\begin{aligned} a &= \frac{D\alpha}{(G^2 + (D\alpha)^2)}, \\ b &= -\frac{G}{(G^2 + (D\alpha)^2)}, \\ g_1 &= \frac{b_j (G^2 + D^2\alpha\xi)}{(G^2 + (D\alpha)^2)}, \\ g_2 &= \frac{Gb_j D(\xi - \alpha)}{(G^2 + (D\alpha)^2)}. \end{aligned}$$

Тогда уравнение (3) примет вид

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = & \begin{pmatrix} a\kappa \cdot x + a\beta \cdot (x^2 + y^2) \cdot x \\ a\kappa \cdot y + a\beta \cdot (x^2 + y^2) \cdot y \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} -b\kappa \cdot y - b\beta \cdot (x^2 + y^2) \cdot y \\ b\kappa \cdot x + b\beta \cdot (x^2 + y^2) \cdot x \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} -g_2 j_y - g_1 j_x \\ g_2 j_x - g_1 j_y \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4)$$

Будем считать возмущение гармоническим $\mathbf{j} = j_0 \cos(\Omega t + \varphi_\Omega) \cdot \mathbf{e}_x$, и воспользуемся методом медленно меняющихся амплитуд. Введем амплитуду $U(t)$ и фазу $\varphi(t)$ колебаний координат ядра вихря следующим образом: $x(t) = U(t) \cos(\omega t + \varphi(t))$, $y(t) = U(t) \sin(\omega t + \varphi(t))$, где ω – частота вынужденных колебаний, необязательно равная частоте колебаний возбуждающего тока Ω . Систему уравнений (4) преобразуем к виду

$$\begin{aligned} \dot{U} = & a\kappa \cdot U + a\beta \cdot U^3 + \\ & + \frac{g_2 j_0}{2} \sin(\Psi) - \frac{g_1 j_0}{2} \cos(\Psi), \\ \dot{\Psi} = & (b\kappa - \Omega) + b\beta \cdot U^2 + \\ & + \frac{g_2 j_0}{2U} \cos(\Psi) + \frac{g_1 j_0}{2U} \sin(\Psi). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь введена разность фаз $\Psi(t) = (\omega - \Omega)t + \varphi(t) - \varphi_\Omega$ и отброшены высокочастотные слагаемые с фазой $(\omega + \Omega)t + \varphi(t) + \varphi_\Omega$. Система уравнений (5) представляет собой автономную систему, анализ которой позволяет находить стационарные значения амплитуды и разности фаз для заданной частоты и амплитуды прикладываемого тока. Заметим, что система (5) инвариантна относительно замен $U \rightarrow -U$, $\Psi \rightarrow \Psi + \pi$ и $U \rightarrow U$, $\Psi \rightarrow \Psi + 2\pi$, поэтому при отыскании стационарных решений и построении фазовых портретов достаточно ограничиться областью $U > 0$, $\Psi \in [0, 2\pi]$.

Найдем стационарные решения (U_0, Ψ_0) системы дифференциальных уравнений (5), для этого положим, что $\dot{U}_0 = 0$, $\dot{\Psi}_0 = 0$. Тогда из (5) можно выразить $\sin(\Psi_0)$ и $\cos(\Psi_0)$ и подставить в основное тригонометрическое тождество $\sin^2(\Psi_0) + \cos^2(\Psi_0) = 1$. Получим

$$AV_0^3 + BV_0^2 + CV_0 + D = 0, \quad (6)$$

где $A = (a^2 + b^2)\beta^2$, $B = 2\beta(a^2\kappa - b(\Omega - b\kappa))$, $C = (a\kappa)^2 + (\Omega - b\kappa)^2$, $D = -(g_1^2 + g_2^2)(j_0/2)^2$, $V_0 = U_0^2$. Уравнение (6) является кубическим и может иметь до трех вещественных корней. Решая его аналитически или численно, можно получить амплитуду U_0 и далее с помощью (5) найти разность фаз Ψ_0 . Количество корней (6) определяется при помощи дискриминанта

$$\begin{aligned} Q = & -\frac{27}{16}\beta^4(a^2 + b^2)^2(g_1^2 + g_2^2)^2j_0^4 \\ & - 9\beta^3(a^2 + b^2)((a^2 + b^2)\kappa - b\Omega) \cdot \\ & \cdot ((a\kappa)^2 + (\Omega - b\kappa)^2)(g_1^2 + g_2^2)j_0^4 - \\ & - 4\beta^2(a^2 + b^2)((a\kappa)^2 + (\Omega - b\kappa)^2)^3 + \\ & + 8((a^2 + b^2)\kappa - b\Omega)^3\beta^3(g_1^2 + g_2^2)j_0^4 + \\ & + 4((a^2 + b^2)\kappa - b\Omega)^2 \cdot \\ & \cdot \beta^2((a\kappa)^2 + (\Omega - b\kappa)^2)^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Если $Q > 0$, то у (6) есть три вещественных корня. Решение уравнения $Q = 0$ при фиксированной амплитуде спин-поляризованного тока позволяет найти критические частоты Ω_{cr} , являющиеся границами интервалов знакопостоянства Q . Получить общее аналитическое выражение для этих частот невозможно, поскольку (7) является полиномом шестой степени относительно Ω , а аналитическое выражение для корней уравнения такой степени неизвестно.

Определить тип и устойчивость особых точек системы (5) можно стандартными для дифференциаль-

ных уравнений методами [23]. Для этого следует линеаризовать систему (5) в окрестности (U_0, Ψ_0) и переписать ее относительно отклонений $\Delta U = U - U_0$, $\Delta\Psi = \Psi - \Psi_0$ в следующем виде

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dt}\Delta U \\ \frac{d}{dt}\Delta\Psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta U \\ \Delta\Psi \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} \Delta U \\ \Delta\Psi \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} m_{11} &= a\kappa + 3a\beta U_0^2, \\ m_{12} &= \frac{g_1 j_0}{2} \sin(\Psi_0), \\ m_{21} &= 2b\beta U_0 - \frac{g_1 j_0}{2U_0} \sin(\Psi_0), \\ m_{22} &= \frac{g_1 j_0}{2U_0} \cos(\Psi_0). \end{aligned} \quad (8)$$

Собственные числа $\lambda_{1,2}$ матрицы \hat{M} и определяют тип и устойчивость особой точки. Выражения для собственных чисел имеют вид:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \frac{1}{2}(m_{11} + m_{22}) \pm \\ & \pm \sqrt{\frac{1}{4}(m_{11} + m_{22})^2 + m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Пусть в некоторой области значений параметров j_0 и Ω уравнение (6) имеет единственное вещественное решение $U_0(j_0, \Omega)$, задающее АЧХ наноточки. При фиксированной амплитуде тока j_0 в резонансе $\Omega = \Omega_{\text{res}}$ у функции $U_0(j_0, \Omega)$ должен быть максимум, поэтому $\partial U_0(j_0, \Omega_{\text{res}})/\partial \Omega = 0$. Продифференцируем (6) по Ω в точке $\Omega = \Omega_{\text{res}}$ и учтем условие максимума

$$(\Omega_{\text{res}} - b\beta U_{\text{res}}^2 - b\kappa) U_{\text{res}}^2 = 0. \quad (10)$$

Здесь $U_{\text{res}} = U_0(j_0, \Omega_{\text{res}})$. Ненулевое решение (10) подставим в (6) и получим кубическое уравнение относительно резонансной частоты

$$\frac{a^2}{b^3\beta} \Omega_{\text{res}}^2 (\Omega_{\text{res}} - b\kappa) - \frac{1}{4} (g_1^2 + g_2^2) j_0^2 = 0. \quad (11)$$

Полученное уравнение (11) может быть решено аналитически. Его вещественный корень разложим в ряд по степеням j_0 в окрестности $j_0 = 0$ и будем удерживать члены не выше второго порядка малости

$$\Omega_{\text{res}} = b\kappa + \frac{(g_1^2 + g_2^2)\beta b}{4a^2\kappa^2} j_0^2 + O(j_0^3). \quad (12)$$

Теперь, для нахождения U_{res} достаточно подставить (12) в (10) и решить полученное квадратное уравне-

ние. Следует выбрать корень, больший нуля и разложить его в ряд, как было сделано при выводе (12), для недопущения превышения точности. Получим

$$U_{\text{res}} = \frac{\sqrt{g_1^2 + g_2^2}}{2 |a\kappa|} j_0 + O(j_0^3). \quad (13)$$

Отметим, что в линейном режиме резонансная частота должна быть равна собственной частоте колебаний ω_0 . Тогда, из (12) следует, что $\Omega_{\text{res}} = b\kappa = \omega_0$. Данный результат согласуется с работой [10]. Таким образом, первый коэффициент жесткости κ может быть определен из эксперимента или моделирования при небольшом отклонении ядра вихря от положения равновесия. Определение второго коэффициента жесткости β возможно при вычислении коэффициентов ряда (12) по экспериментальным точкам или результатам моделирования при больших амплитудах прикладываемого тока. Для этой цели можно использовать метод наименьших квадратов или другие численные методы [24].

Было проведено микромагнитное моделирование с использованием программного пакета MUMAX³ [25]. Параметры материала были выбраны как у пермаллоя Ni₈₀Fe₂₀, а именно: обменная константа $A_{ex} = 13 \cdot 10^{-12}$ Дж/м, $M_s = 8 \cdot 10^5$ А/м, $\alpha = \xi = 0.01$. Для тока была установлена степень поляризации $P = 1$. Размеры ячейки моделирования, имеющей форму прямоугольного параллелепипеда, вдоль осей OX и OY были равны 1.5625 нм, а ребро, параллельное оси OZ , имело длину 20 нм. Отметим, что выбор таких размеров соответствует приближению тонкой пленки, заключающемуся в пренебрежении изменениями намагниченности вдоль оси OZ . Такой выбор соответствует примененной модели Тили (1). Учет неоднородностей намагниченности может быть проведен при модификации уравнения Тили и введении гигантской движущейся массы вихря, что приводит к нелокальности динамики и снижению частоты гиротропной моды вихря [26]. В работе [26] показано, что учет этой массы для малых толщин вплоть до 20–30 нм для нанодиска не приводит к существенным отличиям от результатов применения локального уравнения Тили. Для численного интегрирования по времени использовался решатель на основе метода Дорманда–Принса с адаптивным шагом [25]. Для различных амплитуд плотности спин-поляризованного тока были получены АЧХ колебаний x -координаты ядра вихря. Они изображены на рис. 2. Совпадение расчетов, полученных на основе уравнения (6), с моделированием наблюдается как в линейном режиме работы с амплитудой плотности тока 2 МА/см², так и при возникновении сдвига ре-

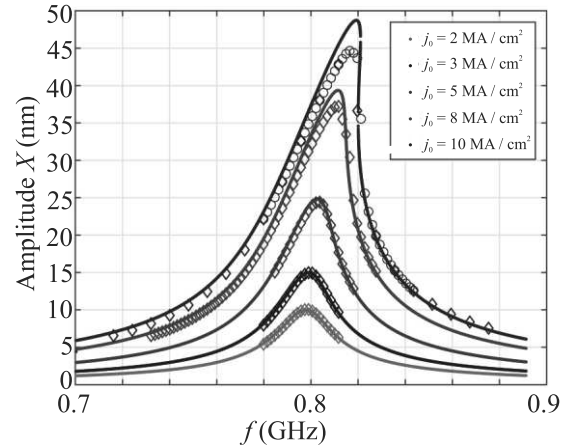


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости установившейся амплитуды колебаний ядра вихря при различных амплитудах спин-поляризованного тока от его частоты $f = \Omega/2\pi$. Линии построены при помощи численного решения уравнения (7). Ромбы отмечают результаты микромагнитного моделирования при увеличении частоты колебаний тока, круги – при уменьшении. Цвет соответствует определенному значению амплитуды плотности тока j_0 согласно легенде

зонансной частоты при j_0 до 5 МА/см². При дальнейшем увеличении амплитуды j_0 возникает расхождение между расчетами на основе подхода Тили и моделированием. Решения уравнения (6) дают несколько завышенный результат, это можно связать с тем, что уравнение Тили (1) является хорошим приближением для неограниченного образца [17], а для моделирования использовались граничные условия Аменты–Радо, соответствующие случаю свободных спинов на поверхности ферромагнетика [27].

При построении АЧХ по результатам моделирования оказалось, что для амплитуды плотности спин-поляризованного тока 10 МА/см² в некотором диапазоне частот существует два возможных режима устойчивого движения ядра вихря. Анализ подобной ситуации удобно проводить методом фазовой плоскости. Фазовые портреты системы (5) при амплитудах $j_0 = 2$ МА/см² и $j_0 = 10$ МА/см² приведены на рис. 3. В линейном режиме, у системы (5) есть единственная особая точка – устойчивый фокус. При $j_0 = 10$ МА/см² и частоте $\Omega = 5.16 \cdot 10^9$ рад/с стационарных точек три: одно седло и два устойчивых узла. Каждый узел соответствует установившемуся движению ядра вихря. Конкретный режим колебаний выбирается в зависимости от того, к какой из устойчивых точек на фазовой плоскости оказывается ближе начальное состояние системы. Значит, в исследуемой системе возникает зависимость от предыдущей

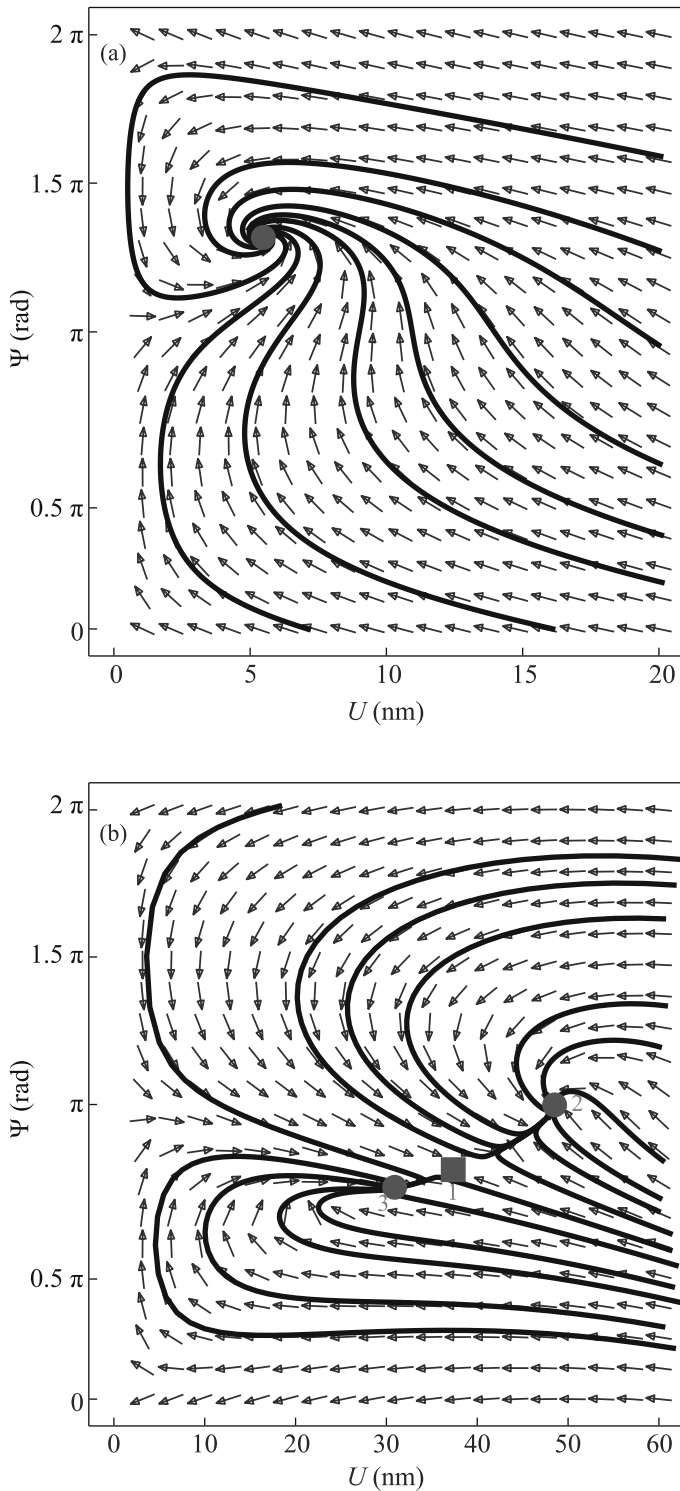


Рис. 3. (Цветной онлайн) Фазовые портреты системы (6) для: (a) – линейного режима при $j_0 = 2 \text{ MA/cm}^2$ и $\Omega = 4.9 \cdot 10^9 \text{ рад/с}$ (красный круг показывает положение устойчивого фокуса) и (b) – нелинейного режима при $j_0 = 10 \text{ MA/cm}^2$ и $\Omega = 5.16 \cdot 10^9 \text{ рад/с}$ (1 – седло, 2, 3 – устойчивые узлы)

тории – гистерезис, проявляющий себя следующим образом. Если изначально вихрь находился в центре диска, то для фиксированной величины j_0 , которая обеспечит наличие трех вещественных корней у (6), при увеличении частоты спин-поляризованного тока от значения много меньшего $\Omega_{\text{res}}(j_0)$ амплитуда установившихся колебаний будет расти и на определенной критической частоте $\Omega_{\text{cr}1}$, которую можно найти решением бифуркационного условия $Q = 0$, она скачком уменьшится. Если продолжить увеличение частоты спин-поляризованного тока, то амплитуда колебаний ядра вихря будет плавно уменьшаться. Однако, если для вихря, первоначально находившегося в центре диска, частоту внешнего воздействия уменьшать от значения, много большего $\Omega_{\text{res}}(j_0)$, то амплитуда установившихся колебаний будет расти, но на критической частоте $\Omega_{\text{cr}2} < \Omega_{\text{cr}1}$ она скачком увеличится и при дальнейшем уменьшении частоты спин-поляризованного тока продолжит плавное снижение.

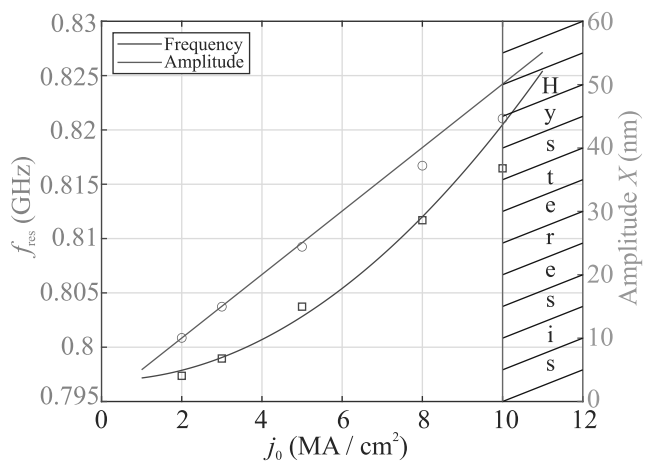


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость резонансных амплитуды и частоты $f_{\text{res}} = \Omega_{\text{res}}/2\pi$ колебаний ядра вихря от амплитуды плотности прикладываемого тока. Линии показывают зависимости, полученные на основе уравнений (12) и (13). Круги и квадраты отражают результаты моделирования. Оранжевые круги показывают резонансную амплитуду, а синие квадраты резонансную частоту. Выделенная область отражает значения j_0 , при которых будет наблюдаться больше одной устойчивой точки в фазовом пространстве в некотором диапазоне частот

На рисунке 4 изображены зависимости резонансной частоты (12) и амплитуды (13) колебаний ядра вихря и результаты моделирования. Соотношение (13) устанавливает линейную зависимость резонансной амплитуды колебаний ядра вихря с точностью до поправок третьего порядка малости при $\beta \neq 0$.

Из рисунка 4 видно, что такая зависимость, действительно, является хорошим приближением в нелинейном режиме для j_0 до 5 МА/см². Значит, нелинейность, связанная со слагаемым $\beta/4 |\mathbf{X}|^4$ в энергии $W(|\mathbf{X}|)$, в модели Тиля оказывает малое влияние на величину резонансной амплитуды в указанном диапазоне токов. Однако, для резонансной частоты учет $\beta \neq 0$ оказывается существенным для тех же токов.

В данной работе рассмотрено применение модели Тиля к описанию нелинейного резонанса вихревой наноточки в СІР конфигурации. Методом укороченных уравнений выведены соотношения, определяющие зависимости резонансных характеристик исследуемого образца от амплитуды спин-поляризованного тока. Показано, что в широком диапазоне токов нелинейность не существенна для амплитуды колебаний ядра вихря, в то время как ее учет определяет сдвиг резонансной частоты. Полученные выражения (12) и (13) определяют отклик вихревого наноточечного цилиндра на пропускаемый через него спин-поляризованный ток.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда # 19-19-00607-П.

1. S. Kasai, Y. Nakatani, K. Kobayashi, H. Kohno, and T. Ono, Phys. Rev. Lett. **97**, 107204 (2006).
2. С. А. Никитов, А. Р. Сафин, Д. В. Калябин, А. В. Садовников, Е. Н. Бегинин, М. В. Логунов, М. А. Морозова, С. А. Одинцов, С. А. Осокин, А. Ю. Шаравевская, Ю. П. Шараевский, А. И. Кирилук, УФН **190**(10), 1009 (2020).
3. S. Bohlens, B. Krüger, A. Drews, M. Bolte, G. Meier, and D. Pfannkuche, Appl. Phys. Lett. **93**, 142508 (2008).
4. Q. Shao, P. Li, L. Liu et al. (Collaboration), IEEE Trans. Magn. **57**(7), 1 (2021).
5. В. А. Орлов, Г. С. Патрин, И. Н. Орлова, ЖЭТФ **158**(4), 672 (2020).
6. Л. В. Кулик, А. В. Горбунов, С. М. Дикман, В. Б. Тимофеев, УФН **189**, 925 (2019).
7. А. К. Звездин, К. А. Звездин, А. В. Хвальковский, УФН **178**(4), 436 (2008).
8. Ю. Н. Шубин, М. Х. Машаев, А. В. Ведяев, Н. В. Стрелков, ЖЭТФ **161**(5), 746 (2022).
9. M. Najafi, B. Krüger, S. Bohlens, M. Franchin, H. Fangohr, A. Vanhaverbeke, R. Allenspach, M. Bolte, U. Merkt, D. Pfannkuche, D. Müller, and G. Meier, J. Appl. Phys. **105**, 113914 (2009).
10. B. Krüger, A. Drews, M. Bolte, U. Merkt, D. Pfannkuche, and G. Meier, Phys. Rev. B **76**, 224426 (2007).
11. M. Bolte, G. Meier, B. Krüger, A. Drews, R. Eiselt, L. Bocklage, S. Bohlens, T. Tylliszczak, A. Vansteenkiste, B. Waeyenberge, K. Chou, A. Puzic, and H. Stoll, Phys. Rev. Lett. **100**, 176601 (2008).
12. K. Guslienko, R. Heredero, and O. Chubykalo-Fesenko, Phys. Rev. B **82**, 014402 (2010).
13. K. Buchanan, P. Roy, M. Grimsditch, F. Fradin, K. Guslienko, S. Bader, and V. Novosad, Phys. Rev. B **74**, 064404 (2006).
14. A. Khvalkovskiy, J. Grollier, A. Dussaux, K. Zvezdin, and V. Cros, Phys. Rev. B **80**, 140401 (2009).
15. K. Guslienko, O. Sukhostavets, and D. Berkov, Nanoscale Res Lett. **9**, 386 (2014).
16. A. Drews, B. Krüger, G. Selke, T. Kamionka, A. Vogel, M. Martens, U. Merkt, D. Moller, and G. Meier, Phys. Rev. B **85**, 144417 (2012).
17. Y. Gaididei, V. Kravchuk, and D. Sheka, Int. J. Quantum Chem. **110**, 83 (2010).
18. Б. А. Иванов, Г. Г. Аванесян, А. В. Хвальковский, Н. Е. Кулагин, К. Э. Заспел, К. А. Звездин, Письма в ЖЭТФ **91**(4), 190 (2010).
19. A. A. Thiele, J. Appl. Phys. **45**, 377 (1974).
20. Z. Liu, F. Giesen, X. Zhu, R. Sydora, and M. Freeman, Phys. Rev. Lett. **98**, 087201 (2007).
21. S. Zhang and Z. Li, Phys. Rev. Lett. **93**, 127204 (2004).
22. П. Д. Ким, В. А. Орлов, В. С. Прокопенко, С. С. Замай, В. Я. Принц, Р. Ю. Руденко, Т. В. Руденко, ФТТ **57**, 29 (2015).
23. Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко, *Колебания, волны, структуры*, Физматлит, М. (2003).
24. Г. А. Кокотушкин, А. А. Федотов, П. В. Храпов, *Численные методы алгебры и приближения функций*, Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, М. (2011).
25. A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, M. Helsen, F. Garcia-Sanchez, and B. Waeyenberge, AIP Adv. **4**, 107133 (2014).
26. K. Guslienko, G. Kakazei, J. Ding, X. Liu, and A. Adeyeye, Sci. Rep. (2015).
27. Б. А. Калиникос, Соросовский Образовательный Журнал **5**, 93 (1996).

Фазовое расслоение в двумерных электронных системах: экспериментальная картина явлений (Миниобзор)

В. М. Пудалов¹⁾

Центр им. В. Л. Гинзбурга, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 2022 г.

После переработки 30 августа 2022 г.

Принята к публикации 1 сентября 2022 г.

В обзоре рассмотрены ключевые экспериментальные результаты по выявлению и изучению свойств неоднородного состояния, возникающего в двумерных электронных системах вследствие взаимной игры межэлектронных взаимодействий и беспорядка. В фокусе обзора – результаты, полученные на кремниевых полевых структурах (Si-MДП) с высокой подвижностью, в которых эффекты взаимодействия при низких концентрациях носителей проявляются наиболее ярко вследствие сильного е-е взаимодействия, многодолинного спектра и короткопериодного характера случайного потенциала. В обзоре описаны проявления фазового расслоения в транспорте, магнитотранспорте и термодинамике. Рассмотрение ряда экспериментальных результатов дополняется кратким обзором их теоретической интерпретации.

DOI: 10.31857/S1234567822190089, EDN: kiacku

В последнее время эффекты фазового расслоения вышли на авансцену в физике конденсированного состояния, привлекая пристальное теоретическое и экспериментальное внимание. Исторически первые и наиболее заметные эффекты фазового расслоения были обнаружены в манганитах [1], затем было обнаружено, что разделение фаз играет существенную роль в высокотемпературных сверхпроводниках [2, 3], низкоразмерных органических кристаллах [4] и т.п. В настоящее время стало совершенно ясно, что эффекты расслоения являются обыденностью, а не экзотикой.

В последнее время были опубликованы несколько обзоров [5, 6], в которых рассматриваются, главным образом, теоретические аспекты физики фазового расслоения. Данный обзор частично компенсирует этот пробел, рассматривая несколько ярких экспериментальных проявлений фазового расслоения в двумерных электронных (2DE) системах. Во всех рассмотренных примерах движущей силой расслоения является конкуренция беспорядка и межчастичных взаимодействий. Известно, что эффекты взаимодействия проявляются тем сильнее, чем ниже размерность системы.

I. Двумерные электронные системы с сильным взаимодействием: теория. Корреляции иг-

рают важную роль для электронов с парным потенциалом $1/r$, движущихся на фоне нейтрализующего заряда [7]. Их роль возрастает как с уменьшением концентрации n , так и размерности пространства, и может качественно изменять предсказания простых приближений, таких как приближение Хартри–Фока (HF) или случайных фаз RPA [7]. Взаимодействие обычно характеризуют безразмерным отношением r_s потенциальной энергии взаимодействия E_{ee} к кинетической энергии Ферми E_F ; для электронов вблизи поверхности 001-Si $r_s = 2.63(10^{12}/n[\text{см}^{-2}])^{1/2}$ [8].

В сильно коррелированной электронной жидкости с низкой плотностью действует очень тонкий энергетический баланс, определяющий свойства системы, и для получения надежных результатов необходима высокая точность расчетов, которую обеспечивают, например, методы квантового Монте-Карло (QMC) [7]. В 2D системах взаимная игра беспорядка и электрон-электронных взаимодействий порождает множество ярких эффектов, некоторые из них рассматриваются ниже. Мы начнем с отрицательной сжимаемости электронной жидкости – эффекта, который “прокладывает дорогу” фазовому расслоению.

A. Отрицательная сжимаемость и фазовое расслоение: аналитические результаты. Обратная сжимаемость ($\partial\mu/\partial n$) отражает изменение электрохимического потенциала системы электронов μ с их концентрацией n

¹⁾e-mail: pudalov@lebedev.ru

$$\kappa^{-1} = n^2 (\partial^2 E_{\text{tot}} / \partial n^2) = n^2 (\partial \mu / \partial n), \quad (1)$$

где n – плотность носителей, а μ – электрохимический потенциал. Для невзаимодействующих электронов κ пропорциональна одночастичной плотности состояний D , которая в 2DE системе (2DES) не зависит от плотности, $D_2 = g_v m / (\pi \hbar^2)$, где g_v – кратность долинного вырождения ($g_v = 2$ для (001)-Si-МДП).

Эта картина, однако, резко изменяется при учете межэлектронного взаимодействия. Уже в начале 1980-х гг. было осознано, что сжимаемость 2DE системы может стать отрицательной при низких плотностях из-за электрон-электронных взаимодействий [9]. В отсутствие магнитного поля этот эффект обусловлен в первую очередь обменной энергией, а в сильных полях корреляционная энергия также становится существенной [10].

В рамках теории HF, для “чистой” системы (без беспорядка):

$$\partial \mu / \partial n = \pi \hbar^2 / m - (2/\pi)^{1/2} e^2 / 4\pi \epsilon n^{1/2}. \quad (2)$$

Таким образом, при понижении концентрации сжимаемость неограниченно уменьшается и становится отрицательной. Смена знака сжимаемости означает, что при изменении концентрации электронов изменение потенциальной энергии за счет межэлектронного взаимодействия, имея противоположный знак, превышает изменение кинетической энергии. Изменение знака сжимаемости $(\partial \mu / \partial n)^{-1}$ было экспериментально обнаружено в 2D структурах Si-МДП в магнитном поле [11–13], и позже, в отсутствие магнитного поля, методом измерения глубины проникновения электрического поля [14–16] (см. в разделе II B).

В. Учет влияния беспорядка. Беспорядок неизбежно присутствует в реальных двумерных системах [17]. Сколь малыми бы ни были флуктуации потенциала в самых совершенных 2D структурах, они приводят к существенному изменению поведения термодинамики и транспорта в системе по мере уменьшения плотности носителей.

1. Результаты в рамках квантовых поправок взаимодействия и ренорм-групповой теории. Расчеты на “металлической” стороне (высокая проводимость $\sigma \times (\hbar/e^2) = E_F \tau / \hbar \gg 1$), в рамках квантовых поправок и ренорм-группового подхода, не выявляют сингулярных поправок к сжимаемости в первом порядке по беспорядку $(E_F \tau / \hbar)^{-1}$ [18–22], и даже во втором порядке [23]. В [24, 25] были предприняты попытки рассмотрения взаимодействия и беспорядка и их влияния на термодинамические свойства. Однако, предсказанное в этой теории исчезновение сжимае-

мости при переходе системы в локализованное состояние не подтвердилось экспериментальными результатами (раздел II).

2. Результаты численных расчетов. Неограниченное падение κ^{-1} для чистой 2DE системы обрезается в присутствии беспорядка. Из уравнения состояния [т.е., $E(r_s)$], полученного в [26] для нормальной жидкости, была вычислена ее сжимаемость

$$\frac{\kappa_0}{\kappa} = 1 - \frac{\sqrt{2} r_s}{\pi} + \frac{r_s^4}{8} \left[\frac{d^2}{dr_s^2} - \frac{1}{r_s} \frac{d}{dr_s} \right] E_c. \quad (3)$$

Здесь $\kappa_0 = \pi r_s^4 / 2$ – сжимаемость невзаимодействующей системы (рис. 1a), E_c – корреляционная энергия [26]. Из этой формулы следует, что сжимаемость становится отрицательной около $r_s = 2.03$, несколько раньше, чем 2.22 в приближении HF.

В работе [27] вычислены энергия основного состояния и сжимаемость 2DE системы для диапазона концентраций, включающего переход из “металлического” жидкого в локализованное состояние. Из вычислений в самосогласованном приближении HF и модели деформируемого желе, при низких плотностях найдено резкое изменение поведения электрохимического потенциала и расходимость обратной сжимаемости. Такое поведение и смена знака κ^{-1} качественно согласуется с наблюдаемым в экспериментах поведением κ^{-1} (см. раздел II).

Термодинамическая сжимаемость может быть легко вычислена из энергии основного состояния E_g :

$$\frac{\kappa_0}{\kappa} = -\frac{r_s^3}{8} \left[\frac{\partial E_g}{\partial r_s} - r_s \frac{\partial^2 E_g}{\partial r_s^2} \right]. \quad (4)$$

Asgari и Tanatar [28] вычислили энергию основного состояния и сжимаемость в рамках DFT и DMFT. Результаты представлены на рис. 1b. Сплошная кривая изображает κ^{-1} для чистой системы. Влияние беспорядка учитывалось в двух моделях: (i) не зависящая от плотности частота рассеяния $\tau^{-1} = \gamma$ аналогично [24], и (ii) с γ зависящей от r_s посредством экранирования потенциала примесей. Точечная кривая – κ_0/κ – вычисленная с постоянной γ , остается отрицательной при низкой плотности, подобно результату для чистой системы. Однако, κ_0/κ , вычисленная с учетом экранированного примесного потенциала, проходит через минимум и начинает возрастать в положительные значения. Таким образом, резкий рост обратной сжимаемости при низких плотностях является эффектом только от беспорядка. С другой стороны, беспорядок не влияет на κ в диапазоне малых $r_s = 2 \div 4$.

Значение концентрации n , при которой κ^{-1} имеет минимум, зависит от плотности примесей n_i (см.

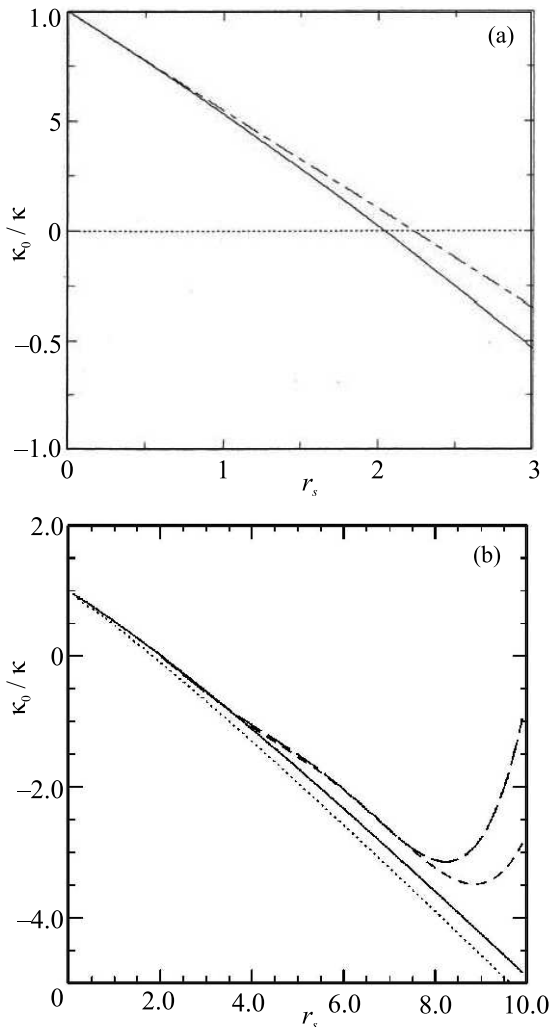


Рис. 1. (а) – κ_0/κ для 2DE системы в зависимости от r_s , вычисленная из (3). Штриховая линия – сжимаемость в приближении HF. Из работы [26]. (б) – κ_0/κ в более широком диапазоне r_s . Короткие и длинные штриховые линии – для концентрации примесей $n_i = 5 \times 10^{10}$ и 10^{11} см^{-2} , соответственно. Сплошная кривая – для системы без беспорядка. Точечная кривая вычислена с постоянной γ . Из работы [28]

рис. 1б). В экспериментах [29–31] обратная сжимаемость также демонстрирует резкий подъем после похождения минимума. Вначале [29], этот минимум рассматривался как термодинамический признак перехода металл-изолятор. Однако, в более поздних измерениях [30–32] и в теории [33, 28, 27, 34] эти два эффекта были разделены и аномальное поведение $1/\kappa$ было отнесено на счет неоднородного характера фазы изолятора (фазовое расслоение). Таким образом, вычисления [28] дают общую зависимость $1/\kappa(r_s)$, совпадающую с экспериментально наблюдаемой (раздел II В).

3. Численное моделирование в рамках теории нелинейного экранирования. В работе [33] с помощью приближения локальной плотности изучалось пространственное распределение плотности носителей и сжимаемость 2D электронной системы. Для этого, в рамках DFT вычислялась полная электронная энергия как:

$$E(n) = E_T(n) + E_{ee}(n) + E_d(n) + E_x(n) + E_c(n). \quad (5)$$

Здесь $E_T(n)$ – это функционал кинетической энергии, $E_{ee}(n)$ – прямая Кулоновская энергия вследствие неоднородности заряда, $E_d(n)$ – потенциальная энергия беспорядка, $E_x(n)$ и $E_c(n)$ – обменная и корреляционная энергия, соответственно. Пространственное распределение плотности носителей для основного состояния находилось путем минимизации функционала полной энергии по плотности. Беспорядок симулировался приложением к системе медленно изменяющегося случайного потенциала. Найдено, что при низких значениях средней плотности электроны образуют состояния “капель”, в которых сосуществуют области с высокой и низкой плотностью. При вычислении полной обменной и корреляционной энергии использовалась интерполяция численного результата QMC, полученного Танатаром и Сеперли [26] для однородной 2DE системы.

В [33] было обнаружено, что аномалия сжимаемости, наблюдаемая в 2D системах, которая сопровождается переходом металл-изолятор, может быть связана с образованием неоднородного (капельного) состояния вследствие влияния беспорядка при низких плотностях электронов. Рисунок 2 показывает распределение плотности в системе. Ясно видно, что электроны формируют области высокой концентрации, тогда как в других областях концентрация практически нулевая. В зависимости от средней плотности электронов в системе области с высокой плотностью могут быть связаны друг с другом ($r_s = 10$), или образовывать изолированные районы ($r_s = 19$). Существует некоторое значение плотности $r_s = 14$, где связность областей с высокой плотностью изменяется (происходит перколяционный переход).

Электрон-электронное взаимодействие важно для проводимости электронной системы с низкой средней плотностью в том смысле, что оно увеличивает протяженность областей с высокой локальной плотностью. Рисунок 3 показывает распределение локальной плотности для свободного электронного газа с той же самой средней плотностью, как и на рис. 2, полученное путем выключения электрон-электронного взаимодействия. В этом случае в системе образуются только некоторые

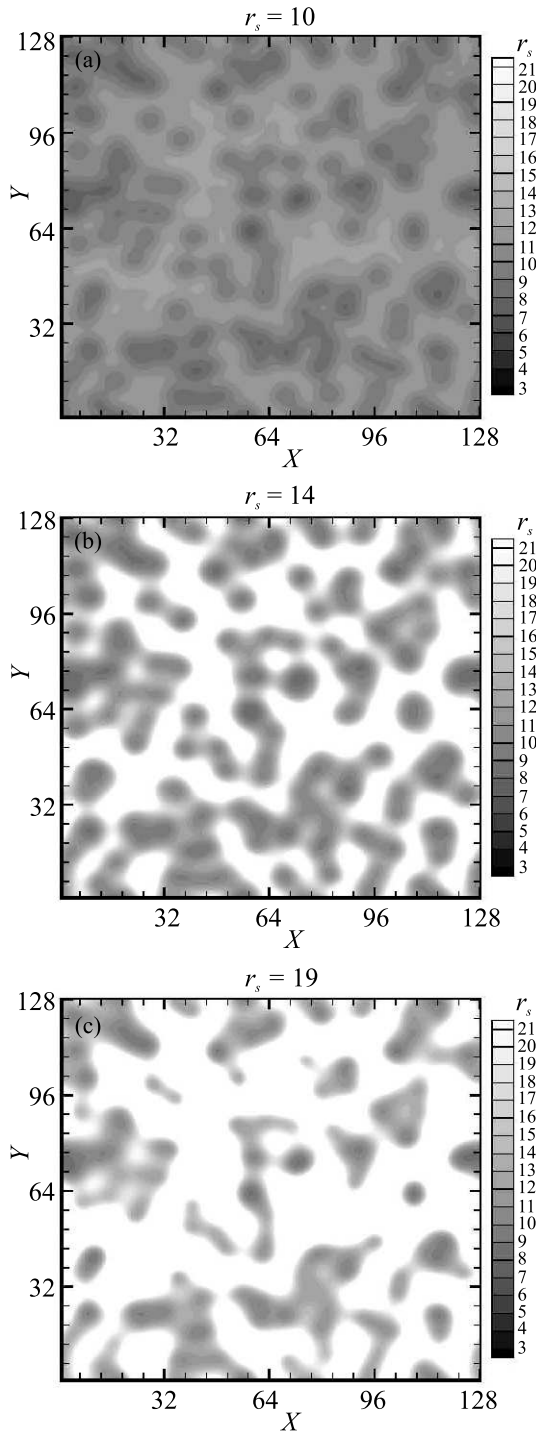


Рис. 2. Пространственное распределение локальной плотности электронов для различных значений их средней плотности. Контурный рисунок показывает локальный параметр $r_s = 1/\sqrt{\pi n}$. Плотность в белых областях быстро уменьшается до нуля. Размер системы выбран равным $L = 256a_B^*$. Потенциал беспорядка генерируется заряженными примесями с $n_i = 2.5 \times 10^{-3}/(a_B^*)^2$, расположенными на удалении от 2D плоскости $d = 10a_B^*$. Из работы [33]

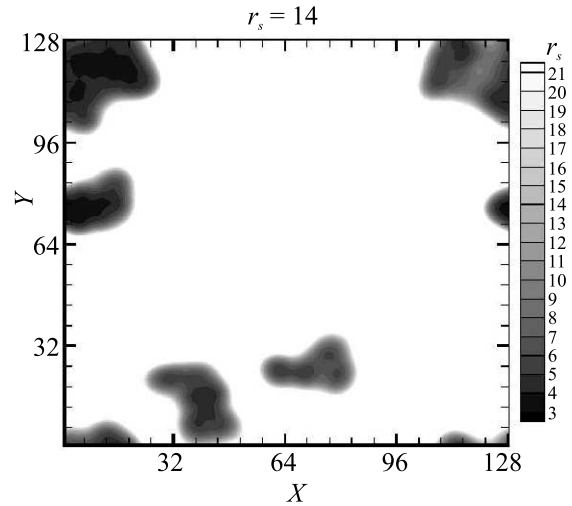


Рис. 3. Пространственное распределение локальной плотности для свободного электронного газа на том же самом потенциальном ландшафте, как на рис. 2 для $r_s = 14$. Из работы [33]

изолированные островки с высокой плотностью в наиболее разупорядоченных областях, тогда как во взаимодействующей системе с той же самой средней плотностью (рис. 2b) области с высокой локальной плотностью являются довольно протяженными. Другими словами, при данной силе беспорядка, критическая плотность для свободного электронного газа гораздо выше, чем для его взаимодействующего аналога.

II. Сжимаемость 2DE систем: экспериментальные результаты.

А. Емкостные измерения. В ранних экспериментах [11–13, 35, 36] информация о сжимаемости (или обратной плотности состояний) получалась из измерений емкости структур с затвором или из измерений изменения электрохимического потенциала в квантующих магнитных полях. Измеряемую емкость C МДП структуры с затвором можно рассматривать как последовательное соединение геометрической и “квантовой” частей:

$$C^{-1} = C_0^{-1} + e^2 S \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)^{-1}, \quad (6)$$

где C_0 – емкость в пределе $\partial \mu / \partial n \rightarrow 0$, а S – площадь 2D системы. C_0 можно оценить как $C_0^{-1} = C^{-1}|_{B=0} - (e^2 S D_0)^{-1}$, где плотность состояний $D_0 = \partial n / \partial \mu|_{B=0} = 8.37 \times 10^{14} (m^*/m_e) \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$ [8]. Для того, чтобы отделить вторую (“квантовую”) часть от геометрической емкости, результаты, измеренные в отсутствие поля, вычитались из результа-

тов в магнитном поле. Поведение сжимаемости в нулевом поле оставалось недоступным.

На рисунке 4 изображена разность $\Delta C(n) = -(C - C|_{B=0})$, измеренная с Si-МДП структурой

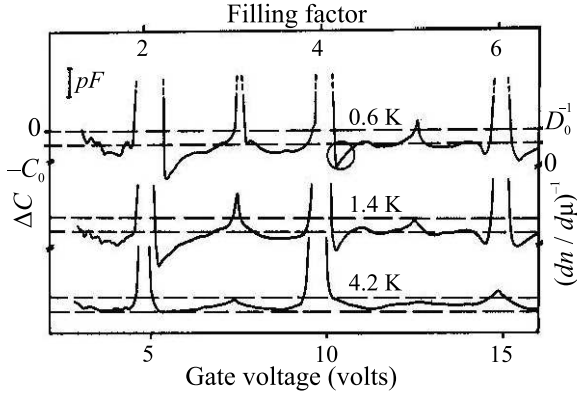


Рис. 4. Зависимость ΔC от V_g (пропорционально плотности) для трех температур, в поле 11.7 Тл. Верхняя горизонтальная шкала – коэффициент заполнения уровней Ландау. Из работы [11]

в зависимости от концентрации в фиксированном поле:

$$\Delta C(n) \approx (C^2/e^2S) [(\partial n/\partial \mu)^{-1} - D_0^{-1}].$$

При $T = 4.2$ К $\Delta C(n)$ согласуется с более ранними емкостными данными [37, 38, 39]. Однако, понижение температуры до 1.4 и 0.6 К приводит к появлению провалов с отрицательными значениями $(\partial n/\partial \mu)^{-1}$ по обе стороны от целочисленных факторов заполнения, в точном соответствии с теоретическим предсказанием [10]. В терминах [10] в общей энергии электронов к одночастичной энергии E_{1p} добавляется член E_{ee} . Соответственно, обратная плотность состояний

$$D^{-1} = D_{1p}^{-1} + G_{ee}^{-1}.$$

G_{ee} была оценена в [10] как:

$$G_{ee} = -(\epsilon^2 \alpha / \epsilon) (\{\nu\} n_B)^{3/2}, \quad \{\nu\} \leq \frac{1}{2},$$

$$= -(\epsilon^2 \alpha / \epsilon) [(1 - \{\nu\}) n_0^{3/2}], \quad \{\nu\} \geq \frac{1}{2},$$

где $\nu = n/n_B$ – фактор заполнения уровней Ландау, $\{\nu\} = \nu - \text{int}(\nu)$ – его дробная часть, n_B – кратность вырождения уровня, и α – безразмерная константа ($= 2$ для классического Кулоновского взаимодействия).

Обратная термодинамическая плотность состояний, соответственно, равна [10]:

$$D_{ee}^{-1} = -(3\alpha \epsilon^2 / 4\pi \epsilon) (\{\nu\} n_B)^{-1/2}, \quad \{\nu\} \leq \frac{1}{2},$$

$$= -(3\alpha \epsilon^2 / 4\pi \epsilon) [(1 - \{\nu\}) n_B]^{-1/2}, \quad \{\nu\} > \frac{1}{2}. \quad (7)$$

Отрицательная сжимаемость сигнализирует тенденцию 2DE системы к нарушению однородного состояния. С другой стороны, зарядовая стабильность 2DE системы с отрицательной сжимаемостью обеспечивается нейтрализующим фоном. Для 2DE систем с затвором условие стабильности анализировалось в [40].

В. Измерения глубины проникновения поля. Доминирование большого геометрического члена в емкости 2DE структуры с затвором, измеряемой традиционным способом, заставляет для нахождения квантовой части D_{ee} изменять другие параметры, такие как магнитное поле [11–13, 36], температура [41, 42] и т.п., и затем вычитать большой постоянный член. Такой метод имеет несколько недостатков. Во-первых, геометрический член обычно точно не известен и его вычитание вносит неопределенности. Во-вторых, геометрический член, в действительности, может и не оставаться постоянным при изменении внешних параметров, например магнитного поля. В-третьих, возбуждаемые в 2DE слое вихревые токи [43] медленно затухают, затрудняя модуляционные емкостные измерения при низких температурах в квантующем магнитном поле.

Метод “плавающего затвора”, разработанный в [44], не требует модуляции поля или модуляции плотности и поэтому может быть использован для измерений электрохимического потенциала 2DE системы даже в режиме квантового эффекта Холла [45, 46].

Альтернативный метод измерения проникновения поля, введенный Эйзенштейном [14, 15], обеспечивает автоматическое вычитание геометрического члена. Это достигается использованием двухслойной 2D-системы и измерением доли переменного электрического поля δE_0 , проникающего в один слой и детектируемого вторым. На вставке к рис. 5 показана схема измерений. Переменное поле δE_p проникает через верхний слой и вызывает протекание тока через внешний импеданс Z , генерируя детектируемое напряжение V_{sig} . В нижней части рис. 5 показана зависимость измеренного проникающего поля от напряжения на затворе или электронной плотности верхнего 2DE слоя. Это проникающее поле и есть мера экранирующей способности электронов, которая обратно пропорциональна κ . Главное преимущество этого экспериментального подхода заключается в том, что он обеспечивает прямое получение $\partial \mu / \partial n$ для верхнего 2DE слоя без какого-либо вычитания

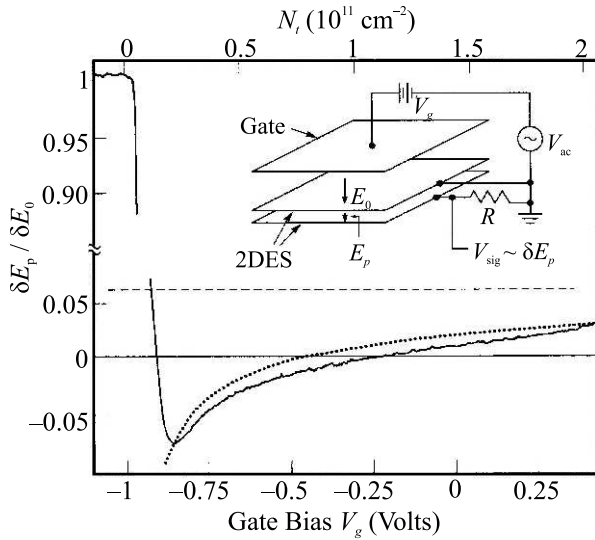


Рис. 5. Нормированное проникающее поле $\delta E_p / \delta E_0$ в зависимости от напряжения на затворе при $B = 0$ и $T = 1.2$ К. Точечная кривая вычислена с использованием результатов [26]. Верхняя ось соответствует плотности верхней 2DE системы. Штриховая линия - не взаимодействующая система. Вставка – схема измерений. Из работы [14]

геометрического вклада. В работе [29] метод измерения проникающего поля был модифицирован для измерений с гетероструктурой с только одним слоем носителей.

Если бы 2DE система была не взаимодействующей, то проникающее в нижний слой поле составляло бы несколько процентов и было бы положительным. Этот результат качественно изменяется е-е взаимодействием, которое делает наблюдаемое дифференциальное проникающее поле отрицательным.

Наблюдаемый минимум в сжимаемости [15] вызвал большой интерес, когда авторы [29] сообщили, что в некоторых образцах минимум практически совпадает с переходом металл-изолятор в транспорте. Это совпадение вначале рассматривалось как термодинамическое свидетельство вызванного взаимодействием фазового перехода [47, 24]. Однако, позже в работе [32] авторы на нескольких образцах измерили одновременно сжимаемость, емкость и сопротивление $\rho(T)$ в окрестности перехода металл-изолятор. В результате было показано, что совпадение в некоторых образцах двух эффектов, минимума обратной сжимаемости и изменения знака $d\rho/dT$, является случайным.

С. Измерения локальной сжимаемости. Папи и др.. [30, 31] провели локальные измерения $\partial\mu/\partial n$ в широком диапазоне плотностей, включая локали-

зованное состояние. В измерениях использовались одноэлектронные транзисторы (SET), расположенные непосредственно над двумерным дырочным газом (2DHG) структур GaAs/AlGaAs. Этот метод позволил исследовать локальное поведение $\partial\mu/\partial n$, а также его пространственные вариации. В состоянии равновесия энергия Ферми постоянна по всему образцу, поэтому изменение $\mu(n)$ вызывает изменение электростатического потенциала, которое легко найти путем измерения изменения тока через SET. Пространственное разрешение, определяемое размером SET и его расстоянием от 2DHG, составляло 0.1×0.5 мкм².

В “металлическом” режиме высокой плотности, в отличие от ожидаемого результата HF для чистой системы, измеренная зависимость $\mu(n)$ имеет кусочный характер с длинными пилообразными колебаниями. В локализованном состоянии на них накладывается новый набор быстрых пилообразных колебаний (рис. 6b) с характерным периодом на порядок меньше и амплитудой, нарастающей с понижением плотности.

Пилообразный профиль напоминает зависимость электрохимического потенциала квантовой точки от числа электронов [48] и, следовательно, указывает на существование дискретных событий перезарядки. Таким образом, измеряемое значение μ для 2DHG не возмущается вдоль участков с отрицательными наклонами, пока между 2DHG и SET не возникает определенное смещение, делающее перезарядку промежуточного локализованного состояния энергетически выгодной. Это приводит к резкому падению электростатического потенциала, после чего μ продолжает изменяться плавно до следующего события в экранировке.

Авторы [30] реконструировали базовую зависимость $\mu(n)$ путем сборки сегментов воедино; результаты показаны на рис. 7 для пяти SET, расположенных на расстоянии друг от друга. В “металлическом” режиме (высокая плотность) все данные коллапсируют на одну кривую на рис. 7, которая довольно близка к предсказанию модели HF.

Для локализованной фазы, предполагая, что новая серия пилообразных осцилляций происходит от экранирования ловушек заряда, авторы нанесли их наклоны, $\partial\mu/\partial n$, на один график (рис. 7). В локализованной фазе знак наклона заранее не известен, поэтому на рис. 7 приведены абсолютные значения наклонов. Отклонения от зависимости HF достигают порядка величины при наименьшей плотности и свидетельствуют об изменении экранирующих свойств 2DHG при переходе в локализованное состояние.

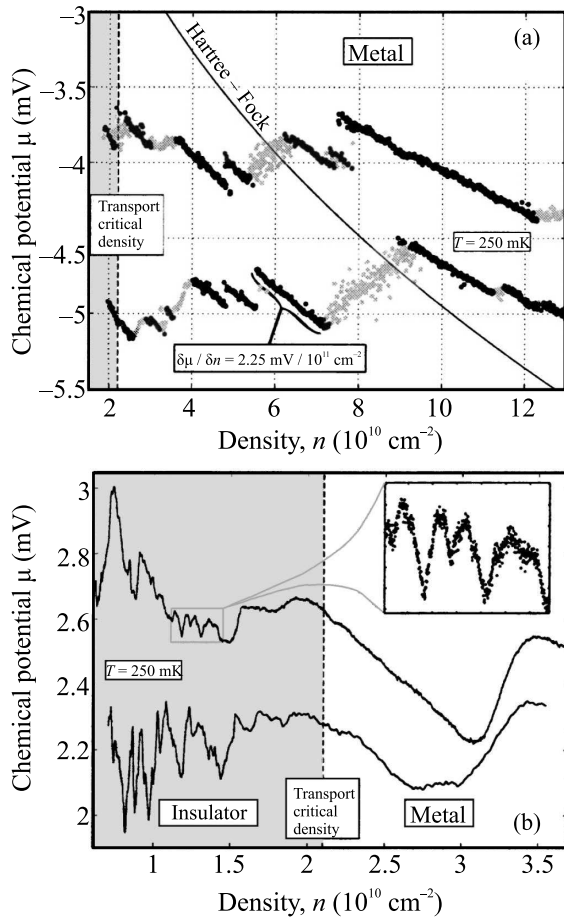


Рис. 6. (а) – Измеренная зависимость $\mu(n)$ в металлическом режиме (точки) и вычисленная зависимость в приближении HF (1) для “чистой” системы (сплошная линия). Измеренные отрицательные наклоны выделены темными символами для того, чтобы продемонстрировать их схожесть с моделью HF. (б) – Измеренная зависимость $\mu(n)$ по обе стороны от MIT. Вставка: увеличенная область данных в режиме изолятора. Из работы [30]

Флуктуации величины наклонов в состоянии изолятора (рис. 7) указывают на мезоскопические эффекты. Усредненное поведение $\partial\mu/\partial n$ в состоянии изолятора зависит от положения SET (вставка на рис. 7), свидетельствуя о пространственно неоднородном состоянии 2DE системы.

Локальные измерения [31] высветили важную роль ловушек заряда в термодинамике основного состояния 2DE системы. Это может иметь прямое отношение к моделям фазового расслоения, в которых 2DE жидкость и заряженные ловушки находятся в равновесии, в частности [49, 50]. Таким образом, в металлической фазе $\partial\mu/\partial n$ в среднем следует HF модели, свидетельствуя о том, что она пространственно

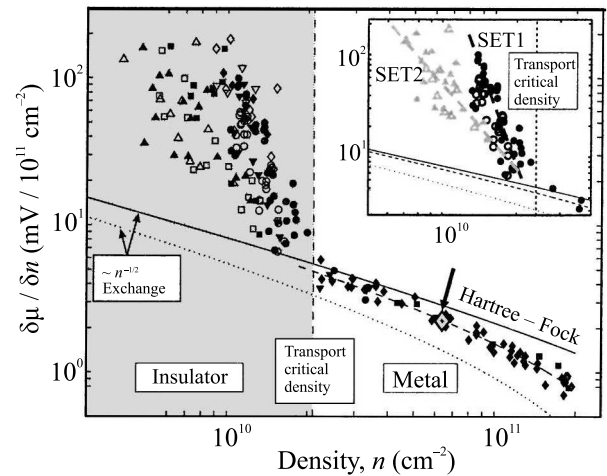


Рис. 7. Зависимость $|d\mu/dn|$, собранная из данных от нескольких SET на нескольких образцах. В режиме изолятора величина $|d\mu/dn|$ характеризует как отрицательные, так и положительные наклоны. Каждая точка соответствует сегменту на исходной зависимости $\mu(n)$. Точка, отмеченная стрелкой отвечает отмеченному сегменту на рис. 6а. Вставка: результаты для двух SET на одном и том же образце демонстрируют пространственную зависимость $|d\mu/dn|$ в состоянии изолятора. Из работы [30]

почти однородна. Фаза же изолятора, напротив, является существенно пространственно неоднородной.

III. Эффекты фазового расслоения в термодинамике и транспорте: эксперимент.

А. Обнаружение “спиновых капель” из термодинамических измерений спиновой намагниченности. Метод термодинамических измерений $\partial\mu/\partial B$ был предложен и обоснован в [51, 52]. Для того, чтобы исследовать чисто спиновую восприимчивость, без орбитального вклада, измерения в [51, 52] проводились в магнитном поле B_{\parallel} , ориентированном строго параллельно 2D плоскости. В [52] измерялся ток перезарядки Si-МДП структуры с затвором $\delta I = [i\omega C_0 \delta B / e](\partial\mu/\partial B)$ при модуляции магнитного поля с амплитудой δB , где C_0 – известная емкость структуры “затвор – 2DE система”. Из тока перезарядки находилась $\partial\mu/\partial B$, которая, вследствие соотношения Максвелла, $\partial M/\partial n = -\partial\mu/\partial B$, прямо дает намагниченность на электрон $\partial M/\partial n$.

Для изучения эффектов взаимодействия в работе [53] измерения проводились в слабых полях, $g\mu_B B \leq k_B T$. При больших плотностях (малых r_s) $\partial M/\partial B$ имеет отрицательный знак, как и ожидается для Ферми жидкости (см. раздел I), а при понижении плотности $\partial M/\partial n$ становится положительной и гораздо большей, чем можно ожидать для воспри-

имчивости Паули [53]. При увеличении поля (но при соотношении $g\mu_B B < k_B T$), $\partial M/\partial n$ быстро увеличивается и превышает магнетон Бора более чем в 2 раза при низких температурах (рис. 8).

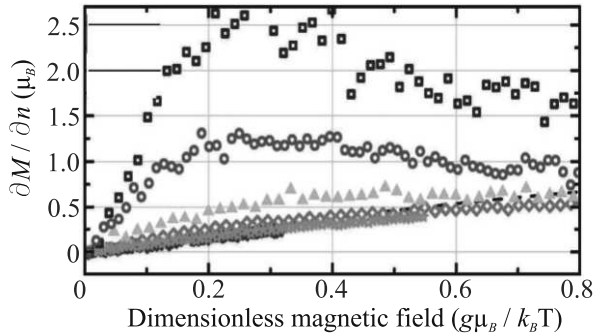


Рис. 8. (Цветной онлайн) Намагничивание на электрон $\partial M/\partial n$ в слабом магнитном поле в зависимости от поля, нормированного на температуру $b = g\mu_B B/k_B T$ для плотности электронов $5 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$ при нескольких температурах ($T = 0.8, 1.2, 1.8, 4.2, 7, 10, 24 \text{ К}$, сверху вниз). Из работы [53]

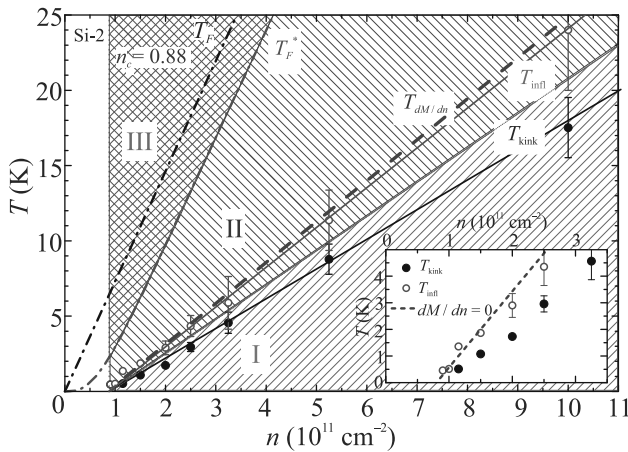


Рис. 9. (Цветной онлайн) Эмпирическая фазовая диаграмма 2DE системы. Заштрихованные области: I – баллистический режим взаимодействий; II – режим аномального магнитосопротивления; III – невырожденный режим. Незакрашенная область при $n < n_c$ – локализованное состояние. Сплошные точки: температура “изгиба” T_{kin} ; пустые кружки: точка перегиба T_{inf} . Штрихпунктирные кривые отмечают расчетные значения зонного (T_F) и перенормированного (T_F^*) значения температуры Ферми. Вставка показывает увеличенную область низких плотностей; штриховая линия – $T_{dM/dn}$ [53]. Из работы [54]

Такое поведение $\partial M/\partial n$ походит на зависимость ожидаемую для свободных спинов [53]. Однако, тот факт, что $\partial M/\partial n$ превышает магнетон Бора, прямо

указывает на ферромагнитное упорядочение электронных спинов. Кривые намагничивания $\partial M/\partial n$ (рис. 8) насыщаются в поле $b = \mu_B B/(k_B T) \sim 0.25$, сигнализируя, что частицы, которые реагируют на модуляцию поля и перезаряжаются, имеют спин, равный $1/(2b) \approx 2$, а не $1/2$. Этот результат является прямым свидетельством возникновения в 2D системе двухфазного состояния, состоящего из парамагнитной Ферми жидкости (FL) и ферромагнитных доменов (“спиновых капель”) с полным спином ~ 2 , состоящих, соответственно, из 4-х или более электронов.

Существование двухфазного состояния не является исключительным свойством локализованного (по критериям транспорта) состояния с низкой плотностью. Спиновые капли детектировались в [53] в широком диапазоне плотностей, вплоть до $n \approx 2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, т.е. в два раза выше критической плотности перехода в локализованное состояние, иначе говоря в режиме высокой “металлической” проводимости $\sigma \sim 80e^2/h$.

В. Эффекты фазового расслоения в транспорте заряда. В работе [54] были обнаружены несколько взаимосвязанных особенностей в магнитотранспорте, транспорте в отсутствие поля и термодинамической спиновой намагниченности в 2DE коррелированной системе. Более детально: (i) в магнитопроводимости (MC), в параллельном поле обнаружено установление нового режима выше некоторой температуры $T_{\text{kink}}(n)$, зависящей от плотности. (ii) Температурная зависимость сопротивления в нулевом поле примерно при этих же температурах $T_{\text{inf}}(n) \approx T^*$ имеет точку перегиба. (iii) В термодинамических измерениях восприимчивость на электрон, $\partial\chi/\partial n \equiv \partial^2 M/\partial B \partial n$, изменяет знак при $T_{dM/dn} \approx T^*$ [53].

Все три характерные температуры, T_{kink} , T_{inf} и $T_{dM/dn}$ близки друг к другу и наблюдаются только в режиме сильных межэлектронных корреляций. Ниже показано, что эти особенности удается описать в рамках модели фазового расслоения.

1. *Магнитотранспорт в параллельном поле.* Особенности магнитотранспорта в параллельном поле и транспорта в нулевом поле требуют более детального рассмотрения. В традиционной теории квантовых поправок взаимодействия (IC) [55], в наинизшем порядке изменения MC в слабом поле $g\mu_B B_{\parallel} < k_B T \ll k_B T_F$ является параболическим. Это ясно из соображений симметрии, а также следует из теории IC, или из теории температурно-зависимого экранирования [56, 57].

$$\sigma = \sigma_0 - a_\sigma B^2 + \mathcal{O}(B^2); \quad \rho = \rho_0 + a_\rho B^2 + \mathcal{O}(B^2), \quad (8)$$

Здесь

$$a_\sigma \equiv -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial B^2} \Big|_{B=0} = \frac{1}{2\rho^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial B^2}; \quad a_\rho \equiv \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial B^2} \Big|_{B=0}.$$

В работе [54] детально изучалось магнитосопротивление в терминах коэффициента $a_\sigma(T, n)$. В теории IC изменение $\sigma(T, B)$ для 2DE системы описывается суммой одночастичной интерференционной поправки и поправок от е-е взаимодействия [58, 55]

$$\Delta\sigma(T) \approx \Delta\sigma_C(T, B) + n_T(B)\Delta\sigma_T(T, B) + O\left(\frac{1}{k_F l}\right).$$

Здесь первый член объединяет одночастичную интерференционную поправку и поправку взаимодействия в синглетном канале, а второй член – это поправки взаимодействия в триплетных каналах, $k_F l \gg 1$ – безразмерная проводимость. В рамках того же подхода, MC в слабом поле, параллельном 2D плоскости связано с зависимостью от поля эффективного числа триплетных каналов, которое, в свою очередь, определяется Зеемановским расщеплением [55].

В результате, поправки первого порядка $\Delta\sigma(B, T) \equiv \sigma(T, B) - \sigma(T, 0)$ за счет взаимодействия в диффузионном и баллистическом режимах [55] могут быть выражены в терминах a_σ следующим образом:

$$a_\sigma(T) \propto \begin{cases} (1/T)^2, & T\tau \ll 1 \\ (1/T), & T\tau \gg 1. \end{cases} \quad (9)$$

Точные выражения для поправок приведены в [55].

Таким образом, согласно предсказаниям теории IC, с *ростом* температуры, MC должно трансформироваться от зависимости $(1/T^2)$ к $(1/T)$. Эти предсказания теории хорошо подтверждаются измерениями на образцах Si-МДП с низкой подвижностью (большие плотности, слабое взаимодействие) [54]. В противоположность этому, для образцов с высокой подвижностью (низкие плотности, сильное взаимодействие), как показано на рис. 10, с *ростом температуры* $a_\sigma(T)$ изменяется от обычной зависимости баллистического типа $-(B^2/T)$ к аномальной зависимости $-(B^2/T^2)$. Несмотря на отсутствие перегрева электронов [59], диффузионный режим MC в структурах с высокой подвижностью не наблюдается вплоть до $T = 0.3$ К.

Из рисунка 10 видно, что зависимость баллистического типа $a_\sigma \propto T^{-1}$ протягивается до температур 1.5–2 К (которые на порядок больше, чем ожидаемая граница диффузия/баллистика, $T_{дб} \approx 0.2$ К) [54], а затем резко изменяется на новый неподвиженный

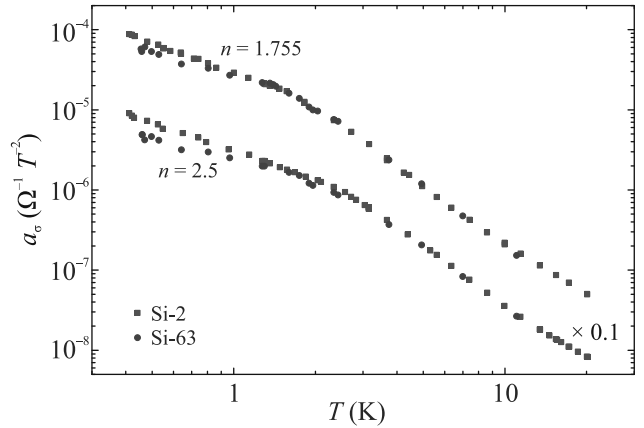


Рис. 10. (Цветной онлайн) Сравнение температурных зависимостей коэффициента $a_\sigma(T)$ для двух образцов, и для двух значений плотности (в единицах 10^{11} см^{-2}). Кривые отмасштабированы для ясности на коэффициент, указанный рядом с каждой кривой. Цитировано из [54]

тип зависимости $a_\sigma(T) \propto T^{-2}$. Это поведение даже качественно не согласуется с теорией (9). Кроссовер на рис. 10 устанавливается довольно резко, как излом на двойном логарифмическом графике. Этот излом и общее поведение воспроизводимо наблюдалось на нескольких образцах с высокой подвижностью в широком диапазоне плотностей. В следующем разделе показано, что наблюдаемый эффект в магнитном поле связан с установлением двухфазного состояния.

2. Транспорт в нулевом поле. В этом разделе анализируются $\rho(T)$ и $\sigma(T)$ зависимости в нулевом поле. Для Si-МДП структур с высокой подвижностью изменения $\rho(T)$ и $\sigma(T)$ при $B = 0$ (см. рис. 11) велики (до 10 раз), не позволяя применять теорию квантовых поправок.

Каждая из $\rho(T)$ зависимостей для различных значений плотности имеет две характерные точки: T_{\max} – максимум $\rho(T)$, и T_{inf} – точка перегиба [60, 61]. Тогда как T_{\max} имеет порядок перенормированной энергии Ферми, точка перегиба соответствует более низким температурам, в заведомо вырожденном режиме. Важно, что точка перегиба оказывается близкой к температуре излома зависимостей $a_\sigma(T)$ (см. рис. 9 и 11). Кроме того, $T^*(n)$ много больше температуры “декогерентности”, при которой исчезает фазовая когерентность (определенная как $\tau_\varphi(T) = \tau$ [62]), подтверждая, что излом, перегиб и смена знака $\partial\chi/\partial n$ не имеют отношения к поправкам за счет одночастичной интерференции [62–65].

Как видно из рис. 11, температурная зависимость $\rho(T)$ является монотонной вплоть до $T = T_F$ и имеет

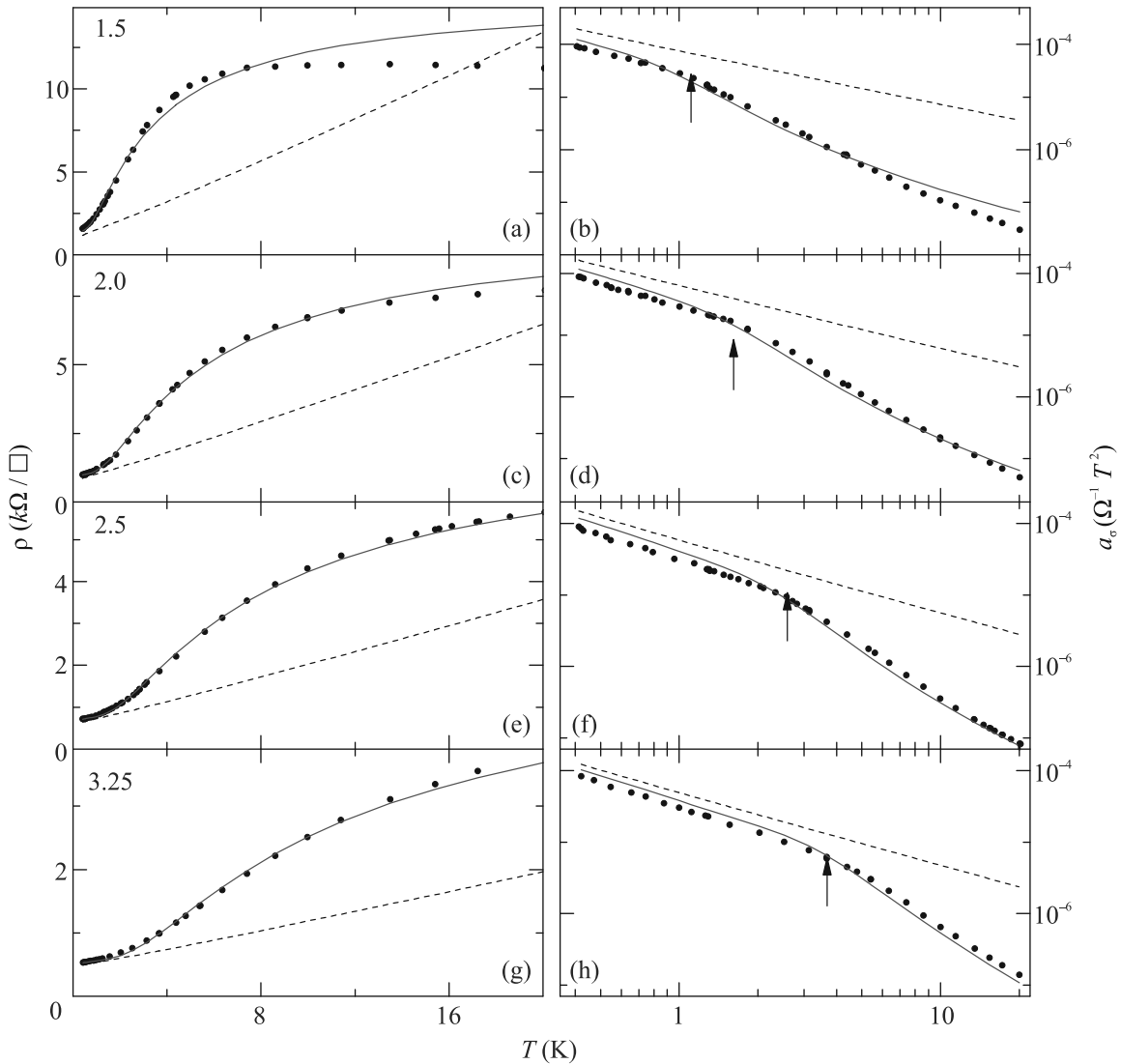


Рис. 11. (Цветной онлайн) Аппроксимация зависимостей $\rho(T, B = 0)$ (слева) и $a_\sigma(T)$ (справа) с одним и тем же набором подгоночных параметров. Плотность носителей (сверху вниз) $n = 1.5, 2.0, 2.5$ и $3.25 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Штриховые линии на левых панелях – вычисленные ИС поправки в баллистическом режиме. Вертикальные стрелки на правых панелях отмечают положения изломов. Из [54]

одну и ту же аддитивную функциональную зависимость в широком диапазоне плотностей:

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \rho_0 + \rho_1 \exp(-\Delta(n)/T), \\ \Delta(n) &= \alpha(n - n_c(B)), \end{aligned} \quad (10)$$

где $\rho_1(n, B)$ – медленно убывающая функция n , а $\rho_0(n, T)$ включает сопротивление Друде и квантовые поправки, как одночастичные, так и многочастичные. Хотя данная эмпирическая температурная зависимость сопротивления была предложена в [66] из других соображений, она хорошо описывает $\rho(T)$ для различных 2D систем [66–73].

Эмпирическая форма (10) удовлетворяет общим требованиям симметрии поведения транспорта в окрестности критической точки перехода металл-изолятор [74, 61]. Эта форма подразумевает 2-х канальное рассеяние и, следовательно, согласуется с представлением о двухфазном состоянии 2D системы (правило Матиссена). Как отмечено выше, изменение $\rho(T)$ (и $\sigma(T)$) с температурой (рис. 11) велико, поэтому поправки первого порядка по $T\tau$, конечно, не могут его описать. Функциональная зависимость (10) с экспоненциальным членом правильно описывает точку перегиба $\rho(T)$, а также ее линейную зависимость от плотности [66, 75]. Очевидно, что в этой

модели $T_{\text{inf}} = \Delta/2$. Для учета магнитного поля и, следуя результатам [75], в (Δ/T) включены все четные по B члены низшего порядка:

$$\Delta(T, B, n)/T = \Delta_0(n)/T - \beta(n)B^2/T - \xi(n)B^2/T^2, \quad (11)$$

с $\Delta_0 = \alpha[n - n_c(0)]$.

Формулы (10) и (11) связывают температурные зависимости магнитопроводимости и $\rho(T)$. Объединяя (10) и (11), получаем

$$\rho(B, T) = [\sigma_D - \delta\sigma \cdot \exp(-T/T_B)]^{-1} + \rho_1 \exp\left(-\alpha \frac{n - n_c(0)}{T} - \beta \frac{B^2}{T} - \xi \frac{B^2}{T^2}\right). \quad (12)$$

Первый член включает проводимость Друде и квантовые поправки [58, 55], плавно обрезаемые при $T = T_B \approx \Delta/2$. В [54] $\delta\sigma(B, T)$ была вычислена, используя экспериментально измеренные значения Ферми-жидкостных констант $F_0^\sigma(n)$ [76, 65], а также σ_D , определенное согласно алгоритму [77].

Коэффициент $a_\sigma = -(1/2)\partial^2\sigma/\partial B^2$, вычисленный из (12), показан на рис. 11 в сравнении с экспериментальными данными. При аппроксимации $\rho(T)$ (рис. 11а, с, е, г) использовался только один подгочный параметр $\rho_1(n)$ для каждой плотности. $n_c(0)$ определялось из обычного скейлингового анализа при $B = 0$ [61], а наклон $\alpha = 2\partial T_{\text{inf}}(n)/\partial n$ может быть определен из рис. 9.

Как видно, обе измеренные зависимости $\rho(T)$ и $a_\sigma(T)$ хорошо аппроксимируются данной моделью с одними и теми же параметрами; модель правильно описывает резкую зависимость $\rho(T)$, ее перегиб, а также излом на зависимости $a_\sigma(T)$. Очевидно, что в рамках данной модели изгиб соответствует переходу от низкотемпературного режима МС (с доминирующей линейной зависимостью $\sigma(T)$) к “высокотемпературному” режиму с экспоненциальной зависимостью $\rho(T)$. Подчеркнем, что оба режима не имеют отношения к диффузионному режиму взаимодействия. Этот важный вывод ставит под сомнение ранние попытки применения двухпараметрического скейлинга для описания магнитосопротивления $\sigma(B)$ и температурной зависимости $\rho(T)$ в рамках ренормгруппы.

Таким образом, в рамках феноменологической двухфазной модели с двумя каналами рассеяния удается объяснить все наблюдаемые особенности в транспорте и магнитотранспорте в параллельном поле. Важно, что их характерные температуры близки к температуре кроссовера $T_{dM/dn}(n)$, где спиновая намагниченность на электрон изменяет знак [53] (вставка на рис. 9). Физически это означает, что при температурах ниже $T_{dM/dn}(n)$ коллективные капли с большим спином (миноритарная фаза) “плаваются”

при увеличении плотности. Другими словами, электроны, добавляемые в Ферми-жидкость, улучшают экранирование, содействуя исчезновению спиновых капель. При температурах выше $T_{dM/dn}(n)$, напротив, число спиновых капель растет с повышением плотности; в этом случае добавляемые в 2D систему электроны предпочитают объединяться в новые спиновые капли. В [54] был сделан вывод, что T^* может быть связано с усредненным энергетическим спектром SD фазы.

С. Эффекты фазового расслоения в спиновой восприимчивости. С помощью методики с управляемым вектором поля в работе [50] были прецизионно измерены осцилляции Шубникова–де Газа (ШдГ) при различных магнитных полях в 2D плоскости. Ранее [76, 78, 79] было показано, что осцилляции $\delta\rho_{xx}$ хорошо аппроксимируются формулой Лифшица–Косевича [78–81]; это позволяет определять с высокой точностью спиновую восприимчивость χ^* ($\sim 1\%$) и плотность носителей n_{SDH} из биений осцилляций.

Рисунок 12 показывает основной результат [50] – резкая немонотонная зависимость χ^* от магнитного поля в плоскости. Характерные изменения $\delta\chi^*(B)/\chi^*(0)$ составляют $\sim 25\%$ при низкой плотности, снижаясь до $\sim 6\%$ при высоких плотностях $10 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Эти результаты [50] в пределе $B_{\parallel} \rightarrow 0$ совпадают с ранее измеренными значениями [76, 65]. Характерное поле минимума $\chi^*(B)$, $B_{\parallel} \sim 1 \text{ Т}$ для $n = (1.1 - 2) \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, гораздо меньше поля полной спиновой поляризации 2DE системы $B_p \sim 20 \text{ Т}$. Известно, что для однородной Ферми жидкости есть только одно характерное поле – B_p .

Изменения $\delta\chi^*(B)$, найденные из осцилляций ШдГ, характеризуют только подвижные электроны. Ключом к объяснению этого эффекта является корреляция $\delta\chi^*(B)$ с изменением плотности делокализованных носителей δn_{SDH} (рис. 13b), и с термодинамической намагниченностью коллективных локализованных состояний $M(B)$ (рис. 8с) [53]. Такая корреляция подсказывает, что наблюдаемые изменения свойств делокализованных состояний и, как следствие, перераспределением носителей между двумя подсистемами. Диапазон доступных плотностей, где удается измерять $\delta n_{\text{SDH}}(B_{\parallel})$, ограничен, так как при приближении к критической плотности перехода в локализованное состояние приложение поля в плоскости быстро приводит к полной локализации [82–85].

Из наблюдаемого при сверхнизких температурах перераспределения плотности между двумя подси-

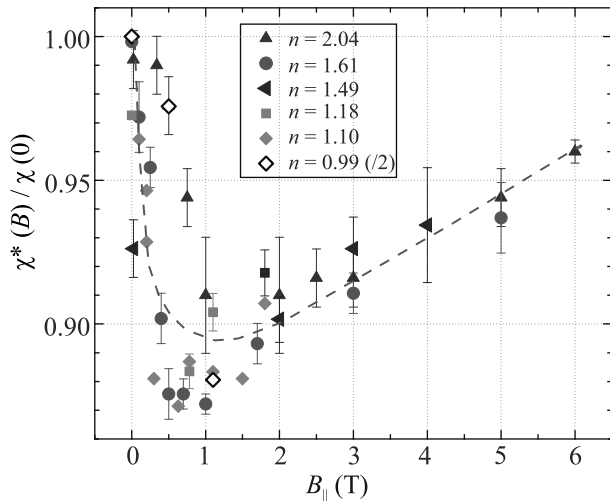


Рис. 12. (Цветной онлайн) Сводка зависимостей $\chi^*(B_{\parallel})/\chi^*(0)$ для двух образцов и нескольких значений плотности. Для наименьшей плотности $n = 0.99$, изменения $\chi^*(B)/\chi^*(0)$ уменьшены в 2 раза. Плотность – в единицах 10^{11} см^{-2} , $T = 0.1 \text{ К}$. Из [50]

стемами следует, что локализованные SD состояния расположены по энергии вблизи уровня Ферми. Никакой зависимости от температуры не обнаружено для δn_{SDH} в диапазоне $0.1 - 0.5 \text{ К}$, следовательно, перераспределение происходит посредством упругого туннелирования. Схематическая диаграмма, иллюстрирующая это двухфазное состояние, приведена на рис. 14. Отметим, что данная диаграмма резко отличается от традиционной модели локализованных за счет беспорядка одночастичных состояний вблизи хвоста зоны проводимости [8, 86, 87].

Следует отметить, что концентрация, определяемая из осцилляций ШдГ в системе с фазовым расслоением, определяется локальной плотностью в Ферми-жидкостных областях, в которых носители обладают наибольшим временем релаксации, а совсем не полной плотностью (определяемой из измерений емкости или тока перезарядки), и также не средней плотностью. Такая картина сохраняется до тех пор, пока области делокализованных состояний (“озера” Ферми жидкости, FL) распространяются на размер образца.

Отметим также, что перераспределение носителей между двумя фазами не легко определить другими методами: например, емкостные измерения на частотах $10^1 - 10^5 \text{ Гц}$ дают информацию о всех носителях, которые перезаряжаются на временах модуляции, т.е. как делокализованных ($c \tau \sim \text{ps}$), так и SD состояниях. Холловские измерения также не могут пролить свет на распределение плотности делокали-

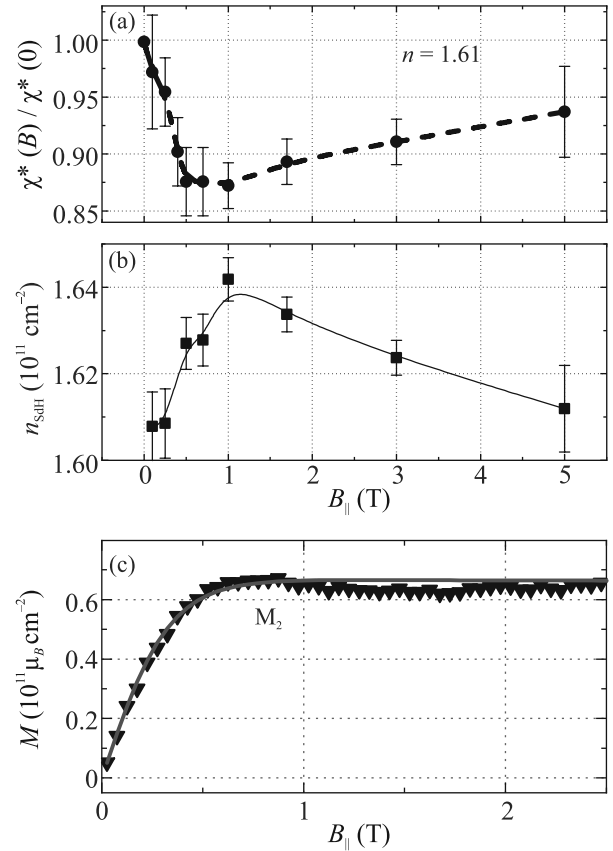


Рис. 13. (Цветной онлайн) Корреляция между зависимостями от магнитного поля B_{\parallel} для: (а) – $\chi^*(B)/\chi^*(0)$; (б) – плотности n_{SDH} ; (с) – спиновой намагниченности $M(B)$ (черные символы). Красная кривая – $\tanh(\mu_B B/k_B T)$ – аппроксимация данных $M(B)$. Концентрация $n_0 = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ для (а) и (б), и $1.4 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ для (с), $T = 0.1 \text{ К}$. Из [50]

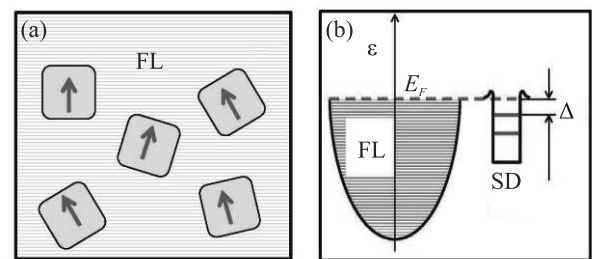


Рис. 14. (Цветной онлайн) (а) – Схематическое пространственное устройство двухфазного состояния и (б) – его энергетическая диаграмма. Из [50]

зованных и SD состояний, поскольку Холловское напряжение перестает быть связанным с плотностью носителей при приближении к локализованному состоянию [88].

Измерения [50] были проведены на МДП структуре при фиксированном напряжении на затворе V_g и при варьировании B_{\parallel} и T . В таких условиях в МДП структуре полный заряд постоянен, поэтому изменение плотности (δn_{SDH}) в FL-областях может происходить только путем перетекания носителей в локализованные области (SD) и обратно [42, 53].

Для описания полученных данных в работе [50] была предложена простая модель сосуществования двух фаз в термодинамическом равновесии. Эта модель, как оказалось, описывает результаты качественно, используя параметры, определенные из эксперимента. В частности, зависимость $n_{\text{FL}}(B)$, вычисленная в этой модели для типичной плотности $1.4 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ показана на рис. 15. Как видно, она согласуется с экспериментальными данными на рис. 13b; эта схожесть подтверждает применимость двухфазной термодинамической модели.

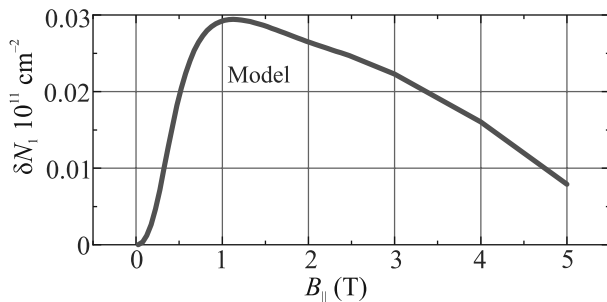


Рис. 15. (Цветной онлайн) Модельная кривая $\delta T_1(B_{\parallel})$, вычисленная из экспериментальных данных. Из работы [50]

Резюмируя содержание данного раздела, заключаем, что результаты [54, 50] дают основание считать, что фазовое расслоение в коррелированной 2D электронной системе существует не только вблизи перехода в состояние изолятора (как было выявлено в локальных измерениях сжимаемости [30]), но и в широком диапазоне плотностей, даже глубоко в “металлическом режиме” высокой проводимости $\sigma = (3 - 80) \times (e^2/h)$ [89].

IV. Заключение. Двумерная электронная система в кремниевых структурах в течение последних 50 лет служит площадкой, на которой было обнаружено множество новых эффектов, включая целочисленный квантовый эффект Холла, отрицательная электронная сжимаемость, сильная перенормировка эффективной массы и спиновой восприимчивости и пр. Эта 2DE система является сильно коррелированной в широком диапазоне плотностей, где энергия межчастичных взаимодействий много больше кинетической энергии Ферми.

Локальные измерения сжимаемости [30] свидетельствовали о развитии неоднородного состояния на микроскопическом масштабе в 2D системе при понижении концентрации носителей вблизи перехода в изолятор. Долгое время этот результат не принимали во внимание, рассматривая систему с высокой проводимостью как, в среднем, однородную Ферми жидкость. Из такого рассмотрения были определены ее усредненные Ферми-жидкостные параметры и количественно описаны усредненные свойства в транспорте заряда. Однако, более поздние термодинамические измерения [53] выявили признаки сосуществования и термодинамического равновесия, в широком диапазоне концентраций, мажоритарной Ферми жидкости и миноритарной фазы коллективных локализованных состояний с большим спином.

Последующие прецизионные измерения осцилляций ШдГ в присутствии поля, приложенного в 2D плоскости, выявили резкое изменение $\chi^*(B_{\parallel})$ в слабых полях и одновременное изменение концентрации подвижных носителей $\delta n_{\text{SDH}}(B)$. Установлено, что первопричиной этих вариаций является намагничивание коллективных локализованных состояний (“спиновых капель”) и, как результат, перераспределение носителей между двумя фазами. Независимые измерения спиновой намагниченности и магнитосопротивления в слабом параллельном поле, а также температурной зависимости сопротивления выявили существование нового энергетического масштаба $T^*(n) \ll T_F$, который отмечает кроссовер между режимом преимущественного размножения SD состояний и режимом их исчезновения. Результаты рассмотренных экспериментов удалось описать в рамках феноменологической двухфазной модели, что подтверждает правомочность концепции фазового расслоения и его существования даже в режиме высокой металлической проводимости $\sigma = (3 - 80) \times (e^2/h)$ [89].

В казидномерных системах главная движущая сила фазового расслоения связана с нестингом поверхности Ферми, который приводит к возникновению волны спиновой или зарядовой плотности, сосуществующей с парамагнитной или сверхпроводящей металлической фазой в окрестности фазового перехода [4, 90, 91]. В 2D системах нестабильность также может возникнуть в зарядовом или спин-обменном канале. Теоретически рассматривались несколько сценариев, в которых в мажоритарной Ферми жидкости возникает миноритарная фаза, такая как “льдинки” Вигнеровского кристалла или спин-поляризованные “капли”. Движущей силой в этих случаях является локальная Вигнеровская кри-

сталлизация [92, 93], локальная Стонеровская неустойчивость [94–100], или, возможно, изменение топологии поверхности Ферми [101–105].

Экспериментальные результаты, представленные в данном обзоре, свидетельствуют в пользу реализации миноритарной фазы в виде спин-поляризованных капель в мажоритарной Ферми-жидкости. Не исключено, однако, что при более сильном взаимодействии или более слабом беспорядка может проявиться неустойчивость в зарядовом канале. Попытки игнорировать тенденцию к спиновой/зарядовой неустойчивости или неустойчивости Ферми-поверхности, рассматривая только полуклассические эффекты беспорядка и экранирования [106], хотя и способны описать некоторые экспериментальные результаты (такие как отрицательная сжимаемость, транспорт в нулевом поле), но дают черезчур упрощенную картину явления фазового расслоения и упускают структуру гетерофазного состояния.

Интересными и пока открытыми вопросами остаются микроскопический механизм, отвечающий за фазовое расслоение, за перетекание носителей между фазами, а также энергетическая структура миноритарной фазы.

Автор благодарен Б. Л. Альтшулеру, Г. Вауер, Г. Brunthaler, И. С. Бурмистрову, М. Е. Гершензону, М. D'Iorio, J. Campbell, Н. Климову, Н. Kojima, С. В. Кравченко, А. Ю. Кунцевичу, Д. Л. Маслову, Л. А. Моргуну, О. Prus, М. Резникову, Д. Ринбергу, С. Г. Семенчинскому, Н. Teneh, В. С. Эдельману за плодотворное сотрудничество в развитии экспериментальных методов, проведении измерений, обсуждении результатов, и написании исходных статей.

Работа частично поддержана в рамках Госзадания ФИАН (# 0019-2019-0006) и в рамках гранта Российского фонда фундаментальных исследований (# 18-02-01013).

1. T. V. Ramakrishnan, H. R. Krishnamurthy, S. R. Hassan, and G. V. Pai, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 157203 (2004).
2. A. A. Gorbatshevich, Yu. V. Kopaev, and I. V. Tokatly, *Physica C* **223**, 95 (1994).
3. V. Z. Kresin, S. G. Ovchinnikov, and S. A. Wolf, *Superconducting state*, Oxford University Press, UK (2021).
4. *The Physics of Organic Superconductors and Conductors*, ed. by A. G. Lebed, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–N.Y., Tokyo (2008).

5. E. Fradkin, S. A. Kivelson, M. J. Lawler, J. P. Eisenstein, and A. P. Mackenzie, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 153 (2010).
6. M. Yu. Kagan, K. I. Kugel, and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rep.* **916**, 1 (2021).
7. G. Giuliani and G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid*, Cambridge University Press, Cambridge (2005).
8. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 4 (1982).
9. М. С. Белло, Е. И. Левин, Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, *ЖЭТФ* **80**, 1596 (1981).
10. A. L. Efros, *Solid State Commun.* **65**, 1281 (1988).
11. S. V. Kravchenko, V. M. Pudalov, and S. G. Semenchinsky, *Phys. Lett. A* **141**, 71 (1989).
12. S. V. Kravchenko, V. M. Pudalov, D. A. Rinberg, and S. G. Semenchinsky, *Phys. Lett. A* **146**, 535 (1990).
13. S. V. Kravchenko, D. A. Rinberg, S. G. Semenchinsky, and V. M. Pudalov, *Phys. Rev. B* **42**(6), 3741 (1990).
14. J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 674 (1992).
15. J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **50**, 1760 (1994).
16. S. Shapira U. Sivan, P. M. Solomon, E. Buchstab, M. Tischler, and G. Ben Yoseph, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3181 (1996).
17. В. А. Гепрель, Р. А. Сурис, *ЖЭТФ* **75**, 191 (1978). [V. A. Gergel' and R. A. Suris, *JETP* **48**, 95 (1978)].
18. А. М. Финкельштейн, *ЖЭТФ* **84**, 168 (1983) [A. M. Finkelstein, *JETP* **57**, 97 (1983)].
19. A. M. Finkelstein, *Z. Phys.* **56**, 189 (1984)
20. C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee, and M. Ma, *Phys. Rev. B* **30**, 527 (1984).
21. C. Castellani, C. di Castro, P. A. Lee, M. Ma, S. Sorella, and E. Tabet, *Phys. Rev. B* **30**, 1596 (1984).
22. B. L. Altshuler and A. G. Aronov, in *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, ed. by A. L. Efros and M. Pollak, Elsevier Science Publishers, N.Y. (1985).
23. D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994).
24. Q. Si and C. M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4951 (1998).
25. A. A. Pastor and V. Dobrosavljevic, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4642 (1999).
26. B. Tanatar and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989).
27. S. Orozco, R. M. Mendez-Moreno, and M. Moreno, *Phys. Rev. B* **67**, 195109 (2003).
28. R. Asgari and B. Tanatar, *Phys. Rev. B* **65**, 085311 (2002).
29. S. C. Dultz and H. W. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4689 (2000).

30. S. Ilani, A. Yacoby, D. Mahalu, and H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3133 (2000).
31. S. Ilani, A. Yacoby, D. Mahalu, and H. Shtrikman, *Science* **292**, 1354 (2001).
32. G. Allison, E. A. Galaktionov, A. K. Savchenko, S. S. Safonov, M. M. Fogler, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 216407 (2006).
33. J. Shi and X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 086401 (2002).
34. M. M. Fogler, *Phys. Rev. B* **69**, 121409 (R) (2004).
35. R. K. Goodall, R. J. Higgins, and J. P. Harrang, *Phys. Rev. B* **31**, 6597 (1985).
36. S. V. Kravchenko and J. M. Caulfield, J. Singleton, H. Nielsen, and V. M. Pudalov, *Phys. Rev. B* **47**, 12961 (1993).
37. T. P. Smith, W. I. Wang, and P. J. Stiles, *Phys. Rev. B* **34**, 2995 (1986).
38. T. P. Smith, B. B. Goldberg, P. J. Stiles, and M. Heiblum, *Phys. Rev. B* **32**, 2696 (1985).
39. V. Mosser, D. Weiss, K. V. Klitzing, K. Ploog, and G. Weinmann, *Solid State Commun.* **58**, 5 (1986).
40. H. Nielsen, S. V. Kravchenko, D. A. Rinberg, and V. M. Pudalov, *Physica B* **184**(1–4), 323 (1993).
41. Е. Тупиков, А. Ю. Кунцевич, В. М. Пудалов, И. С. Бурмистров, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 131 (2015). [Y. Tupikov, A. Yu. Kuntsevich, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, *JETP Lett.* **101**, 125 (2015)].
42. A. Yu. Kuntsevich, Y. V. Tupikov, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, *Nat. Commun.* **6**, 7298 (2015).
43. V. M. Pudalov, S. G. Semenchinsky, and V. S. Edelman, *Solid State Commun.* **51**, 713 (1984).
44. В. М. Пудалов, С. Г. Семенчинский, В. С. Эдельман, *ЖЭТФ* **89**, 1870 (1985) [V. M. Pudalov, S. G. Semenchinskii, and V. S. Edelman, *JETP* **62**, 1079 (1985)].
45. В. М. Пудалов, С. Г. Семенчинский, *Письма в ЖЭТФ*, **44**(11), 526 (1986) [V. M. Pudalov and S. G. Semenchinskii, *JETP Lett.* **44**(11), 677 (1986)].
46. В. М. Пудалов, *УФН* **191**, 3 (2021) [V. M. Pudalov, *Phys.-Uspekhi* **64**, 3 (2021)].
47. S. Chakravarty, S. Kivelson, C. Nayak, and K. Voelker, *Philos. Mag. B* **79**, 859 (1999).
48. L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, *Rep Progr. Phys.* **64**, 701 (2001).
49. B. L. Altshuler and D. L. Maslov, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 145 (1999).
50. V. M. Pudalov, and M. E. Gershenson, *Phys. Rev. B* **104**, 035407 (2021).
51. O. Prus, Y. Yaish, M. Reznikov, U. Sivan, and V. Pudalov, *Phys. Rev. B* **67** 205407 (2003).
52. M. Reznikov, A. Yu. Kuntsevich, N. Teneh, and V. M. Pudalov, *Pis'ma ZhETF* **92**, 518 (2010) [*JETP Lett.* **92**, 470 (2010)].
53. N. Teneh, N. Teneh, A. Yu. Kuntsevich, V. M. Pudalov, and M. Reznikov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 226403 (2012).
54. L. A. Morgun, A. Yu. Kuntsevich, and V. M. Pudalov, *Phys. Rev. B* **93** 235145 (2016).
55. G. Zala, B. N. Narozhny, and I. L. Aleiner, *Phys. Rev. B* **65**, 020201 (2001).
56. A. Gold and V. T. Dolgoplov, *Phys. Rev. B* **33**, 1076 (1986).
57. V. T. Dolgoplov and A. V. Gold, *Pis'ma v ZhETF* **71**, 42 (2000) [V. T. Dolgoplov and A. V. Gold, *JETP Lett.* **71**, 27 (2000)].
58. G. Zala, B. N. Narozhny, and I. L. Aleiner, *Phys. Rev. B* **64**, 214204 (2001).
59. O. Prus, M. Reznikov, U. Sivan, and V. M. Pudalov, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 016801 (2002).
60. D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, *Pis'ma v ZhETF* **84**, 780 (2006) [D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, *JETP Lett.* **84**, 662 (2006)].
61. D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 046405 (2008).
62. G. Brunthaler, A. Prinz, G. Bauer, and V. M. Pudalov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 096802 (2001).
63. V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, *Pis'ma v ZhETF* **68**, 497 (1998) [V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, *JETP Lett.* **68**, 534 (1998)].
64. V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, *Physica E* **3**, 79 (1998).
65. N. N. Klimov, D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, H. Kojima, and M. E. Gershenson, *Phys. Rev. B* **78**, 195308 (2008).
66. В. М. Пудалов, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 168 (1997) [V. M. Pudalov, *JETP Lett.* **66**, 175 (1997)].
67. Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C. C. Li, D. C. Tsui, and H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1288 (1998).
68. S. J. Papadakis and M. Shayegan, *Phys. Rev. B* **57**, R15068 (1998).
69. X. P. A. Gao, A. P. Mills Jr., A. P. Ramirez, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 166803 (2002).
70. T. Hörmann and G. Brunthaler, *Physica E* **40**, 1235 (2008).
71. J. Y. Zhang, C. A. Jackson, R. Chen, S. Raghavan, P. Moetakef, L. Balents, and S. Stemmer, *Phys. Rev. B* **89**, 075140 (2014).
72. S. Raghavan, J. Y. Zhang, and S. Stemmer, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 132104 (2015).
73. P. Moetakef, C. A. Jackson, J. Hwang, L. Balents, S. J. Allen, and S. Stemmer, *Phys. Rev. B* **86**, 201102(R) (2012).
74. B. L. Altshuler, D. L. Maslov, and V. M. Pudalov, *Phys. Stat. Sol. (b)* **218**, 193 (2000).

75. V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, ArXiv:cond-mat/0103087 (2001).
76. V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, N. Butch, E. M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **88**, 196404 (2002).
77. V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **91**, 126403 (2003).
78. V. M. Pudalov, A. Yu. Kuntsevich, M. E. Gershenson, I. S. Burmistrov, and M. Reznikov, Phys. Rev. B **98**, 155109 (2018).
79. V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, and H. Kojima, Phys. Rev. B **90**, 075147 (2014).
80. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, ЖЭТФ **33**, 88 (1957).
81. A. Isihara and L. Smrčka, J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 6777 (1986)
82. D. Simonian, S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik, and V. M. Pudalov, Phys. Rev. Lett. **79**, 2304 (1997).
83. V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Письма в ЖЭТФ **65**, 887 (1997). [V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, JETP Lett. **65**(12), 932 (1997)].
84. V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Physica B **249-251**, 697 (1998).
85. S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, A. D. Kent, and V. M. Pudalov, Phys. Rev. B **58**, 3553 (1998).
86. S. A. Vitkalov, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **65**, 201106(R) (2002).
87. A. Gold and V. T. Dolgoplov, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 7091 (2002).
88. V. M. Pudalov, M. D'Iorio, and J. Campbell, Pis'ma v ZhETF **57**, 592 (1993) [V. M. Pudalov, M. D'Iorio, and J. Campbell, JETP Lett. **57**, 608 (1993)].
89. V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Phys. Rev. B **60**(4), R2154 (1999).
90. A. V. Kornilov, V. M. Pudalov, Y. Kitaoka, K. Ishida, G.-q. Zheng, T. Mito, and J. S. Qualls, Phys. Rev. B **69**, 224404 (2004).
91. Ya. A. Gerasimenko, S. V. Sanduleanu, V. A. Prudkoglyad, A. V. Kornilov, J. Yamada, J. S. Qualls, and V. M. Pudalov, Phys. Rev. B **89**, 054518 (2014).
92. B. Spivak, Phys. Rev. B **67**, 125205 (2003).
93. B. Spivak and S. A. Kivelson, Phys. Rev. B **70**, 155114 (2004).
94. C. Sloggett and O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **71**, 235326 (2005).
95. Y. V. Stadnik and O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **88**, 125402 (2013).
96. E. Eisenberg and R. Berkovits, Phys. Rev. B **60**, 15261 (1999).
97. I. L. Kurland, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **62**, 14 886(2000).
98. B. N. Narozhny, I. L. Aleiner, and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **62**, 14898 (2000).
99. G. Benenti, G. Caldara, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **86**, 5333 (2001).
100. E. V. Repin and I. S. Burmistrov, Phys. Rev. B **93**, 165425 (2016).
101. V. A. Khodel and V. R. Shaginyan, JETP Lett. **51**, 553 (1990).
102. Г. Е. Воловик, Письма в ЖЭТФ **53**, 208 (1991).
103. V. A. Khodel, J. W. Clark, and M. V. Zverev, Phys. Rev. B **78**, 075120 (2008).
104. В. Т. Долгополов, М. Ю. Мельников, А. А. Шашкин, С. В. Кравченко, Письма в ЖЭТФ **116**, 159 (2022) [V. T. Dolgoplov, M. Yu. Melnikov, A. A. Shashkin, and S. V. Kravchenko, JETP Lett. **116**, (2022)].
105. В. Т. Долгополов, УФН **189**, 673 (2019) [V. T. Dolgoplov, Phys.-Uspekhi **62**, 633 (2019)].
106. S. Das Sarma, E. H. Hwang, and Q. Li, Phys. Rev. B **88**, 155310 (2013).

Первый экспериментальный синтез ортокарбоната Mg по реакции $MgCO_3 + MgO = Mg_2CO_4$ при давлениях нижней мантии Земли¹⁾

П. Н. Гаврюшкин^{+*2)}, Н. С. Мартиросян^{×°}, С. В. Ращенко^{+*}, Д. Н. Сагатова^{+*}, Н. Е. Сагатов^{+*},
А. И. Семерикова^{+*}, Т. М. Федотенко[°], К. Д. Литасов[∇]

⁺Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

[×]Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ), Sec. 3.5 Interface Geochemistry, Telegrafenberg, 14473 Potsdam, Germany

[°]Bayerisches Geoinstitut, University of Bayreuth, 95440 Bayreuth, Germany

[∇]Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 августа 2022 г.

После переработки 31 августа 2022 г.

Принята к публикации 31 августа 2022 г.

Mg-карбонат является одним из основных карбонатов, субдуцирующихся с поверхности Земли в мантию, и возможные реакции этого соединения с мантийными минералами определяют стабильность карбонатов во внутренних оболочках Земли. Недавно на основе теоретических расчетов нами было показано, что при давлениях и температурах нижней мантии Земли $MgCO_3$ должен реагировать с MgO с образованием Mg_2CO_4 . В настоящей работе, на основе экспериментов в ячейке с алмазными наковальнями мы провели *in situ* исследование продуктов реакции $MgCO_3 + MgO$ при давлениях порядка 50 ГПа и температурах выше 2000 К. Исследование рентгеновских дифрактограмм и спектров комбинационного рассеяния однозначно указывает на то, что реакция была реализована, и в качестве продукта реакции получена модификация, подобная Mg_2CO_4 - $P2_1/c$. Используя метод просвечивающей электронной микроскопии, нам удалось показать, что в образце после воздействия высокого давления присутствует новая фаза магнезиального ортокарбоната/карбоната.

DOI: 10.31857/S1234567822190090, EDN: kinjab

1. Введение. Карбонаты являются основными минералами океанической коры, содержащими углерод в окисленном состоянии [1]. Их погружение в мантию Земли является одним из основных этапов глобального цикла углерода, который имеет существенный вклад в углеродный бюджет глубинных слоев Земли [1–3]. По разным оценкам, около 20–80 % карбонатов Ca, Mg и Fe могут избежать разложения и плавления под островными дугами и быть перенесены на глубину ~ 150 км в пределы верхней мантии Земли [1, 2]. Хотя карбонаты и могут быть восстановлены по окислительно-восстановительным реакциям до карбидов и алмаза [4, 5], первичные минеральные включения Ca- и Mg-карбонатов в сверхглубоких алмазах подтверждают их существование вплоть до глубин, соответствующих нижней мантии Земли [6–11].

Кальцит и доломит являются преобладающими фазами среди карбонатов океанической коры, однако при высоких давлениях их стабильность ограничена реакциями с силикатами, процессами разложения или плавления [12, 13]. Кривые солидуса карбонатизированных перидотитов и эклогитов расположены над геотермами субдукции при давлениях 21–32 ГПа, и появление твердых фаз карбонатов маловероятно в переходной зоне [14–20]. Однако магнезит ($MgCO_3$) остается твердым даже в случае значительного плавления карбонатитовых пород в присутствии щелочей или воды [17] и может погружаться в нижнюю мантию Земли.

Магнезит считается основной фазой, содержащей углерод в окисленной форме, среди фаз, присутствующих в переходной зоне и верхней части нижней мантии [21]. Его структура характеризуется плоскими треугольными группами $[CO_3]$, в которых углерод находится в sp^2 -гибридизованном состоянии. Магнезит стабилен до давлений 80–115 ГПа и температуры 2500 К в чистой карбонатной систе-

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

²⁾e-mail: gavryushkin@igm.nsc.ru; p.gavryushkin@g.nsu.ru

ме [22–25], далее он переходит в полиморфную модификацию, $MgCO_3$ -II, характеризующуюся моноклинной симметрией ($C2/m$). В этой структуре углерод находится в sp^3 -гибризованном состоянии и характеризуется тетраэдрической $[CO_4]$ координацией. Структура $MgCO_3$ -II была сначала теоретически предсказана [22], а затем подтверждена на основе монокристаллической расшивки рентгеновских дифракционных спектров для Fe-содержащего магнетита [26] и для чистого магнетита [27].

Карбонаты состава M_2CO_4 и M_3CO_5 с тетраэдрически координированными атомами углерода были недавно обнаружены в карбонатно-оксидных системах $MgCO_3$ – MgO , $CaCO_3$ – CaO , $SrCO_3$ – SrO , $BaCO_3$ – BaO [28, 29] и $PbCO_3$ – PbO [30]. Эти соединения можно рассматривать как соли гипотетической ортоугольной кислоты H_4CO_4 , в силу чего они получили названия *ортокарбонатов* (M_2CO_4) и *оксиртокарбонатов* (M_3CO_5). На данный момент проведенные эксперименты подтвердили существование фаз Ca_2CO_4 -*Pnma* [31], Sr_2CO_4 -*Pnma* [32] и Sr_3CO_5 -*I4/mcm* [33]. В соответствии с предсказаниями, все найденные структуры характеризуются ковалентно связанными группами $[CO_4]$ и имеют изоструктурные аналоги среди силикатов [28]. Некоторые из ортокарбонатов оказались динамически стабильными при атмосферном давлении, что было подтверждено их успешной декомпрессией и извлечением из камеры высокого давления. Последнее было реализовано в отношении Sr_2CO_4 -*Pnma* [32] и Sr_3CO_5 -*Pnma* [33].

По сравнению с другими карбонат-оксидными системами, система $MgCO_3$ – MgO имеет непосредственное приложение для определения равновесных фаз нижней мантии Земли, поскольку обе фазы, ферропериклаз и магнетит, могут присутствовать в мантийных условиях. Основываясь на расчетах предсказания структур, нами было показано, что при высоких давлениях и температурах $MgCO_3$ реагирует с MgO , образуя Mg_2CO_4 [34]. Были предсказаны две фазы высокого давления: фаза Mg_2CO_4 -*Pnma*, стабильная ниже 80 ГПа, и фаза Mg_2CO_4 -*P2₁/c*, стабильная выше этого давления. В отличие от других щелочноземельных металлов, стабильных структур состава Mg_3CO_5 обнаружено не было.

В настоящей работе, руководствуясь выполненными предсказаниями, мы провели экспериментальное *in situ* исследование продуктов реакции между $MgCO_3$ и MgO при давлениях порядка 50 ГПа, а также исследование тех же продуктов, извлеченных из ячейки после воздействия высокого давления.

2. Экспериментальная методика и детали расчетов.

2.1. Экспериментальная методика. Эксперименты высокого давления проводились в симметричных ячейках с алмазными наковальнями (*diamond anvil cell*, DAC) с размерами калеты (*culet*) 200 мкм. Рениевые гasketы обжимались до толщины 30–35 мкм и просверливались лазером в центре обжимаемой области, чтобы сформировать камеру для образцов. Смесь природного магнетита состава $Mg_{0.99}Fe_{0.003}Ca_{0.004}CO_3$ (месторождение Bahia, Бразилия) и химически чистый MgO (99.9%, Merck) измельчались в мелкий порошок, тщательно перемешивались и помещались внутрь камеры для образцов вместе с небольшим количеством порошка Pt (99.9%, Alfa Aesar), который использовался в качестве поглотителя лазерного излучения и маркера давления. Давление определяли с использованием уравнения состояния платины [35].

Все эксперименты проводились следующим образом. Сначала давление повышалось до желаемого значения при комнатной температуре. Затем образец нагревался с использованием техники двухстороннего лазерного нагрева волоконным лазером YLR-100-AC (производитель IPG Photonics, мощность 100 Вт, длина волны 1070 нм) в режиме непрерывной генерации с диаметром области однородного нагрева около 10 мкм [36]. Температуру измеряли одновременно с обеих сторон DAC с использованием спектральной радиометрии; спектры теплового излучения были сопоставлены с функцией излучения Планка серого тела с помощью программного обеспечения T-Rax (разработанного Клеменсом Прешером (C. Prescher)).

Спектры комбинационного рассеяния (КР) света измерялись до и после каждого цикла нагрева с помощью спектрометра HORIBA Jobin Yvon LabRam HR800 VIS (GFZ, Потсдам), оснащенного зеленым (532 нм) Nd:YAG лазером. Для анализа данных использовалось программное обеспечение Fityk [37].

Исследование рентгеновской дифракции проводилось с использованием сфокусированного монохромного пучка ($\lambda = 0.29 \text{ \AA}$) на линии P02.2 синхротрона Petra-III (DESY, Гамбург, Германия). Рентгеновские данные были получены при каждом давлении после нагрева, чтобы наблюдать возможные фазовые превращения. Алмазные ячейки, использовавшиеся в первом и третьем экспериментах (EXP1, EXP3, см. ниже), имели меньший угол раскрытия и давали возможность снимать только порошковые рентгенограммы. Полученные дифракционные картины интегрировались в программе

Dioptase с целью получения одномерных дифракционных рентгенограмм [38]. Во второй серии экспериментов (EXP2) для сбора монокристаллических рентгеновских данных использовалась алмазная ячейка с углом раскрытия $\pm 30^\circ$. Пошаговое сканирование выполнялось с шагом 0.5° . Обработка полученных данных в программном обеспечении CrysAlisPro (включая программу CrysAlisTabbiner К. Глазырина [https://github.com/DESY-Petra-III/CrysAlisTabbiner]), была выполнена с использованием протокола ЭСПЕРАНТО [https://doi.org/10.1107/S0909049513018621].

Всего было проведено три эксперимента:

- EXP1: с нагревом до 3600 К при ~ 50 ГПа и дальнейшим снятием дифракционных порошковых спектров;
- EXP2: с нагревом до 2700 К при ~ 55 ГПа и дальнейшим снятием монокристаллических дифракционных спектров;
- EXP3: с нагревом не выше 3000 К при ~ 55 ГПа и дальнейшим снятием дифракционных порошковых спектров.

После экспериментов образцы извлекались из алмазной ячейки и анализировались методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Электронно-прозрачные пленки ($15 \times 10 \times 0.15$ мкм) изготавливались методом сфокусированного ионного пучка (FIB) (FEI FIB 200 TEM, GFZ Potsdam) примерно из срединных частей областей, подвергавшихся лазерному нагреву [39]. Исследования проводились с помощью электронного микроскопа Tescan G2 F20 X-Twin transmission, работающего при 200 кВ с электронной пушкой (*field emission gun*) в качестве источника электронов (GFZ, Потсдам). Просвечивающий электронный микроскоп был оснащен энергетическим фильтром Gatan TridiemTM, рентгеновским анализатором EDAX GenesisTM и высокоугольным кольцевым детектором темного поля Fishione (HAADF) для спектроскопии характеристических потерь энергии электронов (EELS) и получения изображений с фильтрацией по энергии. Были получены изображения ярких и темных полей, а также изображения высокого разрешения. Электронные структуры каждого элемента были исследованы с использованием EELS спектров, собранных на К-краях углерода и кислорода с дисперсией по энергии 0.1 эВ/канал. Дифракционные картины, рассчитанные с помощью быстрого преобразования Фурье (FFT) по изображениям высокого разрешения, использовались для измерения межплоскостных расстояний и углов между плоскими сетками пространственной решетки. Об-

работка спектров, включающая вычитание фона, устранение многократного рассеяния, деконволюция отношения Фурье, осуществлялась с использованием программного пакета Digital Micrograph.

Химический состав и однородность образцов были охарактеризованы с помощью электронного микросондового анализа с использованием JEOL Hyperprobe JXA-8500F EMP с эмиссионным катодом (GFZ, Потсдам). Анализы проводились при ускоряющем напряжении 15 кВ, токе пучка 10 нА и размере пучка 0.5–10 мкм. В качестве стандартных материалов использовались доломит, кальцит и сидерит с известными составами.

2.2. Детали расчетов. Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP [40, 41]. Обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось в приближении обобщенного градиента по схеме Пердью–Бюрке–Эрнцерхофа (Perdew–Burke–Ernzerhof, PBE) [42]. Электронные остовы атомов были аппроксимированы с использованием псевдопотенциалов проекционных присоединенных волн (*Projector augmented wave*, PAW) [41], а валентные электроны были представлены базисом плоской волны с энергией обрезания 800 эВ. Использовались псевдопотенциалы со следующими валентными электронными конфигурациями: $2p^63s^2$ для Mg, $2s^22p^2$ для С и $2s^22p^4$ для О. Разбиение зоны Бриллюэна выполнено по схеме Монкхороста–Пака [43] с плотностью сетки k -точек, равной 0.2 \AA^{-1} .

Для расчетов были использованы структурные данные ранее известных модификаций: MgCO_3 - $R\bar{3}c$ [44], MgO - $Fm\bar{3}m$ [45], Mg_2CO_4 - $Pnma$ [34], Mg_2CO_4 - $P2_1/c$ [34], MgO_2 - $Pa\bar{3}$ [46], MgO_2 - $I4/mcm$ [46], ϵ - O_2 [47], Mg_2C - $Fm\bar{3}m$ [48], Mg_2C - $Pnma$ [49], Mg_2C - $P4_2/mnm$ [48], Mg_2C - $P6_3/mmc$ [48].

Для учета температурного эффекта и расчета фазовых P - T диаграмм использовался метод решеточной динамики в рамках квазигармонического приближения (*Quasi-harmonic approximation*, QHA), подобно тому как это было реализовано в нашей работе [50]. Для этой задачи были рассчитаны частоты колебаний решетки с помощью кода PHONOPY [51]. Для получения спектров КР были рассчитаны тензоры поляризуемости для каждой кристаллической моды с использованием кода vasp_gamma.py [52].

3. Результаты.

3.1. Спектроскопия комбинационного рассеяния. КР-спектры, измеренные до и после нагрева при 50 и 55 ГПа, показаны на рис. 1. Спектры, снятые перед нагреванием, характеризуются тремя полосами высокой интенсивности при 1225 , 824 , 539 см^{-1} и широ-

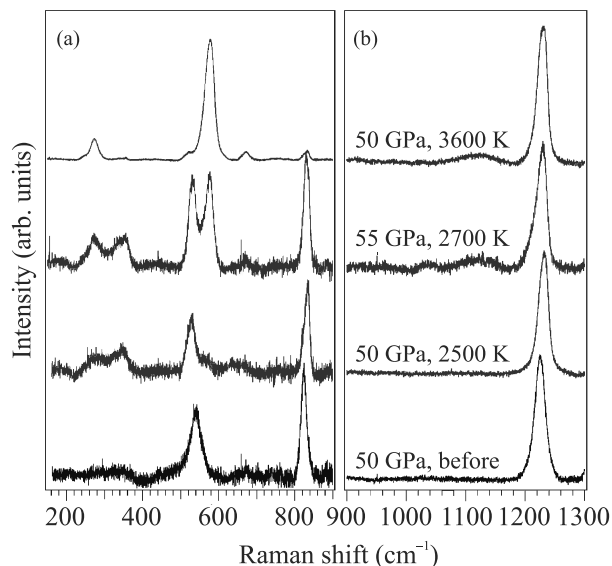


Рис. 1. (Цветной онлайн) Экспериментальные КР-спектры, снятые до и после нагрева при 50 и 55 ГПа

кой полосой низкой интенсивности при 348 см^{-1} , что указывает на присутствие магнезита [27]. Высокочастотные полосы ($800\text{--}1300\text{ см}^{-1}$) объясняются внутренними колебаниями групп $[CO_3]$: симметричным растяжением (ν_1) и изгибом в плоскости (ν_4). Симметричная вибрация растяжения магнезита остается преобладающей особенностью в спектрах комбинационного рассеяния света в высокочастотной области даже после нагрева до 3600 К. Колебания решетки, расположенные на низких частотах (539 и 348 см^{-1}), усиливаются и становятся более резкими при нагревании до 2700 К.

Новые полосы появляются в диапазоне $100\text{--}800\text{ см}^{-1}$ на КР-спектрах, снятых при 2500 К, и их интенсивность увеличивается с температурой. При 2500 К различаются, по крайней мере, три новых моды колебаний: при 285 , 565 и 644 см^{-1} . Кроме того, на низкочастотной стороне полосы магнезита ν_4 при 825 см^{-1} появляется плечо. Область высоких частот не изменяется до 2700 К и характеризуется наличием моды магнезита ν_1 . Дальнейшая эволюция спектров после нагрева при 2700 К отмечена увеличением интенсивности полос 565 и 644 см^{-1} и новыми особенностями при 250 и 1040 , 1100 см^{-1} . КР-спектры, снятые после нагрева до 3600 К, показывают тот же набор мод, однако со значительно уменьшенной относительной интенсивностью исходных полос магнезита и преобладанием новых пиков ниже 900 см^{-1} .

Появление новых полос указывает на образование новых фаз, отличных от магнезита. Для уточ-

нения спектров были рассмотрены все известные соединения в системе Mg–C–O. Высокочастотные моды при 1040 и 1100 см^{-1} могут быть отнесены к колебаниям растяжения-сжатия связи O–O в пероксидной группе. Для пероксида магния известно две полиморфных модификации высокого давления, кубическая ($Pa\bar{3}$) и тетрагональная ($I4/mcm$). Для обеих модификаций колебания растяжения-сжатия связи O–O являются основным характеристическим признаком, поскольку соответствующие им полосы обладают наиболее высокой интенсивностью [53]. Моды этих колебаний появляются в спектре закаленного образца только после нагрева при 2700 К. Из-за перекрытия пиков нельзя однозначно сделать вывод о том, какая из модификаций появилась в эксперименте (рис. S1).

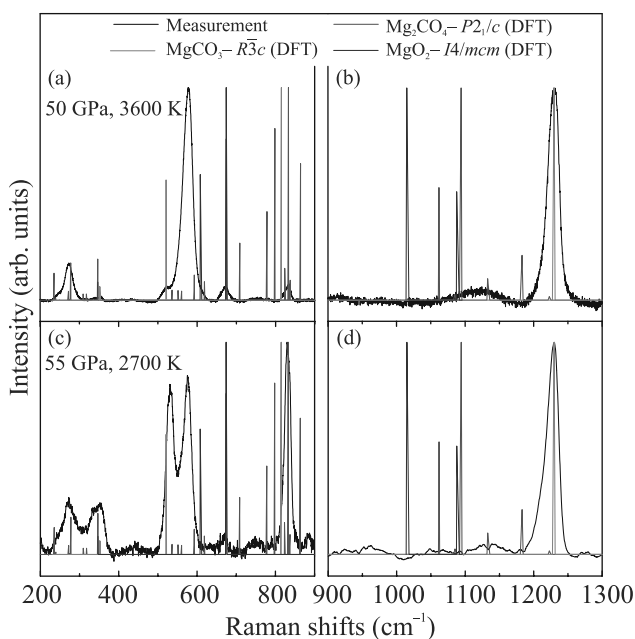


Рис. 2. (Цветной онлайн) Экспериментальные КР-спектры при 3600 К и 50 ГПа (а), (б) и при 55 ГПа и 2700 К (с), (д) в сравнении со спектрами рассчитанными на основе теории функционала плотности для фаз $Mg_2CO_4\text{-}P2_1/c$, $MgCO_3\text{-}R\bar{3}c$ и $MgO_2\text{-}I4/mcm$ при 60 ГПа

Полосы в низкочастотной области спектров не могут быть полностью объяснены смесью магнезита и пероксида и указывают на присутствие дополнительной фазы, которая образуется уже при 2500 К. На основе сравнения полученных экспериментальных КР-спектров с рассчитанными КР-спектрами моноклинной ($P2_1/c$) и ромбической ($Pnma$) фаз Mg_2CO_4 (рис. 2 и рис. S1), новые пики в низкочастотной области могут быть удовлетворительно объяс-

нены комбинацией магнезита и $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$. Моноклинная фаза $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$ лучше согласуется с экспериментальными спектрами, чем ромбическая $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}Pnma$. Единственный стабильный карбид Mg при 50–55 ГПа, $\text{Mg}_2\text{C-Pnma}$, не наблюдается в экспериментальных спектрах (рис. S1).

3.2. Эксперименты по рентгеновской дифракции. Проведенное картирование рентгенограмм, снятых в EXP1, показало появление новой фазы с пиком вблизи $d = 1.90 \text{ \AA}$ в пятне нагрева (рис. S2a). К сожалению, мы не смогли однозначно идентифицировать какие-либо другие рентгеновские пики, принадлежащие этой фазе, ни на порошковых, ни на монокристалльных дифрактограммах (последнее из-за малого $\pm 10^\circ$ угла раскрытия алмазной ячейки, которая использовалась в этих экспериментах). Единственной фазой в системе Mg–C–O, характеризующейся интенсивным пиком при 1.9 \AA , является пероксид $\text{MgO}_2\text{-}I4/mcm$ (рис. 3a), присутствие которого также согласуется с КР-спектрами.

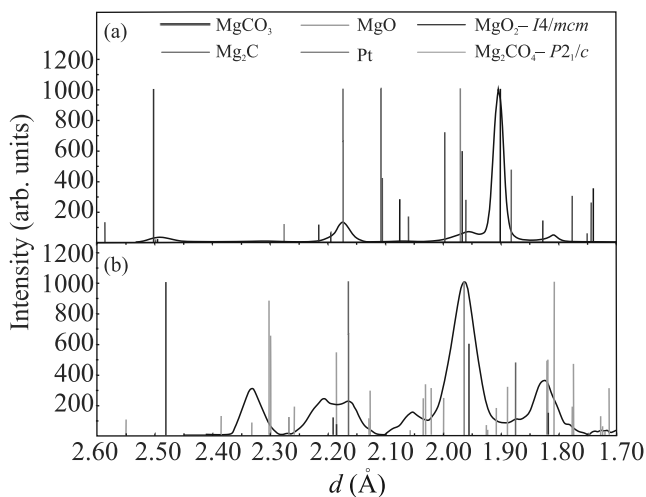


Рис. 3. (Цветной онлайн) Порошковые рентгенограммы, снятые в EXP1 (a) и EXP3 (b) и расчетные положения пиков Pt, MgO, $\text{MgO}_2\text{-}I4/mcm$, магнезита, Mg_2C , $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$ при давлении ~ 50 ГПа

Во второй попытке воспроизвести образование новых фаз при лазерном нагреве в EXP3 аналогичная смесь ($\text{MgO} + \text{MgCO}_3 + \text{Pt}$) сжималась почти до того же давления ~ 50 ГПа, но нагревалась до более низких температур, не превышающих 3000 К. Порошковые рентгенограммы, снятые после нагрева, снова показали появление пиков, указывающих на образование новой фазы. В качестве такой фазы мы предполагаем модификацию $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$, показывающую наилучшее соответствие с экспериментальными спектрами по сравнению с другими фазами

(рис. 3b). Необходимо отметить и некоторую разницу в положениях и интенсивностях экспериментальных пиков и пиков фазы $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$. Основываясь на этом различии, мы предполагаем, что в экспериментах была синтезирована фаза, не идентичная, но структурно близкая $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$.

В EXP2 для снятия монокристалльных рентгенограмм с зерен новообразованных фаз использовалась алмазная ячейка с большим углом раскрытия. Используемый метод позволил произвести индексирование “поликристаллических” данных, по которым были проиндексированы следующие фазы:

- 1) тригональная или гексагональная фаза с характерной ячейкой $a = 4.378(4) \text{ \AA}$ и $c = 12.67(3) \text{ \AA}$, однозначно интерпретируемая как магнезит;
- 2) кубическая фаза с $a = 3.741(2) \text{ \AA}$, однозначно интерпретируемая как Pt при давлении ~ 55 ГПа;
- 3) неизвестная тригональная или гексагональная фаза с характерной ячейкой $a = 2.693(4) \text{ \AA}$ и $c = 6.517(12) \text{ \AA}$.

3.3. ПЭМ. Поперечное сечение области образца, в которой проводился лазерный нагрев, было подготовлено для анализа методом ПЭМ с целью исследования текстур, пространственного распределения и полуколичественных химических составов синтезированных фаз. Тонкие пленки были изготовлены из областей, в которых осуществлялся лазерный нагрев при 50 ГПа до температур 3600 К. Изображение ПЭМ показывает многофазный характер образца в зоне нагрева (рис. S2b). Большая пустота в центре образца на рис. S2 отражает присутствие флюидной фазы при высоких давлениях и температурах, которая высвобождалась в процессе декомпрессии. Ассоциации фаз изменяются от центра нагретого пятна и образуют отдельные зоны, которые появляются из-за температурного градиента внутри нагретого пятна. В образце были обнаружены следующие фазы: нетрансформированный магнезит и оксид магния во внешней зоне, новый карбонат/ортокарбонат магния в середине и платина с остатками оксида ближе к центру. EDS спектр нового Mg-карбоната/ортокарбоната показан на рис. S2c.

Были получены три изображения высокого разрешения (HRTEM) и соответствующие электронные дифрактограммы новой карбонатной/ортокарбонатной фазы. Дифракционные картины не могут быть проиндексированы с помощью структуры магнезита. Обе фазы ортокарбоната, $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}Pnma$ с параметрами элементарной ячейки $a = 9.94 \text{ \AA}$, $b = 5.96 \text{ \AA}$, $c = 4.46 \text{ \AA}$ и $\text{Mg}_2\text{CO}_4\text{-}P2_1/c$ с параметрами элементарной ячейки $a = 5.172 \text{ \AA}$, $b = 6.174 \text{ \AA}$, $c = 9.2780 \text{ \AA}$, $\beta = 120.4860^\circ$, пока-

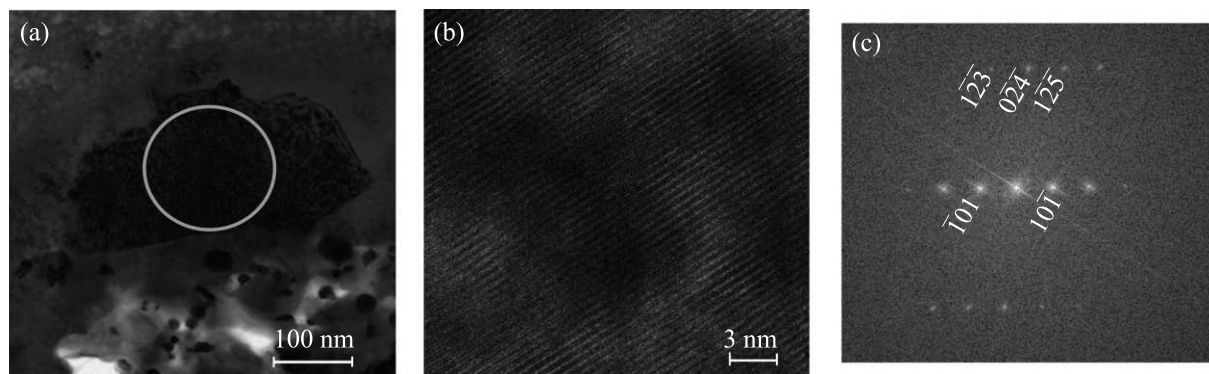


Рис. 4. Изображение ПЭМ, светлое поле (а), изображение высокого разрешения (b) и дифракционная картина (FFT) (с) новой фазы; hkl индексы приведены в соответствии со структурой Mg_2CO_4 - $P2_1/c$. Область, с которой были получены изображение высокого разрешения и электронно-дифракционная картина, показана белым кружком

зывают приемлемое соответствие с полученными дифракционными спектрами. Отклонение экспериментально измеренных межплоскостных расстояний не превышает 0.08 \AA при среднем значении 0.03 \AA , а отклонение углов между плоскостями hkl находится в пределах двух градусов (рис. 4).

EELS спектры С-К края Mg-карбоната (рис. 5) показывают сдвиг основного пика нового карбоната до значения 292.7 эВ , в то время как пик магнетита находится на уровне 290.5 эВ . Полученные спектры О-К краев новой карбонатной фазы также отличаются от спектров магнетита с основными пиками, наблюдаемыми в положениях выше по энергии на $1\text{--}2 \text{ эВ}$.

4. Дискуссия и выводы. КР-спектры и спектры рентгеновской дифракции однозначно показывают образование новой фазы в результате реакции между $MgCO_3$ и MgO при давлениях около 50 ГПа . Единственной фазой в системе Mg–C–O, которая не находится в явном противоречии полученным спектрам, является Mg_2CO_4 - $P2_1/c$. В Дополнительном материале показано, что фазы высокого давления O_2 , CO_2 или Mg-карбидов не согласуются с полученными результатами. Мы также исключаем возможность реакции между исходными реагентами ($MgCO_3$, MgO) и платиной, поскольку многочисленные эксперименты с этими соединениями, в которых Pt использовался в качестве поглотителя лазерного излучения, не обнаружили никаких признаков их взаимодействия [24, 54].

Ранее [34], основываясь на теоретических предсказаниях, мы показали стабильность при высоких давлениях и температурах двух ортокарбонатных фаз Mg_2CO_4 - $Pnma$ и Mg_2CO_4 - $P2_1/c$ (рис. 6a). В настоящей работе мы провели повторный анализ энергетических соотношений между фазами ортокарбо-

ната и установили, что единственной термодинамически стабильной фазой Mg_2CO_4 является $P2_1/c$, а фаза $Pnma$ является метастабильной во всем диапазоне давлений и температур, по крайней мере, в квазигармоническом приближении (рис. 6b). Это согласуется с результатами экспериментов, показывающими лучшее соответствие для фазы Mg_2CO_4 - $P2_1/c$, чем для Mg_2CO_4 - $Pnma$. Mg_2CO_4 - $P2_1/c$ согласно теоретическим расчетам становился стабильным, начиная с давления 70 ГПа . Это примерно на 20 ГПа выше, чем давление появления ортокарбоната магния в наших экспериментах (рис. 6b). Разница в давлениях может быть объяснена неотъемлемым различием теоретической модели и реального эксперимента, а также структурным различием между фазой, наблюдаемой в эксперименте, и Mg_2CO_4 - $P2_1/c$. Если в эксперименте реализовывалась фаза, более энергетически выгодная, чем Mg_2CO_4 - $P2_1/c$, то для нее нижний предел термодинамической устойчивости будет ниже по давлению, чем для фазы Mg_2CO_4 - $P2_1/c$, что уменьшит расхождение в экспериментальном и теоретическом значении.

Результаты, полученные методом ПЭМ, свидетельствуют о стабильности синтезированного Mg-ортокарбоната при атмосферном давлении. Согласно расчетам фонных спектров, фаза Mg_2CO_4 - $P2_1/c$ также динамически стабильна при атмосферном давлении. Однако фаза, полученная в эксперименте, не идентична Mg_2CO_4 - $P2_1/c$ и ее фонные спектры еще предстоит рассчитать.

Обнаруженное появление пероксида магния в наших экспериментах заслуживает внимания. Мы предполагаем, что он образуется в результате реакции, характерной и для других систем MCO_3 -MO со щелочноземельными металлами. По крайней мере, в наших неопубликованных экспериментах мы наблю-

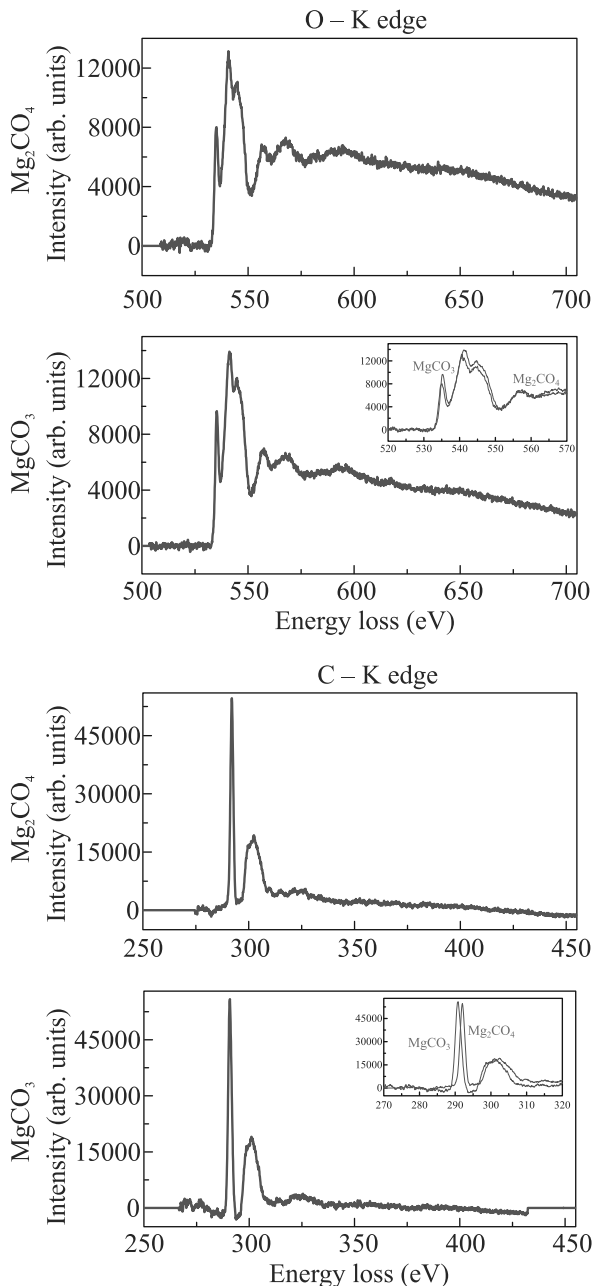


Рис. 5. (Цветной онлайн) О-К и С-К края Mg_2CO_4 (синяя кривая) и эталонного MgCO_3 (красная кривая)

дали образование SrO_2 при нагревании смеси ($\text{SrCO}_3 + \text{SrO}$). Рассчитанные значения свободных энергий Гиббса показали, что MgO_2 является метастабильным в наших экспериментах, и он должен разлагаться на смесь ($\text{MgO} + 0.5\text{O}_2$) при давлениях ниже 100 ГПа (рис. S4). В данном случае метастабильное образование Mg-пероксида не является удивительным и его синтез при атмосферном давлении осуществляется в промышленных масштабах. Реакция, по которой образовывался MgO_2 в наших экспери-

ментах неясна, можно предположить, что пероксид является одним из продуктов разложения ортокарбоната.

Обнаруженное сложное фазовое поведение системы $\text{MgCO}_3\text{--MgO}$ при высоких давлениях и температурах и возможное существование принципиально новых фаз, которые не были описаны в предыдущих экспериментах, расширяют список возможных фаз-концентраторов углерода в мантии Земли. Ранее предполагалось, что магнезит является основным носителем углерода при $P\text{--}T$ параметрах нижней мантии Земли, и только выше 80 ГПа он переходит в модификацию $\text{MgCO}_3\text{--II}$ с тетраэдрической координированным углеродом. Установленная реакция магнезита с периклазом подразумевает, что ортокарбонаты магнезия с тетраэдрической координированным углеродом может образовываться при существенно более низких давлениях, порядка 50 ГПа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта # 20-03-00774 и гос. задания ИГМ СО РАН. Работа Наиры Мартirosян выполнена при финансовой поддержке немецкого научно-исследовательского общества (Deutsche Forschungsgemeinschaft, DFG) в рамках исследовательской группы FOR 2125 “CarboPaT” (проекты # KO1260/19 и RE1062/3).

Авторы благодарят Аню Шрайбер (Anja Schreiber), Ричарда Вирта (Richard Wirth) и Сергея Лобанова (Sergey Lobanov) из Потсдамского центра имени Гельмгольца (Deutsches GeoForschungsZentrum, GFZ) за помощь в проведении экспериментов и анализе результатов.

1. T. Plank and C. E. Manning, *Nature* **574**, 343 (2019).
2. P. V. Kelemen and C. E. Manning, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112**, E3997 (2015).
3. P. D. Clift, *Rev. Geophys.* **55**, 97 (2017).
4. S. M. Dorfman, J. Badro, F. Nabiei, V. B. Prakapenka, M. Cantoni, and P. Gillet, *Earth Planet. Sci. Lett.* **489**, 84 (2018).
5. N. S. Martirosyan, K. D. Litasov, S. S. Lobanov, A. F. Goncharov, A. Shatskiy, H. Ohfuji, and V. Prakapenka, *Geosci. Front.* **10**, 1449 (2019).
6. T. Stachel, J. W. Harris, and G. P. Brey, *Contrib. Mineral. Petrol.* **132**, 34 (1998).
7. T. Stachel, J. W. Harris, G. P. Brey, and W. Joswig, *Contrib. Mineral. Petrol.* **140**, 16 (2000).
8. M. J. Walter, G. Bulanova, L. S. Armstrong, S. Keshav, J. D. Blundy, G. Gudfinnsson, O. T. Lord, A. Lennie, S. Clark, and C. Smith, *Nature* **454**, 622 (2008).

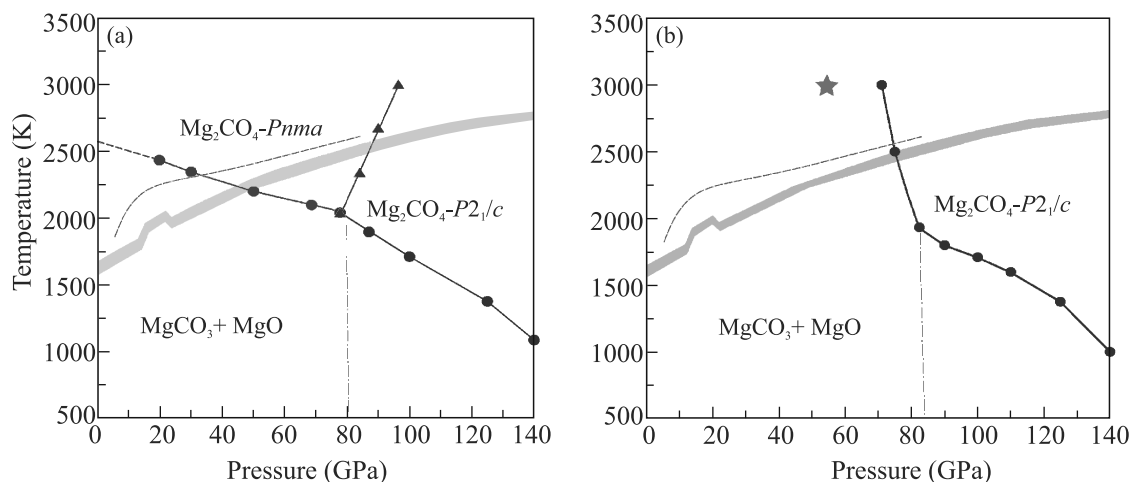


Рис. 6. (Цветной онлайн) Фазовая P - T диаграмма, представленная в работе [34] (а) и исправленная в соответствии с новыми данными (б) P - T фазовая диаграмма Mg_2CO_4 ; оранжевая звезда показывает приблизительные (P , T) параметры, при которых проводились эксперименты, серая сплошная линия – мантийная адиабата, серая пунктирная линия – кривая плавления магнезита ($MgCO_3$ - $R\bar{3}c$), серая пунктирная линия с точкой – граница фазового перехода $MgCO_3$ - $R\bar{3}c \rightarrow MgCO_3$ - $C2/m$

9. R. Wirth, F. Kaminsky, S. Matsyuk, and A. Schreiber, *Earth Planet. Sci. Lett.* **286**, 292 (2009).
10. B. Harte and S. Richardson, *Gondwana Res.* **21**, 236 (2012).
11. D. Zedgenizov, H. Kagi, V. Shatsky, and A. Ragozin, *Chem. Geol.* **363**, 114 (2014).
12. G. M. Yaxley and G. P. Brey, *Contrib. Mineral. Petrol.* **146**, 606 (2004).
13. K. Sato and T. Katsura, *Earth Planet. Sci. Lett.* **184**, 529 (2001).
14. K. Litasov, *Russ. Geol. Geophys.* **52**, 475 (2011).
15. E. S. Kiseeva, G. M. Yaxley, J. Hermann, K. D. Litasov, A. Rosenthal, and V. S. Kamenetsky, *J. Petrol.* **53**, 727 (2012).
16. E. S. Kiseeva, K. D. Litasov, G. M. Yaxley, E. Ohtani, and V. S. Kamenetsky, *J. Petrol.* **54**, 1555 (2013).
17. K. D. Litasov, A. Shatskiy, E. Ohtani, and G. M. Yaxley, *Geology* **41**, 79 (2013).
18. K. D. Litasov and A. Shatskiy, *Magmas Under Pressure*, Elsevier, Amsterdam (2018).
19. D. Ghosh, S. Giri, S. Dhibar, and C. K. Das, *Electrochim. Acta* **147**, 557 (2014).
20. A. R. Thomson, M. J. Walter, S. C. Kohn, and R. A. Brooker, *Nature* **529**, 76 (2016).
21. K. D. Litasov, Y. Fei, E. Ohtani, T. Kuribayashi, and K. Funakoshi, *Phys. Earth Planet. Inter.* **168**, 191 (2008).
22. A. R. Oganov, S. Ono, Y. M. Ma, C. W. Glass, and A. Garcia, *Earth Planet. Sci. Lett.* **273**, 38 (2008).
23. E. Boulard, A. Gloter, A. Corgne, D. Antonangeli, A. L. Auzende, J. P. Perrillat, F. Guyot, and G. Fiquet, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **108**, 5184 (2011).
24. F. Maeda, E. Ohtani, S. Kamada, T. Sakamaki, N. Hirao, and Y. Ohishi, *Sci. Rep.* **7**, 1 (2017).
25. M. Isshiki, T. Irifune, K. Hirose, S. Ono, Y. Ohishi, T. Watanuki, E. Nishibori, M. Takata, and M. Sakata, *Nature* **427**, 60 (2004).
26. S. Chariton, M. Bykov, E. Bykova, E. Koemets, T. Fedotenko, B. Winkler, M. Hanfland, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, and C. McCammon, *Acta Crystallogr. E* **76**, 715 (2020).
27. J. Binck, L. Bayarjargal, S. S. Lobanov, W. Morgenroth, R. Luchitskaia, C. J. Pickard, V. Milman, K. Refson, D. B. Jochym, and P. Byrne, *Phys. Rev. Mater.* **4**, 055001 (2020).
28. P. N. Gavryushkin, D. N. Sagatova, N. Sagatov, K. D. Litasov, *ACS Earth Space Chem.* **5**, 1948 (2021).
29. D. Sagatova, A. Shatskiy, N. Sagatov, P. N. Gavryushkin, and K. D. Litasov, *Lithos* **370**, 105637 (2020).
30. M. V. Banaev, N. E. Sagatov, D. N. Sagatova, and P. N. Gavryushkin, *ChemistrySelect* (2022), accepted.
31. J. Binck, D. Laniel, L. Bayarjargal, S. Khandarkhaeva, T. Fedotenko, A. Aslandukov, K. Glazyrin, V. Milman, S. Chariton, V. B. Prakapenka, N. Dubrovinskaia, L. Dubrovinsky, and B. Winkler, *Am. Mineral.* **107**, 336 (2022).
32. D. Spahr, J. Binck, L. Bayarjargal, R. Luchitskaia, W. Morgenroth, D. Comboni, V. Milman, and B. Winkler, *Inorg. Chem.* **60**, 5419 (2021).
33. D. Spahr, J. König, L. Bayarjargal, P. N. Gavryushkin, V. Milman, H.-P. Liermann, and B. Winkler, *Inorg. Chem.* **60**, 14504 (2021).
34. P. N. Gavryushkin, D. N. Sagatova, N. Sagatov, and K. D. Litasov, *Cryst. Growth Des.* **21**, 2986 (2021).

35. C.-S. Zha, K. Mibe, W. A. Bassett, O. Tschauner, H.-K. Mao, and R. J. Hemley, *J. App. Phys.* **103**, 054908 (2008).
36. S. S. Lobanov, N. Holtgrewe, G. Ito, J. Badro, H. Piet, F. Nabiei, J.-F. Lin, L. Bayarjargal, R. Wirth, and A. Schreiber, *Earth Planet. Sci. Lett.* **537**, 116176 (2020).
37. M. Wojdyr, *J. Appl. Crystallogr.* **43**, 1126 (2010).
38. C. Prescher and V. B. Prakapenka, *High Press. Res.* **35**, 223 (2015).
39. R. Wirth, *Chem. Geol.* **261**, 217 (2009).
40. G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
41. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
42. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
43. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
44. N. L. Ross, *Am. Mineral.* **82**, 682 (1997).
45. L. Dubrovinsky and S. Saxena, *Phys. Chem. Miner.* **24**, 547 (1997).
46. Q. Zhu, A. R. Oganov, and A. O. Lyakhov, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 7696 (2013).
47. F. Datchi and G. Weck, *Z. Kristallogr.* **229**, 135 (2014).
48. C. Fan and J. Li, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 12970 (2015).
49. H. Liu, G. Gao, Y. Li, J. Hao, and J. S. Tse, *J. Phys. Chem. C* **119**, 23168 (2015).
50. Д. Н. Сагатова, П. Н. Гаврюшкин, Н. Е. Сагагов, И. В. Медриш, К. Д. Литасов, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 160 (2020).
51. A. Togo, F. Oba, and I. Tanaka, *Phys. Rev. B* **78**, 134106 (2008).
52. A. Fonari and S. Stauffer, *vasp_raman.py* (<https://github.com/raman-sc/VASP/>) (2013).
53. S. S. Lobanov, Q. Zhu, N. Holtgrewe, C. Prescher, V. B. Prakapenka, A. R. Oganov, and A. F. Goncharov, *Sci. Rep.* **5**, 1 (2015).
54. Y. Ye, V. Prakapenka, Y. Meng, and S. H. Shim, *J. Geophys. Res.* **122**, 3450 (2017).

Проявления электронно-ядерных взаимодействий в спектрах высокочастотного ДЭЯР/ОДМР для триплетных Si-C дивакансий в SiC, обогащенном изотопом ^{13}C

Р. А. Бабунц⁺, Ю. А. Успенская⁺¹⁾, А. С. Гурин⁺, А. П. Бундакова⁺, Г. В. Мамин^{*}, А. Н. Анисимов⁺,
Е. Н. Мохов⁺, П. Г. Баранов⁺

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

^{*}Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 2 сентября 2022 г.

После переработки 5 сентября 2022 г.

Принята к публикации 6 сентября 2022 г.

Определены частоты электронно-ядерных взаимодействий с ядрами ^{13}C и ^{29}Si на удаленных координационных сферах в триплетных спиновых центрах в виде нейтральных Si-C дивакансий в кристалле карбида кремния гексагонального политипа 6H-SiC, десятикратно обогащенном изотопом ^{13}C . Применялись методы высокочастотного двойного электронно-ядерного резонанса и оптически детектируемого магнитного резонанса в условиях оптического выстраивания спинов. Обнаружены осцилляции электронной спиновой плотности на ядрах ^{29}Si и ^{13}C . Переходы ядерного магнитного резонанса на ларморовских и близких к ним частотах ^{13}C и ^{29}Si вызывают гигантские изменения населенностей спиновых подуровней с трансформацией этих резонансов в сигналы электронного парамагнитного резонанса и оптические сигналы.

DOI: 10.31857/S1234567822190107, EDN: kinuso

Карбид кремния (SiC) широко используется в электронных устройствах с возможностью применения их в экстремальных условиях окружающей среды. В SiC имеются два семейства спиновых центров окраски с $S = 1$ и $S = 3/2$, обладающих свойством оптического выстраивания населенностей спиновых уровней. Уникальные магнитно-оптические свойства, позволяющие оптически манипулировать электронными и ядерными спинами в условиях окружающей среды, дают возможность рассматривать эти спиновые центры в качестве материальной платформы для спинтроники, сенсорики, квантовой обработки информации, разработки гибридных квантовых систем [1–22]. В настоящей работе будет рассмотрено семейство триплетных ($S = 1$) центров окраски, являющихся нейтральными дивакансиями в виде ковалентно связанной пары вакансий $V_{\text{Si}}-V_{\text{C}}$ [1, 2, 10, 12]. Симметрия этих центров обусловлена направлением связи Si-C, расщепления тонкой структуры для этих центров находятся в гигагерцовом диапазоне, подобно NV-центрам в алмазе [12, 23].

Основные спиновые явления в SiC в значительной степени определяются наличием изотопов кремния и углерода с ядерными магнитными моментами,

несмотря на то, что содержание этих изотопов составляет единицы процентов: 4.7% для ^{29}Si и 1.1% для ^{13}C . Для многих квантовых применений спиновых центров в SiC важно фиксировать величины (частоты) электронно-ядерных взаимодействий, при этом низкое содержание изотопов с ядерными магнитными моментами часто затрудняет эти измерения. Тем не менее эти частоты необходимы для управления ядерными и электронными спиновыми состояниями при использовании спиновых центров в качестве сенсоров, кубитов, создания гироскопов на ядерных спинах, поэтому для их определения мы использовали кристаллы SiC, обогащенные изотопом $^{13}\text{C} \sim 12\%$.

В ряде алгоритмов применения спиновых центров в SiC в квантовой обработке информации рассматривается возможность использования ядерных спинов ^{13}C и ^{29}Si в качестве долговременной памяти, например, [12]. В данной статье с помощью двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) получены частоты сверхтонких (СТ) взаимодействий электронного спина с ядерными магнитными моментами изотопов ^{13}C и ^{29}Si , в том числе и с ядрами, удаленными от места локализации спинового центра. Важной задачей для использования спиновых центров является выяснение воздействия высокого содержа-

¹⁾e-mail: yulia.uspenskaia@mail.ioffe.ru

ния изотопа с ядерным магнитным моментом (более чем десятикратное увеличение содержания ^{13}C в настоящих исследованиях) на релаксационные характеристики этих центров.

Номинально нелегированные кристаллы 6H-SiC *n*-типа, обогащенные изотопом $^{13}\text{C} \sim 12\%$, были выращены сублимационным сэндвич-методом [24]. Образцы подвергались облучению быстрыми нейтронами при комнатной температуре с дозой $\sim 10^{18} \text{ см}^{-2}$ с последующим 30-минутным изохронным отжигом при температуре 700°C . Кристаллы были выколоты в виде пластин с известной кристаллографической ориентацией с возможностью вращения образца в магнитном поле в заданных плоскостях.

Эксперименты по электронному парамагнитному резонансу (ЭПР) и оптически детектируемому магнитному резонансу (ОДМР) выполнены на радиоспектроскопическом комплексе, созданном в ФТИ им. А. Ф. Иоффе, включающем высокочастотный спектрометр ЭПР/ОДМР диапазона 94 ГГц (W-диапазон) с использованием магнитооптического криостата замкнутого цикла, с диапазоном рабочих температур 1.5–300 К и широким диапазоном изменения магнитных полей $-7 \div +7 \text{ Тл}$ с переходом через нулевое значение. В комплекс также входит спектрометр ОДМР, выполненный на базе конфокального оптического микроскопа [25]. Сигналы ОДМР регистрировались при различных температурах, вплоть до комнатной температуры, с помощью синхронного детектирования при приложении постоянного магнитного поля и осциллирующего на низкой частоте переменного магнитного поля.

Для определения концентрации изотопа ^{13}C непосредственно в кристаллической решетке 6H-SiC был зарегистрирован спектр ЭПР (X-диапазон, 9.4 ГГц, $T = 300 \text{ К}$) классической изолированной отрицательно заряженной вакансии кремния V_{Si}^- ($S = 3/2$) [26], который представлен на рис. 1а. Пунктирной черной линией показан смоделированный спектр ЭПР для кристалла 6H-SiC с содержанием изотопа $^{13}\text{C} \sim 12\%$ и природным содержанием изотопа ^{29}Si . Для сравнения пунктирной синей линией показан смоделированный спектр ЭПР для кристалла 6H-SiC с природным содержанием изотопов ^{13}C и ^{29}Si . Обозначены СТ переходы для взаимодействия с ближайшими четырьмя атомами углерода, C_{NN} , где NN – *nearest neighbor*: атом углерода #1 расположен вдоль оси *c* кристалла, три атома #2–4 расположены в эквивалентных позициях вдоль связей, отвернутых на 70° от оси *c*. В образце, обогащенном ^{13}C , эти переходы чрезвычайно интенсивные, но видны и в смоделированном

спектре ЭПР в кристалле с природным содержанием изотопов. В последнем случае видны интенсивные сателлиты от взаимодействия с двенадцатью атомами кремния во второй координационной сфере относительно вакансии кремния, обозначенные как Si_{NNN} , где NNN – *next nearest neighbor*. СТ структура для взаимодействия с ^{29}Si составляет примерно 9 МГц ($\sim 0.3 \text{ мТл}$) [27].

На рисунке 1b приведены последовательности импульсов, которые использовались для регистрации спектров ЭПР и ДЭЯР по электронному спиновому эху (ЭСЭ) в диапазоне 94 ГГц, оптимальная последовательность $\pi/2$ - τ - π соответствовала временам 36–280–72 нс. Измерения ДЭЯР проводились на спектрометре ЭПР Bruker Elexsys 680, частота 95 ГГц. Принцип регистрации ДЭЯР основан на использовании высокоэнергетического сигнала ЭПР для детектирования низкоэнергетических квантов ядерного магнитного резонанса (ЯМР), что позволяет на порядки повысить чувствительность регистрации ЯМР и исследовать малые расщепления энергий, которые в обычном ЭПР не разрешаются и просто приводят к уширению линий. Регистрация ДЭЯР проводилась в импульсном режиме, поэтому основная часть измерений была выполнена в режиме ЭСЭ.

На рисунке 1c представлена структура кристаллической решетки 6H-SiC, имеются две квазикубические (k_1 , k_2) и гексагональная (h) позиции Si и C. Возможны три конфигурации нейтральных дивакансий Si-C, ориентированных вдоль оси *c*: (k_1k_1), (k_2k_2), (hh), так называемые P6 центры [28], а также набор дивакансий, отвернутых на 70° от оси *c*: (k_1k_2), (k_1h), (k_2h) – P7 центры [28]. Семейства P6 и P7 имеют триплетные основные состояния нейтральной дивакансии Si-C и характеризуются симметрией C_{3v} и C_{1h} соответственно. На рисунке 1c представлена только одна конфигурация дивакансии (k_1k_1), обозначим ее как P6', остальные конфигурации легко получить, используя изображенную часть кристаллической решетки. На рисунке 1c также выделена изолированная отрицательно заряженная вакансия V_{Si}^- [26], спектр ЭПР которой показан на рис. 1а. Эта вакансия характеризуется нулевым параметром тонкой структуры, $D = 0$, [29] и не проявляет уникальных спиновых свойств в виде оптически индуцированного выстраивания спинов. Обозначены атомы углерода и кремния (C_{NN} , Si_{NNN} , C_{III} , Si_{IV}), расположенные в окружении вакансии кремния, входящей в дивакансию $V_{\text{Si}}^-V_{\text{C}}$, выделенную на рис. 1c как P6'.

На рисунке 2 приведены зарегистрированные по ЭСЭ ориентационные зависимости спектров ЭПР

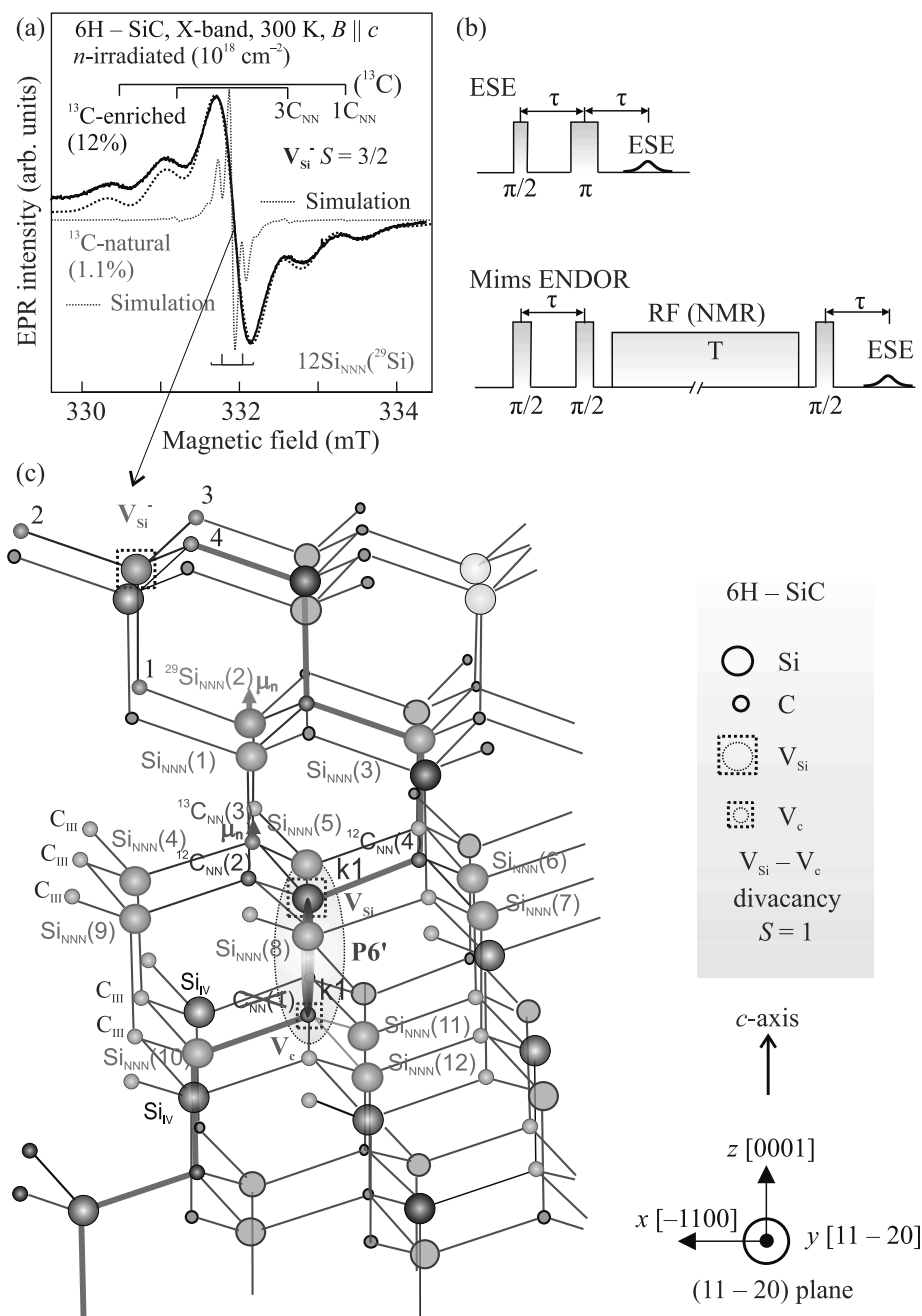


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Спектр ЭПР изолированной отрицательно заряженной вакансии кремния V_{Si}^- в кристалле 6H-SiC, обогащенном изотопом $^{13}\text{C} \sim 12\%$, зарегистрированный на частоте 9.4 ГГц. Пунктирными линиями показаны симулированные спектры ЭПР (описание в тексте). (б) – Последовательности импульсов для регистрации спектров ЭСЭ и ДЭЯР в диапазоне 94 ГГц. (в) – Схематическое представление кристаллической решетки 6H-SiC. Представлена одна конфигурация дивакансии (k1k1). Обозначены атомы кремния и углерода, расположенные в окружении вакансии кремния, входящей в дивакансию $V_{\text{Si}}-V_{\text{C}}$. Условно показано попадание одного изотопа с ядерным магнитным моментом в окружение дивакансии

нейтральных дивакансий $V_{\text{Si}}-V_{\text{C}}$ в кристалле 6H-SiC, обогащенном изотопом ^{13}C (12%) при непрерывном оптическом лазерном возбуждении, длина волны 808 нм, температура 150 К. Для ориентации, близ-

кой к $B \parallel c$ ($\theta = 0^\circ$), черной линией показан спектр ЭПР при отсутствии оптического возбуждения. Видно, что в отсутствие света все линии ЭПР имеют одинаковую фазу, так как характеризуют оптиче-

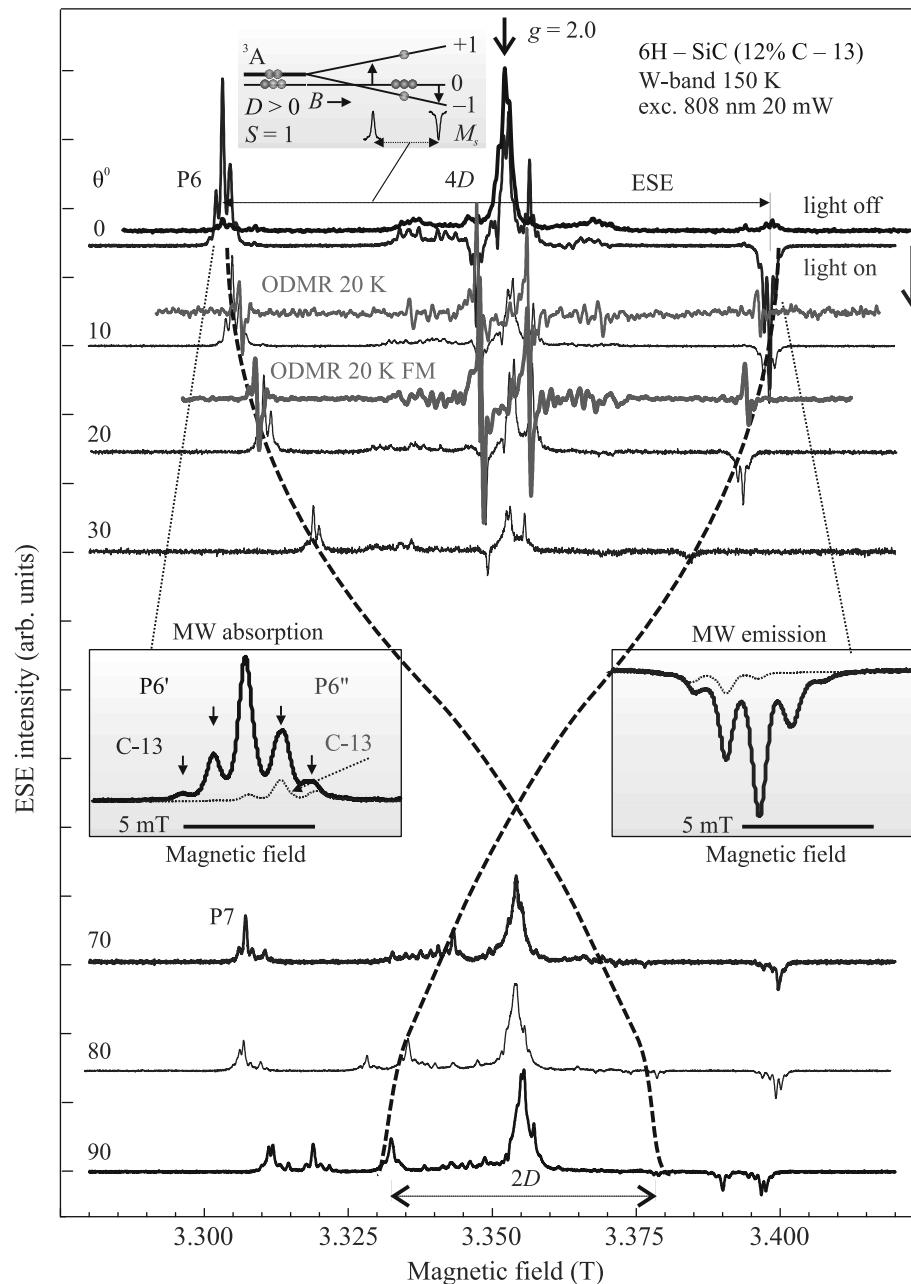


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зарегистрированные по ЭСЭ ориентационные зависимости спектров ЭПР нейтральных дивакансий $V_{Si}-V_C$ в кристалле 6H-SiC, обогащенном изотопом $^{13}C \sim 12\%$ при непрерывном оптическом лазерном возбуждении (описание в тексте). Красным цветом представлены два спектра ОДМР, зарегистрированные в том же образце, что и спектры ЭСЭ. Все спектры зарегистрированы на частоте 94 ГГц (W-диапазон)

ское поглощение микроволновой энергии, в то же время оптическое возбуждение приводит к инвертированию фаз для ряда переходов, что объясняется наличием излучения вместо поглощения микроволновой энергии. На вставке в увеличенном масштабе представлены линии излучения и поглощения микроволновой мощности для ориентации близкой к $\theta = 0^\circ$, где отчетливо проявляется СТ структу-

ра ^{13}C для двух P6 центров (P6' и P6'') в виде переходов для взаимодействия с ближайшими тремя атомами углерода #2-4, расположенными в эквивалентных позициях вдоль связей, отвернутых на 70° от оси c , $\theta = 70^\circ$ (см. рис. 1с). В ориентации $\theta = 70^\circ$ проявляются спектры ЭПР нейтральных дивакансий $V_{Si}-V_C$, отвернутых на 70° от оси c (P7 центры).

Красным цветом представлены два спектра ОДМР, зарегистрированные в том же образце при двух ориентациях. Сигналы в области $g = 2$ (в диапазоне магнитных полей 3.347–3.357 Тл) принадлежат семейству спиновых центров с $S = 3/2$ и будут рассмотрены в отдельной работе. Фаза линий ОДМР одинакова для обоих переходов, хотя эти линии соответствуют поглощению и излучению микроволнового излучения. Таким образом, поглощение и излучение микроволновой мощности приводят к одним и тем же изменениям интенсивности фотолюминесценции спиновых центров.

Спиновый гамильтониан, описывающий основное состояние нейтральной дивакансии $V_{Si}-V_C$ в SiC, имеет вид [12]:

$$\hat{H} = g_e \mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} + D[\hat{S}_z^2 - (1/3)S(S+1)] + E[\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2] + \sum_i (\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{A}_i \cdot \hat{\mathbf{I}}_i - g_{Ni} \mu_N \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{I}}_i). \quad (1)$$

Здесь $\hat{\mathbf{S}}$ – оператор спина электрона с $S = 1$, g_e – изотропный электронный g -фактор, равный ~ 2.0 , μ_B – магнетон Бора. Первый член описывает зеемановское взаимодействие электронов, второй и третий члены отражают тонкую структуру вследствие взаимодействия с кристаллическим полем, при этом $E = 0$ для P6 центров и отлично от нуля для P7 центров. СТ структура в спектрах ЭПР и ДЭЯР описывается последними членами спинового гамильтониана под знаком суммирования. Представлены операторы ядерного спина для ядер ^{29}Si ($I_{Si} = 1/2$) или ^{13}C ($I_C = 1/2$), расположенных в разных координатных сферах относительно положений дивакансии $V_{Si}-V_C$, g_{Ni} – g -фактор ядра i (g_N – отрицательный для ^{29}Si и положительный для ^{13}C), μ_N – ядерный магнетон. Первая часть суммы отражает сверхтонкое взаимодействие, где \mathbf{A}_i – тензор, описывающий СТ взаимодействие с i -ми атомами Si или C. СТ взаимодействия в первой и второй сферах относительно вакансии Si частично разрешены в спектрах ЭПР. Вторая часть под знаком суммирования описывает ядерное зеемановское взаимодействие для ядер ^{29}Si и ^{13}C .

Без внешнего магнитного поля ($B = 0$) основное состояние $S = 1$ расщепляется из-за наличия аксиального кристаллического поля с параметром тонкой структуры D , расщепление между подуровнями $M_S = 0$ и $M_S = \pm 1$ имеет значение $\Delta = D$. Оптическое возбуждение приводит к изменению населенностей (выстраиванию) спиновых состояний дивакансии в SiC, в результате избыточно населяется уровень $M_S = 0$ и опустошаются уровни $M_S = \pm 1$ (вставка на рис. 2). Изменение населенностей уровней в результате резонансного воздействия микро-

волнового излучения приводит к сильным изменениям интенсивности фотолюминесценции (ФЛ). Этот эффект позволяет осуществить оптическое детектирование магнитного резонанса. Техника ОДМР приводит к гигантскому увеличению чувствительности, вплоть до возможности регистрировать одиночные спины [10, 11, 23].

Параметры тонкой структуры рассматриваемых в настоящей работе триплетных центров приведены в ряде работ [28, 30, 31], в них представлены различные конфликтующие модели, которые были пересмотрены и окончательно установлены как нейтральные дивакансии $V_{Si}-V_C$ в основном триплетном состоянии в 6H-SiC [1]. Было показано, что основное состояние соответствует $S = 1$, в результате сделан вывод о нейтральном зарядовом состоянии дивакансии в решетке SiC, т.е. имеются по 4 электрона на связях для вакансии углерода и кремния. Позднее модель нейтральной дивакансии была подтверждена в 4H-SiC [2]. Параметры D для семейства P6 и P7, найденные в различных работах, в основном совпадают, несмотря на различие в интерпретации структуры этих центров. В наших экспериментах для P6' и P6'' параметр D равен $\sim 440 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и $\sim 430 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ соответственно.

Частоты переходов ДЭЯР, определяемые правилами отбора, $\Delta M_S = 0$ и $\Delta m_I = \pm 1$, даются формулами [12]:

$$\nu_{\text{ENDOR}i} = h^{-1} |M_S [a_i + b_i (3 \cos^2 \theta - 1)] - g_{Ni} \mu_N B|, \quad (2)$$

где a_i и b_i – изотропная и анизотропная части СТ взаимодействия с i -м ядром, θ – угол между внешним магнитным полем B и тензором СТ взаимодействия, $g_{Ni} \mu_N B/h$ – ларморовская частота f_L . Компоненты тензора СТ взаимодействия могут быть выражены через изотропную a - и анизотропную b -компоненты как $A_{\parallel} = a + 2b$ и $A_{\perp} = a - b$ с аксиальной симметрией относительно оси p -функции. Здесь $a = (8\pi/3)g_e \mu_B g_N \mu_N |\Psi_{2s}(0)|^2$ и $b = (2/5)g_e \mu_B g_N \mu_N \langle r_{2p}^{-3} \rangle$, где g_e – электронный g -фактор, а Ψ – волновая функция неспаренного электрона, т.е. значения a и b дают возможность однозначно определять спиновую плотность на ядрах лигандов.

На рисунке 3 представлены зарегистрированные по ЭСЭ спектры ДЭЯР дивакансий $V_{Si}-V_C$ в кристалле 6H-SiC, обогащенном изотопом $^{13}\text{C} \sim 12\%$ при непрерывном оптическом возбуждении лазером 808 нм и температуре 150 К. Справа представлен спектр ЭПР, зарегистрированный по ЭСЭ в ориентации, близкой к $B \parallel c$ ($\theta = 0^\circ$). Спектры ДЭЯР, обозначенные как lf (*low field*) и hf (*high field*), соответ-

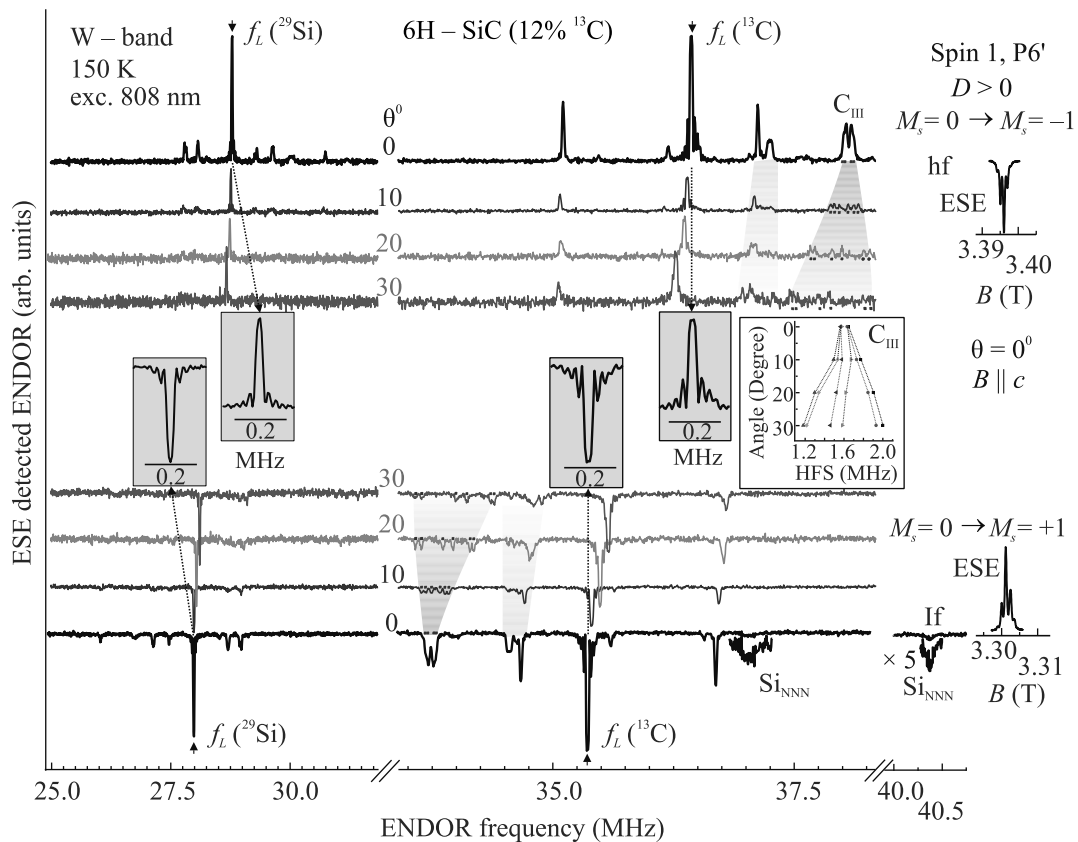


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зарегистрированные по ЭСЭ в диапазоне 94 ГГц спектры ДЭЯР нейтральной дивакансии $V_{\text{Si}}-V_{\text{C}}$, $P6'$, в кристалле 6H-SiC, обогащенном изотопом $^{13}\text{C} \sim 12\%$ при непрерывном оптическом лазерном возбуждении. Справа представлены две линии ЭПР $P6'$ центров: высокополевая (hf) и низкополевая (lf). На вставках показаны в увеличенном масштабе линии ДЭЯР, зарегистрированные в области ларморовских частот ^{13}C и ^{29}Si . На правой вставке представлена угловая зависимость СТ структуры (HFS) для одной из групп координационной сферы C_{III}

ствуют низкополевому и высокополевому ЭПР переходам, показанным справа. Наблюдается зеркальное отражение линий ДЭЯР, обусловленных СТ взаимодействиями с ^{13}C и ^{29}Si , находящихся в различных координационных сферах относительно дивакансии, зарегистрированных по низкополевому и высокополевому переходам. СТ взаимодействия с ядрами ^{29}Si и ^{13}C однозначно разделены благодаря селективному заселению уровней тонкой структуры с определенными значениями M_S . Определены знаки этих взаимодействий и, как следствие, знаки осциллирующей спиновой плотности на ядрах ^{29}Si и ^{13}C . Определены значения СТ взаимодействия с ядрами ^{29}Si и ^{13}C , которые могут быть использованы рядом алгоритмов квантовой обработки информации в качестве долговременной памяти (см., например, [32]).

Отличительной особенностью спектров ДЭЯР является наблюдение интенсивных сигналов на ларморовских частотах ^{13}C и ^{29}Si , т.е. переходы ЯМР на удаленных сферах от дивакансии с $S = 1$ индуциру-

ют сильные изменения населенностей спиновых подуровней центра, что и отражается в изменениях интенсивности ЭСЭ. На вставках рис. 3 показаны в увеличенном масштабе линии ДЭЯР, зарегистрированные в области ларморовских частот ^{13}C и ^{29}Si . На правой вставке рис. 3 представлена угловая зависимость СТ структуры (*hyper-fine structure* – HFS) для одной из групп координационной сферы C_{III} .

В соответствии с предложенной моделью нейтральной дивакансии с $S = 1$ основную роль для СТ взаимодействий играет вакансия кремния, в ближайшем окружении которой находятся три атома углерода C_{NN} (один атом углерода, #1, расположенный вдоль оси c кристалла отсутствует), #2–4, расположенные в эквивалентных позициях вдоль связей, отвернутых на 70° от оси c . На вставке рис. 2 показаны сателлиты, обусловленные СТ взаимодействиями именно с тремя атомами углерода, обозначенные как #2, #3 и #4 на схеме рис. 1с. Отметим, что в спектре ЭПР на рис. 1а для изолированной (темной) ва-

Таблица 1. Сверхтонкие взаимодействия с ядрами ^{13}C и ^{29}Si , окружающими нейтральные дивакансии Si-C со спином $S = 1$, обозначенные как P6' и P6'' в 6H-SiC. СТ взаимодействие с тремя атомами C, расположенными в ближайшем окружении (NN) кремниевой вакансии, входящей в состав дивакансии, имеет симметрию, близкую к аксиальной вдоль направления связи Si-C, поэтому параметры даны параллельно связи (A_{\parallel}) и перпендикулярно связи (A_{\perp}). Структура центра P6' и обозначения атомов C и Si приведены на рис. 1с. Жирным шрифтом выделены группы линий, принадлежащих одному типу позиций атомов углерода

Центр	Позиция C и Si	Расщепления СТ взаимодействия для ^{13}C , ^{29}Si (МГц)
P6'	$C_{\text{NN}}(2-4)$	$A_{70} = 60$ $A_{\parallel} \approx 114, A_{\perp} \approx 49$ z -ось (\parallel) вдоль направления связи $V_{\text{Si}}-C_{\text{NN}}$
	C_{III}	$\theta = 0$: 1.651, 1.637, 1.582; 1.568 , 0.798, 0.672; -1.346, -1.221, -0.256
		$\theta = 10$: 1.776, 1.734, 1.678, 1.582, 1.540, 1.498 ; -1.317
		$\theta = 20$: 1.907, 1.852, 1.623, 1.525, 1.345, 1.303 ; 0.95, 0.881, 0.839, 0.728, 0.7; -1.283
		$\theta = 30$: 2.004, 1.935, 1.588, 1.463, 1.22, 1.185 ; 1.006, 0.776, 0.693; -1.221
Удаленные координационные сферы 0.067, 0.038; -0.064, -0.036		
P6''	$C_{\text{NN}}(2-4)$ [C _i]	$A_{70} = 55$ $A_{\parallel} \approx 105, A_{\perp} \approx 44$ z -ось (\parallel) вдоль направления связи $V_{\text{Si}}-C_{\text{NN}}$
	$\text{Si}_{\text{NNN}}(1-12)$	$\text{Si}_{\text{NNN}}(1-3)$: 19.412 $\text{Si}_{\text{NNN}}(4-9)$: 9.09, 9.15 $\text{Si}_{\text{NNN}}(10-12)$: $\theta = 0$: 1.015, 0.987, 0.736, 0.721, 0.553; -1.945, -1.244, -0.836, -0.513 Удаленные координационные сферы 0.062, 0.035; -0.064, -0.038

кансии кремния с $S = 3/2$ имеется также взаимодействие с атомом углерода # 1, который отсутствует в дивакансии.

В таблице 1 представлены сверхтонкие взаимодействия с ядрами ^{13}C и ^{29}Si , окружающими нейтральную дивакансию Si-C, обозначенные как P6' и P6''. По данным ЭПР, СТ взаимодействие с тремя атомами углерода, расположенными в ближайшем окружении кремниевой вакансии, входящей в состав дивакансии, имеет симметрию близкую к аксиальной вдоль направления связи, поэтому параметры даны параллельно связи (A_{\parallel}) и перпендикулярно связи (A_{\perp}). Константа СТ взаимодействия определяется по формуле $A = (A_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + A_{\perp}^2 \sin^2 \theta)^{1/2}$.

Структура центра P6' и обозначения атомов C и Si приведены на рис. 1с. Положительным значениям СТ расщепления для ^{29}Si соответствует отрицательная спиновая плотность, а положительным значениям СТ расщепления для ^{13}C соответствует положительная спиновая плотность (также верно обратное

утверждение). Мы не анализировали полные ориентационные зависимости сигналов ДЭЯР, так как при больших значениях угла линии ЭПР начинают перекрываться, как для разных переходов в дивакансии, так и с линиями ЭПР других спиновых центров. Тем не менее в табл. 1 мы приводим значения СТ взаимодействий с различными координационными сферами, полученными из спектров ДЭЯР. Видно, что ряд сигналов обладает сильной анизотропией, также различие в знаках может дать информацию для идентификации позиции атомов ^{13}C и ^{29}Si . Необходимо проведение теоретических расчетов для обоснования наблюдаемых СТ взаимодействий, что выходит за рамки настоящей работы.

Широкие возможности для применения карбида кремния в сенсорике, квантовых вычислениях и для создания квантовых гироскопов открываются благодаря эффективному воздействию ЯМР на лармовских частотах ^{13}C и ^{29}Si на сигнал ЭСЭ, что непосредственно связано с изменением населенно-

стей электронных спиновых уровней, и, как результат, превращение ЯМР в оптические сигналы. Подобные эффекты наблюдались для NV-центров в алмазе, которые также имеют триплетное основное состояние, как и дивакансии, в которых используются ядерные магнитные моменты для долговременной записи информации и при создании гироскопов. Именно для таких применений необходимо использование SiC, обогащенного изотопами с магнитными моментами в фиксированных пропорциях, поскольку большинство применений основывается на использовании свойств ядерных магнитных моментов изотопов ^{13}C и ^{29}Si . При этом важную роль может играть различие в знаках магнитных моментов ^{13}C и ^{29}Si , так как ожидается эффективная компенсация нежелательных вращений ядер при их использовании для разработки гироскопических приборов. Параллельная регистрация ОДМР в 6H-SiC ($^{13}\text{C} \sim 12\%$) свидетельствует о том, что любые изменения населенностей электронных спиновых подуровней изменяют интенсивность люминесценции спиновых центров.

Заключение. Методами высокочастотного импульсного ЭПР и ДЭЯР определены величины электронно-ядерных взаимодействий с ядрами углерода ^{13}C и кремния ^{29}Si на удаленных оболочках для нейтральных дивакансий со спином $S = 1$ в условиях оптически индуцированного выстраивания спинов в 6H-SiC, десятикратно обогащенном изотопом ^{13}C . Сверхтонкие взаимодействия с ядрами ^{13}C и ^{29}Si однозначно разделены благодаря селективному заселению уровней тонкой структуры с определенными значениями M_S . Определены знаки этих взаимодействий и обнаружены осцилляции спиновой плотности на ядрах ^{29}Si и ^{13}C . Ранее такой эффект был обнаружен для центров окраски с $S = 3/2$ в SiC [27], а также теоретически предсказан для NV-центров в алмазе [33]. Переходы ЯМР на ларморовских частотах ^{13}C и ^{29}Si и частотах, чрезвычайно близких к ларморовским, отстоящих от них на килогерцы с осциллирующей спиновой плотностью, вызывают гигантские изменения населенностей спиновых подуровней. Этот эффект свидетельствует о сильном воздействии ЯМР на удаленных ядрах на населенности электронных спиновых уровней, изменения которых могут трансформироваться в сигналы ЭСЭ и оптические сигналы. Отметим, что оптические сигналы совместимы с полосой прозрачности волоконной оптики и живой материи.

Авторы работы выражают глубокую благодарность Орлинскому Сергею Борисовичу за плодотворное сотрудничество, ценные и конструктивные предложения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 20-12-00216).

1. P. G. Baranov, I. V. Il'in, E. N. Mokhov, M. V. Muzafarova, S. B. Orlinskii, and J. Schmidt, JETP Lett. **82**, 441 (2005).
2. N. T. Son, P. Carlsson, J. ul Hassan, E. Janzén, T. Umeda, J. Isoya, A. Gali, M. Bockstedte, N. Morishita, T. Ohshima, and H. Itoh, Phys. Rev. Lett. **96**, 055501 (2006).
3. P. G. Baranov, A. P. Bundakova, I. V. Borovykh, S. B. Orlinskii, R. Zondervan, and J. Schmidt, JETP Lett. **86**, 202 (2007).
4. J. R. Weber, W. F. Koehl, J. B. Varley, A. Janotti, B. B. Buckley, C. G. van de Walle, and D. D. Awschalom, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **107**, 8513 (2010).
5. W. F. Koehl, B. B. Buckley, F. J. Heremans, G. Calusine, and D. D. Awschalom, Nature **479**, 84 (2011).
6. P. G. Baranov, A. P. Bundakova, A. A. Soltamova, S. B. Orlinskii, I. V. Borovykh, R. Zondervan, R. Verberk, and J. Schmidt, Phys. Rev. B **83**, 125203 (2011).
7. V. A. Soltamov, A. A. Soltamova, P. G. Baranov, and I. I. Proskuryakov, Phys. Rev. Lett. **108**, 226402 (2012).
8. D. Riedel, F. Fuchs, H. Kraus, S. Văth, A. Sperlich, V. Dyakonov, A. A. Soltamova, P. G. Baranov, V. A. Ilyin, and G. V. Astakhov, Phys. Rev. Lett. **109**, 226402 (2012).
9. H. Kraus, V. A. Soltamov, D. Riedel, S. Văth, F. Fuchs, A. Sperlich, P. G. Baranov, V. Dyakonov, and G. V. Astakhov, Nat. Phys. **10**, 157 (2014).
10. D. J. Christle, A. L. Falk, P. Andrich, P. V. Klimov, J. U. Hassan, N. T. Son, E. Janzén, T. Ohshima, and D. D. Awschalom, Nat. Mater. **14**, 160 (2015).
11. M. Widmann, S.-Y. Lee, T. Rendler et al. (Collaboration), Nat. Mater. **14**, 164 (2015).
12. P. G. Baranov, H. J. von Bardeleben, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, *Magnetic Resonance of Semiconductors and Their Nanostructures: Basic and Advanced Applications*, Springer Series in Materials Science, Springer-Verlag GmbH Austria (2017), v. 253.
13. V. A. Soltamov, B. V. Yavkin, D. O. Tolmachev, R. A. Babunts, A. G. Badalyan, V. Yu. Davydov, E. N. Mokhov, I. I. Proskuryakov, S. B. Orlinskii, and P. G. Baranov, Phys. Rev. Lett. **115**, 247602 (2015).
14. S. A. Tarasenko, A. V. Poshakinskiy, D. Simin, V. A. Soltamov, E. N. Mokhov, P. G. Baranov, V. Dyakonov, and G. V. Astakhov, Phys. Status Solidi B **255**, 1700258 (2018).
15. V. A. Soltamov, C. Kasper, A. V. Poshakinskiy, A. N. Anisimov, E. N. Mokhov, A. Sperlich, S. A. Tarasenko, P. G. Baranov, G. V. Astakhov, and V. Dyakonov, Nat. Commun. **10**, 678 (2019).

16. H. Singh, A. N. Anisimov, S. S. Nagalyuk, E. N. Mokhov, P. G. Baranov, and D. Suter, *Phys. Rev. B* **101**, 134110 (2020).
17. H. Singh, A. N. Anisimov, I. D. Breev, P. G. Baranov, and D. Suter, *Phys. Rev. B* **103**, 104103 (2021).
18. C. J. Cochrane, J. Blacksberg, M. A. Anders, and P. M. Lenahan, *Sci. Rep.* **6**, 37077 (2016).
19. A. N. Anisimov, V. A. Soltamov, I. D. Breev, M. M. Khalisov, R. A. Babunts, A. V. Ankudinov, and P. G. Baranov, *JETP Lett.* **108**, 610 (2018).
20. A. N. Anisimov, R. A. Babunts, I. D. Breev, V. A. Soltamov, E. N. Mokhov, and P. G. Baranov, *JETP Lett.* **112**, 774 (2020).
21. R. A. Babunts, A. N. Anisimov, I. D. Breev, A. S. Gurin, A. P. Bundakova, M. V. Muzafarova, E. N. Mokhov, and P. G. Baranov, *JETP Lett.* **114**, 463 (2021).
22. I. D. Breev, K. V. Likhachev, V. V. Jakovleva, I. P. Veishtort, A. M. Skomorokhov, S. S. Nagalyuk, E. N. Mokhov, G. V. Astakhov, P. G. Baranov, and A. N. Anisimov, *JETP Lett.* **114**, 274 (2021).
23. A. Gruber, A. Drabenstedt, C. Tietz, L. Fleury, J. Wrachtrup, and C. von Borczyskowski, *Science* **276**, 2012 (1997).
24. Yu. A. Vodakov, E. N. Mokhov, M. G. Ramm, and A. D. Roenkov, *Krist. Tech.* **14**, 729 (1979).
25. E. V. Edinach, Yu. A. Uspenskaya, A. S. Gurin, R. A. Babunts, H. R. Asatryan, N. G. Romanov, A. G. Badalyan, and P. G. Baranov, *Phys. Rev. B* **100**, 104435 (2019).
26. T. Wimbauer, B. K. Meyer, A. Hofstaetter, A. Scharmann, and H. Overhof, *Phys. Rev. B* **56**, 7384 (1997).
27. V. A. Soltamov, B. V. Yavkin, G. V. Mamin, S. B. Orlinskii, I. D. Breev, A. P. Bundakova, R. A. Babunts, A. N. Anisimov, and P. G. Baranov, *Phys. Rev. B* **104**, 125205 (2021).
28. V. S. Vainer and V. A. Il'in, *Sov. Phys. Solid State* **23**, 2126 (1981).
29. S. B. Orlinski, J. Schmidt, E. N. Mokhov, and P. G. Baranov, *Phys. Rev. B* **67**, 125207 (2003).
30. Th. Lingner, S. Greulich-Weber, J.-M. Spaeth, U. Gerstmann, E. Rauls, Z. Hajnal, Th. Frauenheim, and H. Overhof, *Phys. Rev. B* **64**, 245212 (2001).
31. M. V. B. Pinheiro, E. Rauls, U. Gerstmann, S. Greulich-Weber, H. Overhof, and J.-M. Spaeth, *Phys. Rev. B* **70**, 245204 (2004).
32. S. Pezzagna and J. Meijer, *Appl. Phys. Rev.* **8**, 011308 (2021).
33. A. Gali, M. Fyta, and E. Kaxiras, *Phys. Rev. B* **77**, 155206 (2008).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 116

Выпуск 8

25 октября 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора
Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

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

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2022

К вопросу о фазовых переходах в окрестности черных дыр

А. А. Гриб⁺¹⁾, Ю. В. Павлов^{*×1)}

⁺Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, 191186 С.-Петербург, Россия

^{*}Институт проблем машиноведения РАН, 199178 С.-Петербург, Россия

[×]Институт математики и механики им. Н. И. Лобачевского Казанского федерального университета, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 29 августа 2022 г.

После переработки 9 сентября 2022 г.

Принята к публикации 15 сентября 2022 г.

В статье показано, что вблизи горизонта вращающихся черных дыр возможны температуры порядка температуры фазового перехода в модели Хиггса стандартной модели элементарных частиц. Даны численные оценки параметра расстояния от горизонта, а также испускаемого при столкновении частиц гравитационного и электромагнитного излучений.

DOI: 10.31857/S1234567822200010, EDN: kntzfi

1. Введение. В Брукхейвенской национальной лаборатории на релятивистском коллайдере тяжелых ионов при столкновении ионов золота в 2010 г. была получена кварк-глюонная плазма, температура которой составляла 4 триллиона градусов Цельсия. В 2012 году сообщалось о достижении температуры в 5 триллионов градусов кварк-глюонной плазмы, возникающей при столкновении ядер свинца при энергиях порядка нескольких ТэВ на каждый сталкивающийся нуклон на Большом адронном коллайдере (БАК). Однако исследование столкновений частиц в окрестностях вращающихся черных дыр [1–5] показало, что можно говорить о существовании в природе естественного суперколлайдера с энергиями столкновений, значительно превышающими достижимые на БАК. Тем самым возникновение кварк-глюонной плазмы в таких столкновениях должно иметь следствием появление очень высоких температур. Поэтому представляет интерес вопрос о возникновении температуры фазового перехода в кварк-глюонной плазме, в частности, в теории электрослабого взаимодействия. При этой температуре происходит изменение вакуума, в силу чего среднее по вакууму от хиггсовского поля обращается в нуль. Масса кварков становится равной нулю и кварк-глюонная плазма меняет существенно свои свойства. Целью настоящей статьи является указать, при каких условиях это происходит, в частности, на каких расстояниях от горизонта событий черной дыры имеет место указанное явление. Ранее фазовый переход в электро-

слабых взаимодействиях обсуждался в космологии Киржницем и Линде [6, 7], Вайнбергом [8] и др.

2. Фазовые переходы в ранней Вселенной. При экстраполяции стандартной космологической модели на времена, близкие к моменту Большого взрыва, теоретически могли достигаться очень высокие температуры и могли иметь место следующие переходы между состояниями космической среды, которые обычно называют космологическими фазовыми переходами:

1) между кварк-глюонной плазмой и адронами при энергиях E порядка 200 МэВ. Соответствующая температура $T = E/k_B \approx 10^{12}$ К, где $k_B = 1.380649 \times 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, могла иметь место в расширяющейся Вселенной во время порядка 10^{-6} с после Большого взрыва.

2) Электрослабый фазовый переход при энергиях порядка $E_W \approx 100$ ГэВ. Соответствующая температура $T_W \approx 10^{15}$ К могла иметь место во время порядка 10^{-12} с после Большого взрыва.

3) Переход Большого объединения при энергиях $E_{GUT} \approx 10^{16}$ ГэВ. Температура, соответствующая энергии Большого объединения $T_{GUT} = E_{GUT}/k_B \approx 10^{29}$ К, могла не достигаться в ранней Вселенной [9], в моделях с инфляционной стадией, в которых температура разогрева значительно ниже T_{GUT} . В моделях с радиационно-доминированной стадией в ранней Вселенной температура T_{GUT} могла быть достигнута на временах порядка 10^{-38} с.

Отметим, что возможное существование фазовых переходов в ранней Вселенной приводит к известной проблеме космологической постоянной [9]. Дело в том, что плотность энергии вакуума, со-

¹⁾e-mail: andrei_grib@mail.ru; yuri.pavlov@mail.ru

ответствующая указанным фазовым переходам, на много порядков превосходит значение, соответствующее наблюдаемой космологической постоянной. Для объяснения этого приходится предполагать тонкую подстройку исходного затравочного значения космологической постоянной.

3. Хокинговская температура в окрестности горизонта невращающейся черной дыры. Высокие температуры и области возможных фазовых переходов могут иметь место в окрестностях горизонта черных дыр благодаря открытому Хокингом [10, 11] эффекту теплового излучения черных дыр.

Метрика невращающейся черной дыры может быть записана в виде

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) c^2 dt^2 - \frac{dr^2}{1 - \frac{r_g}{r}} - r^2 d\Omega^2, \quad (1)$$

где $r_g = 2GM/c^2$, G – гравитационная постоянная, c – скорость света, M – масса черной дыры, $d\Omega^2 = d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2$. Хокинговская температура на бесконечном удалении от черной дыры Шварцшильда равна [12]:

$$T_H = \frac{\hbar c^3}{8\pi k_B G M} \approx 6.169 \cdot 10^{-8} K \cdot \frac{M_\odot}{M}, \quad (2)$$

где $\hbar = 1.05457 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – приведенная постоянная Планка, M_\odot – масса Солнца.

Как известно [13], в гравитационном поле в условиях термодинамического равновесия имеет место равенство

$$T\sqrt{g_{00}} = \text{const}. \quad (3)$$

Поэтому для хокинговской температуры невращающейся черной дыры в точках со значением радиальной координаты r получим

$$\begin{aligned} T(r) &= T_H / \sqrt{1 - \frac{r_g}{r}} = \frac{\hbar c}{4\pi k_B r_g} \sqrt{\frac{r}{\Delta r}} \approx \\ &\approx 6.169 \cdot 10^{-8} K \cdot \frac{M_\odot}{M} \sqrt{\frac{r}{\Delta r}}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\Delta r = r - r_g$. Для значений радиальной координаты, на которых достигается заданная температура T хокинговского излучения, получим, при $r \approx r_g$,

$$\Delta r \approx \frac{\hbar^2 c^4}{32\pi^2 k_B^2 G M T^2} \approx \frac{1.12 \cdot 10^{-11} M_\odot}{T^2} \frac{M_\odot}{M} \text{ (м)}. \quad (5)$$

В последнем равенстве значение температуры измеряется в кельвинах, а расстояние выражается в метрах. Подставляя в формулу (5) температуру кварк-глюонного фазового перехода, получим для черной

дыры солнечной массы расстояние $\Delta r \approx 10^{-35}$ м. Эта величина порядка значения планковской длины $l_{Pl} = \sqrt{\hbar G/c^3} \approx 1.616 \cdot 10^{-35}$ м. Для черных дыр больших масс эта величина будет еще меньше.

Отметим, что r – это радиальная координата, ее нельзя отождествлять с физическим понятием расстояния, которое может быть определено в искривленном пространстве-времени лишь локально [14]. Для пояснения смысла r напишем радиальное уравнение времениподобных геодезических в поле Шварцшильда (1) (см. [15], § 19):

$$\left(\frac{dr}{c d\tau}\right)^2 = \varepsilon^2 - \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \left(1 + \frac{L^2}{(mcr)^2}\right), \quad (6)$$

где τ – собственное время движущейся частицы массы m , $\varepsilon = E/(mc^2)$ – ее удельная энергия, L – ее момент импульса. Из формулы (6) следует

$$d\tau = \frac{dr}{c \sqrt{\varepsilon^2 - \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \left(1 + \frac{L^2}{(mcr)^2}\right)}}. \quad (7)$$

Для частицы с фиксированным значением момента импульса, получаем из (7) при $r \rightarrow r_g$, что время пребывания в области dr примерно равно $dr/(\varepsilon c)$. Для частиц, падающих из далекой от горизонта событий области, полная энергия не может быть много меньше mc^2 , и, следовательно, время пребывания в указанной области по порядку величины не превышает dr/c . Поэтому полученные оценки Δr для кварк-глюонного фазового перехода показывают, что снаружи горизонта событий черной дыры вещество сможет находиться в таком состоянии в течении промежутка времени порядка планковской величины, что для наблюдения физически неприемлемо.

Вывод: наблюдать фазовые переходы, даже кварк-глюонные, в окрестности горизонта астрофизических черных дыр за счет хокинговской температуры нельзя.

4. Температура, достигаемая при столкновениях вблизи горизонта экстремально вращающейся черной дыры. Метрика Керра вращающейся черной дыры [16] в координатах Бойера-Линдквиста [17] имеет вид:

$$ds^2 = \frac{\rho^2 \Delta}{\Sigma^2} c^2 dt^2 - \frac{\sin^2 \theta}{\rho^2} \Sigma^2 (d\varphi - \omega dt)^2 - \frac{\rho^2}{\Delta} dr^2 - \rho^2 d\theta^2, \quad (8)$$

где

$$\rho^2 = r^2 + \frac{a^2}{c^2} \cos^2 \theta, \quad \Delta = r^2 - \frac{2GM r}{c^2} + \frac{a^2}{c^2}, \quad (9)$$

$$\Sigma^2 = \left(r^2 + \frac{a^2}{c^2}\right)^2 - \frac{a^2}{c^2} \sin^2 \theta \Delta, \quad \omega = \frac{2GM r a}{\Sigma^2 c^2}, \quad (10)$$

M – масса черной дыры, aM – ее момент импульса. Полагаем, что $0 \leq a \leq GM/c$. Горизонт событий керовской черной дыры соответствует значению координаты

$$r = r_H \equiv \frac{G}{c^2} \left(M + \sqrt{M^2 - \left(\frac{ac}{G} \right)^2} \right). \quad (11)$$

Согласно [1] энергия столкновения в системе центра масс двух частиц массы m , с моментами импульса L_1, L_2 , нерелятивистских на бесконечности, свободно падающих в экваториальной плоскости на черную дыру с моментом импульса aM , равна

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{с.м.}}^2}{m^2 c^4} = & \frac{2}{x(x^2 - 2x + A^2)} \left[2A^2(1+x) - \right. \\ & - 2A(l_1 + l_2) - l_1 l_2 (x-2) + 2(x-1)x^2 - \\ & \left. - \sqrt{2(A-l_2)^2 - l_2^2 x + 2x^2} \sqrt{2(A-l_1)^2 - l_1^2 x + 2x^2} \right], \end{aligned} \quad (12)$$

где используются безразмерные величины $x = rc^2/GM$, $l = Lc/GmM$, $A = ac/GM$. Для экстремально вращающейся черной дыры $A = 1$, а горизонт событий соответствует значению $x = x_H = 1$. Чтобы падающая частица смогла достигнуть горизонта событий, ее момент импульса должен быть не очень большим по абсолютной величине. Например, при падении в экваториальной плоскости момент импульса нерелятивистской на бесконечности частицы ($E/mc^2 = 1$), достигающей горизонта черной дыры, должен лежать в пределах

$$-2[1 + \sqrt{1+A}] \leq l \leq 2[1 + \sqrt{1-A}]. \quad (13)$$

В случае невращающейся ($A = 0$) черной дыры энергия столкновения двух частиц с моментами импульса $l_1 = 4$ и $l_2 = -4$ у горизонта событий составляет $2\sqrt{5}mc^2$. С ростом скорости вращения черной дыры максимально достижимая энергия столкновения в системе центра масс увеличивается [3].

В случае экстремально вращающейся черной дыры частица с максимально возможным моментом импульса $l_2 = 2$ (критическая частица) будет в свободном падении бесконечно долго по собственному времени накручиваться на поверхность горизонта. Энергия соударения этой критической частицы с другой, с моментом импульса l_1 , лежащим в интервале $(-2(1 + \sqrt{2}), 2)$, может быть неограниченно большой (резонанс Банадоса–Силка–Веста (БСВ) [1]) вблизи горизонта событий

$$\frac{E_{\text{с.м.}}^2}{m^2 c^4} = \frac{4}{x(x-1)} \left(1 - l_1 + x^2 - \sqrt{(1-l_1)^2 - l_1^2 x/2 + x^2} \right). \quad (14)$$

Для температуры, рассчитываемой по формуле $T = (E_{\text{с.м.}} - 2mc^2)/k_B$, получим

$$T = \frac{2mc^2}{k_B} \left[\sqrt{\frac{1 - l_1 + x^2 - \sqrt{(1-l_1)^2 - l_1^2 x/2 + x^2}}{x(x-1)}} - 1 \right] \approx 1.083 \frac{mc^2}{k_B} \sqrt{\frac{2-l_1}{x-1}}, \quad x \rightarrow 1. \quad (15)$$

Расстояние, на котором будет достигаться заданная температура T

$$r - r_H \approx 1.17 \cdot (2 - l_1) r_H \left(\frac{mc^2}{k_B T} \right)^2, \quad r \rightarrow r_H. \quad (16)$$

Для масс m , порядка массы протона и $l_1 = 0$, электрослабая температура достигается в окрестности экстремально вращающейся черной дыры при

$$r - r_H \approx 2 \cdot 10^{-4} r_H. \quad (17)$$

Такие расстояния составляют десятки сантиметров для черных дыр звездных масс и, в отличие от случая хокинговской температуры, вполне приемлемы для реализации процесса фазового перехода.

Чтобы оценить соответствующее значение температуры, наблюдаемое вдали от черной дыры, используем уравнение для временной компоненты времени-подобной геодезической [15]

$$\rho^2 \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\Delta} \left(\Sigma^2 \varepsilon - 2 \left(\frac{GM}{c^2} \right)^2 r l \frac{a}{c} \right). \quad (18)$$

Для частицы с $l < 2\varepsilon r_H c/a$ (некритическая частица) при свободном падении вблизи горизонта экстремально вращающейся черной дыры замедление собственного времени τ по сравнению со временем на бесконечности t составляет

$$\frac{dt}{d\tau} \sim \frac{2\varepsilon(2\varepsilon - l)}{(x-1)^2(1 + \cos^2 \theta)}, \quad x \rightarrow 1. \quad (19)$$

Для критической частицы с $l = l_H = 2\varepsilon r_H c/a$ замедление времени равно

$$\frac{dt}{d\tau} \sim \frac{4\varepsilon}{(x-1)(1 + \cos^2 \theta)}, \quad x \rightarrow 1. \quad (20)$$

Ограничения на возможные значения удельной энергии ε и проекции момента импульса l на ось вращения черной дыры при заданной радиальной координате r можно получить из уравнений для радиальной и угловых компонент геодезических. Ограничимся случаем движения в экваториальной плоскости $\theta = \pi/2$. Тогда уравнение радиальной компоненты геодезической можно записать в виде [15]

$$\frac{\rho^2}{c} \frac{dr}{d\tau} = \pm \sqrt{R}, \quad (21)$$

$$R = \Sigma^2 \varepsilon^2 - lr \left(\frac{GM}{c^2} \right)^2 \left(4\varepsilon \frac{a}{c} + l \left(r - 2 \frac{GM}{c^2} \right) \right) - r^2 \Delta. \quad (22)$$

Для критической частицы условие $R \geq 0$ приводит к ограничению $\varepsilon \geq \sqrt{x/(x+2)}$, и, следовательно, замедление времени

$$\frac{dt}{d\tau} \gtrsim \frac{4}{\sqrt{3}(x-1)}, \quad x \rightarrow 1. \quad (23)$$

Для некритических частиц, падающих на экстремальную черную дыру, удельная энергия может быть мала. Так, в случае $l = 0$, из требования $R \geq 0$ получаем $\varepsilon \geq \varepsilon_{\min}$, где

$$\varepsilon_{\min} = \frac{(x-1)\sqrt{x}}{\sqrt{x^3+x+2}} \sim \frac{x-1}{2}, \quad x \rightarrow 1. \quad (24)$$

В предельном случае ε_{\min} замедление времени, согласно (18), равно

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{\sqrt{x^2+1+2/x}}{x-1} \sim \frac{2}{x-1}, \quad x \rightarrow 1. \quad (25)$$

В процессе столкновения частиц вблизи горизонта событий черной дыры и возникновения кварк-глюонной плазмы следует ожидать рождения частиц с различными значениями удельных энергии и импульса и последующего излучения фотонов при их столкновениях. Как видно из формул (19), (23), (25), если столкновение происходит вблизи горизонта $x \rightarrow 1$, то энергия столкновения и локальная температура образовавшихся частиц может неограниченно расти, но наблюдаемая на большом удалении от черной дыры температура за счет красного смещения будет стремиться нулю, при стремлении точки столкновения к горизонту событий черной дыры.

Зависимость температуры, наблюдаемой на большом удалении от черной дыры, от радиальной координаты x точки столкновения приближенно получим, комбинируя формулы (15) и (25):

$$T(x) \approx \frac{mc^2}{k_B} \cdot \frac{2(x-1)}{\sqrt{x^2+x+2/x}} \times \left[\sqrt{\frac{1-l_1+x^2-\sqrt{(1-l_1)^2-l_1^2x/2+x^2}}{x(x-1)}} - 1 \right]. \quad (26)$$

Максимальное значение $T(x)$ при $l_1 = -4$ составляет $\approx 0.534mc^2/k_B$ и достигается при $x \approx 1.744$.

Соответствующие результаты для столкновения частиц с $l_1 = -4$, $l_2 = 4$ и $E_{1,2} = mc^2$, падающих в черную дыру Шварцшильда, имеют вид

$$T(x) \approx \frac{mc^2}{k_B} \cdot \frac{32}{x(x+\sqrt{x^2+16})} \sqrt{\frac{x-2}{x}}. \quad (27)$$

Здесь максимальное значение $T(x)$ составляет $\approx 0.803mc^2/k_B$ и достигается при $x \approx 2.645$.

Таким образом, вне зависимости от скорости вращения черной дыры, наблюдаемая на большом удалении температура, порожденная высокоэнергетическими столкновениями в окрестностях горизонта событий, по порядку величины не превосходит нескольких десятых от значения mc^2/k_B . Локальная температура в окрестности места столкновения в экстремально вращающейся черной дыре может быть, в принципе, неограниченно большой. Общее излучение из-за столкновения, выходящее наружу от черной дыры, не может в силу законов сохранения превышать сумму энергий сталкивающихся частиц ($2mc^2$ при столкновении нерелятивистских на бесконечности частиц одинаковых масс m , если не рассматривается эффект Пенроуза для вращающихся черных дыр).

Отметим, что при падении любой частицы на экстремально вращающуюся черную дыру, эта черная дыра перестает быть экстремальной [18]. Это делает сомнительным существование экстремальных черных дыр в природе. Оценка из работы [19] для предельного момента импульса черной дыры, достижимого при аккреции вещества на нее, составляет $A = 0.998$. При таком значении момента импульса черной дыры максимальная энергия столкновения в системе центра масс свободно падающих нерелятивистских на бесконечности частиц составит всего $E_{c.m.} \approx 19mc^2$.

5. Многократные столкновения вблизи горизонта неэкстремально вращающихся черных дыр. Как было показано в работах [2, 3], в случае неэкстремальных черных дыр сверхвысокая энергия столкновения в системе центра масс может быть достигнута в случае многократных столкновений. Падающие из бесконечности частицы, способные достичь горизонта, должны иметь небольшой по абсолютной величине момент импульса. Необходимый для столкновения с большой энергией в системе центра масс момент импульса одной из частиц может быть приобретен или в результате многократных столкновений, или при взаимодействии с электромагнитным полем аккреционного диска. По порядку величины возможная энергия столкновения в системе центра масс частицы с моментом импульса l с другой частицей той же массы m может составлять величину [2]

$$E_{c.m.}(r) \approx \frac{mc^2}{\sqrt{\delta}} \sqrt{\frac{2(l_H - l)}{1 - \sqrt{1 - A^2}}}, \quad (28)$$

параметр δ характеризует область радиальных коор-

динат, где возможно высоко-энергетическое столкновение

$$x \leq x_H + \frac{\delta^2(1 - \sqrt{1 - A^2})^2}{4x_H\sqrt{1 - A^2}}. \quad (29)$$

Из (28), (29) для расстояния, на котором может быть достигнута заданная энергия столкновения $E_{c.m.}$, получим

$$x - x_H \approx \frac{(l_H - l)^2}{x_H\sqrt{1 - A^2}} \left(\frac{mc^2}{E_{c.m.}} \right)^4, \quad (30)$$

в частности, при $l = 0$ для вращающихся черных дыр с A , близким к единице,

$$r - r_H \approx \frac{2.8r_H}{\sqrt{1 - A}} \left(\frac{mc^2}{E_{c.m.}} \right)^4. \quad (31)$$

В случае предельного значения [19] $A = 0.998$ температура электрослабого масштаба по порядку величины возможна при $r - r_H \approx 6 \cdot 10^{-3} r_H$. Для черных дыр звездной массы такие расстояния составляют метры по порядку величины, а для сверхмассивных черных дыр это могут быть тысячи километров.

Таким образом, достижение температур кварк-глюонных и даже электрослабых фазовых переходов при многократных столкновениях частиц в окрестности вращающихся черных дыр, в принципе, возможно.

6. Столкновение макроскопических тел.

Столкновения макроскопических тел в окрестностях горизонта событий черных дыр могут иметь место только в случае, когда такие тела достигают окрестностей горизонта, не разрушившись приливными силами поля тяготения. Процессы разрушения макроскопических объектов (звезд) приливными силами в окрестности сверхмассивных черных дыр многократно наблюдались в космическом эксперименте SRG/eROSITA [20]. Приливные силы вблизи горизонта уменьшаются с ростом массы черной дыры. Приведем некоторые оценки для массы черных дыр, при которых макроскопические объекты у горизонта событий не разрушаются (см. также [21], с. 772). Ограничимся случаем невращающейся черной дыры и радиальными приливными силами. В координатах, связанных с центром масс падающего тела из уравнения девиации геодезических следует (см. [22], формула (32.24b)):

$$\frac{D^2 \xi^r}{d\tau^2} = \frac{2GM}{r^3} \xi^r, \quad (32)$$

где ξ^r – соответствующая радиальная координата. Для оценки примем, что звезда или падающая планета разрушаются, если приливные силы для точек

центра масс и поверхности превышают силу притяжения точек поверхности к центру падающего тела. Будем считать, что падающий объект представляет собой однородный шар плотности ρ и радиусом R . Тогда для падения без разрушения до горизонта получим

$$\frac{2GM}{r_g^3} R < \frac{G4\pi\rho R^3}{3R^2}. \quad (33)$$

Следовательно, звезда или планета, связанная силами гравитации, не разрушится при падении до горизонта событий, если масса черной дыры превышает

$$M > \frac{c^3}{4G^{3/2}} \sqrt{\frac{3}{\pi\rho}}, \quad \frac{M}{M_\odot} > 1.9 \cdot 10^8 \sqrt{\frac{\rho_W}{\rho}}, \quad (34)$$

где $\rho_W = 10^3 \text{ кг/м}^3$. Таким образом, о столкновении со скоростью сближения, близкой к скорости света звезд или планет, можно говорить только вблизи горизонта событий сверхмассивных черных дыр с массой, превышающей 10^8 масс Солнца. Такие черные дыры встречаются в центрах многих галактик. Столкновение компактных объектов звездных масс вблизи сверхмассивных черных дыр рассматривалось ранее в [23]. В работе [24] было показано, что вокруг сверхмассивных черных дыр должны образовываться огромные облака из комет, астероидов и камней.

Оценим теперь массу черной дыры, допускающую падение до горизонта без разрушения камня обычных размеров в несколько сантиметров (метров). В этом случае разрушение падающего камня наступит, если приливные силы превысят его предел прочности (на разрыв для радиального направления, или пределы сжатия для полярных и азимутальных направлений). Ограничимся случаем разрыва в радиальном направлении и в качестве предела прочности возьмем прочность титановых сплавов на разрыв $\sigma = 10^9 \text{ Па}$. Чтобы тело с характерным размером d и плотностью ρ не разрушилось, необходимо выполнение равенства

$$\frac{GM}{4r_g^3} \rho d^2 < \sigma \quad (35)$$

(см. вывод формулы (32.25а) в [22]). Подставив выражение для гравитационного радиуса r_g и для численной оценки, выбрав плотность железа $\rho = 7.87 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$, получим

$$M > \frac{c^3 d}{4G} \sqrt{\frac{\rho}{2\sigma}}, \quad \frac{M}{M_\odot} > 10^2 d, \quad (36)$$

где d измеряется в метрах. Таким образом, столкновения “каменей” размерами 0.1 м со скоростями, близкими к скорости света, возможны у горизонта черных дыр звездных масс.

Для получения высоких температур необходима не суммарно большая энергия столкновения, а большая энергия столкновения на каждую составляющую тело частицу. Для макроскопических тел механизм многократных столкновений, очевидно, неприемлем, так как любое столкновение с релятивистскими скоростями неизбежно приведет к разрушению тел. Поэтому столкновения с энергиями в системе центра масс, значительно превышающими mc^2 , могли бы осуществляться только в окрестности горизонта экстремально вращающихся черных дыр.

Следует ожидать, что процесс ультрарелятивистских столкновений макроскопических тел имеет сложную структуру. Такие процессы пока не наблюдались в природе. Отметим, что при столкновениях нейтронных звезд или слиянии черных дыр, наблюдавшихся по всплескам гравитационного излучения, скорости сталкивающихся объектов хотя и близки к скорости света, но соответствующий фактор $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ не значительно превосходит единицу.

При ультрарелятивистском столкновении макроскопических тел (кинетическая) энергия каждой составляющей эти тела частицы значительно превосходит энергию электромагнитных связей этих частиц в самих телах. Поэтому такие тела в модели ультрарелятивистских столкновений следует рассматривать, как сталкивающиеся облака частиц. Если размеры d облака таковы, что $\sigma nd \ll 1$, где σ – эффективное сечение рассеяния, n – концентрация частиц, то в реакцию вступает лишь незначительное число частиц облака и в процессе столкновения облака проходят друг сквозь друга, не разрушаясь. Для оценочного расчета возьмем $\sigma = \pi r_n^2$ – площадь поперечного сечения ядра, с радиусом $r_n \approx 10^{-15}$ м, а концентрацию положим равной концентрации атомов железа $n = 8.4 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$. Тогда полное разрушение будет иметь место при столкновении твердых тел с характерными размерами $d \geq 30$ м. В этом случае столкновение макротел будет приводить к ультрарелятивистским парным столкновениям составляющих тел нуклонов.

При ультрарелятивистских столкновениях макроскопических тел следует ожидать всплеск электромагнитного и гравитационного излучения. Будем считать, что столкновение макротел приводит к парным столкновениям составляющих эти тела нуклонов и воспользуемся оценками, полученными в работе [25]. Гравитационное излучение при парных столкновениях частиц массы m можно оценить по формуле (10.4.23) из книги [26]. Оно будет подавлено фактором m^2/M_{Pl}^2 (см. формулу (11) в [25]), где

M_{Pl} – планковская масса. Электромагнитное излучение по порядку величины составит

$$E_{em} \approx \frac{e^2}{\hbar c} E_{c.m.} \quad (37)$$

(см. формулу (17) в [25]), где e – элементарный электрический заряд. Очевидно, даже с учетом красного смещения у горизонта суммарное электромагнитное излучение от столкновения макротел будет значительным и может быть доступным наблюдению. Так, при столкновении в окрестности горизонта экстремально вращающейся черной дыры массой $10^9 M_\odot$ в точках с радиальной координатой $r_H + 7 \cdot 10^5$ км максимальная энергия столкновения в системе центра масс может достигать $100mc^2$. Для парных столкновений нуклонов это будет энергия электрослабого объединения. Если с соответствующим γ -фактором сталкиваются два железных астероида диаметром 1 км, то максимальная суммарная энергия столкновения в системе центра масс составит порядка $3 \cdot 10^{31}$ Дж. Электромагнитное излучение в системе центра масс вблизи столкновения может составить $2 \cdot 10^{29}$ Дж при мощности порядка 10^{34} Вт, а на большом удалении от черной дыры за счет красного смещения и замедления времени в гравитационном поле может наблюдаться вспышка электромагнитного излучения с энергией порядка 10^{25} Дж при мощности порядка 10^{28} Вт.

7. Заключение. Стандартная модель предсказывает существование частицы Хиггса, предсказанной из модели Хиггса, в свою очередь, основанной на модели Голдстоуна. Модель Голдстоуна построена, как известно [27], по аналогии с теорией сверхтекучести и сверхпроводимости и предполагает существование двух вакуумов – симметричного и асимметричного. Экспериментальное открытие на БАК бозона Хиггса заставляет серьезно относиться к возможности фазового перехода от одного вакуума к другому при высоких температурах, как это имеет место в квантовой нерелятивистской теории многих тел, где роль вакуума играет основное состояние. В настоящей статье показано, что такой фазовый переход в стандартной модели возможен вблизи горизонта вращающихся черных дыр (в их эргосфере) при многократных столкновениях для неэкстремальных черных дыр. Для экстремальных черных дыр эффект возможен и для макротел при столкновениях двух таких тел при условиях наличия резонанса БСВ [1]. В статье также обсуждаются эффекты, сопутствующие фазовому переходу – испускание гравитационных и электромагнитных волн. Гравитационное излучение при таких столкновениях оказыва-

ется незначительным, но электромагнитное излучение достаточно велико и соответствующая вспышка может наблюдаться на Земле.

Это исследование поддержано Российским научным фондом (грант # 22-22-00112).

1. M. Banados, J. Silk, and S. M. West, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 111102 (2009).
2. A. A. Grib and Yu. V. Pavlov, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 147 (2010) [*JETP Lett.* **92**, 125 (2010)].
3. A. A. Grib and Yu. V. Pavlov, *Astropart. Phys.* **34**, 581 (2011).
4. O. B. Zaslavskii, *JETP Lett.* **111**, 260 (2020); arXiv:1910.04068.
5. O. B. Zaslavskii, *JETP Lett.* **113**, 757 (2021); arXiv:2103.02322.
6. Д. А. Киржниц, А. Д. Линде, *ЖЭТФ* **67**(10), 1263 (1974) [*Sov. Phys. JETP.* **40**, 628 (1975)].
7. D. A. Kirzhnits and A. D. Linde, *Ann. Physics* **101**, 195 (1976).
8. S. Weinberg, *Phys. Rev. D* **9**, 3357 (1974).
9. Д. С. Горбунов, В. А. Рубаков, *Введение в теорию ранней Вселенной: Теория горячего Большого взрыва*, ЛЕНАНД, М. (2016).
10. S. W. Hawking, *Nature* **248**, 30 (1974).
11. S. W. Hawking, *Commun. Math. Phys.* **43**, 199 (1975).
12. А. А. Гриб, С. Г. Мамаев, В. М. Мостепаненко, *Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях*, Энергоатомиздат, М. (1988) [A. A. Grib, S. G. Mamaev, and V. M. Mostepanenko, *Vacuum Quantum Effects in Strong Fields*, Friedmann Lab. Publ., St. Petersburg (1994)].
13. R. C. Tolman, *Relativity, Thermodynamics and Cosmology*, Clarendon Press, Oxford (1934) [Р. Толмен, *Относительность, термодинамика и космология*, Наука, М. (1974)].
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, М. (1988) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon Press, Oxford (1983)].
15. S. Chandrasekhar, *The Mathematical Theory of Black Holes*, Oxford University Press, Oxford, UK (1983) [С. Чандрасекар, *Математическая теория черных дыр*, Мир, М. (1986)].
16. R. P. Kerr, *Phys. Rev. Lett.* **11**, 237 (1963).
17. R. H. Boyer and R. W. Lindquist, *J. Math. Phys.* **8**, 265 (1967).
18. А. А. Гриб, Ю. В. Павлов, *ТМФ* **190**, 312 (2017) [*Theor. Math. Phys.* **190**, 268 (2017)].
19. K. S. Thorne, *Astrophys. J.* **191**, 507 (1974).
20. S. Sazonov, M. Gilfanov, P. Medvedev et al. (Collaboration), *MNRAS* **508**, 3820 (2021).
21. *Физика космоса: Маленькая энциклопедия*, гл. ред. Р. А. Сюняев, Советская энциклопедия, М. (1986).
22. C. W. Misner, K. S. Thorne, and J. A. Wheeler, *Gravitation*, Freeman, San Francisco (1973) [Ч. Мизнер, К. Торн, Дж. Уилер, *Гравитация*, Мир, М. (1977)].
23. T. Harada and M. Kimura, *Phys. Rev. D* **84**, 124032 (2011).
24. S. Nayakshin, S. Sazonov, and R. Sunyaev, *MNRAS* **419**, 1238 (2012).
25. A. A. Grib and Yu. V. Pavlov, *Mod. Phys. Lett. A* **35**, 2050262 (2020).
26. S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and applications of the general theory of relativity*, Wiley, N.Y. (1972) [С. Вейнберг, *Гравитация и космология. Принципы и приложения общей теории относительности*, Мир, М. (1975)].
27. А. А. Гриб, *Проблема неинвариантности вакуума в квантовой теории поля*, Атомиздат, М. (1978).

Температурная зависимость циркулярно поляризованного излучения инжекционного полупроводникового лазера

А. А. Максимов¹⁾, Е. В. Филатов, И. И. Тартаковский

Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 30 августа 2022 г.

После переработки 30 августа 2022 г.

Принята к публикации 9 сентября 2022 г.

Исследована температурная зависимость стимулированного лазерного излучения с высокой степенью циркулярной поляризации в хиральных полупроводниковых наноструктурах в температурном диапазоне от гелиевых температур вплоть до ~ 140 К. Исследования проводились на полупроводниковых лазерных структурах с электрической накачкой на основе планарных микрорезонаторов с GaAs квантовыми ямами внутри и с периодической квадратной решеткой фотонного кристалла хиральной симметрии, сформированного в результате частичного травления на верхнем брэгговском зеркале. При максимальных значениях импульсного тока, текущего через образец, наблюдалась развитая многомодовая лазерная генерация в виде спектрально очень узких полос с высокой степенью величины циркулярной поляризации излучения $> 70\%$ вплоть до температур ~ 90 К.

DOI: 10.31857/S1234567822200022, EDN: knydwg

Создание компактных устройств, с помощью которых можно управлять состоянием поляризации излучаемого света, является одной из центральных задач нанопотоники. По аналогии со спин-поляризованными инжекторами тока в спинтронике [1], где были предложены новые принципы работы приборов, в которых электронный спин наряду с зарядом используется для передачи и обработки информации [2, 3], компактные источники циркулярно поляризованного излучения открывают возможность их практического применения в таких бурно развивающихся областях, как квантовые технологии оптической записи и чтения квантовой информации и оптоэлектроника [4, 5].

Обычный способ получения света с круговой поляризацией заключается в использовании четвертьволновых пластинок из двулучепреломляющего материала, которые имеют сравнительно большую толщину. Для создания компактных лазеров с круговой поляризацией излучения возможно использование оптической или электрической инжекции спинов (так называемые спиновые лазеры) [6–8] или же использование в качестве активных сред оптических хиральных материалов, например, холестерических жидких кристаллов [9, 10]. Однако с практической точки зрения выгодны полностью твердотельные хиральные фотонные или плазмонные структуры, фотонные кристаллы и метаповерхности из-за их совме-

стимости с существующими и широко используемыми лазерными и полупроводниковыми технологиями [5, 11–16].

Возможность возбуждения фотолюминесценции (ФЛ) с круговой поляризацией света в полупроводниковой гетероструктуре на основе обычных ахиральных полупроводников A^3B^5 возникает [11, 12], когда в ее верхнем слое, путем частичного травления, формируется очень тонкая модулированная структура с хиральной симметрией. В таких наноструктурах неэквивалентность электромагнитных мод, циркулярно поляризованных по или против часовой стрелки, возникает из-за общей хиральной симметрии системы и может быть использована для создания компактных излучателей света с круговой поляризацией без приложения внешнего магнитного поля и без необходимости возбуждения циркулярно поляризованным светом или инжекции спин-поляризованных носителей.

Слой встроенных в полупроводниковую гетероструктуру квантовых точек InAs при оптической накачке может демонстрировать ФЛ с круговой поляризацией [12, 14, 15]. Циркулярно поляризованная ФЛ была получена в наноструктурах из обычных ахиральных полупроводников A^3B^5 как в планарном волноводе GaAs, так и в микрорезонаторах с AlAs/(Al, Ga)As брэгговскими зеркалами, когда на верхнем слое структуры была образована пластина фотонного кристалла с квадратной решеткой с C_4 хиральной симметрией точечной группы (т. е. без

¹⁾e-mail: maksimov@issp.ac.ru

плоскостей зеркальной симметрии). В оптимизированных структурах степень циркулярной поляризации ρ_C ФЛ могла достигать величины $\rho_C \sim 96\%$ по отношению к слабому неполяризованному бесструктурному фону ($\rho_C \sim 81\%$ с учетом фона [15]). В полном соответствии с теоретическими расчетами [14, 15, 17] эти структуры демонстрируют сильную угловую зависимость спектров ФЛ [16], а знак (σ^+ или σ^-) круговой поляризации коррелирует с соответствующей ориентацией фотонного кристалла.

Была также продемонстрирована возможность лазерной генерации с круговой поляризацией излучения [18] при оптической накачке микрорезонаторов AlAs/(Al, Ga)As с квантовыми ямами GaAs в активной области и пластиной фотонного кристалла с хиральной симметрией, вытравленной на верхнем брэгговском зеркале. Изготовление полупроводниковых микрорезонаторов с высокой добротностью и легированных брэгговских зеркал позволило реализовать поляритонный лазер с электрической накачкой со значительно более низким порогом генерации, чем обычные инжекционные полупроводниковые лазеры [19]. Следующий важный шаг в этом, также имеющем практическое значение, направлении был сделан в работах [20, 21], в которых была продемонстрирована реализация полупроводникового лазера с электрической накачкой с циркулярно поляризованным излучением. Лазерные структуры состояли из микрорезонатора AlAs/(Al, Ga)As, содержащего несколько квантовых ям GaAs в активной области, и пластины хирального фотонного кристалла, вытравленной в верхнем распределенном брэгговском отражателе (DBR). Было показано, что в таких устройствах при низкой температуре наблюдалась лазерная генерация при инжекции электрического тока в ближней инфракрасной области спектра с высокими степенями круговой поляризации, достигающими значений $\sim 90\%$, при этом направление круговой поляризации контролируется направлением хиральности фотонно-кристаллической пластины и меняется на противоположное в зеркально-симметричной структуре.

Целью настоящей работы было подробное исследование температурных зависимостей свойств генерации света в инжекционных полупроводниковых лазерных структурах, аналогичных исследованным в [21], параметры которых были исходно оптимизированы на область гелиевых температур, в максимально широком температурном интервале вплоть до ~ 140 К.

На рисунке 1 схематически показана часть лазерной структуры, в которой при приложении электри-

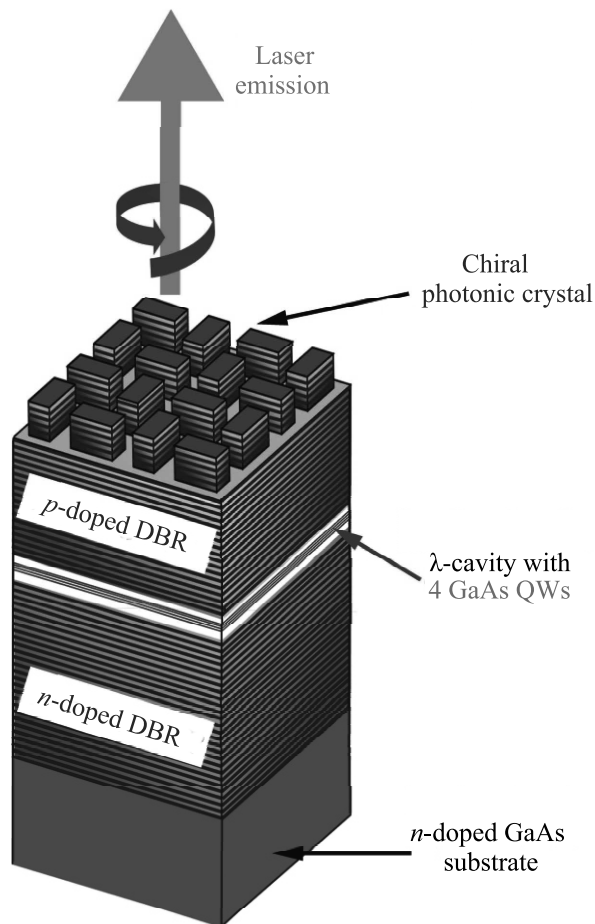


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема лазерной структуры, излучающей циркулярно поляризованный свет

ческого напряжения в режиме развитой лазерной генерации излучается циркулярно поляризованный свет. Образец был выращен на ориентированной (100) n -допированной GaAs подложке методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Исследовались лазеры, выращенные на основе λ -микрорезонатора $\text{Al}_{0.40}\text{Ga}_{0.60}\text{As}$. В пучности электрического поля в центре микрорезонатора располагались четыре квантовые ямы из GaAs шириной 7 нм, разделенные 4 нм $\text{Al}_{0.40}\text{Ga}_{0.60}\text{As}$ барьерами. 27 n -допированных кремнием пар слоев AlAs/ $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}$ составляли нижнее брэгговское зеркало микрорезонатора, а верхнее содержало 23.5 пары слоев, p -допированных углеродом. На верхнем брэгговском зеркале были вытравлены на глубину до середины пятого сверху слоя $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}$ фотонные кристаллы с квадратными элементарными ячейками с различным знаком хиральности. Знак хиральности определялся направлением закрученности (по часовой стрелке или против) вытянутых прямоугольников с соотношением длин сторон 2:1, лежащих в основаниях

четырёх микростолбиков, из которых состоит элементарная ячейка фотонного кристалла [21]. Период фотонного кристалла был равен 880 нм, а размеры длинных сторон прямоугольников изменялись от 256 до 280 нм в различных лазерных наноструктурах. Каждая отдельная вертикально излучающая лазерная структура представляла собой параллелепипед с размерами основания 60×60 мкм², на верхнем зеркале которого, внутри площади, ограниченной золотым кольцевым контактом, размещался фотонный кристалл размером 36×36 мкм². Общая площадь образца составляла величину порядка 1 см², на которой размещалось несколько сотен независимых лазерных структур. Микрорезонатор имел плавно меняющуюся толщину (~ 228 нм) в зависимости от места на образце, что обеспечивало изменение спектрального положения фотонного резонанса микрорезонатора в разных лазерных структурах и его отстройку от экситонного уровня в GaAs квантовых ямах.

Образец помещался в оптический гелиевый криостат с регулируемой температурой. Спектры излучения регистрировались в направлении, близком к нормали к поверхности образца с помощью спектрометра, оснащенного охлаждаемым ССД детектором. Максимальное спектральное разрешение измерительной системы составляло ~ 40 мкэВ.

Оптимальные условия для наблюдения мощной лазерной генерации в исследованных структурах достигались при импульсном электрическом возбуждении прямоугольными импульсами с длительностями в диапазоне от ~ 0.1 мкс до ~ 1 мс со скважностью $\sim 1:100$. Максимальные значения импульсного тока J , текущего через различные лазерные структуры, не превышали ~ 40 мА при самых коротких электрических импульсах возбуждения.

Развитая лазерная генерация с высокой степенью циркулярной поляризации излучения $\rho_C \gtrsim 70\%$ была получена вплоть до температур $\simeq 90$ К. На рисунке 2 представлены спектры излучения одного из лазеров при возбуждении импульсами длительностью 1 мкс в σ^+ (сплошные кривые) и σ^- (точечные кривые) циркулярных поляризациях при различных значениях текущего через образец импульсного тока J . Спектры регистрировались по направлению, близкому к нормали образца при температуре 90 К. При малых значениях импульсного тока наблюдался спектральный сдвиг линии излучения на величину ~ 1.5 мэВ. При дальнейшем увеличении тока возникает несколько узких мод лазерной генерации и наблюдается резкий сверхлинейный рост их интенсивности и сужение спектральной ширины.

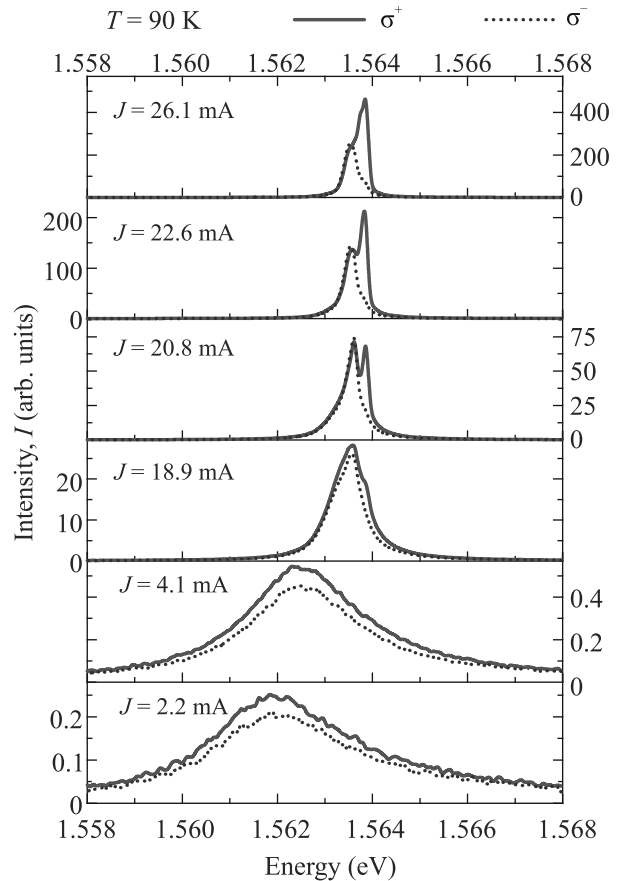


Рис. 2. (Цветной онлайн) Изменения спектров излучения хиральной полупроводниковой лазерной структуры в σ^+ (сплошные кривые) и σ^- (точечные кривые) циркулярной поляризации с ростом значений импульсного тока J : 2.2, 4.1, 18.9, 20.8, 22.6 и 26.1 мА. Длительность импульса возбуждения 1 мкс, температура $T = 90$ К

В целом, спектральные характеристики излучения, наблюдаемые при увеличении тока, текущего через лазерную структуру, при различных температурах $\lesssim 90$ К не сильно отличаются от характеристик, исследованных при низких ~ 2 К температурах [21]. Типичные зависимости интенсивности лазерного излучения, измеренные при различных температурах в диапазоне от 2 до 90 К, от текущего через образец импульсного тока J представлена на верхней панели рис. 3 в двойном логарифмическом масштабе. Видно, что линейная зависимость интенсивности излучения при малых токах, сменяется ее резким сверхлинейным ростом при достижении пороговых значений тока J_{th} , которые несколько возрастают при повышении температуры.

Нижняя панель рис. 3 демонстрирует, что степень циркулярной поляризации излучения ρ_C , кото-

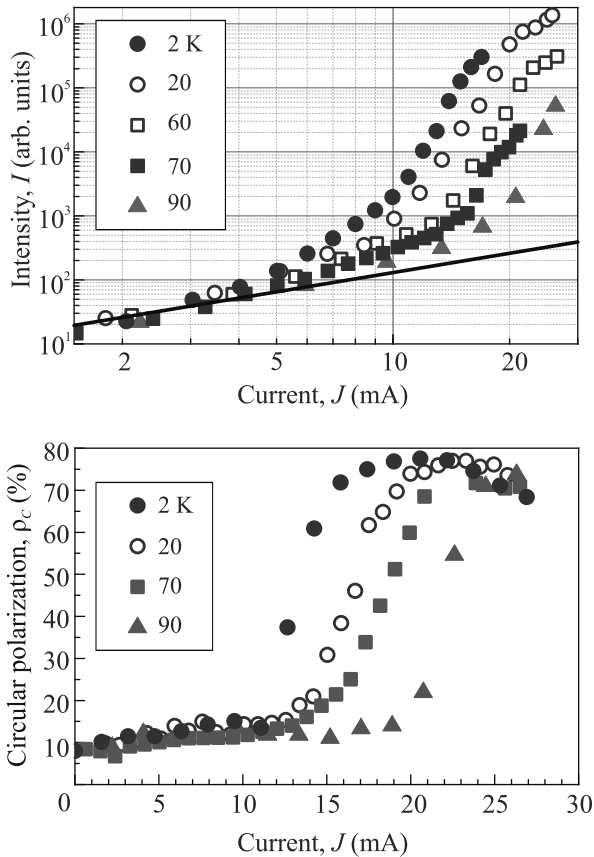


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости интенсивности I (верхняя панель) и степени циркулярной поляризации ρ_C (нижняя панель) излучения полупроводникового лазера на основе хирального микрорезонатора от величины импульсного тока возбуждения J (длительность импульса 1 мкс), измеренные при различных температурах. Прямая линия на верхней панели отвечает линейной зависимости величины I от J

рая определяется как $\rho_C = (I^+ - I^-)/(I^+ + I^-)$, где I^+ и I^- – интенсивность лазерного излучения в σ^+ и σ^- поляризациях, соответственно, при низких токах (в спонтанном режиме) имеет относительно низкие значения $\rho_C \sim 10\%$, а, начиная с пороговых значений импульсного тока при его увеличении, наблюдается резкий рост степени циркулярной поляризации лазерного излучения до величины $\rho_C \gtrsim 70\%$. Причины такого поведения степени циркулярной поляризации при изменении величины возбуждающего тока, связанные с конкуренцией различных мод лазерной генерации, в не полностью оптимизированных лазерных структурах в режиме многомодовой генерации подробно обсуждались в работах [18, 21].

Длина волны излучения λ основной полосы генерации в исследованных лазерных структурах определяется соотношением $\lambda = n \cdot d$, где n – эффек-

тивный показатель преломления (Al, Ga)As материала микрорезонатора, а d – точное значение толщины микрорезонатора в месте расположения лазера на образце. Изменение показателя преломления с температурой приводит к спектральному смещению линий лазерной генерации в красную сторону на величины ~ 5 мэВ при изменении температуры от 2 до 140 К. На верхней панели рис. 4 точка

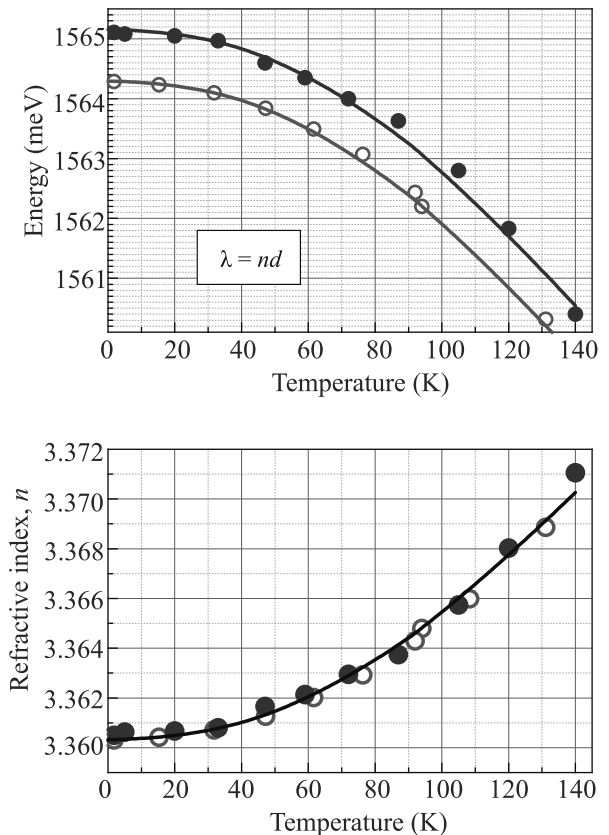


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость спектрального положения линий генерации света двух различных лазеров с близкими параметрами (верхняя панель) и эффективного показателя преломления n (Al, Ga)As материала микрорезонатора (нижняя панель) от температуры

ми показано спектральное положение линий генерации двух различных лазерных структур с близкими параметрами и слабо различающимися толщинами микрорезонатора. Используя простейшую одноосцилляторную модель для зависимости показателя преломления $\text{Al}_{0.40}\text{Ga}_{0.60}\text{As}$ от температуры [22], можно хорошо описать наблюдаемый на эксперименте красный сдвиг линий генерации – сплошные линии на верхней панели рис. 4. Можно восстановить и само температурное поведение эффективного показателя преломления и его изменение на величину

~ 0.01 в этом температурном интервале материала λ -микрорезонатора (сплошная линия на нижней панели рис. 4) при учете различия номинальных толщин в месте расположения двух лазеров $\sim 1.5 \text{ \AA}$.

В исследованных наноструктурах лазерная генерация наблюдалась при электрической накачке вплоть до температур $T \gtrsim 140 \text{ K}$ (рис. 5). На верхней

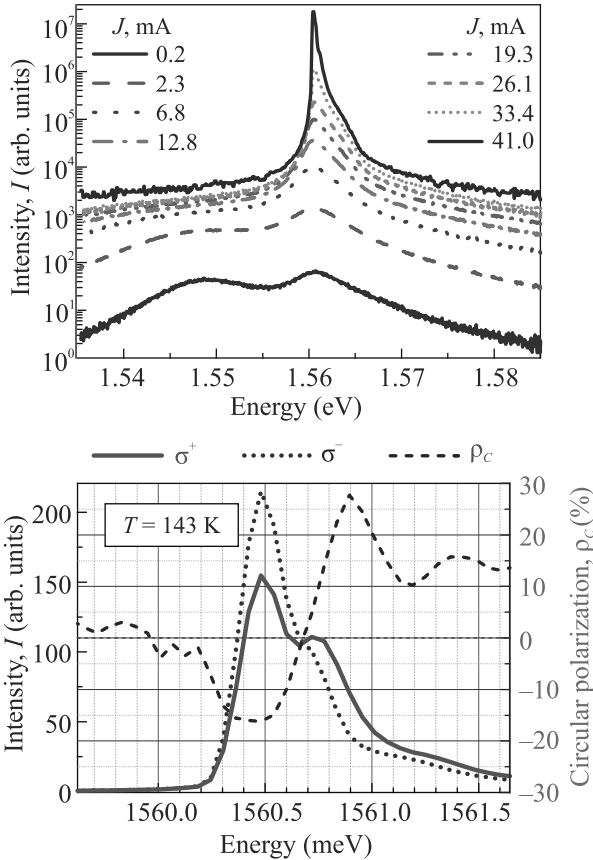


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектры излучения хиральной полупроводниковой лазерной структуры при различных значениях импульсного тока J длительности 0.1 мкс (верхняя панель). Спектры в σ^+ (сплошная кривая) и σ^- (точечная кривая) циркулярной поляризации при величине импульсного тока $J \approx 41 \text{ мА}$ и степень циркулярной поляризации излучения ρ_c (пунктирная кривая) полупроводникового лазера на основе хирального микрорезонатора (нижняя панель). Температура $T = 143 \text{ K}$

панели рис. 5 показано изменение спектров излучения одной из лазерных структур при возбуждении импульсами длительностью 0.1 мкс при различных возбуждающих токах. При температуре 143 K также наблюдается спектральное сужение линий генерации и сверхлинейный рост их интенсивности. Однако, как видно из нижней панели рис. 5, где подробно показаны спектры в двух различных циркулярных поляризациях излучения при максимальном возбуж-

дающем токе $J \approx 41 \text{ мА}$ и спектральная зависимость их степени поляризации ρ_c , максимальные значения степени поляризации различных мод генерации не превышают по модулю величины $20\text{--}30\%$.

Таким образом, мы продемонстрировали, что в исследованных полупроводниковых лазерных структурах на основе брэгговского микрорезонатора $\text{AlAs}/(\text{Al}, \text{Ga})\text{As}$ с хирально вытравленным сегментом фотонного кристалла на верхнем отражателе можно при электрической накачке получать лазерное излучение в широком температурном диапазоне с высокой ($\rho_c \gtrsim 70\%$) степенью циркулярной поляризации излучения до температур $T \gtrsim 90 \text{ K}$, а с более низкой – вплоть до $T \gtrsim 140 \text{ K}$. Такие структуры являются компактными источниками лазерного излучения с круговой поляризацией, знак которой может быть задан на этапе изготовления за счет симметрии хирального фотонно-кристаллического зеркала. Можно ожидать, что адаптация конструкции использованных лазеров позволит реализовать устройства, работающие при комнатной температуре [18]. Также можно предположить, что оптимизированные структуры смогут работать в режиме сильной связи, обеспечивая сверхнизкие пороги генерации благодаря большой поляритонной нелинейности [19].

Авторы выражают благодарность В. Д. Кулаковскому и С. Г. Тиходееву за многочисленные полезные обсуждения, а также С. Хеффлингу (S. Höffling) и Х. Шнайдеру (C. Schneider) за предоставленные образцы для исследований.

Работа частично поддержана проектом Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00534.

1. X. Jiang, R. Wang, R. M. Shelby, R. M. Macfarlane, S. R. Bank, J. S. Harris, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056601 (2005).
2. *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, ed. by D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth, Springer, Heidelberg (2002).
3. *Spin physics in semiconductors*, ed. by M. I. Dyakonov, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (2008).
4. P. Genevet, F. Capasso, F. Aieta, M. Khorasaninejad, and R. Devlin, *Optica* **4**, 139 (2017).
5. H. Hübener, U. De Giovannini, C. Schäfer, J. Andberger, M. Ruggenthaler, J. Faist, and A. Rubio, *Nat. Mater.* **20**, 438 (2021).
6. H. Ando, T. Sogawa, and H. Gotoh, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 566 (1998).
7. M. Lindemann, G. Xu, T. Pusch, R. Michalzik, M. R. Hofmann, I. Žutić, and N. C. Gerhardt, *Nature* **568**, 212 (2019).

8. I. Žutić, G. Xu, M. Lindemann, P. E. Faria Jr, J. Lee, V. Labinac, K. Stojšić, G. M. Sipahi, M. R. Hofmann, and N. C. Gerhardt, *Solid State Commun.* **316-317**, 113949 (2020).
9. V. I. Kopp, B. Fan, H. K. M. Vithana, and A. Z. Genack, *Opt. Lett.* **23**, 1707 (1998).
10. N. Y. Ha, Y. Ohtsuka, S. M. Jeong, S. Nishimura, G. Suzuki, Y. Takanishi, K. Ishikawa, and H. Takezoe, *Nat. Mater.* **7**, 43 (2008).
11. K. Konishi, B. Bai, X. Meng, P. Karvinen, J. Turunen, Y. P. Svirko, and M. Kuwata-Gonokami, *Opt. Express* **16**, 7189 (2008).
12. K. Konishi, M. Nomura, N. Kumagai, S. Iwamoto, Y. Arakawa, and M. Kuwata-Gonokami, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 057402 (2011).
13. N. Shitrit, I. Yulevich, E. Maguid, D. Ozeri, D. Veksler, V. Kleiner, and E. Hasman, *Science* **340**, 724 (2013).
14. A. A. Maksimov, I. I. Tartakovskii, E. V. Filatov, S. V. Lobanov, N. A. Gippius, S. G. Tikhodeev, C. Schneider, M. Kamp, S. Maier, S. Höfling, and V. D. Kulakovskii, *Phys. Rev. B* **89**, 045316 (2014).
15. S. V. Lobanov, S. G. Tikhodeev, N. A. Gippius, A. A. Maksimov, E. V. Filatov, I. I. Tartakovskii, V. D. Kulakovskii, T. Weiss, C. Schneider, J. Geßler, M. Kamp, and S. Höfling, *Phys. Rev. B* **92**, 205309 (2015).
16. А. А. Максимов, А. Б. Пещеренко, Е. В. Филатов, И. И. Тартаковский, В. Д. Кулаковский, С. Г. Тиходеев, С. В. Лобанов, Х. Шнайдер, С. Хефлинг, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 615 (2017).
17. S. V. Lobanov, T. Weiss, N. A. Gippius, S. G. Tikhodeev, V. D. Kulakovskii, K. Konishi, and M. Kuwata-Gonokami, *Opt. Lett.* **40**, 1528 (2015).
18. A. A. Demenev, V. D. Kulakovskii, C. Schneider, S. Brodbeck, M. Kamp, S. Hoefling, S. V. Lobanov, T. Weiss, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 171106 (2016).
19. C. Schneider, A. Rahimi-Iman, N. Y. Kim, J. Fischer, I. G. Savenko, M. Amthor, M. Lerner, A. Wolf, L. Worschech, V. D. Kulakovskii, I. A. Shelykh, M. Kamp, S. Reitzenstein, A. Forchel, Y. Yamamoto, and S. Höfling, *Nature* **497**, 348 (2013).
20. А. А. Максимов, Е. В. Филатов, И. И. Тартаковский, *Известия РАН. Серия физическая* **85**, 241 (2021).
21. A. A. Maksimov, E. V. Filatov, I. I. Tartakovskii, V. D. Kulakovskii, S. G. Tikhodeev, C. Schneider, and S. Höfling, *Phys. Rev. Applied* **17**, L021001 (2022).
22. M. F. Afromowitz, *Solid State Commun.* **15**, 59 (1974).

Resonance energy transfer reveals presence of multiple luminescence emission centers within a carbon nanodot

A. A. Astafiev⁺¹⁾, A. M. Shakhov⁺, V. A. Nadtochenko^{+*}

⁺N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 119991 Moscow, Russia

^{*}Chemistry Department, Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

Submitted 6 September 2022
Resubmitted 6 September 2022
Accepted 11 September 2022

DOI: 10.31857/S1234567822200034, EDN: knygjk

Luminescent carbonaceous nanoparticles or carbon nanodots (CNDs) are an emerging class of nanomaterials with unique and attractive properties for application in fluorescent bioimaging, fluorescence sensing, photocatalysis and light emitting devices [1, 2]. CNDs commonly exhibit visible photoluminescence (PL) attributed to small luminescent organic groups within their structure [3]. Due to heterogeneity of these emission centers CNDs frequently have excitation-dependent or even multicolor PL [4]. Knowing if a single nanoparticle can carry several emitters of the same or different colors is essential for understanding luminescence mechanism of CNDs and tailoring their emission properties. Usually this information is obscured by ensemble-averaged luminescence measurements. Detection of PL from a single nanodot using fluorescence microscopy can uncover distribution of emission centers of CNDs [5, 6], but is laborious and requires expensive and complicated equipment.

An alternative strategy for revealing localization of luminescence emitters of CND is based on nonradioactive resonance energy transfer (RET) between closely situated emitters [7]. RET affects emission anisotropy in case of homotransfer between fluorophores of the same type and also emission spectra and decay kinetics in case of heterotransfer between fluorophores of different emission colors (Fig. 1a). Here we employed measurements of luminescence anisotropy and photobleaching-induced changes in spectra and decay kinetics to study RET effects and uncover multiple emissions centers localized on the same nanoparticle.

Two types of carbon nanodots referred as *p*- and *b*-CNDs were produced by pulsed laser synthesis from liquid pyridine and benzene respectively [8]. Both samples consisted of nanometer-sized particles and exhibited visible PL with broad and excitation-dependent emission

spectra. In order to reveal homo-RET effects we analyzed anisotropy decay of blue PL of CNDs at 450 nm emission wavelength as a function of solvent viscosity η . We show that a simple model of a cluster of several identical fluorophores in solution [9] predicts that the anisotropy decay rate is a linear function of inverse viscosity:

$$K = \alpha/\eta + K_0, \quad (1)$$

where α and K_0 are independent of viscosity and the first term corresponds to depolarization due to rotational diffusion of nanodots in solution and the second viscosity-independent term K_0 – to RET between fluorophores. Measurements of anisotropy decay kinetics of *p*- and *b*-CNDs under pulsed laser excitation in glycerol-ethanol mixtures confirmed that the anisotropy decay rate followed the linear dependence (1) (Fig. 1b). The homo-RET rate of *p*- and *b*-CNDs was found as an intercept on a linear fit of experimental $K(1/\eta)$ dependence and was equal to 0.17 and 0.22 ns⁻¹ respectively. The homo-RET rate could be increased by photooxidation of CNDs, which produced additional luminescence groups and increased the average number of luminescence emitters per nanoparticle.

Presence of energy exchange between emission centers of CNDs was confirmed by measurement of anisotropy decay kinetics in pure glycerol, where rotational diffusion was arrested due to high solvent viscosity. Emission anisotropy of *p*- and *b*-CNDs in glycerol decayed as a single exponent and decay times – 7 and 4.5 ns respectively were in reasonable agreement with inverse of the homo-RET rate. Almost complete depolarization of PL at long time reveals that nanodots carry a large number of emission centers exchanging excitation energy – at least 10–15 per nanoparticle in average.

Steady-state emission anisotropy of *p*- and *b*-CNDs in glycerol strongly decreased with increase of the emis-

¹⁾e-mail: astafiev.artiom@gmail.com

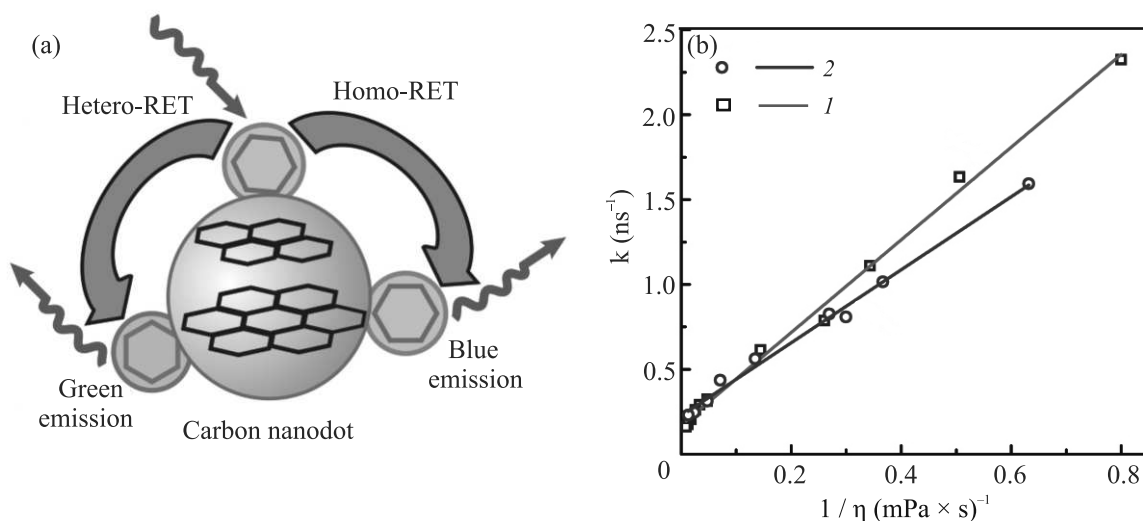


Fig. 1. (Color online) (a) – Scheme of homo- and hetero-RET between emitters localized on the same carbon nanodot. (b) – Anisotropy decay rate K of p -CNDs (1) and b -CNDs (2) at 450 nm emission wavelength as a function of solvent inverse viscosity, experimental data points and linear fit. Linear fit is expressed with the formula: $K = 2.73/\eta + 0.17$ (p -CNDs) and $K = 2.15/\eta + 0.23$ (b -CNDs)

sion wavelength. This fact suggests that green and yellow luminescence is excited by hetero-RET from blue emitters. Hetero-RET was further confirmed by photobleaching experiments, where CNDs solution was continuously irradiated with a blue diode at 450 nm wavelength. Irradiation resulted in bleaching of green PL, at the same time the intensity of blue PL of both samples increased by 20–25 % and the lifetime of blue PL became longer. These results are interpreted as dequenching of blue emitters (energy donors) upon bleaching of green emitters (acceptors). The average hetero-RET efficiency was estimated as 0.17 and 0.20 and heterotransfer rate as 0.17 and 0.33 ns^{-1} for p - and b -CNDs respectively.

In conclusion, we demonstrated homo- and hetero-RET within aromatic compounds-derived luminescent carbon nanodots, which revealed that a single nanodot can carry multiple luminescence emitters exchanging energy by nonradiative transfer. Resonance energy transfer influence luminescent properties of nanodots and should be considered in tailoring luminescent performance of CNDs and analysis of emission anisotropy. Experimental protocol described in the letter can be applied to other types of luminescent nanoparticles.

The work has financial support from the Russian Scientific Foundation grant # 21-72-20169. The measurements were performed in the Federal Research Center

for Chemical Physics shared research facilities # 506694 and large-scale research facilities # 1440743.

This is an excerpt of the article “Resonance energy transfer reveals presence of multiple luminescence emission centers within a carbon nanodot”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601853

1. X. Xu, R. Ray, Y. Gu, H. J. Ploehn, L. Gearheart, K. Raker, and W. A. Scrivens, *JACS* **126**, 40 (2004).
2. S. Y. Lim, W. Shen, and Z. Gao, *Chem. Soc. Rev.* **44**, 1 (2015).
3. L. Cao, X. Wang, M. J. Meziani, F. Lu, H. Wang, P. G. Luo, Y. Lin, B. A. Haruff, L. Monica Veca, D. Murray, S.-Y. Xie, and Y.-P. Sun, *Nano Res.* **8**, 2 (2015).
4. N. Dhenadhayalan, K.-C. Lin, and R. Suresh, *J. Phys. Chem. C* **120** (2016).
5. S. Ghosh, A. M. Chizhik, and N. Karedla, *Nano Lett.* **14**, 10 (2014).
6. B. van Dam, H. Nie, B. Ju, E. Marino, J. M. J. Paulusse, P. Schall, M. Li, and K. Dohnalova, *Small* **13**, 48 (2017).
7. Y. Wang, H. Meng, and M. Jia, *Nanoscale* **8**, 39 (2016).
8. A. A. Astafiev, A. M. Shakhov, A. G. Tskhovrebov, A. Shatov, A. Gulin, D. Shepel, and V. A. Nadtochenko, *ACS Omega* **7**, 8 (2022).
9. L. W. Runnels and S. F. Scarlata, *Biophys. J.* **69**, 1569 (1995).

Особенности получения мощных (до 1 МВт, 100 мДж) 3-мкм наносекундных лазерных импульсов в эрбиевых кристаллах в частотном режиме

А. В. Пушкин¹⁾, Ф. В. Потемкин

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

Поступила в редакцию 5 сентября 2022 г.

После переработки 17 сентября 2022 г.

Принята к публикации 17 сентября 2022 г.

Исследованы усилительные и генерационные свойства эрбиевых лазерных кристаллов (Er:YAG, Er:YSGG, Cr:Er:YSGG) с высокой (до 50 %) концентрацией иона активатора для получения мощного излучения наносекундной длительности в 3-мкм диапазоне длин волн на самоограниченном переходе. Измеренные коэффициенты усиления в них при мощной неселективной ламповой (до 260 Дж) и селективной диодной (до 3 Дж) накачке составляют от 1.2 до 2.1 и обеспечивают возможность создания эффективных усилителей. Показано, что для среды Er:YAG возбуждение высоколежащих энергетических уровней ($^4I_{9/2}$ и $^4I_{11/2}$) играет определяющую роль в формировании инверсии населенностей, в то время как для других эрбиевых сред это менее важно. В разработанном генераторе Er:YAG с электрооптической модуляцией добротности и двумя однопроходными усилителями получена энергия импульсов 62 мДж на 10 Гц в режиме TEM₀₀ моды. Оптико-механическая модуляция добротности на основе вращающегося зеркала открывает доступ к большей выходной энергии благодаря отсутствию потерь в оптических элементах и из-за деполаризации. В лазере Er:YAG получены одиночные импульсы с энергией 75 мДж и длительностью 123 нс на частоте 10 Гц, в то время как в Cr:Er:YSGG высокий коэффициент усиления является ограничением на получение единичных наносекундных импульсов в такой схеме модуляции добротности. Разработка таких источников с высокой пиковой и средней мощностью представляет интерес для мощных фемтосекундных лазерных систем усиления чирпированных импульсов на основе халькогенидов, легированных ионами железа, в средней ИК (3–5 мкм) области тераваттного уровня.

DOI: 10.31857/S1234567822200046, EDN: knykom

1. Введение. Источники среднего ИК диапазона сейчас привлекают большое внимание благодаря бурному развитию ИК фотоники. В частности, 3-мкм лазеры уже давно нашли применения для стоматологии и косметологии, а сейчас особый интерес к ним связан с возможностью их использования для накачки параметрических усилителей и лазерных генераторов и усилителей в среднем ИК диапазоне [1, 2], а также исследования свойств воды [3, 4]. Мощные наносекундные лазерные импульсы с большой энергией могут быть получены непосредственно из резонатора (вероятно, в многомодовом режиме), либо с помощью усиления импульсов, полученных в генераторе с небольшой энергией и высоким качеством пучка. Режим модуляции добротности в 3-мкм активных элементах имеет некоторые фундаментальные ограничения, в частности, самоограниченность лазерного перехода. Благодаря наличию

большого числа резонансов у ионов эрбия и гольмия велика вероятность апконверсионных и кросс-релаксационных переходов [5–7]. Именно они, главным образом, обеспечивают высокую эффективность свободной генерации и даже возможность непрерывной генерации на самоограниченных переходах. Однако в процессе генерации гигантского импульса указанные процессы заморожены и не дают доступа к и без того ограниченной запасенной энергии в активном элементе [8]. На энергетические характеристики в значительной степени влияет выбор метода модуляции добротности. Одни из них полагаются на эффекты, требующих высокого качества поляризации излучения, такие как электрооптический (ЭО) и акустооптический (АО). Однако, в кристаллах из-за значительного нагрева возникает деполаризация излучения и наведенная анизотропия, уменьшающие эффективность таких подходов. Кроме этого, выходная энергия ограничена лучевой прочностью ЭО и АО материалов. В последнее время появляются со-

¹⁾e-mail: av.pushkin@physics.msu.ru

общения о разработке новых материалов, прозрачных на длинах волн вблизи 3 мкм [9], обладающих на порядок большей лучевой прочностью по сравнению с обычно используемыми (ниобат лития, парателлурит). В лазере Cr:Er:YSGG с электрооптическим модулятором на кристалле LGS была получена энергия 216 мДж [10]. Также большой контроль состояния поляризации излучения внутри резонатора позволил масштабировать энергию до 226 мДж в лазере Er:YAG с ниобатом лития [11].

Другие методы модуляции добротности не требуют определенного состояния поляризации излучения внутри резонатора, такие как, например, вращающееся зеркало. Она позволяет избежать использования материалов с низкой лучевой прочностью, а также потерь за счет деполяризации излучения в активном элементе. В работе [12] в лазере Er:YAG с электрооптической модуляцией добротности на ниобате лития была получена выходная энергия 137 мДж, однако после повреждений затвора авторы обратились к методу вращающегося зеркала [13]. Метод вращающегося зеркала активно использовался в лазерах Er:YAG, разрабатываемых для медицинских задач [14, 15]. На сегодняшний день наибольшая энергия (0.8 Дж) гигантского импульса на 3 мкм получена в лазере Er:YAG именно на этом методе модуляции добротности, однако, на частоте всего 1 Гц из-за влияния тепловой линзы [16]. Минусом такого подхода может быть нестабильность механических узлов, являющаяся причиной большого временного джиттера, и ограниченная скорость переключения добротности. Если лазер используется для накачки лазерной системы с малым временем жизни активного элемента усилителя (например, Fe:ZnSe [1]), то необходима жесткая временная синхронизация. Оптико-механическая модуляция добротности может не обеспечить нужного уровня стабильности работы такой системы в случае простейшей схемы синхронизации без привязки к самому генерируемому импульсу.

Проблема тепловой линзы стоит довольно остро в 3-мкм лазерах, даже с использованием диодной накачки. Причина этому – большой квантовый дефект, многочисленные апконверсионные процессы и сопутствующие им безызлучательные переходы, а также невысокая теплопроводность матриц активных элементов. Поэтому для получения хорошего качества пучка в импульсно-периодическом режиме применяются различные схемы компенсации термооптических искажений на основе выпуклых зеркал, линз, сферических фасок и нелегированных торцов активных элементов [2, 17, 18]. Все эти факторы делают задачу создания мощного 3-мкм наносекундного ла-

зера довольно многопараметрической. Оценку на доступную энергию наносекундного импульса, получаемого в генераторе, может дать измерение усиления. Исследования, посвященные усилению в кристаллах Er:YAG [19–21] и Cr:Er:YSGG [22] демонстрируют однопроходное усиление до 1.5 и 1.8 соответственно.

В данной работе были исследованы усилительные свойства 3-мкм эрбиевых кристаллов, чтобы определить перспективность их использования в качестве активных элементов генераторов и усилителей наносекундных импульсов. На основе таких кристаллов были спроектированы генераторы с электрооптической и оптико-механической модуляцией добротности. Проведенная работа позволяет сделать выводы о возможности масштабирования выходной энергии в 3-мкм лазерах.

2. Усиление в активных элементах. Формирование инверсии в эрбиевых активных элементах главным образом обязано апконверсии и кросс-релаксации, в результате которых снимается самоограничение 3-мкм перехода и имеет место сложная конверсия возбуждения по уровням. Выходная энергия гигантского импульса главным образом определяется инверсией населенностей между уровнями лазерного перехода, а генерация идет за короткое время, в течение которого апконверсионные процессы “заморожены” и не влияют на обновление населенностей.

Для увеличения эффективности генерации эрбиевые кристаллы также солегируют ионами хрома, обладающим полосами поглощения в спектре лампы и эффективно передающими возбуждение ионам эрбия [23, 24]. Cr:Er:YSGG и Er:YAG отличаются механизмом образования инверсной населенности. В Cr:Er:YSGG энергия возбуждения передается от ионов Cr³⁺ на уровни ⁴I_{9/2} и ⁴I_{11/2} иона Er³⁺, а, уровень ⁴I_{13/2} может заселяться только от безызлучательных и спонтанных переходов с уровня ⁴I_{11/2}, вероятность которых на порядок меньше, чем в Er:YAG. Таким образом, при длительности импульса накачки, меньшей времени жизни уровня ⁴I_{11/2}, практически вся энергия, поглощенная в активном элементе, релаксирует на верхний лазерный уровень, а нижний лазерный уровень остается незаселенным. Это позволяет создать в активном элементе более высокую инверсию населенности. Характерная эффективность конверсии энергии из свободной генерации в энергию гигантского импульса составляет от 30 до 75 % [10, 25, 26].

В настоящей работе измерялось усиление в эрбиевых 3-мкм кристаллах (Er:YAG, Er:YSGG и Cr:Er:YSGG) при ламповой и селективной диод-

ной накачке. Все кристаллы имели диаметр 4 мм и накачивались ксеноновой лампой с разрядным промежутком 75 мм в керамическом диффузном осветителе. Блок питания лампы накачки обеспечивал энергию в импульсе до 100 Дж с длительностью около 100 мкс по полувысоте. В качестве пробного импульса использовался импульс с отдельно собранного лазера на идентичном активном элементе с электрооптической модуляцией добротности с энергией импульса порядка 10 мДж. Также разработанная система синхронизации с варьируемой задержкой позволила проследить эволюцию усиления пробного импульса внутри импульса накачки усилителя.

На рисунке 1 представлен график зависимости коэффициента однопроходного усиления от энергии

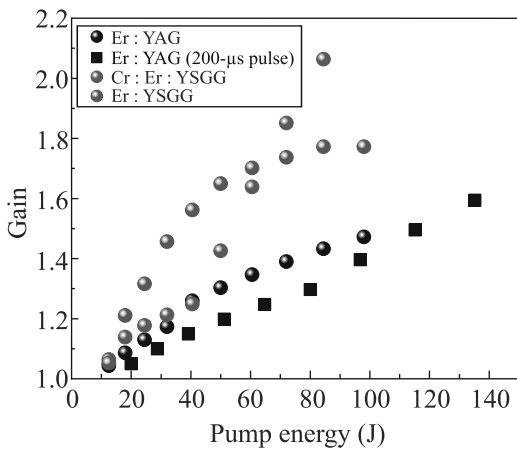


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости коэффициента однопроходного усиления в кристаллах Er:YAG, Er:YSGG и Cr:Er:YSGG от энергии импульса накачки. Для кристалла Er:YAG приведены две зависимости – с импульсами накачки длительностью 100 и 200 мкс

импульса накачки для семейства 3-мкм кристаллов. Наибольшее усиление демонстрирует кристалл Cr:Er:YSGG, причем при энергии около 50 Дж наблюдается резкое увеличение наклона графика. Вероятно, это связано с доминированием процессов передачи возбуждения от ионов хрома над накачкой непосредственно ионов эрбия. В то же время для кристалла Er:YSGG при этой же энергии наблюдается насыщение. Усиление в кристалле Er:YSGG больше чем в Er:YAG из-за значительно большего времени жизни верхнего уровня (1.3 мс против 0.1 мс в Er:YAG [27]), которое позволяет ему запасти энергию для усиления. Для преодоления этого ограничения в кристалле Er:YAG рекомендуется использовать более короткие импульсы накачки [8]. Для определения влияния длительности импульса накачки на

усиление в кристалле Er:YAG мы использовали более мощный источник накачки с длительностью импульса 200 мкс. Из графика видно, что короткий импульс позволяет почти в полтора раза увеличить коэффициент усиления при накачках 40–80 Дж.

На рисунке 2а представлена динамика усиления в исследуемых кристаллах при ламповой накачке. В кристаллах Er:YSGG и Cr:Er:YSGG максимальная инверсия достигается ближе к концу импульса, в то время как в кристалле Er:YAG это выражено менее явно из-за его малого времени жизни. Подобная зависимость была получена в работе [21] для Er:YAG, но там в качестве пробного импульса использовался импульс свободной генерации микросекундной длительности и для более длинного импульса накачки.

Полученные значения усиления G позволяют оценить инверсию населенностей между уровнями $^4I_{9/2}$ и $^4I_{11/2}$ как $\Delta N = \ln(G)/l \cdot \sigma$, где l – длина прокачанной области (75 мм), σ – сечение вынужденных переходов ($2.6 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$). При коэффициенте усиления $G = 1.5$ в Er:YAG ΔN оценивается в $2.1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, а при $G = 2.1$ в Cr:Er:YSGG – $3.8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В этих случаях, в предположении однородно распределенной инверсии, в кристалле диаметром 4 мм запасено от 130 до 240 мДж.

Для оценки роли апконверсионных переходов в формировании инверсии в активных элементах было измерено усиление в кристаллах Er:YSGG и Er:YAG при боковой диодной накачке (рис. 2б). Лазерный квантрон был оснащен шестью диодными матрицами, излучающими на центральной длине волны около 970 нм с шириной спектра 5 нм по полувысоте. Решетки были установленными в два кольца вокруг кристалла со смещением друг относительно друга на 60 градусов для более симметричной прокачки. Центральная длина волны диодных решеток могла контролироваться при помощи элементов Пельтье для управления глубиной поглощения излучения накачки в кристалле. Кристалл и термоэлектрические элементы охлаждались водой с температурой 18 °С. Длительность импульса накачки составляла 270 мкс с суммарной энергией около 3 Дж с засвеченной областью в кристалле около 50 мм. Видно, что усиление в кристалле Er:YSGG достигает приблизительно такого же значения ($G = 1.7$), как и при ламповой накачке, в то время как в Er:YAG усиление значительно меньше ($G = 1.2$), что говорит об определяющей роли возбуждения с высоко лежащих энергетических уровней в этом кристалле.

Важно отметить, что кристаллическая матрица YSGG, с одной стороны, обеспечивает большее время жизни верхнего лазерного уровня, и таким об-

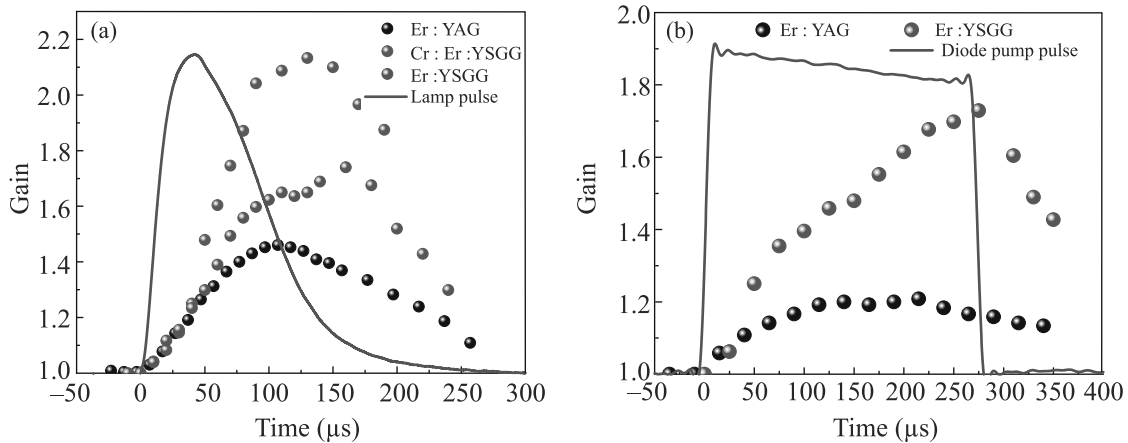


Рис. 2. (Цветной онлайн) Динамика усиления в исследуемых кристаллах при ламповой накачке с энергией 100 Дж и диодной накачке с энергией 3 Дж на длине волны около 970 нм

разом позволяет запастись больше энергии. В то же время теплопроводность матрицы меньше, чем в YAG, а термооптический коэффициент dn/dT больше ($12.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ в YSGG [28] и $7.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ в YAG [27]), что способствует более сильной и астигматичной тепловой линзе, худшему качеству пучка и большим дифракционным потерям в резонаторе. Такая тепловая линза сложна для компенсации в лазерном резонаторе. Кристалл Er:YAG способен выдерживать большую тепловую нагрузку, обеспечивая возможность работы в большей частоте повторения.

3. Электрооптическая модуляция добротности. Для оценки доступа к запасенной энергии были спроектированы генераторы с электрооптической и оптико-механической модуляцией добротности. Кристалл ниобата лития обладает довольно низкой лучевой прочностью (300 МВт/см^2 [29]), поэтому для разработки резонатора была предпринята работа по реализации схемы компенсации тепловой линзы. Измерение тепловой линзы в различных 3-мкм лазерных кристаллах описано в нашей предыдущей работе [30]. В ней нами использовалась схема на основе рассеивающих линз в лазере Cr:Er:YSGG. Среда Er:YAG обладает меньшим коэффициентом усиления по сравнению с Cr:Er:YSGG, поэтому для уменьшения внутррезонаторных потерь в качестве компенсации использовались не линзы, а выпуклые сферические зеркала. Фокусное расстояние тепловой линзы в кристалле Er:YAG при накачке 1.5 кВт достигает всего 15–20 см. С учетом оптической силы тепловой линзы при мощной ламповой накачке был изготовлен набор выпуклых сферических зеркал различных радиусов в согласии с результатами моделирования на основе ABCD формализма.

Схема разработанного лазера представлена на рис. 3. В качестве активного элемента использовался

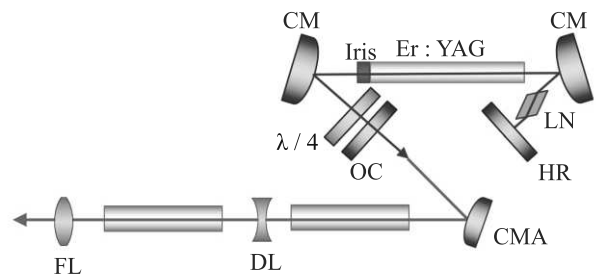


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема установки с кристаллом Er:YAG и двумя выпуклыми зеркалами. HR – глухое зеркало; OC – выходное зеркало; LN – электрооптический модулятор добротности ниобат лития; CM – выпуклые зеркала; $\lambda/4$ – четвертьволновая пластинка

кристалл Er:YAG размером $4 \times 100 \text{ мм}$ с просветляющими покрытиями. Для компенсации тепловой линзы использовались сферические зеркала с радиусом закругления -350 см . Дифрагма диаметром 2.5 мм обеспечивала генерацию с малым числом поперечных мод. На частоте 10 Гц были получены импульсы с энергией до 28 мДж. Затем энергия импульсов была увеличена в двух однопроходных усилителях на идентичных кристаллах Er:YAG до энергии 63 мДж. После прохождения первого усилителя пучок приобрел небольшую эллиптичность, вызванную неоднородностью прокачки кристалла. Второй усилитель был сориентирован с поворотом на 90 градусов относительно первого, что позволило скомпенсировать изменение формы пучка. Во избежание фокусировки лазерного пучка из-за тепловой фокусировки в

кристаллах усилителей пучок транслировался с помощью выпуклого зеркала и рассеивающей линзы. Полагаясь на сделанную оценку запасенной энергии из измерения усиления, можно сделать вывод, что электрооптическая модуляция добротности не позволяет снять запасенную энергию в полной мере. Причиной этому, вероятно, высокие потери из-за деполяризации в активном элементе при мощной накачке, а также потери в кристалле модулятора. В результате, чтобы держать усиление на достаточном уровне, приходится поднимать энергию накачки, что ведет к увеличению силы тепловой линзы, большим дифракционным потерям, и необходимости более тонкого контроля каустики внутри резонатора.

4. Оптико-механическая модуляция добротности. Для получения большей выходной энергии мы обратились к оптико-механической модуляции добротности на основе вращающегося зеркала. Исходя из результатов проведенных измерений усиления в 3-мкм кристаллах, следует, что наибольшая выходная энергия импульса может быть получена в кристалле Cr:Er:YSGG. Для реализации оптико-механической модуляции добротности был спроектирован резонатор длиной 36 см, глухое зеркало которого было установлено на моторе с максимальной частотой вращения 600 Гц, а выходное зеркало $R = 50\%$ стояло стационарно. Для компенсации тепловой линзы на частоте 5–10 Гц в качестве глухого также использовалось выпуклое зеркало с радиусом закругления 350 мм. В итоге была получена энергия до 135 мДж, однако не в единичном наносекундном импульсе (рис. 4), причем по мере увеличения выходной энергии число импульсов увеличивалось. Длительность измерялась КРТ-детектором (Vigo PEM-10.6) с постоянной времени 1.2 нс. Причиной этому является высокое усиление в активном элементе. Параметры оптико-механической модуляции добротности тесно связаны с динамикой соотношения потерь в резонаторе и усиления в активном элементе [31]. При заданной скорости вращения зеркала (600 Гц) импульс, благодаря высокому усилению, время развития генерации мало, и он успевает сгенерироваться до момента минимальных потерь резонатора. В результате, импульс не снимает всю доступную инверсию в активном элементе, и за время замыкания резонатора успевают сгенерироваться еще несколько импульсов. Для увеличения потерь и скорости переключения добротности также использовалась плоскопараллельная пластинка YAG в качестве выходного зеркала с увеличенной длиной резонатора до 50 см. Однако и в этих условиях реализовывался многоимпульсный режим. С подобной проблемой столк-

нулись авторы работы [31], где при сравнении двух неодимовых активных элементов в среде с большим сечением люминесценции была получена значительно меньшая выходная энергия. В итоге, большое усиление может быть препятствием для генерации одиночного гигантского импульса при частотах вращения зеркала порядка 500–700 Гц. Компенсировать быстрое формирование импульса в таких средах может более быстрое переключение добротности, т.е. большая скорость вращения мотора.

Далее режим оптико-механической модуляции добротности исследовался в кристалле Er:YAG в идентичном резонаторе. Для увеличения запасенной энергии использовался двухламповый диффузный квантрон для накачки кристалла 4×100 мм. При вращении мотора на частоте около 400 Гц реализовывался режим модуляции добротности. Рисунок 4b демонстрирует измерение энергии и временной огибающей в зависимости от энергии накачки. Видно, что при увеличении накачки появляются несколько импульсов. В пучке при этом присутствуют также несколько пятен, число которых коррелирует с числом импульсов. Для больших накачек реализуется большее усиление, и скорость переключения добротности резонатора оказывается недостаточной.

Была измерена зависимость выходной энергии и огибающей для двух режимов накачки с энергией 170 и 200 Дж (рис. 5). Для меньшего уровня накачки благоприятные условия для генерации наступают уже при частоте вращения 450 Гц, и явно виден оптимум по частоте на 550 Гц с максимальной энергией и минимальной длительностью. В случае высоких накачек частота 550 Гц является нижней границей по частоте, а выходная энергия слабо зависит от самой частоты.

Для увеличения частоты следования импульсов до 10 Гц была предпринята работа по компенсации тепловой линзы. Для этого в качестве глухого зеркала было установлено выпуклое зеркало с радиусом закругления $ROC = -350$ мм и удлинен резонатор до длины 54 см, чтобы уменьшить число поперечных мод. В этом случае удалось получить импульсы с энергией 75 мДж и длительностью 123 нс (рис. 6) при накачке 278 Дж.

Формирование многоимпульсного режима в зависимости от энергии накачки или частоты вращения зеркала может быть визуализировано с помощью решения скоростных уравнений [32]. В них режим модуляции добротности задается через изменяющиеся во времени потери, которые зависят от скорости вращения мотора. Определяющую роль в формировании импульса будут играть скорость переключе-

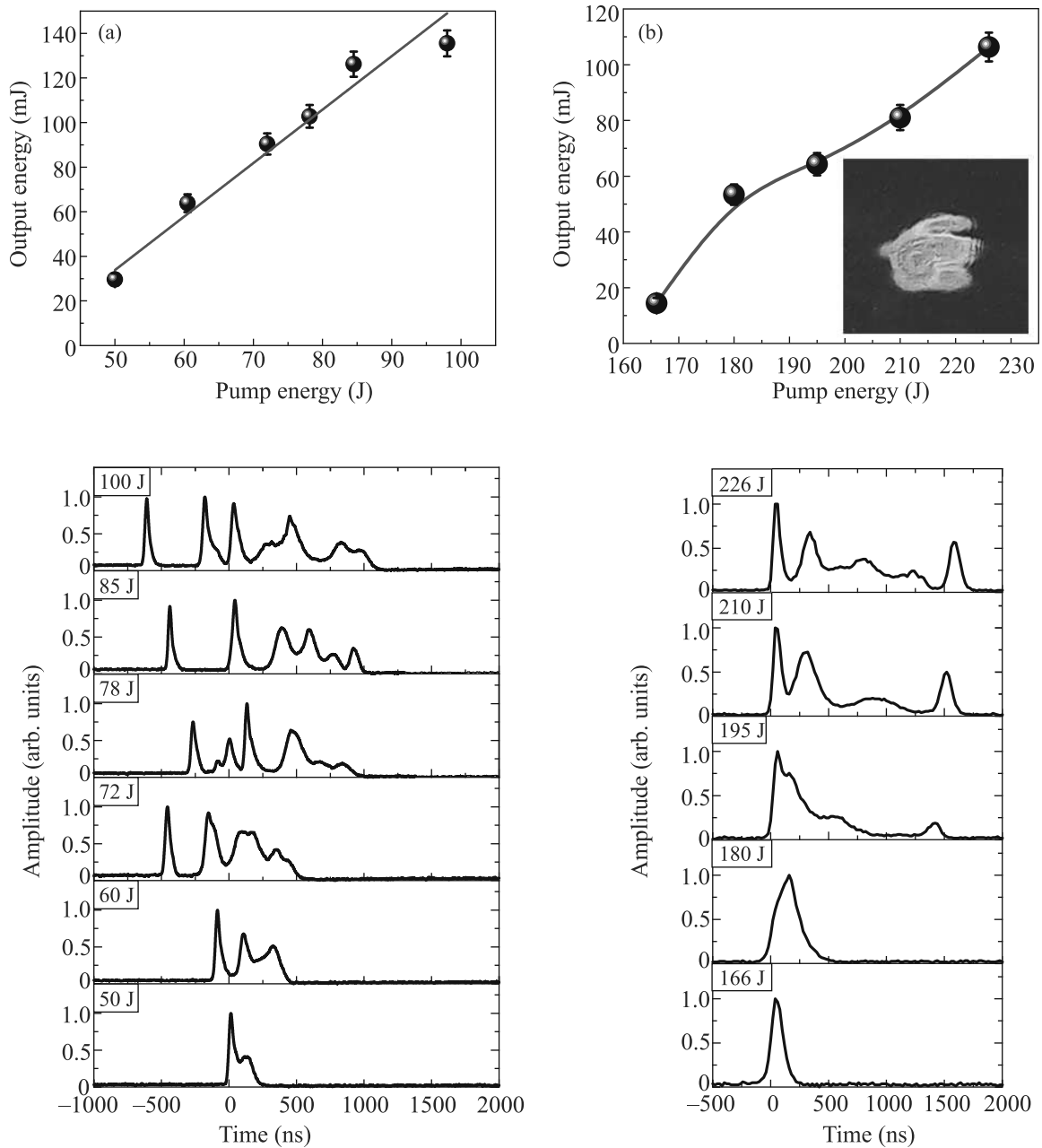


Рис. 4. (Цветной онлайн) Энергия и форма импульса в лазерах St:Er:YSGG (a) и Er:YAG (b) с вращающимся зеркалом при различной энергии накачки. На вставке изображен прожиг фотобумаги от пучка в многоимпульсном режиме

чения добротности, уровень инверсии населенностей (непосредственно связанный с усилением в активном элементе), и время развития генерации. Сама система уравнений с учетом апконверсионных переходов в Er:YAG может быть найдена в работе [33], а учет профиля добротности резонатора при модуляции добротности на вращающемся зеркале рассмотрен в [26]. Для скоростей апконверсии взяты значения $\omega_1 = 1.3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ и $\omega_2 = 3.7 \cdot 10^{-15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$,

а коэффициент усиления в активном элементе размером $4 \times 100 \text{ мм}$ $G = 1.7$, измеренный в эксперименте. На рисунке 7 представлена зависимость временной огибающей импульса для режима работы, близкого к изображенному на рис. 5b при накачке 200 Дж. Наибольшая энергия достигается в условиях, когда момент формирования импульса приходится на момент минимальных потерь резонатора. Импульс начинает формироваться в момент, когда усиление в

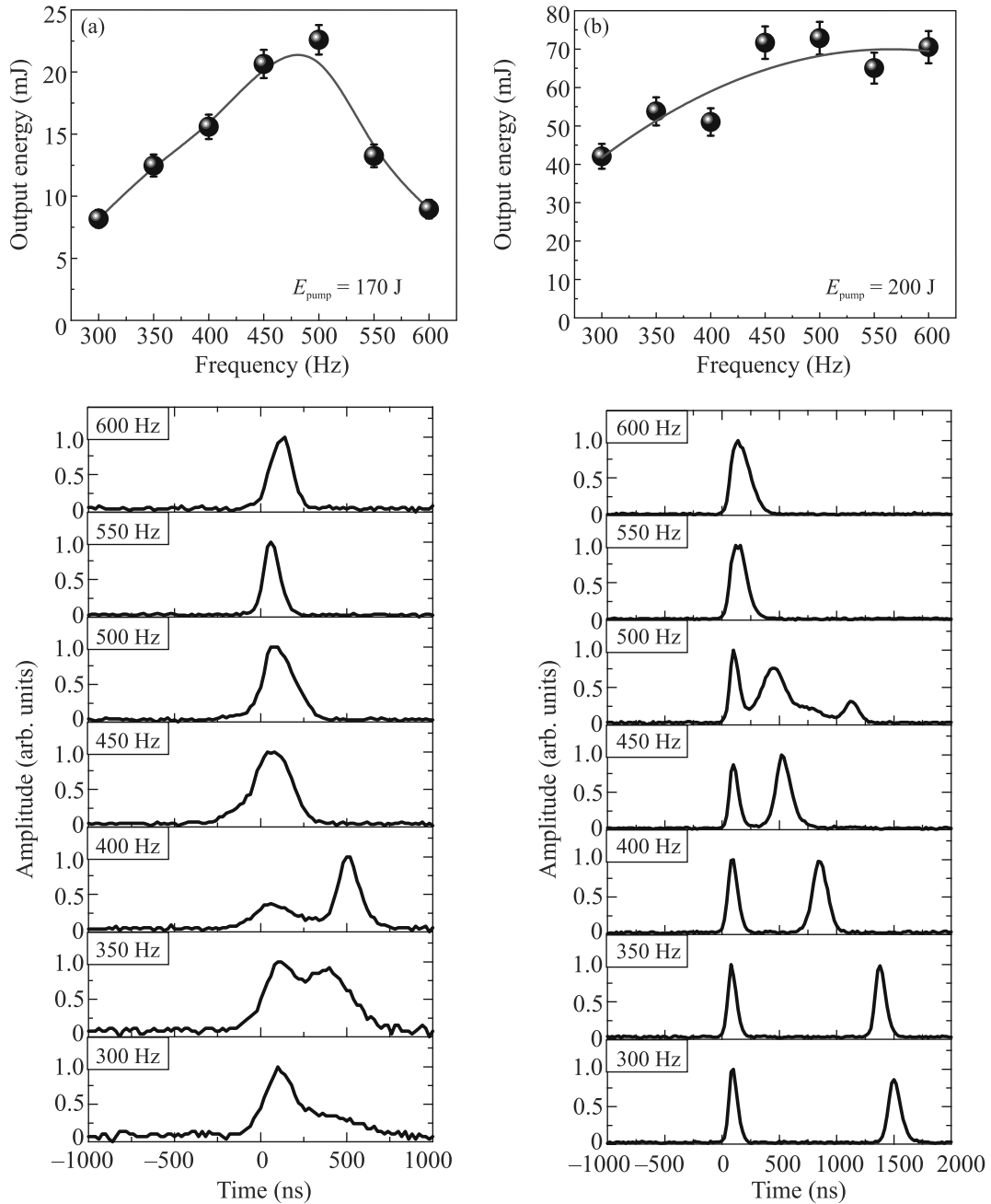


Рис. 5. (Цветной онлайн) Энергия и огибающая импульсов при варьировании скорости вращения зеркала для двух значений энергии накачки: (а) – 170 Дж (а) и (б) – 200 Дж

активном элементе превышает потери резонатора. В случае, если скорость изменения потерь недостаточная (малая частота вращения), максимум огибающей импульса приходится на момент раньше минимума потерь, снимается лишь часть запасенной энергии, и оставшейся инверсии достаточно для формирования еще одного или нескольких импульсов. Таким образом, для доступа к максимальной энергии требуется высокая скорость переключения добротности.

5. Заключение. В работе исследованы свойства лазерных сред (Er:YAG, Er:YSGG, Cr:Er:YSGG) к усилению и генерации наносекундных лазерных импульсов на длинах волн около 3 мкм. При ламповой накачке с энергией до 100 Дж наибольшее усиление демонстрирует Cr:Er:YSGG ($G = 2,1$) благодаря большому поглощению излучения накачки. Больше время жизни кристалла Er:YSGG обеспечивает увеличение усиления до $G = 1.7$ по сравнению

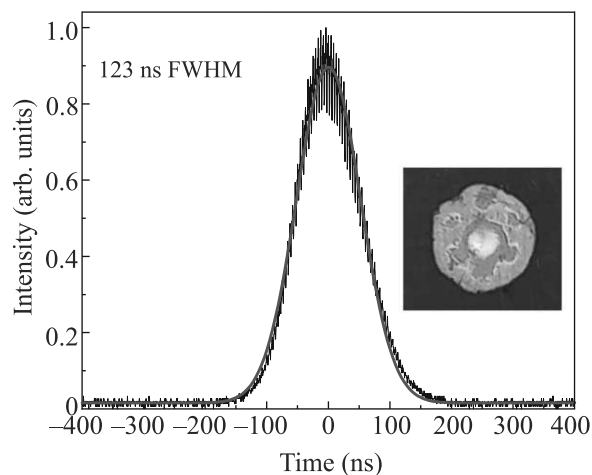


Рис. 6. (Цветной онлайн) Длительность импульса из генератора Er:YAG на вращающемся зеркале с энергией 75 мДж на частоте 10 Гц. На вставке изображен прожиг фотобумаги от пучка

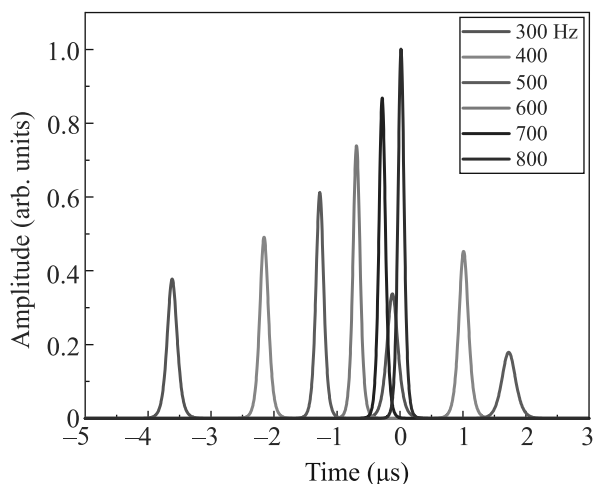


Рис. 7. (Цветной онлайн) Огибающая лазерных импульсов при варьировании скорости вращения зеркала, полученные при решении системы скоростных уравнений

с Er:YAG с $G = 1.5$. Измерение усиления с диодной накачкой показывает, что возбуждение высоколежащих энергетических уровней при ламповой накачке носит определяющий характер, в то время как для других эрбиевых сред это менее важно. В диодном квантроне с энергией импульса накачки 3 Дж получено усиление 1.2 в Er:YAG и 1.7 в Er:YSGG. Измерение усиления позволило сделать оценку на формируемую инверсию населенности, и таким образом на запасенную в активном элементе энергию, доступную для преобразования в гигантский импульс. При заданных условиях накачки эта энергия оценена в величину от 130 до 240 мДж.

Реализованы две схемы модуляции добротности – электрооптическая с использованием ниобата лития и оптико-механическая на основе вращающегося зеркала. Первая схема была реализована в лазере Er:YAG с компенсацией тепловой линзы в режиме TEM₀₀ моды и была получена энергия 28 мДж на 10 Гц в генераторе и увеличена до 62 мДж в двух однопроходных усилителях. По сравнению с кристаллами Cr:Er:YSGG, активные элементы Er:YAG благодаря лучшим механическим свойствам способны работать при большей мощности ламповой накачки с сохранением высокого качества пучка. Схема модуляции добротности на вращающемся зеркале открывает доступ к большей выходной энергии благодаря отсутствию требования на поляризацию излучения и оптических элементов, вносящих потери. В схеме на вращающемся зеркале в Er:YAG получено 113 мДж на частоте 5 Гц и 75 мДж на частоте 10 Гц длительностью 123 нс с использованием схемы компенсации тепловой линзы в режиме генерации одиночного лазерного импульса. В аналогичной схеме с кристаллом Cr:Er:YSGG одиночные наносекундные импульсы получены лишь при очень малой энергии накачки. Высокий коэффициент усиления и быстрое развитие генерации в Cr:Er:YSGG является ограничением на получение единичных наносекундных импульсов в схеме модуляции добротности на вращающемся зеркале. Доступ к одиночным импульсам с большой энергией может быть обеспечен при большей скорости вращения мотора.

Метод вращающегося зеркала является перспективным для создания 3-мкм наносекундных лазеров с субжоулевым уровнем выходной энергии, позволяя обойти ограничения на внутренние потери и деполяризацию в оптических элементах. Разработка таких источников с высокой пиковой и средней мощностью представляет интерес для мощных фемтосекундных лазерных систем усиления chirпованных импульсов на основе халькогенидов, легированных ионами железа, в средней ИК (3–5 мкм) области тераваттного уровня. Генерация мощного фемтосекундного излучения в среднем ИК диапазоне позволяет значительно повысить эффективность нелинейно-оптического преобразования интенсивной волны накачки в терагерцевое (ТГц) излучение в твердотельных (органических кристаллах) и газовых средах, что дает доступ к интенсивным ТГц импульсам (с напряженностью поля МВ/см), что важно в связи с развитием нелинейной оптики в перспективном ТГц диапазоне [34].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 20-19-00148).

1. E. Migal, A. Pushkin, B. Bravy, V. Gordienko, N. Minaev, A. Sirotkin, and F. Potemkin, *Opt. Lett.* **44**, 2550 (2019).
2. D. M. Rines, G. A. Rines, and P. F. Moulton, in *Advanced Solid State Lasers*, ed. by B. H. T. Chai and S. A. Payne, OSA Proceedings Series, Optical Society of America, Washington, D.C. (1995), v. 24, p. 184.
3. K. Vodopyanov, *ЖЭТФ Lett.* **70**, 1 (1990).
4. A. Pushkin, A. Bychkov, A. Karabutov, and F. Potemkin, *Laser Phys. Lett.* **15**, 6 (2015).
5. В. И. Жеков, В. А. Лобачев, Т. М. Мурина, and А. М. Прохоров, *Квантовая электроника* **11**, 189 (1984).
6. X. C. Багдасаров, В. И. Жеков, Л. А. Кулевский, В. А. Лобачев, *Квантовая электроника* **7**, 9 (1980).
7. В. И. Жеков, Т. М. Мурина, А. В. Попов, А. М. Прохоров, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 6 (2022).
8. S. Georgescu, O. Toma, and H. Totia, *IEEE J. Quantum Electron.* **39**, 722 (2003).
9. A. V. Pushkin, M. M. Mazur, A. A. Sirotkin, V. V. Firsov, and F. V. Potemkin, *Opt. Lett.* **44**, 4837 (2019).
10. L. Wang, J. Wang, J. Yang, X. Wu, D. Sun, S. Yin, H. Jiang, J. Wang, and C. Xu, *Opt. Lett.* **38**, 2150 (2013).
11. J. W. Yang, L. Wang, X. Y. Wu, T. Q. Cheng, and H. H. Jiang, *Opt. Express* **22**, 15686 (2014).
12. A. Zajac, M. Skorczakowski, J. Swiderski, and P. Nyga, *Opt. Express* **12**, 5125 (2004).
13. M. Skorczakowski, J. Swiderski, W. Pichola, P. Nyga, A. Zajac, M. Maciejewska, L. Galeckim, J. Kasprzak, S. Gross, A. Heinrich, and T. Bragagna, *Laser Phys. Lett.* **7**, 498 (2010).
14. N. M. Wannop, M. R. Dickinson, A. Charlton, and T. A. King, *J. Mod. Opt.* **41**, 2043 (1994).
15. A. Bizjak, K. Nemeš, and J. Možina, *Strojniški Vestn. – J. Mech. Eng.* **57**, 3 (2011).
16. K. Karki, V. Fedorov, D. Martyshkin, and S. Mirov, *Opt. Express* **29**, 4287 (2021).
17. Q. Cui, M. Wei, Z. Xiong, S. Hu, J. Jiang, L. Wang, T. Cheng, X. Wu, and H. Jiang, *Infrared Phys. Technol.* **98**, 256 (2019).
18. Z. Fang, D. Sun, J. Luo, H. Zhang, Z. Zhao, C. Quan, L. Hu, M. Cheng, Q. Zhang, and S. Yin, *Opt. Express* **25**, 239 (2017).
19. A. Joshi, M. Furtado, R. Shori, and O. M. Stafsudd, *Opt. Laser Technol.* **56**, 58 (2014).
20. N. M. Wannop, M. R. Dickinson, and T. A. King, *Opt. Commun.* **113**, 453 (1995).
21. B. Majaron, T. Rupnik, and M. Lukac, *IEEE J. Quantum Electron.* **32**, 1636 (1996).
22. T.-J. Wang, Q.-Y. He, J.-Y. Gao, Y. Jiang, Z.-H. Kang, H. Sun, L.-S. Yu, X.-F. Yuan, and J. Wu, *Laser Phys.* **16**, 1605 (2006).
23. Е. В. Жариков, Н. Н. Ильичев, С. П. Калитин, В. В. Лаптев, А. А. Малютин, В. В. Осико, П. П. Папинин, А. М. Прохоров, З. С. Саидов, В. А. Смирнов, А. Ф. Умысков, И. А. Щербаков, *Квантовая электроника* **13**(5), 973 (1986).
24. П. Альберс, В. Г. Остроумов, А. Ф. Умысков, С. Шнелл, И. А. Щербаков, *Квантовая электроника*, **15**(5), 871 (1988).
25. P. Maak, L. Jakab, P. Richter, H. J. Eichler, and B. Liu, *Appl. Opt.* **39**, 3053 (2000).
26. Y. H. Park, H. J. Kong, Y. S. Kim, and G. U. Kim, *Laser Phys. Lett.* **6**, 198 (2009).
27. B. J. Dinerman and P. F. Moulton, *Opt. Lett.* **19**, 1143 (1994).
28. D. N. Nikogosyan, *Properties of Optical and Laser-Related Materials: a Handbook*, Wiley, N.Y. (1997).
29. *Laser-Induced Damage in Optical Materials*, ed. by D. Ristau, CRC Press, Boca Raton, FL (2015).
30. A. V. Pushkin, I. A. Slovinskii, and F. V. Potemkin, *ЖЭТФ Lett.* **112**, 478 (2020).
31. M. Lukac, *IEEE J. Quantum Electron.* **27**, 2094 (1991).
32. W. Koehnner, *Solid-State Laser Engineering*, Springer, N.Y. (2013).
33. S. Georgescu and V. Lupei, *IEEE J. Quantum Electron.* **34**, 1031 (1998).
34. Д. З. Сулейманова, Н. А. Жидовцев, Ф. В. Потемкин, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 2 (2022).

Теория нематической сверхпроводимости в допированных топологических изоляторах (Миниобзор)

Д. А. Хохлов^{+*×1)}, Р. Ш. Акзянов^{+*×}, А. Л. Рахманов^{+*×}

⁺Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова (ФГУП ВНИИА), 127055 Москва, Россия

^{*}Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

[×]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 августа 2022 г.

После переработки 2 сентября 2022 г.

Принята к публикации 2 сентября 2022 г.

Данный обзор посвящен теории нематической сверхпроводимости в допированных топологических изоляторах семейства Bi_2Se_3 . Эксперимент показывает, что при переходе в сверхпроводящее состояние в них возникает спонтанное нарушение вращательной симметрии. Такая сверхпроводимость называется нематической. Она хорошо описывается векторным триплетным параметром порядка. Мы изложим основные положения микроскопической теории и теории Гинзбурга–Ландау для нематической сверхпроводимости. Обсудим конкуренцию возможных сверхпроводящих параметров порядка в топологических изоляторах и покажем, что гексагональные искажения поверхности Ферми необходимы для реализации нематической фазы. Эта фаза весьма чувствительна к беспорядку, поскольку наличие заряженных примесей уменьшает критическую температуру. Переход при допировании от закрытой к открытой поверхности Ферми влияет на конкуренцию сверхпроводящих фаз. Обсуждаются поверхностные андреевские состояния в нематических сверхпроводниках. Из микроскопической теории выводится феноменологическая теория Гинзбурга–Ландау для двухкомпонентного параметра порядка. С помощью теории Гинзбурга–Ландау показано, что основным состоянием является либо действительный нематический параметр порядка со спонтанной деформацией решетки, либо комплексный хиральный параметр порядка со спонтанной намагниченностью. Векторная структура параметра порядка вызывает необычную связь сверхпроводимости с деформацией решетки и намагниченностью. Это приводит к сильной анизотропии второго критического поля, возникновению спиновых вихрей (которые могут нести крамерсовские пары фермионов Майораны), а также к необычному парамагнетизму Паули триплетных куперовских пар.

DOI: 10.31857/S1234567822200058, EDN: koaweu

1. Введение. Спонтанное нарушение симметрии является фундаментальным понятием для теории сверхпроводимости [1]. Так в обычной s -волновой БКШ сверхпроводимости возникает спонтанное нарушение калибровочной симметрии $U(1)$. Сверхпроводимость с дополнительными нарушениями симметрии носит название необычной или экзотической. Среди необычных сверхпроводящих фаз повышенный интерес вызывает сверхпроводимость с триплетным по спину спариванием [2, 3]. Такая сверхпроводимость, действительно, была обнаружена, например, в рутенате стронция [4], системе с тяжелыми фермионами URt_3 [5, 6] и др. [7]. В необычных сверхпроводниках наблюдаются спонтанные нарушения и других симметрий. Нарушение инвариантности от-

носительно пространственной инверсии в системах с центральной симметрией [8], нарушение симметрии обращения времени [9–11], снижение симметрии по отношению к вращению [12, 13]. Каждое такое нарушение приводит к необычным физическим эффектам. Например, нарушение симметрии обращения времени может приводить к возникновению спонтанной намагниченности при переходе в сверхпроводящее состояние [14–16] и к возникновению хиральных поверхностных состояний [17]. Нарушение симметрии инверсии может приводить к сверхпроводимости с топологически защищенными бесщелевыми поверхностными состояниями [18]. Отметим, что сложная зонная структура большинства экзотических сверхпроводников затрудняет теоретический анализ, а высокие требования к качеству образцов затрудняют их экспериментальное исследование.

¹⁾e-mail: dmitrii.a.khokhlov@gmail.com

Для реализации триплетной по спину сверхпроводимости логично использовать материалы с сильным спин-орбитальным взаимодействием, к которым относятся топологические изоляторы [12]. В топологических изоляторах Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 спин-орбитальное взаимодействие настолько велико, что приводит к инверсии зон, обеспечивая нетривиальную топологию зонной структуры и наличие устойчивых бесщелевых поверхностных состояний [19]. Первоначальный интерес к сверхпроводимости в топологических изоляторах был связан со сверхпроводимостью, наведенной на его поверхности из-за эффекта близости [20, 21]. В такой системе могут существовать фермионы Майорана [20], которые представляют интерес для топологически защищенных квантовых вычислений [22, 23].

Допирование медью [24–27], стронцием [28–30] или ниобием [31–34] переводит Bi_2Se_3 в металлическую фазу, в которой при температуре ниже 3–3.5 К возникает сверхпроводимость. В работе [35] с помощью точечной контактной спектроскопии была обнаружена сверхпроводящая щель в $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$. Отклик на нулевой частоте в щели был отнесен авторами к вкладу от поверхностных состояний с нетривиальной топологией. В то же время, исследования с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ), показали полную щель в спектре [36] без следов поверхностных состояний. В работе [24] был измерен сдвиг Найта в допированном медью Bi_2Se_3 . Наблюдение заметного сдвига Найта в сверхпроводнике свидетельствует в пользу спин-триплетной сверхпроводимости. Более того, в этой работе было обнаружено нарушение вращательной симметрии C_3 кристалла: при вращении магнитного поля в главной кристаллической плоскости сдвиг Найта показывает C_2 симметрию отклика. Стоит отметить, что измерения сдвига Найта в сверхпроводящем состоянии достаточно сложны и наблюдаемые эффекты могут быть интерпретированы разными способами. Тем не менее аналогичное нарушение вращательной симметрии в сверхпроводящем состоянии было обнаружено при измерениях электронной теплоемкости в магнитном поле [27] и наблюдении вихрей с помощью СТМ [25]. Весьма наглядно такое нарушение симметрии подтверждает сильная анизотропия второго критического поля в главной кристаллической плоскости, $H_{c2}^{\max}/H_{c2}^{\min} \sim 2 - 8$ [27, 37–40]. Важно, что направление анизотропии связано со знаком и направлением деформации кристалла, которая возникает, например, в процессе его роста. Несмотря на то, что эта деформация обычно мала, $u_{xx} = \delta l/l \sim 10^{-5} - 10^{-7}$, ее влияние на свойства сверхпроводящего состояния

значительно. В работе [41] обнаружено, что переход в сверхпроводящее состояние $\text{Sr}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ сопровождается изменением деформации решетки образца. Существуют и другие экспериментальные доказательства спонтанного нарушения вращательной симметрии при переходе в сверхпроводящее состояние допированных монокристаллов Bi_2Se_3 .

Итак, экспериментальные данные указывают на то, что в допированных топологических изоляторах типа $\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ($\text{A} = \text{Sr}, \text{Cu}, \text{Nb}$) реализуется триплетная сверхпроводимость. Поскольку при переходе в сверхпроводящее состояние возникает одноосная анизотропия свойств в главной кристаллической плоскости, то такую сверхпроводимость также называют нематической.

Интересным вопросом является возможность спонтанного нарушения симметрии по обращению ко времени в сверхпроводящем состоянии. В эксперименте [31] была обнаружена намагниченность в сверхпроводящем состоянии $\text{Nb}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$, которая исчезала в нормальной фазе. Однако этот результат не был опубликован в рецензируемом журнале, и он противоречит работе [34], где в нулевом магнитном поле такая система не имела магнитного момента. Спонтанное нарушение симметрии обращения времени наблюдалось в сверхпроводящей фазе $\text{Sr}_{0.1}\text{Bi}_2\text{Se}_3$ в эксперименте по рассеянию мюонов [30].

Наблюдение осцилляций Шубникова–де Хааза позволяет определить топологию поверхности Ферми. В работе [42] показано, что при типичных концентрациях допирования медью поверхность Ферми Bi_2Se_3 имеет топологию цилиндра, достигающего границ зоны Бриллюэна в направлении ΓZ . В работе [43] авторы пришли к аналогичному выводу при допировании стронцием. В этих экспериментах было отмечено, что сверхпроводимость возникала при концентрациях носителей, соответствующих открытой поверхности Ферми.

Мы дадим краткий обзор современных теоретических представлений о свойствах нематической сверхпроводимости в допированных топологических изоляторах. Мы проанализируем возможные сверхпроводящие фазы и покажем, что учет гексагонального искажения поверхности Ферми является необходимым условием для реализации нематической фазы. Далее будут описаны поверхностные андреевские состояния. Затем мы получим функционал Гинзбурга–Ландау (ГЛ) из микроскопической теории. Мы расскажем про эффекты, возникающие из-за связи между сверхпроводимостью и магнетизмом/деформацией, такие как анизотропия второго

критического поля, спиновые вихри и парамагнетизм Паули куперовских пар.

2. Нормальная фаза. Приведем краткий вывод гамильтониана топологического изолятора в нормальном состоянии [19, 44]. Элементарная кристаллическая ячейка Bi_2Se_3 состоит из двух слоев висмута и трех селена: Se-Bi-Se-Bi-Se. Такие пятислойки слабо связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса, и взаимодействия внутри слоев (в плоскости (x, y)) являются наиболее сильными. Внешние орбитали Bi ($6s^2 6p^3$) и Se ($4s^2 4p^4$) являются p -орбиталями, другие орбитали можно не рассматривать. Гибридизация орбиталей Bi и Se приводит к образованию гибридных орбиталей висмута, Bi и Bi*, и селена Se, Se* и Se0.

Благодаря наличию симметрии инверсии кристалла, удобно рассматривать связывающие (bonding) и “разрыхляющие” (antibonding) состояния с определенной четностью. Состояния $P1^\pm = (\text{Bi} \pm \text{Bi}^*)/\sqrt{2}$ соответствуют связывающему (четному +) или разрыхляющему (нечетному -) состояниям орбиталей Bi, а состояния $P2^\pm = (\text{Se} \pm \text{Se}^*)/\sqrt{2}$ соответствуют связывающему (+) или разрыхляющему (-) состояниям орбиталей Se с соответствующей четностью. Установлено, что связывающее состояние $P1^+$ и разрыхляющее состояние $P2^-$ находятся ближе всего к уровню Ферми. Кристалл имеет слоистую структуру вдоль направления z . Кристаллическое поле приводит к расщеплению энергии между p_z и p_x, p_y орбиталями.

Если не учитывать спин-орбитальное взаимодействие, то p_z -орбитали образовали бы зону проводимости $P1^+_{p_z}$ и валентную зону $P2^-_{p_z}$ вблизи уровня Ферми. Однако сильное спин-орбитальное взаимодействие сдвигает энергию орбитали $P1^+_{p_z}$ вниз, а $P2^-_{p_z}$ вверх. При некоторой величине спин-орбитального взаимодействия орбитали с противоположной четностью пересекаются, т.е. происходит инверсия зон. Инверсия зон и является основным признаком топологического изолятора. Она приводит к появлению устойчивых поверхностных состояний. В k -пространстве инверсия происходит в инвариантной относительно обращения времени Γ -точке, расположенной в центре зоны Бриллюэна.

В так называемом $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -разложении по базису $(P1^+_{p_z}, P2^-_{p_z})$ вблизи Γ -точки низкоэнергетический гамильтониан системы имеет вид ($\hbar = 1$) [19, 44]:

$$H_N(\mathbf{k}) = -\mu + m\sigma_x + v\sigma_z(s_x k_y - s_y k_x) + v_z k_z \sigma_y. \quad (1)$$

Здесь матрицы Паули s_i действуют в пространстве спинов (\uparrow, \downarrow), а матрицы Паули σ_i в пространстве орбиталей $(P1^+_{p_z}, P2^-_{p_z})$, μ – химический потенциал

(при половинном заполнении $\mu = 0$), $2m$ – электронная щель в объеме, v – скорость Ферми в плоскости $(\Gamma M, \Gamma K)$, которая параллельна плоскости (x, y) слоев Bi и Se, v_z – скорость Ферми вдоль направления ΓZ (ось z), перпендикулярного слоям Bi и Se. Вдали от точки Γ возникают дополнительные члены в гамильтониане, что приводит к зависимости от импульса его параметров: $m \rightarrow m - M_1(k_x^2 + k_y^2) - M_2 k_z^2$, $\mu \rightarrow \mu - C_1(k_x^2 + k_y^2) - C_2 k_z^2$ и возникновению гексагональных искажений поверхности Ферми, которые описываются дополнительными кубическими слагаемыми в гамильтониане

$$\hat{H}_w = \lambda_1 k_x (k_x^2 - 3k_y^2) s_z \sigma_z + \lambda_2 k_y (k_y^2 - 3k_x^2) \sigma_y. \quad (2)$$

Гексагональные искажения играют важную роль в описании физики топологических изоляторов [45–48], в то время как квадратичные слагаемые обычно не существенны. Стоит отметить, что линейная дисперсия вдоль направления z хорошо работает даже вдали от Γ -точки [19]. Для Bi_2Se_3 типичные значения параметров составляют $m \sim -0.3 \text{ эВ}$, $v \sim 3.3 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$, $v_z \sim 2.3 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$, $\lambda_1 = 50.6 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$, $\lambda_2 = -113.3 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$.

Введем обозначение $\hat{H}_0 = \hat{H}_N + \hat{H}_w$. Важным свойством нормального состояния является наличие симметрии инверсии $\hat{P} \hat{H}_0(\mathbf{k}) \hat{P} = \hat{H}_0(-\mathbf{k})$, где оператор $\hat{P} = \sigma_x$ соответствует инверсии орбиталей. Гамильтониан \hat{H}_N инвариантен относительно вращения вокруг оси z на произвольный угол. Однако при учете слагаемого \hat{H}_w гамильтониан нормального состояния симметричен только при вращениях на угол $2\pi/3$, что описывается оператором $\hat{C}_3 = e^{-is_z \pi/3}$. Зеркальное отражение $x \rightarrow -x$ определяется оператором $\hat{M} = -is_x$. Гамильтониан преобразуется как $\hat{M} \hat{H}_0(k_x, k_y, k_z) \hat{M}^{-1} = \hat{H}_0(-k_x, k_y, k_z)$. Также, имеется глобальная симметрия обращения времени, где $\hat{T} \hat{H}_0(\mathbf{k}) \hat{T}^{-1} = \hat{H}_0(-\mathbf{k})$, $\hat{T} = is_y K$.

Низкоэнергетический спектр объемных состояний $H_N(\mathbf{k})$ без гексагональных искажений определяется выражением

$$E(\mathbf{k}) = -\mu \pm \sqrt{m^2 + v^2 k_x^2 + v^2 k_y^2 + v_z^2 k_z^2}. \quad (3)$$

Поверхность Ферми может быть закрытой или открытой в зависимости от параметров системы (см. рис.1). Если поверхность Ферми закрытая, то она имеет форму эллипсоида, вытянутого вдоль направления z , так как $v_z < v$. Этот эллипсоид может быть параметризован в эллиптических координатах $(vk_x, vk_y, v_z k_z) = \sqrt{\mu^2 - m^2} (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$. В случае замкнутой поверхности Ферми $\varphi \in [0, 2\pi)$ и $\theta \in [0, \pi]$.

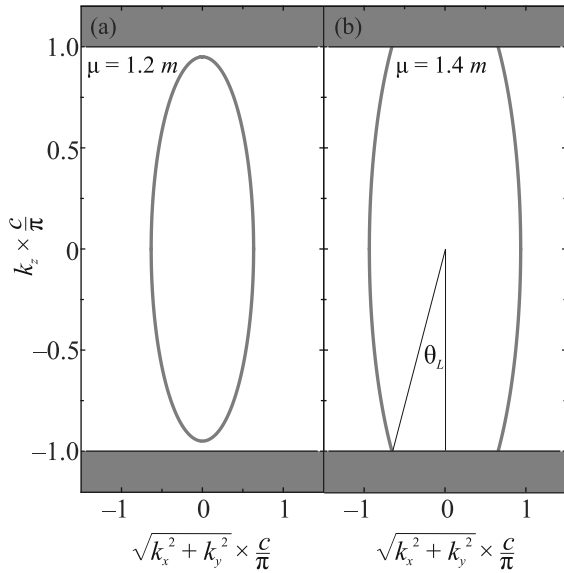


Рис. 1. (Цветной онлайн) Поверхность Ферми до и после перехода Лифшица в безразмерных координатах. Пунктирная синяя линия показывает границы первой зоны Бриллюэна (белый фон) и второй зоны Бриллюэна (розовый фон). (а) – Серая кривая показывает замкнутую поверхность Ферми при $\mu = 1.2m$. (б) – Серая линия показывает открытую поверхность Ферми при $\mu = 1.4m$

Переход Лифшица от закрытой поверхности Ферми к открытой происходит, если размер зоны Бриллюэна k_c вдоль направления z становится меньше фермиевского импульса $v_z k_c < \sqrt{\mu^2 - m^2}$. В эллиптических координатах $\theta \in (\theta_L, \pi - \theta_L)$, где $\cos \theta_L = \min(1, v_z k_c / \sqrt{\mu^2 - m^2})$. Поверхность Ферми является замкнутой при $\cos \theta_L = 1$. При $\cos \theta_L < 1$ поверхность Ферми становится открытой. Случай $\cos \theta_L = 0$ соответствует цилиндрической поверхности Ферми. Поверхность Ферми $E(\mathbf{k}) = 0$ показана на рис. 1 для различных значений θ_L . Вид поверхности Ферми на рис. 1 согласуется с результатами эксперимента [42, 43] и расчета [43].

3. Микроскопическая теория. В подавляющем большинстве работ по сверхпроводимости в допированном Bi_2Se_3 считается, что спаривание электронов происходит из-за электрон-фононного взаимодействия [12, 49, 50]. В простейшей $U-V$ модели притяжение между электронами возникает в межорбитальном и внутриорбитальном каналах

$$H_{\text{int}} = -U(n_1^2 + n_2^2) - 2Vn_1n_2, \quad (4)$$

где $n_i = \sum_{\mathbf{k}, s} c_{i\mathbf{k}s}^\dagger c_{i\mathbf{k}s}$ – плотность электронов на орбитали i , s – проекция спина. Константа U отвечает за притяжение электронов внутри одной орбитали,

а константа V за притяжение между электронами с разных орбиталей.

Симметрия нормальной фазы допускает существование нескольких типов спаривания с различными спиновой и орбитальной структурами параметра порядка $\hat{\Delta}_\alpha$ [12] (индекс α нумерует возможный тип такой структуры). Параметр порядка можно представить в виде $\hat{\Delta}_\alpha = \hat{A}_\alpha \Delta_\alpha$, где Δ_α – скалярная величина, а $\hat{A}_\alpha = \sigma_i s_j$ характеризует матричную структуру параметра порядка в орбитальном и спиновом базисах. В таблице 1 выписаны допустимые параметры порядка, их матричная структура, преобразования при инверсии, отражении относительно плоскости (y, z) и вращении на угол $\pi/3$ вокруг оси z . Также в табл. 1 указаны структуры аномальных средних в терминах операторов вторичного квантования, классификация параметров порядка по спину куперовской пары, а также параметр подобия ζ_α (см. уравнение (6)).

В работе [51] были вычислены фононные спектры Bi_2Se_3 и найдены константы связи электрон-электронного притяжения. Оказалось, что наиболее активно в спаривании участвуют фононы, распространяющиеся вдоль направления ΓZ с малым импульсом. Отметим, эксперимент по рассеянию нейтронов также установил, что такие фононы имеют наименьшее время жизни [49]. Таким образом, этот эксперимент подтверждает, что данные фононы активно рассеиваются и, видимо, играют ключевую роль в формировании куперовских пар. Вероятно, такие фононы способствуют межорбитальному спариванию, и можно ожидать, что $V > U$ в гамильтониане взаимодействия (4). Учет реальных фононных спектров для Bi_2Se_3 и кулоновского отталкивания показывает, что в рамках $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модели (1), наиболее выгодным типом спаривания является псевдо-триплетный изотропный параметр порядка из представления A_{2u} [51] (см. табл. 1). Из работы [12] известно, что триплетное спаривание может быть выгодным только при $V > U$. Таким образом, из расчетов [51] можно предположить, что выполняется соотношение $V > U$. В то же время нематический параметр порядка из E_u представления оказывается лишь немного менее выгодным [51].

В работе [12] была построена фазовая диаграмма системы в зависимости от соотношений между константами связи U/V и химическим потенциалом μ без учета гексагональных искажений \hat{H}_w . Оказалось, что нематическая фаза всегда является менее выгодной, чем скалярный спин-триплетный параметр порядка $\hat{\Delta}_2$, что противоречит эксперименту. Таким образом, при описании сверхпроводимости необходимо

Таблица 1. Возможные сверхпроводящие параметры порядка $A_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$. Симметрия параметров порядка относительно инверсии \hat{P} , отражения \hat{M} от плоскости (y, z) и вращения \hat{C}_3 вокруг оси z на угол $2\pi/3$, см. работу [12]. Скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по поверхности Ферми. Знаки $+$ ($-$) означают четность (нечетность)

	$\hat{\Delta}_1$	$\hat{\Delta}_2$	$\hat{\Delta}_3$	$(\hat{\Delta}_{4x}, \hat{\Delta}_{4y})$
Представление	A_{1g}	A_{1u}	A_{2u}	E_u
Матричная структура \hat{A}_α	$1, \sigma_x$	$\sigma_y \sigma_z$	σ_z	$(\sigma_y \sigma_x, \sigma_y \sigma_y)$
$\hat{P} = \sigma_x$	$+$	$-$	$-$	$(-, -)$
$\hat{M} = -i\sigma_x$	$+$	$-$	$+$	$(+, -)$
$\hat{C}_3 = e^{-is_z \pi/3}$	инвариантен	инвариантен	(x, y)	
Структура спаривания	$c_{1\uparrow}c_{1\downarrow} + c_{2\uparrow}c_{2\downarrow},$ $c_{1\uparrow}c_{2\downarrow} - c_{1\downarrow}c_{2\uparrow}$	$c_{1\uparrow}c_{2\downarrow} + c_{1\downarrow}c_{2\uparrow}$	$c_{1\uparrow}c_{1\downarrow} - c_{2\uparrow}c_{2\downarrow}$	$(c_{1\uparrow}c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}c_{2\downarrow},$ $ic_{1\uparrow}c_{2\uparrow} - ic_{1\downarrow}c_{2\downarrow})$
Спин куперовской пары	0	1	0	1
Параметр подобия ζ_α	$1, \langle \frac{v^2(k_x^2 + k_y^2) + R_1^2}{\mu} \rangle$	$\langle \frac{v^2(k_x^2 + k_y^2) + v_z^2 k_z^2}{\mu} \rangle$	$\langle \frac{m}{\mu} \rangle$	$(\langle \frac{v^2 k_x^2 + v_z^2 k_z^2 + R_1^2}{\mu} \rangle, \langle \frac{v^2 k_y^2 + v_z^2 k_z^2 + R_1^2}{\mu} \rangle)$

учитывать гексагональные искажения. Найдем фазовую диаграмму системы. Для этого мы вычислим критическую температуры каждой фазы. Основным состоянием будет фаза с наибольшей критической температурой T_c . Мы рассмотрим нематическую фазу $\hat{\Delta}_{4y}$, так как остальные ориентации нематика, очевидно, имеют такую же T_c .

Запишем линеаризованную аномальную функцию Грина в виде $\hat{F}_\alpha^{(1)}(i\omega, \mathbf{k}) = \hat{G}_{0,e}(i\omega, \mathbf{k})\hat{A}_\alpha\hat{G}_{0,h}(-i\omega, \mathbf{k})$, где $G_{0,e(h)}$ – электронная (дырочная) мацубаровская функция Грина нормальной фазы, а индекс α указывает на тип спаривания. Для нее мы решаем линеаризованное уравнение Горькова:

$$\hat{\Delta}_\alpha = g_\alpha T \sum_{\omega, \mathbf{k}} \hat{F}_\alpha^{(1)}(i\omega, \mathbf{k}). \quad (5)$$

Константа $g_\alpha = V$ для фаз $\hat{\Delta}_2$ и $\hat{\Delta}_4$, а для фазы $\hat{\Delta}_3$ она равняется U . Для решения уравнения (5) удобно домножить обе его части на матричную структуру левой части, взять след от результата и получить скалярное уравнение на амплитуду параметра порядка $\Delta_\alpha = \text{Tr}(\hat{A}_\alpha \hat{\Delta}_\alpha)/4$. Откуда

$$\Delta_\alpha = \frac{\pi T g_\alpha \rho(\mu)}{4} \zeta_\alpha \sum_{\omega} \frac{\Delta_\alpha}{|\omega|}, \quad (6)$$

где $\rho(\mu)$ – плотность состояний в нормальной фазе, а $\zeta_\alpha = \text{Tr} \langle \hat{B}_\alpha^\dagger \hat{B}_\alpha \rangle / 4$ – параметр подобия, который выражается через проекцию матричной структуры параметра порядка на волновые функции нормального состояния $\hat{B}_{\alpha ij} = \langle \psi_{iN} \hat{A}_\alpha \psi_{jN} \rangle$, ψ_{iN} соответствуют энергии Ферми. След берется по спиновым и орбитальным степеням свободы, усреднение $\langle \dots \rangle$ производится по поверхности Ферми. Если матрица \hat{A}_α коммутирует с гамильтонианом, $[H_N(\mathbf{k}), \hat{A}_\alpha] = 0$, то $\zeta_\alpha = 1$ и уравнение на критическую температуру

совпадает с уравнением на T_c для однозонного синглетного сверхпроводника. Если $[H_N(\mathbf{k}), \hat{A}_\alpha] \neq 0$, то $\zeta_\alpha < 1$ и T_c уменьшается при уменьшении параметра подобия.

Отметим, что для четного синглетного параметра порядка $\hat{\Delta}_1$ спаривание происходит, как между электронами из одной зоны, так и между электронами из разных зон [12, 52]. В результате критическая температура находится из условия совместимости следующей системы уравнений:

$$\Delta_{1,0} + \Delta_{1,x} \sigma_x = T \sum_{\omega, \mathbf{k}} \left[U \hat{F}_{1,0}^{(1)}(i\omega, \mathbf{k}) + V \hat{F}_{1,x}^{(1)}(i\omega, \mathbf{k}) \right]. \quad (7)$$

Численный анализ уравнений (5) и (7) показывает, что фаза $\hat{\Delta}_3$ всегда имеет меньшее значение T_c , чем $\hat{\Delta}_1$. В зависимости от параметров, основное состояние системы может быть $\hat{\Delta}_1$, $\hat{\Delta}_2$ или $\hat{\Delta}_4$. Для некоторого набора параметров нами была вычислена величина свободной энергии при нулевой температуре. Полученные результаты подтвердили правильность расчета фазовой диаграммы системы по величине T_c .

Интересно отметить, что свободная энергия сверхпроводника зависит от ориентации нематичности. Так, наименьшей энергией обладает фаза $\hat{\Delta}_{4y}$, которая имеет наибольшую щель в спектре. При этом, разница в свободной энергии между Δ_{4y} и Δ_{4x} намного меньше, чем типичная разница между свободными энергиями других фаз вдали от фазовых границ. Это означает, в частности, что небольшая деформация может изменить соотношение между состояниями Δ_{4y} и Δ_{4x} . Нами была проанализирована возможность существования хиральной фазы с параметром порядка $\Delta_{4y} \pm i\Delta_{4x}$, который спонтанно нарушает симметрию относительно обращения времени. Эта фаза имеет ту же T_c , что и Δ_{4y} , но более высокую свободную энергию при

нулевой температуре в случае закрытой поверхности Ферми [53].

Полученная фазовая диаграмма системы на плоскости $(U/V, \mu/m)$ представлена на рис. 2. Синглетное спаривание $\hat{\Delta}_1$ является единственно возможным типом сверхпроводимости, если $U > V$. В отсутствие гексагональных искажений основным состоянием является $\hat{\Delta}_1$ или $\hat{\Delta}_2$ в зависимости от химического потенциала, т.е. допирования, рис. 2а. При наличии искажения поверхности Ферми нематическая фаза $\hat{\Delta}_4$ становится основным состоянием при большом химическом потенциале, рис. 2б. Сильное межорбитальное притяжение V благоприятствует нематическому упорядочению. Рост μ/m ведет к расширению области нематической фазы $\hat{\Delta}_4$. Фазы $\hat{\Delta}_4$ и $\hat{\Delta}_2$ имеют одинаковый тип спаривания. Тогда для анализа их конкуренции достаточно сравнить лишь параметры подобия, что приводит к уравнению на переход между фазами $\langle \bar{\lambda}_1^2 \rangle = \langle v^2 k_x^2 \rangle$, где $\bar{\lambda}_1 = \lambda_1(k_x^3 - 3k_x k_y^2)$. Приближенно считая гексагональное искажение малым, можно свести это равенство к условию $\lambda_1(\mu^2 - m^2)/v^3 = 1$, что для рис. 2б дает $\mu/m = 3$ для границы раздела между фазами $\hat{\Delta}_4$ и $\hat{\Delta}_2$.

4. Нематическая сверхпроводящая фаза.

Поскольку в большинстве экспериментов наблюдается нематический параметр порядка $\hat{\Delta}_4$, мы обсудим его более подробно. Структура спаривания изображена на рис. 3. Этот параметр порядка является векторным. При поворотах вокруг оси z он преобразуется как вектор в плоскости (x, y) . Нематический параметр порядка может быть записан как $\hat{\Delta}_4 = (\hat{\Delta}_{4x}, \hat{\Delta}_{4y}) = \Delta_4(\hat{n}_x, \hat{n}_y)$, где $\hat{n} = (\cos \phi_{s_x} \sigma_y, \sin \phi_{s_y} \sigma_y)$.

Если разность фаз между компонентами параметра порядка равна нулю, то это не нарушает симметрию обращения времени. Появление ненулевой разности фаз возможно например, при наличии намагниченности [54]. В некоторых случаях возможно, что параметр порядка $\Delta_x \pm i\Delta_y$ с разностью комплексных фаз $\pi/2$ и с направлением $\phi = \pi/4$ является основным состоянием [55, 56]. Такой параметр порядка, нарушающий симметрию обращения времени, называется хиральным. Хиральный параметр порядка не нарушает симметрию вращения. Возможно хиральная сверхпроводимость наблюдалась в экспериментах [30, 31]. Как в нематической, так и в хиральной фазах спариваются электроны с разных орбиталей, но с одинаковым спином. Следовательно, спин куперовских пар равен единице [12]. В нематической фазе доли пар со спином вверх и со спином вниз совпадают. Таким образом, плотность спина и магнитный момент системы равны нулю. В хиральной фазе

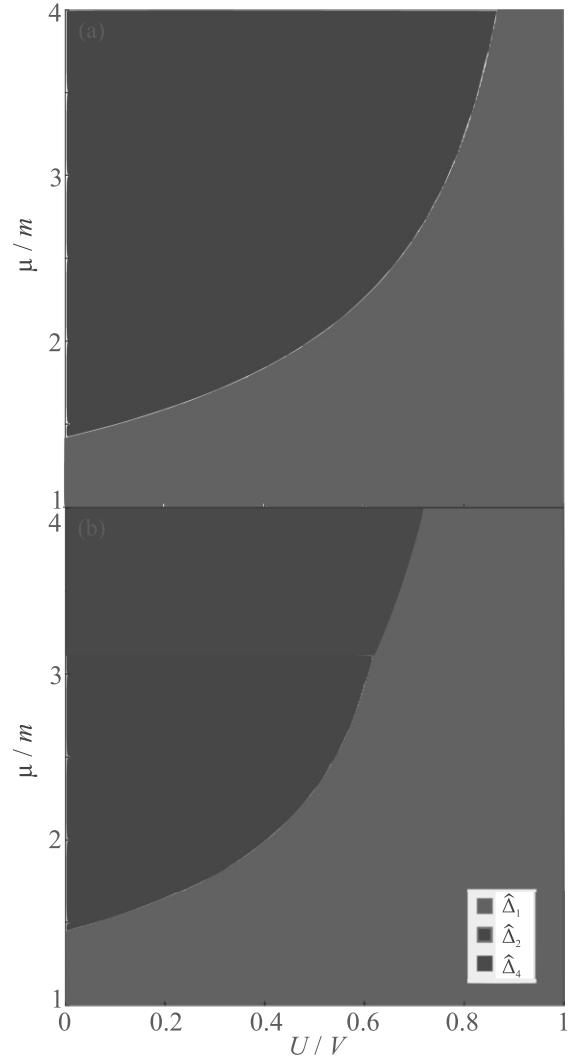


Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма на плоскости $(U/V, \mu/m)$. Бирюзовая область соответствует основному состоянию с параметром порядка $\hat{\Delta}_1$ (представление A_{1u}), зеленая область соответствует $\hat{\Delta}_2$ (представление A_{2g}), а синяя область соответствует нематическому параметру порядка $\hat{\Delta}_4$ (представление E_u). (а) – $\lambda_1 = 0$. (б) – $\lambda_1 m^2 / v^3 = 0.5$

спины всех пар сонаправлены и система является намагниченной.

Для описания сверхпроводящего состояния воспользуемся Гамильтонианом Боголюбова–де-Жена в базисе Намбу-II:

$$\hat{H}_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \tau_z \hat{H}_0(\mathbf{k}) + \tau_+ \hat{\Delta} + \tau_- \hat{\Delta}^\dagger, \quad (8)$$

где матрицы Паули $\tau_\pm = (\tau_x \pm i\tau_y)/2$ действуют в электрон-дырочном пространстве. В отсутствие гексагональных искажений спектр нематической фазы имеет две нодальные точки, расположенные на оси, перпендикулярной направлению вектора параметра

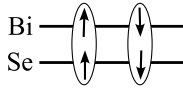


Рис. 3. Схема формирования куперовских пар. Спариваются электроны, имеющие одинаковый спин и различные орбитальные индексы. В нематической фазе присутствуют как пары со спином вверх, так и пары со спином вниз. В хиральной фазе есть только пары с одним знаком поляризации. Каждая стрелка соответствует электрону. Расположение стрелок показывает, на какой орбитали находится электрон. Направление стрелок вверх и вниз соответствует проекции спина электрона на Oz

порядка в k -пространстве. Например, для ориентации $\hat{\Delta}_{4y}$ нодальные точки лежат на оси k_x . Гексагональное искажение λ_1 (см. формулу (2)) открывает полную щель в спектре нематического сверхпроводника [57]. Наибольшая величина щели достигается при ориентации направления параметра порядка $\hat{\Delta}_{4y}$. Однако для ориентации $\hat{\Delta}_{4x}$ остаются точки нулевой щели в спектре (нодальные) на прямой $k_x = 0$. На этой прямой гексагональное искажение λ_1 равно нулю и не может открыть щель. Учет гексагонального искажения λ_2 приводит к замене $v_z k_z \rightarrow v_z k_z - \lambda_2 k_y (k_x^2 - 3k_y^2)$. При этом нодальные точки для $\hat{\Delta}_{4x}$ находятся вне (ГМ; ГК) плоскости.

Сверхпроводимость с топологически нетривиальным спариванием зачастую разрушается слабым беспорядком [58, 59] в отличие от сверхпроводников с тривиальным спариванием, для которых выполняется теорема Андерсона [60]. Для исследования влияния точечного беспорядка на нематическую сверхпроводимость в работе [61] было получено уравнение на величину параметра порядка в виде:

$$\Delta_\alpha = \frac{\pi T g_\alpha \rho(\mu)}{4} \zeta_\alpha \sum_\omega \frac{\Delta_\alpha}{|\omega + (1 - \zeta_\alpha)\Gamma|}, \quad (9)$$

где Γ – феноменологическая амплитуда квазичастичного рассеяния в нормальном состоянии из-за беспорядка. Параметры g_α и ζ_α определены под уравнениями (6) и (5). С помощью этого уравнения можно получить, что нематическая сверхпроводимость полностью подавляется точечными дефектами, $T_c = 0$, если $\Gamma > \Gamma_c = 0.88T_{c0}/(1 - \zeta_\alpha) \sim 2.6T_{c0}$ [61–63]. Здесь T_{c0} – критическая температура в отсутствие беспорядка.

5. Поверхностные андреевские состояния.

Туннельные измерения плотности состояний показывают наличие полной щели в спектре нематического сверхпроводника [36]. Это, в частности, сви-

детельствует об отсутствии поверхностных андреевских связанных состояний. Однако точечная контактная спектроскопия [35] и теоретические расчеты предсказывают наличие таких состояний [64–66]. Гамильтониан для поверхностных состояний можно получить из низкоэнергетической части гамильтониана (8) с помощью стандартной процедуры [19], изложенной ниже. Итак, мы ищем состояния с нулевой энергией, локализованные на границе образца. В нулевом порядке теории возмущений по k_x и k_y для таких состояний из (8) получаем уравнение:

$$H_{\text{BdG}}(k_x = k_y = 0, k_z \rightarrow -i\partial_z) \phi_i e^{\lambda z} = 0. \quad (10)$$

В случае допированного Bi_2Se_3 на волновую функцию накладываются граничные условия:

$$\sigma_z \psi(z=0) = \psi(z=0), \quad (11)$$

поскольку на поверхность выходит только одна орбиталь висмута [12, 64]. Решение данной задачи дает $\lambda = -(\Delta_4 \pm i\sqrt{\mu^2 - m^2})/v_z$. При удалении от границы образца волновая функция экспоненциально затухает на длине когерентности и осциллирует на масштабе порядка $1/k_F$. Отметим, что данная задача может быть решена и для нулевых граничных условий $\psi(z=0) = 0$, как это сделано для поверхностных состояний топологического изолятора в работах [19, 44]. Для нашей задачи это выразится в несущественной перенормировке параметров и двойном вырождении спектра по орбитальному числу.

Добавка к гамильтониану за счет дисперсии вдоль границы образца учитывается как возмущение $\langle \psi_i | H_{\text{BdG}}(k_x, k_y, k_z) - H_{\text{BdG}}(k_x = 0, k_y = 0, k_z) | \psi_j \rangle$, которое добавляется в эффективный гамильтониан. Подобно работе [64], мы получаем гамильтониан поверхностных состояний в главном приближении по степеням Δ_4 :

$$H_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{m\Delta_4}{\mu^2} \begin{pmatrix} -\bar{\lambda}_1 & vk_y \\ vk_y & \bar{\lambda}_1 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

В данном гамильтониане дисперсия вдоль k_x пропорциональна k_x^3 , в то время как дисперсия вдоль k_y линейная. Поверхностные состояния имеют эффективную скорость $m\Delta_4 v/\mu^2$. Отметим, что гамильтониан (12) записан в псевдоспиновом пространстве. Включение произвольного скалярного потенциала в гамильтониан (8) не влияет на гамильтониан поверхностных состояний (12). Следовательно, поверхностные андреевские состояния не рассеиваются на немагнитных (“скалярных”) примесях.

Мы рассчитали численно спектр поверхностных состояний в приближении сильной связи. Для этого

была рассмотрена система толщиной в 200 слоев, которые сложены вдоль направления Oz . Каждый слой бесконечен в плоскости (x, y) . На границе с вакуумом ($z = 0$) поставлены нулевые граничные условия. В вычислениях мы ввели поправку $m \rightarrow m - M_2 k_z^2$, которая обеспечивает существование поверхностных андреевских состояний при $M_2 m < 0$. Спектр изображен на рис. 4. Дисперсия вдоль k_y линейна при малых импульсах, что согласуется с аналитическим результатом. Прямое вычисление спектра поверхностных состояний показывает, что андреевский спектр пересекает уровень Ферми не только при $\mathbf{k} = 0$, но и при конечном значении импульса. Подобный результат был также получен в работах [64, 67] для системы с триплетным изотропным параметром порядка $\hat{\Delta}_2$.

6. Вывод функционала ГЛ. Здесь мы приведем краткий вывод функционала ГЛ из микроскопической теории. Более подробно данный вывод описан в работах [68, 69]. Рассмотрим систему с гамильтонианом \hat{H}_0 . В базисе Намбу $\Phi(k) = [\psi(k), -is_y \psi^*(-k)]$, где $k = (i\omega, \mathbf{k})$, функция Грина для нормального состояния имеет блочно-диагональный вид $\hat{G}_0^{-1} = \text{diag}[i\omega - \hat{H}_0(\mathbf{k}), i\omega + s_y \hat{H}_0^*(-\mathbf{k})s_y]$, где верхний блок соответствует электронам, а нижний – дыркам. Сверхпроводящая часть в данном базисе имеет следующую структуру, $\hat{\Sigma}_\Delta = \hat{\Delta}^\dagger \tau_+ + \hat{\Delta}^\dagger \tau_-$, где $\hat{\Delta}$ – сверхпроводящий параметр порядка, не зависящий от импульса. Полное действие для сверхпроводящей системы записывается как:

$$2S = - \sum_{\omega, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \Phi^\dagger(k) \hat{G}_0^{-1} \Phi(k) + \sum_{\omega, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \Phi^\dagger \left(k + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \hat{\Sigma}_\Delta \Phi \left(k - \frac{\mathbf{q}}{2} \right).$$

В данном действии импульс k связан с относительным положением куперовской пары в пространстве, в то время как импульс $q = (0, \mathbf{q})$ связан с движением центра масс куперовской пары. Свободная энергия такой системы может быть выражена через функциональный интеграл относительно фермионных операторов ψ и ψ^\dagger

$$F = -T \ln \int (D\psi D\psi^\dagger) e^{-S[\psi, \psi^\dagger]}. \quad (13)$$

После интегрирования по грассмановым переменным ψ и ψ^\dagger получается стандартная формула для свободной энергии $F = -T \sum \ln \det G^{-1} = -T \sum \text{Tr} \ln G^{-1}$, где $G^{-1} = G_0^{-1} - \hat{\Sigma}_\Delta$ – это полная функция Грина системы. Логарифм от полной функции Грина можно представить в виде $T \ln G^{-1} = F_0 - T \ln(1 - G_0 \hat{\Sigma}_\Delta)$, где $F_0 = \ln G_0^{-1}$ – это вклад нормальной части в свободную энергию. Вблизи критической температуры

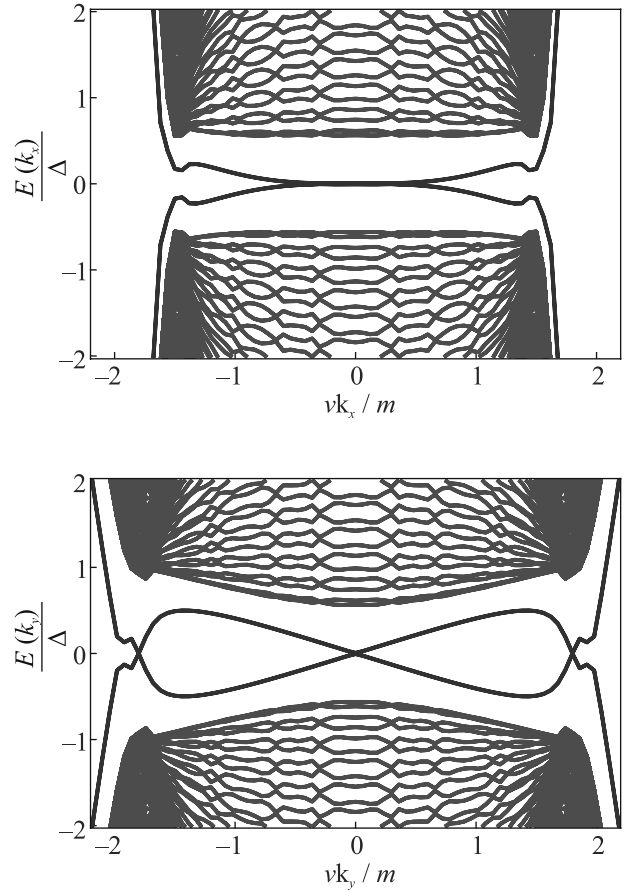


Рис. 4. (Цветной онлайн) Энергия уровней нематического сверхпроводника в модели сильной связи. Расчет проведен для системы толщиной в 200 слоев вдоль Oz . В плоскости Oxy система считалась бесконечной. Синим цветом выделены энергии состояний, локализованных на поверхности. Объемные состояния, не локализованные на поверхности, выделены зеленым цветом. Из-за конечной толщины пленки можно наблюдать размерные эффекты в спектре объемных состояний. При расчете считалось, что $\mu = 20\Delta_4$, $m = -10\Delta_4$, $t_z = 1$, $\lambda_1 m^2 = 0.3v^3$. Для расчетов использован параметр $M_2 = 12\Delta_4$, см. [19]. На верхней панели показан срез энергии вдоль k_x , на нижней панели дан срез вдоль k_y . Расчеты проведены для ориентации параметра порядка $\hat{\Delta}_{4y}$

сверхпроводящая часть свободной энергии становится малой, что позволяет разложить логарифм по степеням $\hat{\Sigma}_\Delta$. Разложение функционала до $O(\hat{\Sigma}_\Delta^4)$ при $q = 0$ дает однородную часть свободной энергии:

$$F - F_0 = \frac{T}{2} \sum_{\omega, \mathbf{k}} \text{Tr} [(G_0(\mathbf{k}) \hat{\Sigma}_\Delta)^2 + (G_0(\mathbf{k}) \hat{\Sigma}_\Delta)^4]. \quad (14)$$

Свободную энергию ГЛ (14) для топологического сверхпроводника с независимым от координат век-

торным параметром порядка $\Delta = (\Delta_{4x}, \Delta_{4y}) = (\Delta_x, \Delta_y)$ удобно переписать в виде [68]:

$$F_h = F_0 + A(|\Delta_x^2| + |\Delta_y^2|) + B_1(|\Delta_x^2| + |\Delta_y^2|)^2 + B_2|\Delta_x\Delta_y^* - \Delta_x^*\Delta_y|^2, \quad (15)$$

где $A \propto T - T_c < 0$ и $B_1 > 0$ – коэффициенты ГЛ. Коэффициент B_2 может быть как положительным, так и отрицательным [57, 69]. Из условия минимума свободной энергии (15) следует, что при $B_2 > 0$ основное состояние соответствует действительному параметру порядка $\Delta = \Delta_0(\cos\phi, \sin\phi)$, непрерывно вырожденному по углу нематичности ϕ , где $\Delta_0^2 = -A/2B_1$. Такое состояние называется нематическим. Если $B_2 < 0$, то мы имеем так называемое хиральное состояние. Минимуму функционала (15) соответствует комплексный параметр порядка $\Delta = \Delta_{ch}(1, \pm i)$, где $\Delta_{ch}^2 = -A/2(B_1 + B_2)$. Для устойчивости сверхпроводящего состояния необходимо, чтобы сумма $B_1 + B_2$ была положительной.

Отметим, что уравнение (15) симметрично относительно вращения на произвольный угол вокруг оси z . Наличие C_3 симметрии учитывается дополнительным слагаемым $F_6 \propto (\Delta_-^* \Delta_+)^3 + (\Delta_+^* \Delta_-)^3$ в функционале ГЛ [57], где $\Delta_{\pm} = \Delta_x \pm i\Delta_y$. Данное слагаемое понижает вращательную симметрию U_1 до C_3 . В результате в зависимости от значения параметров, либо $(\Delta_x, 0)$, либо $(0, \Delta_y)$ становится наиболее выгодным параметром порядка при $B_2 > 0$.

Прямые вычисления в модели с закрытой эллиптической поверхностью Ферми показывают, что $B_2 > 0$ и основным состоянием является нематическая фаза [69, 70]. Мы нашли коэффициент B_2 в модели без гексагональных искажений и показали его на рис. 5. При низком уровне химического потенциала поверхность Ферми является закрытой и коэффициент $B_2 > 0$. Увеличение химического потенциала приводит к переходу Лифшица, при котором поверхность Ферми становится открытой. Как видно из рис. 5, нематическая фаза остается наиболее выгодной при умеренных значениях химического потенциала. Дальнейшее увеличение химического потенциала приводит к тому, что поверхность Ферми становится цилиндрической и коэффициент B_2 становится отрицательным. Это означает, что происходит фазовый переход из нематической в хиральную фазу [69–71]. В двумерной системе, где поверхность Ферми является окружностью, хиральная фаза также выгоднее нематической [55]. Напомним, что в реальном образце поверхность Ферми, скорее всего, является открытой [42, 43].

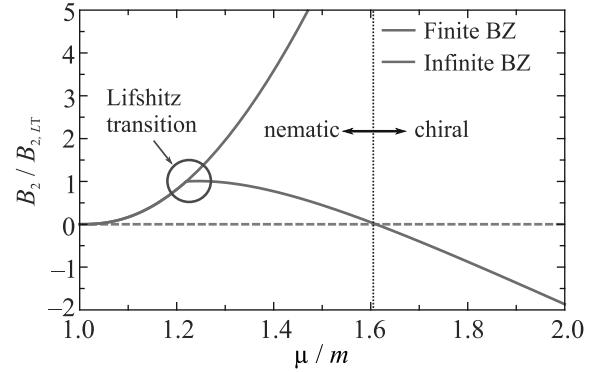


Рис. 5. (Цветной онлайн) На рисунке показана зависимость коэффициента B_2 от химического потенциала. Пунктирная оранжевая линия показывает зависимость в модели с закрытой зоной Бриллюэна. Сплошная оранжевая линия – в модели с открытой зоной Бриллюэна. При $\mu/m \approx 1.2$ происходит переход Лифшица. При $\mu/m \approx 1.6$ в модели с закрытой зоной Бриллюэна коэффициент B_2 меняет знак и система переходит из нематической фазы в хиральную

Чтобы учесть вклады в функционал ГЛ, связанные с изменением параметра порядка в пространстве и влиянием электромагнитного поля, мы должны учесть члены порядка $O(\sum_{\Delta}^2 q^2)$ и получить “градиентный” вклад F_D в свободную энергию ГЛ. Как обычно, F_D содержит калибровочно-инвариантные градиенты $D_i = -i\hbar\partial_i + (2e/c)A_i$ во втором порядке (A_i – компоненты вектор-потенциала), которые разрешены симметрией кристалла. Поскольку кристаллы типа допированного Bi_2Se_3 имеют ось вращательной симметрии вдоль направления z и гексагональную симметрию в плоскости x, y , то выражение для “неоднородной” части свободной энергии может быть представлено в виде [68]:

$$F_D = J_1(D_i\Delta_a)^*(D_i\Delta_a) + J_2\epsilon_{ij}\epsilon_{ab}(D_i\Delta_a)^*(D_j\Delta_b) + J_3(D_z\Delta_a)^*D_z\Delta_a - |(D_x\Delta_y)|^2 + J_4[|(D_x\Delta_x)|^2 + |(D_y\Delta_y)|^2 - |(D_y\Delta_x)|^2 - |(D_x\Delta_y)|^2 + (D_x\Delta_x)^*(D_y\Delta_y) + (D_y\Delta_x)^*(D_x\Delta_y) + (D_x\Delta_y)^*(D_y\Delta_x) + (D_y\Delta_y)^*(D_x\Delta_x)], \quad (16)$$

где J_i – феноменологические коэффициенты разложения, ϵ_{ij} – символы Леви-Чивита, $\{a, b\} \in \{x, y\}$, $\{i, j\} \in \{x, y\}$ и по повторяющимся индексам происходит суммирование. Полная свободная энергия ГЛ F равна сумме $F = F_h + F_D$. Варьируя эту сумму по компонентам параметра порядка и вектор-потенциала, мы получаем систему уравнений ГЛ [68].

7. Связь сверхпроводимости с деформацией и намагниченностью. Векторная природа параметра порядка предполагает возможность

возникновения так называемых дополнительных (subsidiary) параметров порядка в теории ГЛ. Кристаллическая решетка топологических изоляторов типа Bi_2Se_3 обладает симметрией точечной группы D_{3d} . Эта группа имеет дополнительные симметрии E_g и A_{2g} , которым соответствуют билинейные формы [69]:

$$\begin{aligned} E_g &\rightarrow (N_1, N_2) = (|\Delta_x|^2 - |\Delta_y|^2, \Delta_x \Delta_y^* + \Delta_x^* \Delta_y), \\ A_{2g} &\rightarrow M_0 = \Delta_x \Delta_y^* - \Delta_x^* \Delta_y. \end{aligned} \quad (17)$$

Нематической сверхпроводящей фазе с действительным параметром порядка соответствует двумерное представление E_g группы D_{3d} , в котором $M_0 = 0$. Хиральной фазе, у которой $\Delta_x = \pm i \Delta_y$, соответствует представление A_{2g} с $N_{1,2} = 0$. Как было указано в работе [69], наличие таких дополнительных параметров порядка приводит в рамках теории ГЛ к связи сверхпроводимости с тензором деформации u_{ik} в плоскости (x, y) и поперечной зеэмановской намагниченностью M_z . Действительно, во втором порядке по параметру порядка мы можем записать два дополнительных вклада в функционал ГЛ, которые обладают необходимыми симметриями:

$$\begin{aligned} F_u &= g_N(u_{xx} - u_{yy})(|\Delta_x|^2 - |\Delta_y|^2) + \\ &+ 2g_N u_{xy}(\Delta_x \Delta_y^* + \Delta_x^* \Delta_y), \end{aligned} \quad (18)$$

$$F_M = -2ig_M M_z (\Delta_x \Delta_y^* - \Delta_x^* \Delta_y). \quad (19)$$

Здесь $g_{N,M}$ – соответствующие коэффициенты теории ГЛ. Полный функционал теории ГЛ имеет вид:

$$F = F_h + F_D + F_u + F_M. \quad (20)$$

Итак, нематическая сверхпроводимость связана с деформацией, а хиральная – с намагниченностью. При переходе в сверхпроводящее состояние это приводит к возникновению спонтанной деформации и намагниченности [54] соответственно. Энергия деформации в (x, y) плоскости для гексагонального кристалла может быть записана в виде [72]: $F_{\text{def}} = \kappa_1 u^2 + \kappa_2 \text{Tr}^2(u_{ik})$, где $\mathbf{u} = (u_{xx} - u_{yy}, 2u_{xy}) = u(\cos 2\beta, \sin 2\beta)$, $\text{Tr}(u_{ik}) = u_{xx} + u_{yy}$, $\kappa_{1,2}$ – соответствующие упругие модули.

С микроскопической точки зрения, влияние деформации на сверхпроводящие свойства связано с изменением поверхности Ферми нормального состояния. Полная классификация возможных слагаемых в гамильтониане нормального состояния, возникающих из-за слабой деформации решетки, дана в работе [73]. Одним из эффектов продольной деформации $u_{xx} - u_{yy}$ является появление выделенного направления. Появляются добавки к компонентам скорости

Ферми вдоль и поперек направления деформации $vk_x \rightarrow (v + \delta v)k_x$, $vk_y \rightarrow (v - \delta v)k_y$, где $\delta v \propto u_{xx} - u_{yy}$. Это означает, что электронная нематичность, которая возникла в нормальном состоянии из-за деформации решетки, определяет направление нематичности сверхпроводящего состояния.

В нематической фазе $F_M = 0$. Тогда, минимизируя сумму $F_h + F_u + F_{\text{def}}$, мы получим [54], что в этой фазе возникает спонтанная деформация u_{sp} , а параметр порядка перенормируется:

$$u_{\text{sp}} = \frac{(-1)^n g_N A}{4B_1 \kappa_1 - g_N^2}, \quad (21)$$

$$\Delta = \frac{-A}{2(B_1 - g_N^2/4\kappa_1)} [\cos(\beta - \pi n/2), \sin(\beta - \pi n/2)],$$

где $n \in \mathbb{Z}$. Вектор деформации \mathbf{u} параллелен вектору нематичности, если $g_N > 0$ и антипараллелен, если $g_N < 0$. Для устойчивости нематического состояния необходимо, чтобы $B_1 - g_N^2/4 > 0$. Спонтанная деформация порядка 10^{-7} наблюдалась в сверхпроводящих образцах Bi_2Se_3 , допированных ниобием и медью [41]. Эта деформация уменьшалась с ростом температуры и исчезала при переходе в нормальное состояние, как это и предсказывает уравнение (21), поскольку $A \propto T - T_c$.

В хиральной фазе $F_u = 0$. Соответственно, в этом случае не возникает спонтанной деформации, зато появляется поперечная спонтанная намагниченность M_{sp} . Минимизируя сумму $F_h + F_M + aM_z^2$, получим [54]:

$$M_{\text{sp}} = \frac{g_M A}{2[(B_1 + B_2)a - g_M^2]}. \quad (22)$$

Для устойчивости хирального состояния необходимо, чтобы $(B_1 + B_2)a - g_M^2 > 0$. Хиральное состояние вырождено по направлению намагниченности и знаку хиральности $\Delta = \Delta(1, \pm i)$. Спонтанная намагниченность в сверхпроводящем состоянии в допированных стронцием образцах Bi_2Se_3 наблюдалась в эксперименте [30]. Намагниченность пропала при переходе в нормальное состояние.

Выше мы полагали, что приложенное магнитное поле равно нулю и образец не деформирован внешней силой. Легко понять, что приложенное магнитное поле меняет фазу параметра порядка. Тогда исходно нематический сверхпроводник смещается в область хирального состояния. Напротив, если деформировать исходно хиральный сверхпроводник, то наличие у параметра порядка большой фазы невыгодно. То есть, внешняя деформация должна смещать исходно хиральную систему в область нематичности.

Такие процессы подробно проанализированы в работе [54].

Очевидно, что внешняя деформация снимает вырождение параметра порядка. Так, если $g_N(u_{xx} - u_{yy}) > 0$, то из уравнения (18) видно, что в основном состоянии $\Delta = \Delta(0, 1)$. Если $g_N(u_{xx} - u_{yy}) < 0$, то $\Delta = \Delta(1, 0)$. Другими словами, смена знака деформации меняет направление нематичности на 90° .

8. Деформация решетки и анизотропия второго критического поля. Одним из ярких и экспериментально наблюдаемых эффектов, возникающих из-за связи нематической сверхпроводимости и деформации, является анизотропия второго критического поля H_{c2} в плоскости (x, y) в деформированных образцах [37, 39, 68]. Интерес к этому эффекту связан, во-первых, с тем, что эта анизотропия весьма значительна, она достигает значения 4–5 даже при малых деформациях образца ($u_{xx} \sim 10^{-4}$). Во-вторых, ось анизотропии поворачивается на 90° при смене знака деформации, что можно считать ярким подтверждением векторной природы сверхпроводящего параметра порядка.

Пусть образец однородно деформирован вдоль оси x , а приложенное магнитное поле H составляет угол θ с осью x . Найдем зависимость $H_{c2}(\theta)$. Как обычно при вычислении H_{c2} , мы полагаем, что поле в образце однородно и равно внешнему полю. Тогда вектор-потенциал можно выбрать в виде $\mathbf{A} = Hz(\sin \theta, -\cos \theta, 0)$, а в функционале ГЛ оставить только слагаемые второго порядка по Δ . При приближении магнитного поля к H_{c2} в зависимости от параметров сверхпроводника, возможны два варианта исчезновения нематической сверхпроводимости: либо обе компоненты параметра порядка обращаются в нуль в точке перехода [68], либо в сильном поле выживает только одна компонента, которая обращается в нуль в точке перехода [37]. Согласно результатам, приведенным в предыдущем разделе, реализуется второй сценарий, если деформация не мала. Более того, полученная в этом случае зависимость $H_{c2}(\theta)$ лучше описывает эксперимент. Если $g_N(u_{xx} - u_{yy}) < 0$, то согласно [37] имеем $\Delta = (0, \Delta)$. Проварьируем в рассматриваемой геометрии сумму $F_h + F_D + F_u$ по Δ . В результате получим линейризованное уравнение ГЛ, которое при учете деформации имеет вид [37]:

$$- [A + g_N(u_{xx} - u_{yy})] \Delta = [(J_1 + J_4 \cos 2\theta)(D_x \sin \theta - D_y \cos \theta)^2] \Delta. \quad (23)$$

Если $g_N(u_{xx} - u_{yy}) > 0$, то $\Delta = (\Delta, 0)$, что, как можно убедиться, соответствует замене $\theta \rightarrow \theta + \pi/2$ в уравнении (23). Как и в случае обычного сверхпроводника,

правую часть этого уравнения можно рассматривать как гамильтониан для гармонического осциллятора, а верхнее критическое поле может быть получено по аналогии с его основным энергетическим уровнем. В результате имеем [37]:

$$H_{c2}(\theta) = H_{c2}(0) \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \theta + \Gamma \sin^2 \theta}} & g_N(u_{xx} - u_{yy}) < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\sin^2 \theta + \Gamma \cos^2 \theta}} & g_N(u_{xx} - u_{yy}) > 0, \end{cases} \quad (24)$$

где $H_{c2}(0) = -c(A + g_N u_{xx})/2e\sqrt{J_3(J_1 + J_4)}$, $\Gamma = (J_1 - J_4)/(J_1 + J_4)$. На рисунке 6 показана экспериментально измеренная зависимость $H_{c2}(\theta)$, полученная в работе [39]. Эксперимент и теоретическая зависимость (24) практически совпадают, если положить $\Gamma = 20$. При этом ось анизотропии поля $H_{c2}(\theta)$ поворачивается на 90° при смене деформации сжатия на растяжение. Полученное в работе [68] выражение для $H_{c2}(\theta)$ для случая, когда в нуль при переходе в нормальное состояние обращаются одновременно обе компоненты параметра порядка, отличается от (24). Однако эти зависимости качественно схожи (см. синий пунктир на рис. 6).

9. Спиновые вихри. Еще одной интересной особенностью нематических сверхпроводников, которая связана со взаимодействием сверхпроводимости и деформации, является возможность наблюдения в них так называемых спиновых вихрей [71]. Параметр порядка в рассматриваемых здесь материалах, соответствует классу симметрии DIII, которой, например, также обладает сверхтекучий гелий ^3He в В-фазе. Как показывают и эксперимент, и теория, в этой фазе сверхтекучего гелия существуют спиновые вихри [74–76]. Для простоты рассмотрим деформируемый внешней силой цилиндрический образец. Тогда в цилиндрических координатах r, φ, z тензор деформации можно представить в виде [72]: $u_{xx} - u_{yy} = u(r, z) \cos \varphi$ и $2u_{xy} = u(r, z) \sin \varphi$. Характерный масштаб изменения u порядка размера образца L , а параметр порядка изменяется в пространстве на длине когерентности ξ , которая, естественно, много меньше L . Поэтому вдали от сердцевин вихря мы можем считать, что параметр порядка зависит от координат только параметрически, $\Delta[u(r, z)]$, а вблизи сердцевин мы можем пренебречь вкладом деформации. Следуя стандартной процедуре, мы минимизируем свободную энергию и получаем два уравнения ГЛ на компоненты параметра порядка. Решая эти уравнения, мы приходим к выводу, что в системе могут существовать спиновые вихри двух типов [71]. Вихрь типа I возникает, если $g_N u(r, z) > 0$, и имеет структуру $\Delta_I = \Delta_I(r, z)(\cos \varphi, \sin \varphi)$. Вихрь ти-

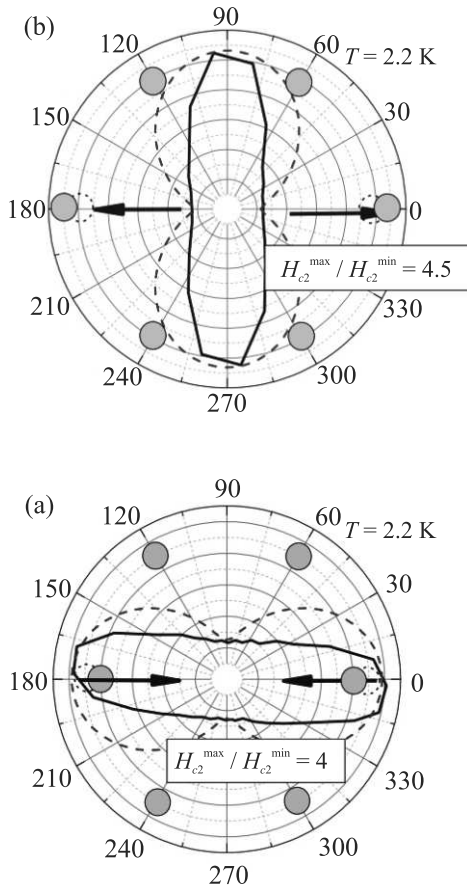


Рис. 6. (Цветной онлайн) Сплошная линия – экспериментально измеренная зависимость $H_{c2}(\theta)$ в полярных координатах для двух монокристаллических образцов $\text{Sr}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ из работы [39]. (а) – Образец с деформацией сжатия, (б) – образец с деформацией растяжения. Деформация $u_{xx} \approx 0.02\%$ возникла в процессе роста образцов и измерялась с помощью рентгеноструктурного анализа. Пунктиром показана зависимость $H_{c2}(\theta)$, вычисленная с помощью уравнения (15) из работы [68]. Расчет по формуле (24) при соответствующем выборе параметра Γ практически совпадает с экспериментальной кривой

па II возникает, если $g_N u(r, z) < 0$, и имеет структуру $\Delta_{II} = \Delta_{II}(r, z)(-\sin \varphi, \cos \varphi)$. Величина $\Delta_{I,II}(r, z)$ обращается линейно в нуль при $r \rightarrow 0$. Тип спиновое вихря меняется в зависимости от знака деформации, т.е. при смене сжатия ($u < 0$) на растяжение ($u > 0$). Так как параметр порядка является векторным полем, то для него можно вычислить параметр завихренности $P = \oint_C \mathbf{n} \cdot d\mathbf{r} / 2\pi$, где C – это замкнутый контур с единичным радиусом, охватывающий центр вихря, $d\mathbf{r} = (dx, dy)$ – это приращение вдоль контура, $\mathbf{n} = \Delta_i / \Delta_i(r, z)$ – это направление параметра порядка. Для вихря типа I (рис. 7а) $P = 0$, в то время как для вихря типа II (рис. 7б) $P = 1$ [71].

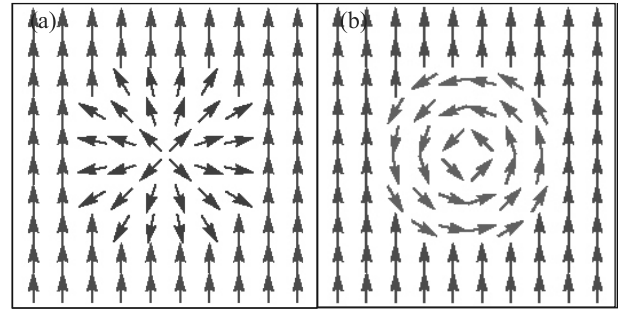


Рис. 7. (Цветной онлайн) На рисунке показано направление параметра порядка в спиновых вихрях разных типов. (а) – структура параметра порядка для вихря I-го типа. (б) – Структура параметра порядка для вихря II-го типа

Из уравнений ГЛ можно получить, что в сердцевине спиновое вихря параметр порядка обращается в нуль [71]. Следовательно, спиновый вихрь является топологическим дефектом. На таких дефектах в топологических сверхпроводниках могут локализоваться фермионы Майораны [3]. Для того чтобы проанализировать такую возможность – можно воспользоваться уравнениями Боголюбова–де Жена (8), в которых параметр порядка имеет координатную зависимость, соответствующую спиновому вихрю одного из двух типов [71]. Спиновый вихрь можно создать в уравнениях (8) с помощью преобразования [74, 77]

$$e^{-is_z[\varphi+(\nu-1)\pi/4]} \Delta \sigma_y s_x \tau_x e^{is_z[\varphi+(\nu-1)\pi/4]}, \quad (25)$$

где $\nu = 0$ для спиновое вихря типа I и $\nu = 1$ для типа II. Видно, что спиновый вихрь создает завихренность в спиновом пространстве \mathbf{s} , в то время как вихрь Абрикосова создает завихренность в массовом пространстве (электроны и дырки) τ [74]. Решения на нулевой энергии являются фермионами Майораны. Решая уравнение $H_{\text{BdG}}(k_j \rightarrow -i\nabla_j)\psi_{MF}(r, \varphi) = 0$, можно получить, что вблизи кора вихря типа I локализованы майорановские состояния. Поскольку наша система инвариантна относительно обращения времени, то эти состояния образуют так называемые пары Майораны–Краммерса. В случае вихря типа II такие локализованные состояния отсутствуют.

Как мы сказали ранее, рассматриваемая система принадлежит DIII классу симметрии, так как присутствуют симметрии электрон-дырочного сопряжения $\hat{\Xi} = s_y \tau_y K$ и по обращению ко времени $\hat{T} = is_y K$. В этом случае можно определить Z_2 , топологический инвариант, который связан с симметрией по обращению времени [78, 77]

$$Z_2 = \prod_{\mathbf{K}} \text{Pf} [w(\mathbf{K})] / \sqrt{\det w(\mathbf{K})}, \quad (26)$$

где Pf – это пфаффин, элементы кососимметричной матрицы $w_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_i(\mathbf{k}) | \hat{T} | u_j(\mathbf{k}) \rangle$ вычислены в симметричных относительно симметрии по обращению времени точках $\mathbf{K} = (k_x, k_y)$ в усеченной зоне Бриллюэна, $u_i(\mathbf{k})$ – это собственные вектора гамильтониана (8) при $k_z = 0$. Данный Z_2 индекс принимает следующие значения

$$\begin{aligned} Z_2 &= 1 \quad \text{для } \nu = 0, \text{ тип I,} \\ Z_2 &= -1 \quad \text{для } \nu = 1, \text{ тип II.} \end{aligned} \quad (27)$$

10. Связь сверхпроводимости и магнетизма. Парамагнетизм Паули куперовских пар. Нетривиальная связь нематического параметра порядка с магнетизмом определяет необычный отклик такого сверхпроводника в магнитном поле. Рассмотрим сверхпроводник около критической температуры во внешнем зеемановском поле $\mathbf{H} \parallel Oz$. Будем рассматривать поле как возмущение $\Sigma_H = \mu_B \beta H s_z$, где μ_B – магнетон Бора, а β – g-фактор Ланде. Для простоты мы опустим взаимодействие поля с электронной системой в антиферромагнитном канале [56]. Это возмущение можно включить в функционал ГЛ по процедуре, описанной в разделе 6. Мы можем найти минимум свободной энергии $F_h + F_M(M_z \rightarrow \mu_B \beta H) - \chi_0 (\mu_B \beta H)^2 / 2$ в заданном внешнем поле H . Вторая производная равновесной свободной энергии по полю даст нам зеемановскую восприимчивость системы χ . Данная восприимчивость в нематической и хиральной фазах соответственно равна

$$\chi_{ns} = \chi_0 + \frac{2g_M^2}{B_2}, \quad \chi_{cs} = \chi_0 + \frac{g_M^2}{4(B_1 + B_2)}. \quad (28)$$

Здесь первый член описывает парамагнетизм Паули нормальной фазы, а второй член описывает вклад в восприимчивость от куперовских пар. В работе [56] мы вычислили коэффициенты ГЛ из микроскопической теории и нашли вклад в восприимчивость от парамагнетизма куперовских пар. Для простоты мы считали, что в системе нет гексагональных искажений поверхности Ферми. Полученная зависимость $\Delta\chi = \chi - \chi_0$ изображена на рис. 8. Падение восприимчивости до 0 при $\mu/m \approx 1.4$ происходит потому, что в этой точке обращается в нуль коэффициент g_M . Около фазового перехода из нематической в хиральную фазу коэффициент B_2 оказывается малым, что приводит к расходимости зеемановской восприимчивости. Данная особенность может быть использована для обнаружения фазового перехода. Отметим, что

в модели с бесконечной зоной Бриллюэна коэффициент $B_2 > 0$ и система всегда остается в нематической фазе, а восприимчивость остается непрерывной.

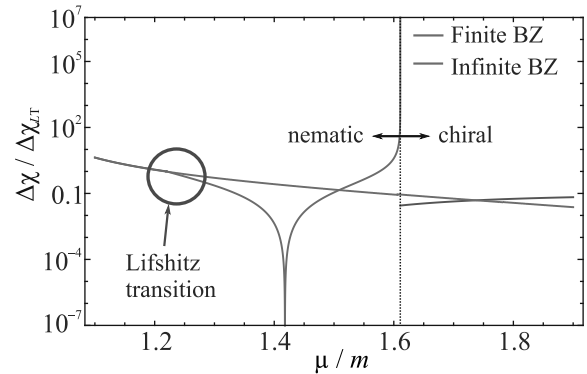


Рис. 8. (Цветной онлайн) Скачок зеемановской восприимчивости между сверхпроводящей и нормальной фазами $\Delta\chi = \chi - \chi_0$, нормированный на его значение $\Delta\chi_{LT}$ в точке перехода Лифшица как функция безразмерного химического потенциала μ/m в модели с фактором Ланде $\beta = -5.3$, см. [19]. Сплошная оранжевая кривая соответствует модели с конечной зоной Бриллюэна (ЗБ) в нематической фазе. Сплошная красная кривая соответствует модели с конечной зоной Бриллюэна в хиральной фазе. Оранжевая пунктирная кривая соответствует модели с бесконечной зоной Бриллюэна. Зеленым кружком обозначен переход Лифшица. Вертикальная синяя пунктирная линия показывает переход между нематической и хиральной фазами, где коэффициент $B_2 = 0$

Плотность спина в системе выражается через полную функцию Грина как $S_z = -T \sum_{\omega, \mathbf{k}} \int \text{Tr}[\hat{G}s_z]$. Мы раскладываем функцию Грина $\hat{G} \approx \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Delta}_4 \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Delta}_4 \hat{G}_0 \hat{\Delta}_4 \hat{G}_0$ по степеням сверхпроводящего параметра порядка, и находим в главном порядке: $S_z = -2ig_M(\Delta_x^* \Delta_y - \Delta_x \Delta_y^*)$. Параметр $\Delta_x^* \Delta_y - \Delta_x \Delta_y^*$ отвечает за спиновый дисбаланс куперовских пар. Если параметр порядка действительный, то спиновая плотность равна нулю, а количество куперовских пар со спином вверх и вниз одинаково. Прямые вычисления [56] показывают, что при включении зеемановского поля параметр $\Delta_x^* \Delta_y - \Delta_x \Delta_y^* \propto H$. Соответственно, спиновая плотность, возникающая из-за дисбаланса между спинами куперовских, становится равной $S_z = g_M^2 \mu_B H / 2B_2 \sim k_F^3 \beta^2 (\mu_B H / \mu) (T_c / \mu)^2$. Такой спиновый дисбаланс снижает энергию системы в магнитном поле аналогично парамагнетизму Паули электронов. Поэтому мы называем этот эффект парамагнетизмом Паули куперовских пар.

Как и обычные сверхпроводники, нематические сверхпроводники в низких магнитных полях являют-

ся диамагнетиками из-за эффекта Мейсснера [61, 79]. Мы ожидаем, что в массивных образцах мейсснеровский диамагнетизм будет преобладать над парамагнетизмом. Однако при определенных условиях парамагнитная часть магнитной восприимчивости может доминировать.

Рассмотрим, например, тонкую вдоль оси Ox или Oy пленку толщиной $d \ll \lambda$, где $\lambda \sim 10^4 \text{ \AA}$ – лондоновская глубина проникновения [34], и пусть магнитное поле направлено в плоскости пленки вдоль оси Oz . Такая геометрия была использована для нахождения предела Клогстона [80, 81]. Диамагнитную мейсснеровскую восприимчивость можно оценить по обычной формуле $\chi_M = -d^2/48\pi\lambda^2$. Тогда парамагнетизм Паули куперовских пар будет наблюдаем, если $|\chi_M/\Delta\chi_{ns}| = (B_2/96\pi g_M^2)(d/\lambda)^2 \leq 1$. Поскольку толщина пленки d должна быть как минимум больше, чем постоянная решетки в плоскости $a = 4.14 \text{ \AA}$ [82], то коэффициент $(d/\lambda)^2$ может иметь величину до 10^{-6} . Отметим, что в настоящее время уже выращены высококачественные пленки Bi_2Se_3 [83, 84].

В работе [34] сверхпроводящий порошок $\text{Nb}_{0.25}\text{Bi}_2\text{Se}_3$ был исследован методом рассеяния мюонов ($\mu - SR$). В отличие от эксперимента [31], обнаружено, что система не имеет спонтанного магнитного момента. Однако авторы работы [34] показали, что в сверхпроводящей фазе появляется дополнительный парамагнитный отклик. Возможно, они наблюдали парамагнетизм Паули триплетных куперовских пар. В то же время, измерения магнитной восприимчивости массивного монокристалла $\text{Nb}_{0.25}\text{Bi}_2\text{Se}_3$ показали обычный сильный диамагнитный отклик [34].

Р. Ш. Акзянов и Д. А. Хохлов выражают благодарность Российскому научному фонду, грант # 22-72-00032, за счет которого написаны главы 1–9. Секция 10, посвященная парамагнетизму Паули куперовских пар, выполнена Д. А. Хохловым при финансировании стипендией президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам # СП-437.2022.5. Также Д. А. Хохлов благодарит за поддержку фонд развития теоретической физики и математики БАЗИС.

1. S. Yonezawa, *Condensed Matter* **4**, 2 (2018).
2. F. S. Bergeret, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1321 (2005).
3. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057(2011).
4. C. Kallin, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 042501 (2012).

5. V. P. Mineev, *Physica B Condens. Matter* **171**, 138 (1991).
6. L. Jiao, S. Howard, S. Ran, Z. Wang, J. O. Rodriguez, M. Sigrist, Z. Wang, N. P. Butch, and V. Madhavan, *Nature* **579**, 523 (2020).
7. S. R. Julian, in *Handbook of Superconductivity*, CRC Press, Boca Raton, Florida (2021), p. 316.
8. L. Zhao, C. A. Belvin, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, N. P. Armitage, and D. Hsieh, *Nat. Phys.* **13**, 250 (2017).
9. M. Sigrist and K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 239 (1991).
10. X. Gong, M. Kargarian, A. Stern, D. Yue, H. Zhou, X. Jin, V. M. Galitski, V. M. Yakovenko, and J. Xia, *Sci. Adv.* **3**, e1602579 (2017).
11. V. P. Mineev, *Phys. Rev. B* **76**, 212501 (2007).
12. L. Fu and E. Berg, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 097001 (2010).
13. A. G. Lebed and O. Sepper, *JETP Lett.* **111**, 239 (2020).
14. R. P. Singh, A. D. Hillier, B. Mazidian, J. Quintanilla, J. F. Annett, D. M. Paul, G. Balakrishnan, and M. R. Lees, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 107002 (2014).
15. E. R. Schemm, W. J. Gannon, C. M. Wishne, W. P. Halperin, and A. Kapitulnik, *Science* **345**, 190 (2014).
16. L.-H. Hu, X. Wang, and T. Shang, *Phys. Rev. B* **104**, 054520 (2021).
17. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **66**, 522 (1997).
18. A. P. Schnyder, P. M. R. Brydon, and C. Timm, *Phys. Rev. B* **85**, 024522 (2012).
19. C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. J. Zhang, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **82**, 045122 (2010).
20. L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008).
21. A. Kamashev and I. A. Garifullin, *JETP Lett.* **113**, 194 (2021).
22. R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 077001 (2010).
23. C. Beenakker, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4**, 113 (2013).
24. K. Matano, M. Kriener, K. Segawa, Y. Ando, and G. Qing Zheng, *Nature Phys.* **12**, 852 (2016).
25. R. Tao, Y.-J. Yan, X. Liu, Z.-W. Wang, Y. Ando, Q.-H. Wang, T. Zhang, and D.-L. Feng, *Phys. Rev. X* **8**, 041024 (2018).
26. L. Andersen, Z. Wang, T. Lorenz, and Y. Ando, *Phys. Rev. B* **98**, 220512 (2018).
27. S. Yonezawa, K. Tajiri, S. Nakata, Y. Nagai, Z. Wang, K. Segawa, Y. Ando, and Y. Maeno, *Nature Phys.* **13**, 123 (2016).
28. Y. Pan, A. M. Nikitin, G. K. Araizi, Y. K. Huang, Y. Matsushita, T. Naka, and A. de Visser, *Sci. Rep.* **6**, 28632 (2016).
29. M. P. Smylie, K. Willa, H. Claus, A. E. Koshelev, K. W. Song, W.-K. Kwok, Z. Islam, G. D. Gu, J. A. Schneeloch, R. D. Zhong, and U. Welp, *Sci. Rep.* **8**, 7666 (2018).

30. P. Neha, P.K. Biswas, T. Das, and S. Patnaik, *Phys. Rev. Materials* **3**, 074201 (2019).
31. Y. Qiu, K.N. Sanders, J. Dai, J.E. Medvedeva, W. Wu, P. Ghaemi, T. Vojta, and Y.S. Hor, arXiv:1512.03519 (2015).
32. T. Asaba, B.J. Lawson, C. Tinsman, L. Chen, P. Corbae, G. Li, Y. Qiu, Y.S. Hor, L. Fu, and L. Li, *Phys. Rev. X* **7**, 011009 (2017).
33. M.P. Smylie, K. Willa, H. Claus, A. Snezhko, I. Martin, W.-K. Kwok, Y. Qiu, Y.S. Hor, E. Bokari, P. Niraula, A. Kayani, V. Mishra, and U. Welp, *Phys. Rev. B* **96**, 115145 (2017).
34. D. Das, K. Kobayashi, M.P. Smylie, C. Mielke, T. Takahashi, K. Willa, J.-X. Yin, U. Welp, M. Z. Hasan, A. Amato, H. Luetkens, and Z. Guguchia, *Phys. Rev. B* **102**, 134514 (2020).
35. S. Sasaki, M. Kriener, K. Segawa, K. Yada, Y. Tanaka, M. Sato, and Y. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 217001 (2011).
36. N. Levy, T. Zhang, J. Ha, F. Sharifi, A. A. Talin, Y. Kuk, and J. A. Stroschio, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 117001 (2013).
37. J. Shen, W.-Y. He, N.F.Q. Yuan, Z. Huang, C. w. Cho, S.H. Lee, Y.S. Hor, K.T. Law, and R. Lortz, *npj Quantum Mater.* **2**, 59 (2017).
38. A. Y. Kuntsevich, M. A. Bryzgalov, V. A. Prudkoglyad, V.P. Martovitskii, Y.G. Selivanov, and E. G. Chizhevskii, *New J. Phys.* **20**, 103022 (2018).
39. A. Y. Kuntsevich, M. A. Bryzgalov, R.S. Akzyanov, V.P. Martovitskii, A. L. Rakhmanov, and Y. G. Selivanov, *Phys. Rev. B* **100**, 224509 (2019).
40. M.I. Bannikov, R.S. Akzyanov, N.K. Zhurbina, S.I. Khaldeev, Y.G. Selivanov, V.V. Zavyalov, A.L. Rakhmanov, and A. Y. Kuntsevich, *Phys. Rev. B* **104**, L220502 (2021).
41. C. w. Cho, J. Shen, J. Lyu, O. Atanov, Q. Chen, S.H. Lee, Y.S. Hor, D. J. Gawryluk, E. Pomjakushina, M. Bartkowiak, M. Hecker, J. Schmalian, and R. Lortz, *Nature communications* **11**, 1 (2020).
42. E. Lahoud, E. Maniv, M.S. Petrushevsky, M. Naamneh, A. Ribak, S. Wiedmann, L. Petaccia, Z. Salman, K.B. Chashka, Y. Dagan, and A. Kanigel, *Phys. Rev. B* **88**, 195107 (2013).
43. A. Almoalem, I. Silber, S. Sandik, M. Lotem, A. Ribak, Y. Nitzav, A.Y. Kuntsevich, O. A. Sobolevskiy, Y.G. Selivanov, V. A. Prudkoglyad, M. Shi, L. Petaccia, M. Goldstein, Y. Dagan, and A. Kanigel, *Phys. Rev. B* **103**, 174518 (2021).
44. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Nature Phys.* **5**, 438 (2009).
45. L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266801 (2009).
46. K. Kuroda, M. Arita, K. Miyamoto, M. Ye, J. Jiang, A. Kimura, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, H. Iwasawa, T. Okuda, K. Shimada, Y. Ueda, H. Namatame, and M. Taniguchi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 076802 (2010).
47. R. S. Akzyanov and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **97**, 075421 (2018).
48. R. S. Akzyanov and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **99**, 045436 (2019).
49. J. Wang, K. Ran, S. Li, Z. Ma, S. Bao, Z. Cai, Y. Zhang, K. Nakajima, S. Ohira-Kawamura, P. Čermák, A. Schneidewind, S. Y. Savrasov, X. Wan, and J. Wen, *Nat. Commun.* **10**, 2802 (2019).
50. P.M.R. Brydon, S. Das Sarma, H.-Y. Hui, and J.D. Sau, *Phys. Rev. B* **90**, 184512 (2014).
51. X. Wan and S.Y. Savrasov, *Nat. Commun.* **5**, 4144 (2014).
52. V. Moskalenko, *Fiz. Metal. Metalloved* **8**, 2518 (1959).
53. R. S. Akzyanov, D. A. Khokhlov, and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **102**, 094511 (2020).
54. R. S. Akzyanov, A. V. Kapranov, and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **102**, 100505(R) (2020).
55. L. Chirolli, *Phys. Rev. B* **98**, 014505 (2018).
56. D. A. Khokhlov and R. S. Akzyanov, *Phys. Rev. B* **104**, 214514 (2021).
57. L. Fu, *Phys. Rev. B* **90**, 100509(R) (2014).
58. A.P. Mackenzie, R.K.W. Haselwimmer, A.W. Tyler, G.G. Lonzarich, Y. Mori, S. Nishizaki, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 161 (1998).
59. Y. Dalichaouch, M.C. de Andrade, D.A. Gajewski, R. Chau, P. Visani, and M.B. Maple, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3938 (1995).
60. P. Anderson, *J. Phys. Chem. Solids* **11**, 26 (1959).
61. R. S. Akzyanov, *Phys. Rev. B* **104**, 224502 (2021).
62. D. C. Cavanagh and P. M. R. Brydon, *Phys. Rev. B* **101**, 054509 (2020).
63. D. Dentelski, V. Kozii, and J. Ruhman, *Phys. Rev. Research* **2**, 033302 (2020).
64. T.H. Hsieh and L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 107005 (2012).
65. L. Hao and T.-K. Lee, *J. Phys. Condens. Matter* **27**, 105701 (2015).
66. L. Hao and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **96**, 144512 (2017).
67. L. Hao and T. K. Lee, *Phys. Rev. B* **83**, 134516 (2011).
68. J.W.F. Venderbos, V. Kozii, and L. Fu, *Phys. Rev. B* **94**, 094522 (2016).
69. J.W.F. Venderbos, V. Kozii, and L. Fu, *Phys. Rev. B* **94**, 180504(R) (2016).
70. L. Chirolli, F. de Juan, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **95**, 201110(R) (2017).
71. R. S. Akzyanov and A.L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **104**, 094511 (2021).
72. L.D. Landau, E.M. Lifšic, E.M. Lifshitz, A.M. Kosevich, and L.P. Pitaevskii, *Theory of elasticity*, Elsevier, Amsterdam (1986), v. 7.
73. M. R. Brems, J. Paaske, A. M. Lunde, and M. Willatzen, *New J. Phys.* **20**, 053041 (2018).
74. G.E. Volovik, *The universe in a helium droplet*, OUP Oxford, Oxford (2003), v. 117.

75. G. E. Volovik, JETP Lett. **111**, 582 (2020).
76. G. E. Volovik, JETP Lett. **115**, 276 (2022).
77. C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).
78. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).
79. J. Schmidt, F. Parhizgar, and A. M. Black-Schaffer, Phys. Rev. B **101**, 180512(R) (2020).
80. A. M. Clogston, Phys. Rev. Lett. **9**, 266 (1962).
81. H. Nam, H. Chen, T. Liu, J. Kim, C. Zhang, J. Yong, T. R. Lemberger, P. A. Kratz, J. R. Kirtley, K. Moler, P. W. Adams, A. H. MacDonald, and C.-K. Shih, Proceedings of the National Academy of Sciences **113**, 10513 (2016).
82. A. Cavallin, V. Sevriuk, K. N. Fischer, S. Manna, S. Ouazi, M. Ellguth, C. Tusche, H. L. Meyerheim, D. Sander, and J. Kirschner, Surface Science **646**, 72 (2016).
83. Z. Xu, X. Guo, M. Yao, H. He, L. Miao, L. Jiao, H. Liu, J. Wang, D. Qian, J. Jia, W. Ho, and M. Xie, Adv. Mater. **25**, 1557 (2013).
84. H. Li, S. Yu, Y. Li, A. I. Channa, H. Ji, J. Wu, X. Niu, and Z. Wang, Appl. Phys. Lett. **115**, 041602 (2019).

Theoretical investigation of the lead-free K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) double perovskite compounds using first principle calculation

D. Behera¹⁾, S. K. Mukherjee¹⁾

Department of Physics, Birla Institute of Technology, Mesra, 835215 Ranchi, India

Submitted 25 August 2022

Resubmitted 3 September 2022

Accepted 5 September 2022

DOI: 10.31857/S123456782220006X, EDN: kobird

The need for energy has grown dramatically over the past few years, which has intensified efforts to find non-fossil fuel and unconventional energy sources. As a result, emphasis is diverted to seeking for renewable energy sources on a global scale [1]. Through the direct conversion of thermal to electrical energies, thermoelectricity could be employed to produce renewable energy that allows for the efficient utilization of waste heat [2]. The efficiency of thermoelectric (TE) material is governed by the figure of merit (ZT), as $ZT = (S^2\sigma T)/(\kappa_e + \kappa_l)$, where S is the Seebeck coefficient, σ – electrical conductivity, T – absolute temperature, and κ_e , κ_l are electronic and lattice contributions to the thermal conductivity [3]. Due to their outstanding potential for contemporary applications, double perovskites have garnered a lot of attention. The double perovskite has the formula $A_2BB'X_6$, where X can be an oxide or a halide, the B and B' sites are inhabited by transition or non-transition cations and the A site is occupied by a rare-earth or alkaline-earth metal. A variety of unique double perovskite compounds have recently been developed. The double perovskite compounds with A – such as K, Cs, Rb, B^+ cation – as Cu, Ag, In, B^{3+} cation – as Bi, Sb , and X – as Cl, Br, I were thoroughly described in this context, revealing their optoelectronics and transport properties [4]. However, based on literature review, halide double perovskite K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) have not been thoroughly examined. In this study, first-principles computations were employed to investigate the structural, elastic, electrical, optical, and thermoelectric properties of K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds.

The K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds possess a cubic face-centered ($Fm\bar{3}m$) atomic configuration and space group 225. The constituent atoms K, In, Bi , and X are located at $(0.25, 0.25, 0.25)$, $(0.5, 0.5, 0.5)$, $(0, 0, 0)$, and $(y, 0, 0)$, respectively ($y = 0.247$) [5]. The negative

formation energy of the studied K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds (-1.63 eV/atom, -1.40 eV/atom) confirms its stability [6]. When designing solids for industrial manufacturing, mechanical properties such as the second-order elastic constants (C_{ij}), bulk modulus (B), shear modulus (G), Pugh ratio (B/G), and anisotropy (A) must be taken into account. The computed Poisson ratio ν for K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds is 0.27, 0.32, showing that materials are ductile by nature. Using various potentials, including Perdew-Burke-Ernzerhof – Generalized Gradient Approximation (PBE-GGA) and modified Becke Johnson Potential (mBJ), we estimated the electronic band structure of K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds. Bandgap about 1.81, 1.29 eV were obtained using mBJ. Optical properties were studied in terms of real and imaginary dielectric function, refractive index and reflectivity, etc. No absorption has been observed between 1.41 and 1.17 eV that would indicate the optical bandgap is about equivalent to the electrical bandgap. The variation in peak intensities results from light photons reflecting off the surface of the material at various angles. The various peaks are observed for absorption coefficient $\alpha(\omega)$ plot that resulted due to material absorption [7]. Absorption peaks in the visible spectrum show that the investigated substances have strong absorption performance.

The variation of S with temperature is shown in Fig. 1a, which suggests p type behavior with a positive magnitude of the Seebeck coefficient. For the investigated K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds at room temperature, the magnitude of S was determined to be $252 \mu V/K$ and $248 \mu V/K$, respectively. Furthermore, an ideal TE material has Seebeck coefficient more than $200 \mu V/K$ suggesting good thermoelectric response of investigated compounds. The σ/τ ratio for $K_2InBiCl_6$ is $0.13 \times 10^{18} (\Omega ms)^{-1}$ at 200 K and becomes $9.01 \times 10^{18} (\Omega ms)^{-1}$ at 800 K. For $K_2InBiBr_6$ it is $0.35 \times 10^{18} (\Omega ms)^{-1}$ at 200 K and reaches $9.35 \times 10^{18} (\Omega ms)^{-1}$ when temperature goes to 800 K. For

¹⁾e-mail: sanat_aphy@yahoo.co.in

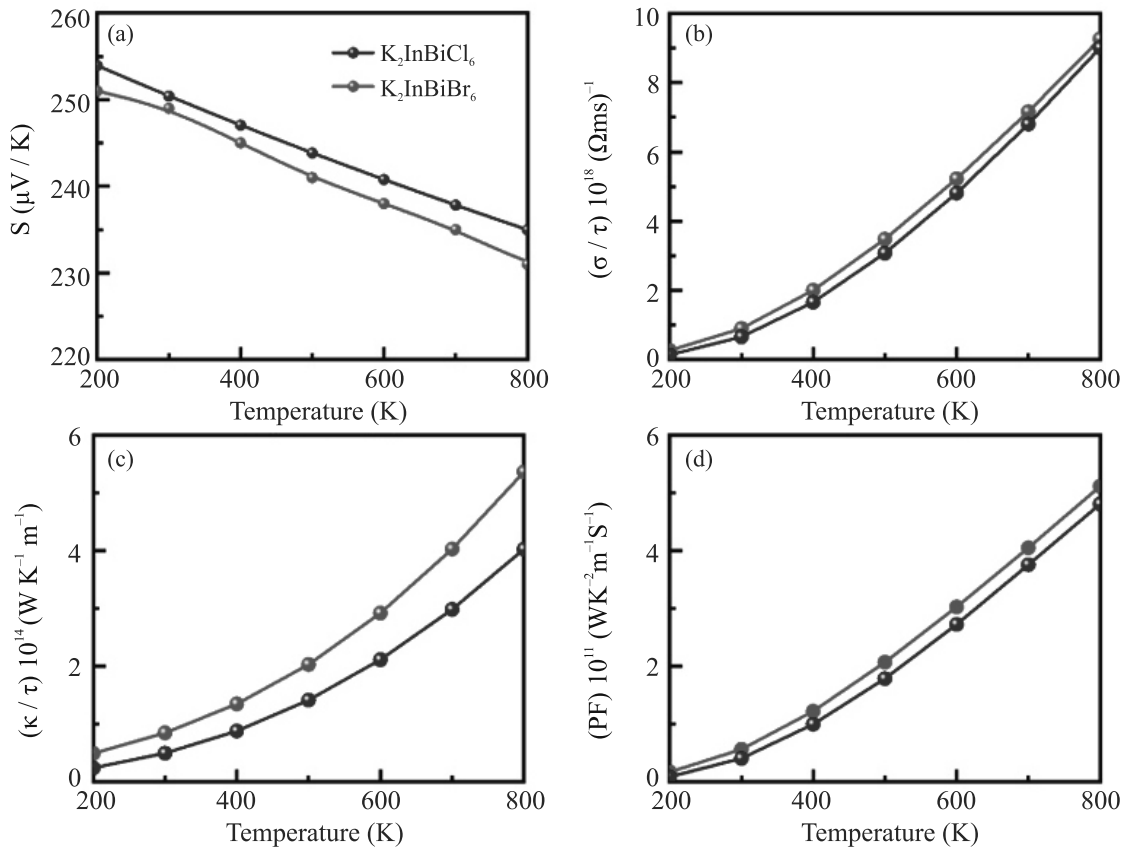


Fig. 1. (Color online) Computed values of (a) – Seebeck coefficient (S), (b) – electrical conductivity (σ/τ), (c) – thermal conductivity (κ/τ), (d) – power factor “PF” ($S^2\sigma$) with temperature for K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds

K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) compounds, the computed PF at 800 K is determined to be $4.81 \times 10^{11} W/K^2ms$ and $5.13 \times 10^{11} W/K^2ms$. Such a high-power factor at high temperatures signifies that the compounds are suitable for thermoelectric device applications.

This is an excerpt of the article “Theoretical investigation of the lead-free K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) double perovskite compounds using first principle calculation”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601944

1. M. H. Elsheikh, D. A. Shnawah, M. F. M. Sabri, S. B. M. Said, M. H. Hassan, M. B. A. Bashir, and M. Mohamad, *Renew. Sustain. Energy Rev.* **30**, 337 (2014).

2. H. J. Goldsmid and H. J. Goldsmid, *The physics of thermoelectric energy conversion*, Morgan & Claypool Publishers (2017), Online ISBN: 978-1-6817-4641-8, Print ISBN: 978-1-6817-4640-1.
3. N. Mingo, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2652 (2004).
4. X. Zhou, J. Jankowska, H. Dong, and O. V. Prezhdo, *Journal of Energy Chemistry* **27**, 637 (2018).
5. M. Luo, Y. Zhao, A. Yang, Q. Chen, X. Zhang, and J. Luo, *Solid State Commun.* **352**, 114812 (2022).
6. M. W. Iqbal, M. Manzoor, N. A. Noor, I. Rehman, N. Mushahid, S. Aftab, Y. M. Alanazi, H. Ullah, and A. M. Afzal, *Sol. Energy* **239**, 234 (2022).
7. M. Houari, B. Bouadjemi, A. Abbad, T. Lantri, S. Haid, W. Benstaali, M. Matougui, and S. Bentata, *JETP Lett.* **112**, 364 (2020).

Природа структурной асимметрии в двойных квантовых ямах HgTe¹⁾

А. В. Иконников^{a,2)}, С. С. Криштопенко^{a,b)}, Л. С. Бовкун^{c,d)}, Н. Н. Михайлов^{e)}, С. А. Дворецкий^{e)}, Б. А. Пио^{c,3)},
М. Потемски^{c,3)}, М. Орлита^{c,f,3)}, Ф. Терп^{b,3)}, В. И. Гавриленко^{d)}

^a Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^b Laboratoire Charles Coulomb (L2C), UMR 5221 CNRS-Université de Montpellier, F-34095 Montpellier, France

^c LNCMI-EMFL, CNRS UPR3228, Université Grenoble Alpes, Université Toulouse, INSA-T, 38042 Grenoble and Toulouse, France

^d Институт физики микроструктур РАН – филиал Федерального исследовательского центра
Институт прикладной физики РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

^e Институт физики полупроводников им. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^f Institute of Physics, Charles University in Prague, CZ-12116 Prague, Czech Republic

Поступила в редакцию 5 сентября 2022 г.

После переработки 5 сентября 2022 г.

Принята к публикации 15 сентября 2022 г.

Исследованы концентрационные зависимости расщепления основных линий магнитопоглощения в нелегированных двойных квантовых ямах HgTe/CdHgTe *p*-типа. Анализ расщепления линий магнитопоглощения, выполненный на основе самосогласованных расчетов зонной структуры, позволил конкретизировать природу структурной асимметрии в двойных квантовых ямах HgTe/CdHgTe, а также определить вклады, обусловленные встроенным электрическим полем, различием толщин квантовых ям и порядком их расположения в структуре. Различие экспериментальных величин расщепления “нулевых” уровней Ландау, извлеченных из анализа двух типов линий, указывает на влияние многочастичных эффектов на энергии переходов между уровнями Ландау.

DOI: 10.31857/S1234567822200071, EDN: komjtk

1. Введение. Квантовые ямы (КЯ) HgTe/CdHgTe обладают целым рядом замечательных физических свойств, которые меняются при изменении параметров КЯ, таких как ее толщина d_{QW} и состав барьеров. В частности, при толщинах, больших критической $d_c \sim 6.3$ нм, происходит инверсия зон (дырочноподобная подзона $H1$ оказывается выше по энергии, чем электроноподобная подзона $E1$), что приводит к возникновению краевых проводящих состояний и появлению фазы топологического изолятора в соответствии с Z_2 -классификацией [1, 2]. При критической толщине КЯ наблюдается бесщелевая фаза: ширина запрещенной зоны обращается в нуль, а законы дисперсии электронов и дырок вблизи центра зоны Бриллюэна описываются безмассовым уравнением Дирака [3, 4], что позволяет рассматривать такие КЯ как “одно-

долинный” аналог графена [5, 6]. Переход между различными фазами может происходить не только при изменении параметров КЯ HgTe, но и за счет изменения давления [7], температуры [7–11], или даже степени беспорядка [12].

Двойные квантовые ямы (ДКЯ) HgTe/CdHgTe демонстрируют более богатую картину фазовых состояний, появление которой обусловлено туннельной непрозрачностью разделительного барьера для дырочноподобных состояний в подзонах $H1$ и $H2$ в центре зоны Бриллюэна и туннельной прозрачностью для электроноподобных подзон $E1$ и $E2$ [13]. В зависимости от ширины КЯ и туннельного барьера в центре зоны Бриллюэна могут реализовываться различные случаи расположения подзон. В частности, последовательность $E2 - E1 - H1 - H2$ (в сторону уменьшения энергии) соответствует нормальной зонной структуре и фазе тривиального изолятора, в то время, как последовательность $E2 - H1 - H2 - E1$ приводит в симметричной ДКЯ к бесщелевому спектру (рис. 1а), подобного спектру двуслойного графена. Наконец, в широких ДКЯ может ре-

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

²⁾ e-mail: antikon@physics.msu.ru

³⁾ В. А. Пиот; М. Potemski; М. Orlita; Ф. Терпе.

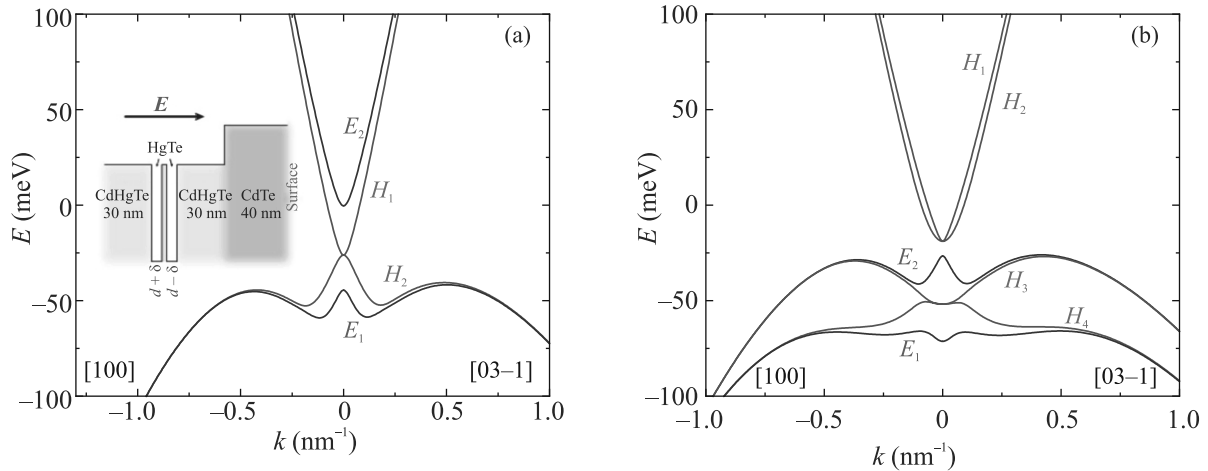


Рис. 1. (Цветной онлайн) Законы дисперсии для образцов А (а) и В (б) в отсутствие электрического и магнитного полей ($\mathbf{E} = 0$, $\mathbf{B} = 0$). На вставке: схематичное изображение двойной КЯ HgTe/CdHgTe с покрывным слоем CdTe

ализовываться фаза изолятора с “двойной инверсией” (рис. 1b), соответствующей упорядочению подзон $H_1 - H_2 - E_2 - \dots - E_1$. Одновременная инверсия в парах подзон $H_1 - E_1$, $H_2 - E_2$ приводит к возникновению двух пар краевых состояний, в спектре которых открывается щель, обусловленная *спин-зависимым* туннелированием через разделительный барьер CdHgTe [13]. Недавно было предсказано, что фаза изолятора с “двойной инверсией” в ДКЯ HgTe/CdHgTe является топологическим изолятором второго порядка с нульмерными (0D) угловыми состояниями, возникающими при определенных кристаллических ориентациях двух смыкающихся краев образца [14].

Отличительной особенностью ДКЯ HgTe/CdHgTe является возможность управления фазовыми переходами с помощью изменения степени структурной асимметрии системы, вызванной наличием электрического поля [13] (например, вследствие одностороннего легирования барьеров [15]) или из-за неодинаковости КЯ [16]. Так, структурная асимметрия в фазе “двуслойного графена” приводит к открытию щели в спектре двумерных (2D) состояний и возникновению фазы топологического изолятора с парой бесщелевых состояний, возникающих на краях образца [1, 13]. Кроме этого, поскольку щель в спектре одномерных (1D) краевых состояний в фазе изолятора с “двойной инверсией” определяется туннелированием между двумя КЯ, которое, в свою очередь, зависит от внешнего электрического поля, изменение структурной асимметрии системы также открывает возможность перестройки спектра 1D краевых и 0D угловых состояний в ДКЯ HgTe/CdHgTe [14].

Отметим, что увеличивая степень структурной асимметрии, можно не только управлять шириной щелей в спектрах 1D и 2D состояний, но и изменять упорядочение подзон, осуществляя, таким образом, топологический фазовый переход, управляемый внешним электрическим полем.

Поскольку при росте реальных гетероструктур технически невозможно сохранить идеальную симметричность гетеропотенциала, ДКЯ HgTe/CdHgTe всегда обладают некоторой степенью структурной асимметрии, вызванной как различием профилей двух КЯ, так и наличием асимметричного “встроенного” электрического поля, обусловленного пространственным разделением носителей заряда в слоях HgTe и доноров/акцепторов в покрывающем слое и внешних барьерах. В недавних работах [16–18] было показано, что в гетероструктурах с ДКЯ HgTe/CdHgTe, с ориентацией поверхности [013], действительно, имеется встроенное электрическое поле, величина которого оценивалась в несколько кВ/см. В работе [17] экспериментально наблюдалось дополнительное расщепление основных линий магнитопоглощения, обусловленных переходами с “нулевых” уровней Ландау⁴ с номерами -2 (см. вставки на рис. 2), расщепленных за счет структурной асимметрии ДКЯ HgTe/CdHgTe. В работе [18] указанное разделение уровней Ландау с номерами -2 привело к появлению “возвратного” квантового эффекта Холла (КЭХ), который становился “нормальным”

⁴Понятие “нулевой” уровень Ландау” для уровня с номером -2 обусловлено классификацией уровней, принятой в рамках эффективной 2D модели Берневига–Хьюза–Чжана [1, 2] (см. также [19, 20]).

при подаче на затвор напряжения +3В. Было показано, что это напряжение приводило к “нейтрализации” структурной асимметрии и слиянию уровней с номерами –2. Наконец, в работе [16] измерения температурных зависимостей локального сопротивления от напряжения на затворе в ДКЯ HgTe в фазе “двуслойного графена” демонстрировали поведение, характерное именно для фазы топологического изолятора с шириной запрещенной зоны 11 мэВ. По оценкам авторов работы [16], такая величина щели в спектре 2D состояний может быть объяснена присутствием встроенного электрического поля 13 кВ/см.

В настоящей работе проводится детальный анализ спектров магнитопоглощения ДКЯ HgTe/CdHgTe *p*-типа, измеренных в сильных магнитных полях при изменении концентрации носителей заряда за счет эффекта остаточной фотопроводимости. На основе анализа расщеплений основных линий магнитопоглощения в рамках самосогласованных расчетов зонной структуры конкретизируется природа структурной асимметрии ДКЯ HgTe/CdHgTe и оцениваются вклады, обусловленные встроенным электрическим полем, различием толщин КЯ и порядка их расположения в структуре. Различие экспериментальных величин расщепления “нулевых” уровней Ландау, извлеченных из анализа двух типов линий, указывает на значительное влияние многочастичных эффектов на энергии переходов между уровнями Ландау.

2. Методы исследований. Исследуемые образцы были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующих подложках GaAs (013) [21]. На подложке выращивался буфер, состоящий из 30 нм слоя ZnTe и толстого (5 мкм) релаксированного слоя CdTe. Активная часть структуры состояла из нижнего барьера Hg_{1-x}Cd_xTe толщиной 30 нм, двух КЯ HgTe толщиной *d*, разделенных туннельно-прозрачным барьером Hg_{1-x}Cd_xTe толщиной *t*, и верхнего барьера Hg_{1-x}Cd_xTe толщиной 30 нм. Поверх всей структуры выращивался покровный слой CdTe толщиной 40 нм. Структуры специально не легировались. Параметры структур представлены в табл. 1. Типичные значения подвижности при низких температурах составляли около 5×10^4 см²/В·с.

Спектры магнитопоглощения были измерены в Национальной лаборатории сильных магнитных полей в Гренобле (Франция) с использованием фурье-спектрометра Bruker Vertex 80v в магнитных полях до 30 Тл. Часть измерений выполнялась с помощью резистивного соленоида, часть – с помощью сверхпроводящего соленоида. В последнем случае мак-

Таблица 1. Параметры исследованных структур. В скобках приведены параметры, скорректированные по данным предыдущих магнитооптических исследований [17]

Образец	d_{QW} , нм	t_{bar} , нм	x	p_{dark} , 10^{11} см ⁻²
A (150218)	6.5 (6.3)	3.0 (2.8)	0.71	1.3
B (150219)	8.4 (8.4)	3.0 (2.8)	0.67	2.2

симальное значение поля составляло 11 Тл. В качестве источника излучения использовался глобар, в качестве детектора – композитный кремниевый болометр. Измерения проводились со спектральным разрешением 8 см⁻¹ в геометрии Фарадея при температурах 1.6 и 4.2 К с использованием различных светоделителей и фильтров, что позволяло покрыть диапазон энергий квантов до 350 мэВ. Концентрация носителей в образце варьировалась либо с помощью подсветки синим светом за счет эффекта остаточной фотопроводимости (ОФП) [22, 23], либо при изменении условий эксперимента за счет фоновой подсветки образца излучением глобара. Более подробная информация о деталях эксперимента представлена в [17].

Концентрация носителей заряда в структурах определялась при помощи магнитотранспортных измерений в тех же условиях, что и при измерениях спектров магнитопоглощения. Использовалась геометрия ван дер Пау. Поскольку исследуемые структуры имеют дырочный тип проводимости при низких температурах, т.е. уровень Ферми находится в валентной зоне, необходимо соблюдать осторожность при определении концентрации. В относительно слабых магнитных полях (< 2 Тл), несмотря на то, что в них наблюдаются плато КЭХ, в том числе и плато, соответствующее фактору заполнения уровней Ландау $\nu = 1$, вклад в КЭХ дает только часть дырок в центре зоны Бриллюэна [18]. Это происходит из-за пиннинга уровня Ферми на боковом максимуме валентной зоны (рис. 1), дырки в котором не дают вклад в КЭХ [24]. В то же время в сильных магнитных полях, когда уровень Ферми “привязывается” к уровням Ландау, находящимся выше бокового максимума валентной зоны, все дырки дают вклад в КЭХ, что приводит, в частности, к возвратному КЭХ в системе ДКЯ HgTe [18]. Поэтому концентрации носителей заряда в исследуемых структурах определялись по положению плато КЭХ и минимумам продольного сопротивления в сильных магнитных полях. Значения “темновых” (максимальных) концентраций дырок указаны в табл. 1. Подсветка образцов синим светом приводила к уменьшению концентрации носителей заряда.

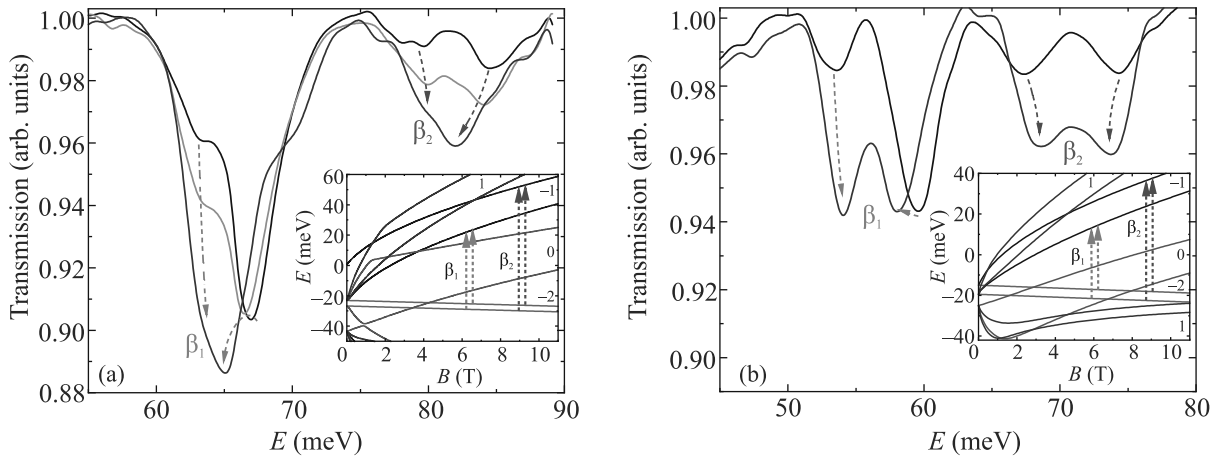


Рис. 2. (Цветной онлайн) Типичные спектры магнитопоглощения при различных условиях подсветки в образце А в магнитном поле 8.5 Тл (а) и в образце В в магнитном поле 10.25 Тл (б). Стрелками показано изменение положения линий при уменьшении концентрации дырок. На вставках показаны уровни Ландау при наличии электрического поля 5 кВ/см, вертикальными стрелками обозначены переходы, соответствующие линиям β_1 и β_2 . Детальная информация о классификации электродипольных переходов и спектральных линий, а также о нумерации уровней Ландау представлена в [17]

Для нахождения зонного спектра и уровней Ландау решались самосогласованные уравнения Пуассона и Шредингера с 8-зонным $k \cdot p$ гамильтонианом [7]. Гамильтониан позволяет корректным образом учитывать непараболичность зон, спин-орбитальное взаимодействие, а также встроенную упругую деформацию, связанную с отличием постоянных решеток HgTe и CdTe [4, 23]. Расчеты выполнялись в аксиальном приближении с учетом встроенного электрического поля. При нахождении последнего полагалось, что поставщиками носителей заряда в КЯ являются акцепторы, находящиеся на удаленных плоскостях на поверхности структуры, либо в глубине на достаточном удалении. На существенное влияние поверхностного слоя CdTe на концентрацию носителей заряда в КЯ HgTe/CdHgTe указывалось в работе [22], в которой изучался эффект ОФП. Использование аксиального приближения в данном случае оправдано, поскольку влияние возможных эффектов, связанных с отсутствием центра инверсии в кристалле и асимметрии химических связей на гетерограницах, оказывает сколь либо заметное влияние на разделение уровней Ландау -2 лишь в полях порядка 30 Тл [17]. И даже в этом случае величина этого разделения не превышает 1 мэВ.

3. Результаты и обсуждение. Типичные спектры магнитопоглощения в образцах А и В в области энергий, соответствующей “основным” переходам между уровнями Ландау с номерами -2 и -1 , представлены на рис. 2. В спектрах наблюдаются две сильные линии β_1 и β_2 , каждая из которых расщеп-

лена дополнительно. Линия β_1 соответствует переходу с “нулевых” уровней -2 на нижний уровень -1 (см. вставки на рис. 2), линия β_2 – переходу на верхний уровень -1 .

Дополнительное расщепление линий β_1 и β_2 связано со структурной асимметрией системы ДКЯ HgTe/CdHgTe, приводящей к снятию вырождения для уровней Ландау -2 . Вырождение этих уровней напрямую связано с совпадением подзон $H1$ и $H2$ при $k = 0$ в симметричных ДКЯ (см. рис. 1), и разница энергий ΔE между “нулевыми” уровнями Ландау -2 есть не что иное, как разница энергий между подзонами $H1$ и $H2$ при $k = 0$ [13]. Как уже отмечалось во Введении, эта структурная асимметрия может быть вызвана как встроенным электрическим полем, так и неодинаковостью двух КЯ. Однако, как видно из рис. 2, расщепление линий β_1 и β_2 становится меньше с уменьшением концентрации носителей заряда. Это однозначно указывает на то, что главный вклад в структурную асимметрию связан именно со встроенным электрическим полем, меняющимся при изменении концентрации дырок в ДКЯ.

Изменение интенсивностей линий в спектрах магнитопоглощения при изменении концентрации носителей заряда связано, прежде всего, с изменением населенности уровней Ландау с номером -2 . В ультраквантовом пределе ($\nu \leq 1$), для которого получены спектры магнитопоглощения, приведенные на рис. 2, уровень Ферми находится на верхнем уровне -2 . Уменьшение числа дырок на уровне Ландау эквивалентно увеличению концентрации электронов. По-

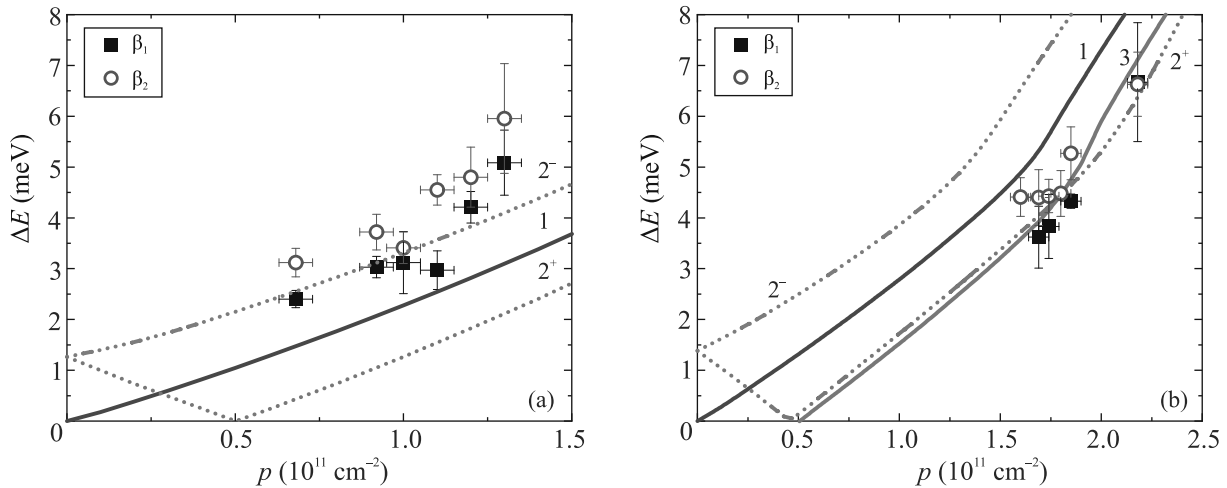


Рис. 3. (Цветной онлайн) Символы – зависимости среднего расщепления линий β_1 и β_2 от концентрации носителей заряда в ДКЯ HgTe/CdHgTe в образцах А (а) и В (б). Линии – рассчитанные зависимости расщепления ΔE между подзонами $H1$ и $H2$ при $k = 0$: 1 – КЯ одинаковой толщины, все дырки “пришли” с поверхности (справа от КЯ); 2^+ , 2^- – КЯ различной ширины, все дырки “пришли” с поверхности. Величина “неодинаковости” КЯ HgTe δ (см. вставку на рис. 1а) для образца А составляет 0.13 нм, для образца В – 0.3 нм. “+” соответствует случаю, когда более узкая КЯ находится ближе к поверхности (см. вставку на рис. 1а); 3^- – КЯ одинаковой толщины, но часть носителей ($2.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$) “пришла” слева от КЯ⁵⁾

этому при уменьшении концентрации дырок интенсивность высокоэнергетического перехода $-2 \rightarrow -1$ с нижнего уровня -2 не должна заметно меняться, а интенсивность низкоэнергетического перехода с верхнего уровня -2 должна возрастать. Это хорошо соответствует поведению компонентов линии β_1 и низкоэнергетической компоненты линии β_2 (рис. 2). В то же время причина увеличения интенсивности высокоэнергетической компоненты линии β_2 остается неясной.

Каждый спектр магнитопоглощения был аппроксимирован с помощью суммы нескольких лоренцианов (см. Дополнительный материал). Были определены положения и параметры всех линий магнитопоглощения, в том числе и линий β_1 и β_2 . Далее были определены величины расщеплений ΔE линий β_1 и β_2 и получена их зависимость от магнитного поля (см. Дополнительный материал). Поскольку никакой выраженной зависимости величин расщепления от магнитного поля не наблюдалось, было проведено усреднение всех указанных величин для заданной концентрации носителей заряда и рассматриваемого перехода.

⁵⁾ Нулевое значение расщепления при ненулевой полной концентрации дырок $5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ соответствует ситуации, когда одинаковое количество дырок “поставляется” слева и справа от КЯ. В этом случае возникающие электрические поля, направленные от КЯ в противоположные стороны, приводят к симметричному изменению профилей КЯ, и, соответственно, расщепления “нулевых” уровней Ландау -2 не возникает.

На рисунке 3 показаны зависимости указанных средних величин расщепления от концентрации дырок. В качестве погрешности указана величина стандартного отклонения. Как видно из рис. 3, имеется очевидная связь между концентрацией носителей заряда и величиной расщепления – уменьшение концентрации приводит к уменьшению расщепления. Кроме того, обращает на себя внимание тот факт, что расщепление линии β_2 во всех случаях оказывается больше расщепления линии β_1 , что особенно заметно для образца А (рис. 3а). Подобное различие в расщеплениях линий, также наблюдавшееся в работе [17], принципиально не может быть объяснено в рамках “одноэлектронного” приближения.

Для интерпретации полученных результатов были выполнены самосогласованные расчеты зонной структуры при различных значениях концентрации носителей заряда. В результате этих расчетов была получена зависимость характерной величины расщепления линий β от концентрации носителей заряда (рис. 3).

Начнем обсуждение с рассмотрения образца В (рис. 3б). Кривая 1 показывает рассчитанную зависимость величины расщепления от концентрации дырок в предположении, что все носители заряда в ДКЯ “пришли” с поверхности структуры или справа от ДКЯ (см. вставку на рис. 1а). В этом случае достигается максимальная величина встроенного электрического поля и, соответственно, максимальное расщепление при заданной концентрации для двух КЯ

одинаковой толщины. Наблюдаемый на кривой 1 перегиб при значении концентрации дырок около $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ связан с заполнением бокового максимума в валентной зоне. Как видно из рис. 1b, для образца В с “двойной инверсией”, первая валентная зона в Γ -точке зоны Бриллюэна определяется только электроноподобными состояниями ($f_E = 1$), в то время как вклад дырочноподобных состояний равен нулю ($f_H = 0$). Именно этот факт позволяет классифицировать первую валентную подзону как подзону $E2$ [25]. При удалении от точки $k = 0$ доля электроноподобных состояний f_E в первой валентной подзоне уменьшается, а доля дырочноподобных состояний f_H , наоборот, непрерывно растет из-за гибридизации с дырочноподобными H_n уровнями ($n = 1, 2, \dots$) при ненулевом квазиимпульсе. В результате с увеличением k вклад дырочноподобных состояний f_H начинает превышать вклад от электроноподобных состояний f_E , и изначально электроноподобная валентная подзона плавно трансформируется в дырочноподобную. При этом при любых значениях k выполняется условие $f_E + f_H = 1$ [25]. Поскольку в самосогласованный электростатический потенциал вносят вклад волновые функции всех заполненных состояний, то при увеличении концентрации вклад дырочноподобных состояний во “встроенное” электрическое поле также растет. Эта ситуация имеет место до тех пор, пока уровень Ферми не “касается” бокового максимума валентной подзоны, вклад электроноподобных состояний в который является доминирующим ($f_E > 0.5$) [25]. Начиная с этого момента, тенденция начинает меняться – вклад дырочноподобных состояний в электростатический потенциал начинает уменьшаться, что, в свою очередь, приводит к изменению зависимости ΔE как функции концентрации. Отметим, что подобный расчет ΔE от концентрации электронов в зоне проводимости (где нет боковых максимумов) демонстрирует плавную зависимость (см. Дополнительный материал).

Из рисунка 3b видно, что для образца В кривая 1 проходит выше экспериментальных точек. В то же время наклоны теоретической и экспериментальной зависимостей достаточно близки. Поэтому можно предположить, что основной вклад в расщепление вносит электрическое поле, вызванное разделением зарядов на поверхности и в КЯ, но существуют еще некоторые “компенсирующие” механизмы, уменьшающие расщепление. В качестве таких механизмов для образца В можно предложить неодинаковость КЯ (кривая 2^+) и наличие “поставщиков” дырок также и слева от КЯ (кривая 3) (см. вставку на рис. 1a).

Для выявления влияния первого механизма были выполнены дополнительные расчеты величины расщепления в зависимости от “неодинаковости” КЯ δ (см. вставку на рис. 1a) при различных концентрациях дырок в предположении, что все они “пришли” справа от КЯ (рис. 4b). Видно, что “неодинаковость” КЯ в случае ненулевой концентрации носителей заряда может как усиливать расщепление, так и ослаблять его. Важную роль здесь играет расположение КЯ относительно направления встроенного электрического поля. В рамках нашего предположения о том, что роль “поставщика” дырок в КЯ играет поверхность, поле направлено от КЯ к поверхности (см. вставку на рис. 1a). Это отчасти подтверждается данными работы [18], в которой приложенное к затвору положительное напряжение приводило к уменьшению расщепления. Если в такой конфигурации более широкая КЯ оказывается ближе к поверхностному слою, то при ненулевой концентрации дырок расщепление будет меньше, чем в случае нулевой концентрации, поскольку вклады от встроенного электрического поля и “неодинаковости” КЯ в структурную асимметрию будут частично компенсировать друг друга.

На рисунке 3b линиями 2^+ и 2^- показаны зависимости величины расщепления линий β от концентрации дырок с учетом “неодинаковости” КЯ $\delta = \pm 0.3 \text{ нм}$ в предположении, что все дырки “пришли” с поверхности. Указанная величина является максимальной неточностью используемой технологии молекулярно-пучковой эпитаксии и методов эллипсометрии, используемых для контроля роста структур [26, 27]. Видно, что экспериментальные значения хорошо описываются кривой 2^+ , соответствующей случаю, когда КЯ меньшей толщины находится ближе к поверхности (см. вставку на рис. 1).

Другой возможностью добиться согласия между экспериментальными данными и расчетами является предположение о том, что часть дырок в КЯ “приходит” не с поверхности, а с противоположной стороны. В этом случае отличного согласия удастся добиться при концентрации дырок, пришедших слева от КЯ, равной $2.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (кривая 3 на рис. 3b).

Несколько другая ситуация имеет место для образца А (рис. 3a). В этом случае даже максимально асимметричный профиль распределения акцепторов оказывается недостаточным для достижения согласия с экспериментальными значениями ΔE . Более того, сопоставление данных для обоих образцов показывает, что величины расщеплений, наблюдаемые в образце А, сравнимы с величинами для образца В, несмотря на то, что концентрации дырок отлича-

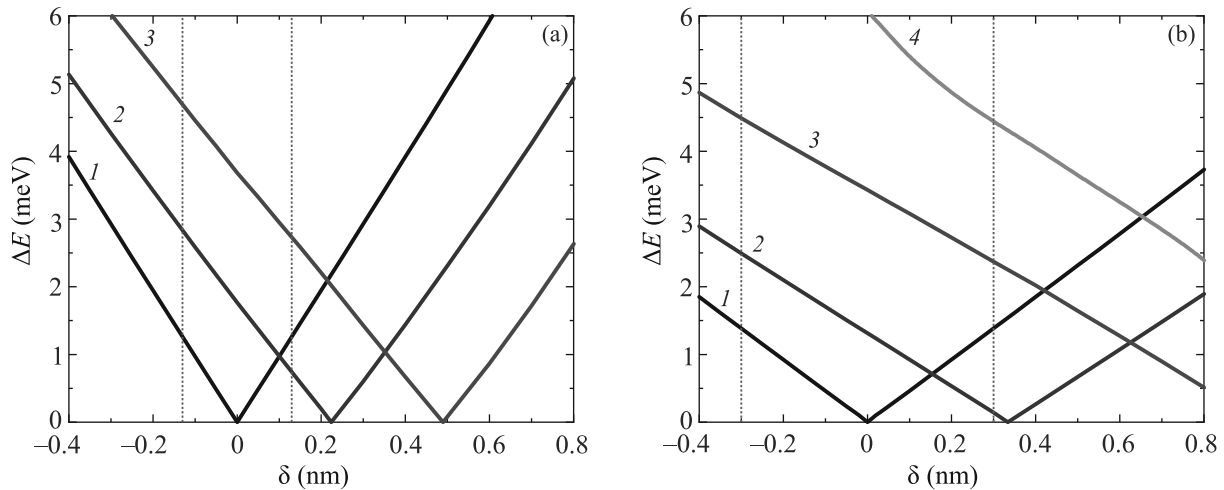


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости величины расщепления линий β от “неодинаковости” КЯ в образцах А (а) и В (b) при различных концентрациях дырок в предположении, что все дырки “пришли” с поверхности. Положительные значения δ соответствуют случаю, когда ближе к поверхности находится более узкая КЯ (см. вставку на рис. 1а). Значения концентрации дырок в КЯ для образца А: 1 – 0 см^{-2} ; 2 – $0.8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 3 – $1.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, для образца В: 1 – 0 см^{-2} ; 2 – $0.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 3 – $1.2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 4 – $1.8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Вертикальные линии указывают значения $\delta = \pm 0.13 \text{ нм}$ для образца А и $\delta = \pm 0.3 \text{ нм}$ для образца В

ются примерно в 2 раза. Таким образом можно сделать вывод, что в отличие от образца В, в образце А вклады в структурную асимметрию от встроенного электрического поля и “неодинаковости” КЯ должны усиливать друг друга. При этом особенности зонной структуры образца А, в котором подзоны $H1$ и $H2$ являются зоной проводимости и валентной зоной, соответственно, приводят к существенно большей чувствительности величины расщепления ΔE от величины δ , чем для образца В. Действительно, кривые на рис. 4а имеют заметно большую крутизну, чем на рис. 4б. Поэтому для достижения количественного соответствия между теоретическими расчетами и экспериментальной зависимостью расщепления от концентрации дырок достаточно выбрать значение $\delta = -0.13 \text{ нм}$, укладывающееся в технологическую точность используемой ростовой технологии.

Таким образом, структурная асимметрия в исследуемых образцах с ДКЯ HgTe/CdHgTe обусловлена вкладом сразу двух факторов одновременно. При этом можно сделать ряд заключений:

1. Доминирующим фактором, вызывающим расщепление линий β в спектрах магнитопоглощения, является наличие встроенного электрического поля. Указанное поле связано с пространственным разделением носителей заряда в ДКЯ и акцепторов в покрывающем слое CdTe и барьерах CdHgTe. При этом источником подавляющей части носителей является именно

акцепторы покрывающего слоя CdTe. На это указывают, во-первых, существенная зависимость величины расщепления от концентрации носителей и, во-вторых, близкие значения измеренных и рассчитанных величин расщеплений для максимально асимметричного профиля распределения акцепторов. Кроме того, ранее отмечалась доминирующая роль покрывающего слоя CdTe для эффекта остаточной фотопроводимости в ДКЯ HgTe/CdHgTe [22], за счет использования которого происходило изменение концентрации дырок в наших экспериментах.

2. Часть носителей заряда в ДКЯ может быть обусловлена наличием акцепторов в нижнем (ближайшим к подложке) барьере CdHgTe. Однако доля таких носителей заряда не может превышать 25%. Действительно, подобное распределение акцепторов должно приводить к уменьшению величины расщепления линий β при заданном значении концентрации дырок. Даже если предположить, что в образце В две КЯ максимально неодинаковы ($\delta = -0.3 \text{ нм}$) и эта неодинаковость увеличивает расщепление, то для получения хорошего согласия между экспериментальными данными и расчетами необходимо положить концентрацию носителей, пришедших слева от КЯ, равной $5 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$, что составляет 25% от характерной концентрации дырок $2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

3. Неодинаковость двух КЯ может как увеличивать, так и уменьшать расщепление линий β при заданной концентрации в зависимости от расположения КЯ относительно поверхности. Для образца А взаимное расположение КЯ можно указать однозначно (более узкая яма находится дальше от поверхности), поскольку для него даже максимального разделения зарядов между КЯ и поверхностью не позволяет достичь наблюдаемого расщепления без учета “неодинаковости”.
4. Поскольку обе рассматриваемые структуры были выращены последовательно в одном ростовом цикле, можно предположить, что степени “неодинаковости” КЯ в этих образцах должны быть сравнимы. Тогда, исходя из данных для обоих образцов, можно сделать осторожную оценку “неодинаковости” КЯ δ от -0.13 нм до $+0.3$ нм. И в этом случае доля носителей, “пришедших” в КЯ с противоположной стороны от поверхности не будет превышать 18–25 %.

Представленный выше анализ основан на само согласованных расчетах зонной структуры, в рамках которых расщепление линий магнитопоглощения β_1 и β_2 однозначно связано с расщеплением “нулевых” уровней Ландау вследствие структурной асимметрии ДКЯ HgTe/CdHgTe. Несмотря на количественное согласие между экспериментальной и теоретической зависимостью ΔE от концентрации дырок в ДКЯ, подобные расчеты, однако, не объясняют различий в величинах расщеплений линий магнитопоглощения β_1 и β_2 , особенно ярко выраженных для образца А с более узкими квантовыми ямами. Мы полагаем, что в данном случае разница в расщеплениях линий может быть связана с проявлением коллективных эффектов в магнитопоглощении (ср. с [20, 28]). Действительно, поскольку каждый переход между уровнями Ландау соответствует длинноволновой энергии магнитоплазменного возбуждения (магнитоэкситона [29, 30]), то непараболичность закона дисперсии в подзонах размерного квантования, типичная для КЯ HgTe/CdHgTe, приводит к взаимодействию магнитоплазменных мод с близкими энергиями даже в длинноволновом пределе [31–34]. Особенно выражены эффекты взаимодействия магнитоплазменных мод, связанные с многочастичным взаимодействием между носителями заряда, должны проявляться для переходов с близкими значениями энергий [20, 28]. В нашем случае это пары переходов между уровнями Ландау, отвечающих за расщепление каждой из линий β_1 и β_2 (см. рис. 2).

Необходимым условием наблюдения многочастичных эффектов во “взаимодействии” двух переходов является малость разницы их энергий по сравнению с характерным масштабом кулоновского взаимодействия в заданном магнитном поле $E_c \sim e^2/(\epsilon a_B)$, где e – заряд электрона, a_B – магнитная длина ($a_B^2 = \hbar/eB$, B – напряженность магнитного поля) и $\epsilon \sim 21$ – статическая диэлектрическая проницаемость HgTe. Очевидно, что это условие заведомо выполняется для переходов, соответствующих расщеплению каждой из линий β_1 и β_2 . Действительно, в диапазоне магнитных полей 4–30 Тл, в котором наблюдаются эти линии магнитопоглощения (см. Дополнительный материал), E_c составляет 4–11 мэВ. Отметим, что сама величина “взаимодействия” двух конкретных переходов значительно меньше E_c , поскольку также зависит от заселенностей начальных и конечных уровней, а также “перекрестных” матричных элементов кулоновского взаимодействия, рассчитанных на четырех волновых функциях уровней Ландау, определяющих рассматриваемую пару переходов [31–34]. Последний фактор является не только причиной различного вклада от многочастичного взаимодействия в расщепление двух разных линий β_1 и β_2 , но также и объясняет то, что различие в расщеплениях оказывается более выраженным в образце А с меньшими размерами КЯ.

4. Заключение. В настоящей работе были проанализированы концентрационные зависимости величин расщеплений ΔE основных линий магнитопоглощения линий β_1 и β_2 . Предложена модель структурной асимметрии в двух образцах, учитывающая асимметричное распределение акцепторов и неодинаковость ям в ДКЯ HgTe/CdHgTe, которая объясняет наблюдаемые зависимости. Анализ экспериментальных расщеплений линий, проведенный в рамках этой модели, свидетельствует, что как минимум 75 % дырок в ДКЯ связано с акцепторами покрывающего слоя CdTe. Различие экспериментальных величин расщепления “нулевых” уровней Ландау, извлеченных из анализа расщепления двух линий β_1 и β_2 , указывает на влияние многочастичных эффектов на энергии переходов между уровнями Ландау.

Работа поддержана НЦМУ “Центр фотоники”, при финансировании Министерством науки и высшего образования РФ, соглашение # 075-15-2022-316.

1. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
2. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi, and S. C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).

3. B. Buttner, C.X. Liu, G. Tkachov, E.G. Novik, C. Brune, H. Buhmann, E.M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S.C. Zhang, and L.W. Molenkamp, *Nat. Phys.* **7**, 418 (2011).
4. M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wrobel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretiskii, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, and W. Knap, *Phys. Rev. B* **86**, 205420 (2012).
5. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature (London)* **438**, 197 (2005).
6. M. Orlita and M. Potemski, *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 063001 (2010).
7. S.S. Krishtopenko, I. Yahniuk, D.B. But, V.I. Gavrilenko, W. Knap, and F. Teppe, *Phys. Rev. B* **94**, 245402 (2016).
8. S. Wiedmann, A. Jost, C. Thienel, C. Brüne, P. Leubner, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, J.C. Maan, and U. Zeitler, *Phys. Rev. B* **91**, 205311 (2015).
9. A.V. Ikonnikov, S.S. Krishtopenko, O. Drachenko et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **94**, 155421 (2016).
10. M. Marcinkiewicz, S. Ruffenach, S.S. Krishtopenko et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **96**, 035405 (2017).
11. A.M. Kadykov, S.S. Krishtopenko, B. Jouault, W. Desrat, W. Knap, S. Ruffenach, C. Consejo, J. Torres, S.V. Morozov, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, and F. Teppe, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 086401 (2018).
12. S.S. Krishtopenko, M. Antezza, and F. Teppe, *Phys. Rev. B* **101**, 205424 (2020).
13. S.S. Krishtopenko, W. Knap, and F. Teppe, *Sci. Rep.* **6**, 30755 (2016).
14. S.S. Krishtopenko, *Sci. Rep.* **11**, 21060 (2021).
15. D.B. Topalović, V.V. Arsoski, M.Ž. Tadić, and F.M. Peeters, *J. Appl. Phys.* **128**, 064301 (2020).
16. G.M. Gusev, E.B. Olshanetsky, F.G.G. Hernandez, O.E. Raichev, N.N. Mikhailov, and S.A. Dvoretzky, *Phys. Rev. B* **101**, 241302(R) (2020).
17. L.S. Bovkun, A.V. Ikonnikov, V. Ya. Aleshkin, K.V. Maremyanin, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, S.S. Krishtopenko, F. Teppe, B.A. Piot, M. Potemski, M. Orlita, and V.I. Gavrilenko, *Opto-Electronics Review* **27**, 213 (2019).
18. M.V. Yakunin, S.S. Krishtopenko, W. Desrat, S.M. Podgornykh, M.R. Popov, V.N. Neverov, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov, F. Teppe, and B. Jouault, *Phys. Rev. B* **102**, 165305 (2020).
19. M. Orlita, K. Masztalerz, C. Faugeras, M. Potemski, E.G. Novik, C. Brune, H. Buhmann, and L.W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **83**, 115307 (2011).
20. S.S. Krishtopenko, A.M. Kadykov, S. Gebert, S. Ruffenach, C. Consejo, J. Torres, C. Avogadri, B. Jouault, W. Knap, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, and F. Teppe, *Phys. Rev. B* **102**, 041404(R) (2020).
21. S. Dvoretzky, N. Mikhailov, Y. Sidorov, V. Shvets, S. Danilov, B. Wittman, and S. Ganichev, *J. Electron. Mater.* **39**, 918 (2010).
22. К.Е. Спири́н, Д.М. Гапонова, К.В. Маремьянин, В.В. Румянцев, В.И. Гавриленко, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, *ФТП* **52**, 1482 (2018).
23. L.S. Bovkun, A.V. Ikonnikov, V. Ya. Aleshkin, K.E. Spirin, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, F. Teppe, B.A. Piot, M. Potemski, and M. Orlita, *J. Phys. Condens. Matter* **31**, 145501 (2019).
24. I. Yahniuk, S.S. Krishtopenko, G. Grabecki et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **4**, 13 (2019).
25. S.S. Krishtopenko and F. Teppe, *Phys. Rev. B* **97**, 165408 (2018).
26. В.А. Шве́ц, Н.Н. Михайлов, Д.Г. Икусов, И.Н. Ужаков, С.А. Дворецкий, *Оптика и спектроскопия* **127**, 318 (2019).
27. V.V. Rumyantsev, A.A. Razova, L.S. Bovkun et al. (Collaboration), *Nanomaterials* **11**, 1855 (2021).
28. Л.С. Бовкун, А.В. Иконников, С.С. Криштопенко, В.Я. Алешкин, М.С. Жолудев, С. Руффенач, К. Консежо, Ф. Теш, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов, М. Потемски, М. Орлита, В.И. Гавриленко, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 541 (2020).
29. Ю.А. Бычков, С.В. Иорданский, Г.М. Элиашберг, *Письма в ЖЭТФ* **33**, 152 (1981).
30. C. Kallin and B.I. Halperin, *Phys. Rev. B* **30**, 5655 (1984).
31. A.H. MacDonald and C. Kallin, *Phys. Rev. B* **40**, 5795 (1989).
32. S.S. Krishtopenko, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 365602 (2013).
33. S.S. Krishtopenko, A.V. Ikonnikov, M. Orlita, Yu.G. Sadofyev, M. Goiran, F. Teppe, W. Knap, and V.I. Gavrilenko, *J. Appl. Phys.* **117**, 112813 (2015).
34. Y.A. Bychkov and G. Martinez, *Phys. Rev. B* **66**, 193312 (2002).

Электронная и спиновая структура топологических поверхностных состояний MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ и их модификация приложенным электрическим полем

А. М. Шикин⁺¹⁾, Н. Л. Зайцев*, А. В. Тарасов⁺, Т. П. Макарова⁺, Д. А. Глазкова⁺, Д. А. Естюнин⁺,
И. И. Климовских⁺

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

* Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, 450075 Уфа, Россия

Поступила в редакцию 16 августа 2022 г.

После переработки 9 сентября 2022 г.

Принята к публикации 10 сентября 2022 г.

Методами теории функционала плотности (ТФП) проведены расчеты электронной и спиновой структуры топологических поверхностных состояний (ТПС) для антиферромагнитных топологических изоляторов MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, состоящих из последовательности магнитных семислойных блоков (СБ) MnBi_2Te_4 , разделенных немагнитными пятислойными блоками (ПБ) Bi_2Te_3 . Проанализированы особенности, характерные для систем с различной терминацией поверхности (как СБ, так и ПБ) и проведено сравнение результатов теоретических расчетов с экспериментально измеренными дисперсиями электронных состояний. Показано, что при терминации поверхности магнитным СБ в структуре ТПС в точке Дирака открывается энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) порядка 35–45 мэВ, подобно MnBi_2Te_4 . При терминации поверхности немагнитным ПБ структура ТПС уже ближе к виду, характерному для Bi_2Te_3 с различным энергетическим сдвигом точки Дирака и формированием гибридных ЭЗЗ в структуре ТПС, обусловленных взаимодействием с нижележащим СБ. Проведены расчеты, показывающие возможность изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации расстояния между блоками на поверхности без принципиального изменения электронной структуры. Приложение электрического поля перпендикулярно поверхности меняет электронную и спиновую структуру ТПС и может модулировать величину ЭЗЗ в точке Дирака в зависимости от напряженности и знака приложенного поля, что может быть использовано для практических приложений.

DOI: 10.31857/S1234567822200083, EDN: koxqib

В последнее время в физике конденсированного состояния значительные усилия исследователей были направлены на интенсивное изучение особенностей электронной и спиновой структуры систем с уникальным сочетанием топологических и магнитных свойств, которые характеризуются новыми нетривиальными квантовыми эффектами, интересными для практических приложений. Одними из наиболее ярких проявлений подобных эффектов являются квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) и топологический квантовый магнитоэлектрический (МЭ) эффект, которые основаны на квантовании холловской проводимости и МЭ отклика (см., например, статьи [1–5]). Данные топологические эффекты проявляются в яркой степени в системах на основе топологических изоляторов (ТИ), в которых для реализации КАЭХ внутреннее магнит-

ное поле вводится как путем допирования ТИ магнитными примесями (см., например, [6]), так и за счет эффектов магнитного продолжения (магнитной близости) при нанесении магнитного слоя на поверхность немагнитного ТИ (см., например, [7, 8]). При этом в последнее время были также успешно синтезированы собственные магнитно-упорядоченные ТИ, в которых магнитные атомы включены непосредственно в кристаллическую структуру формируемого магнитного ТИ. Это обеспечивает упорядоченное расположение магнитных атомов внутри кристаллической решетки и позволяет существенно повысить концентрацию магнитных атомов и степень их воздействия. Одним из наиболее ярких примеров такого магнитно-упорядоченного ТИ является антиферромагнитный (АФМ) ТИ со стехиометрией MnBi_2Te_4 , на исследования электронной структуры и магнитных свойств которого в последние годы направлены значительные усилия (см., например, [9–18]). Одно-

¹⁾e-mail: ashikin@inbox.ru

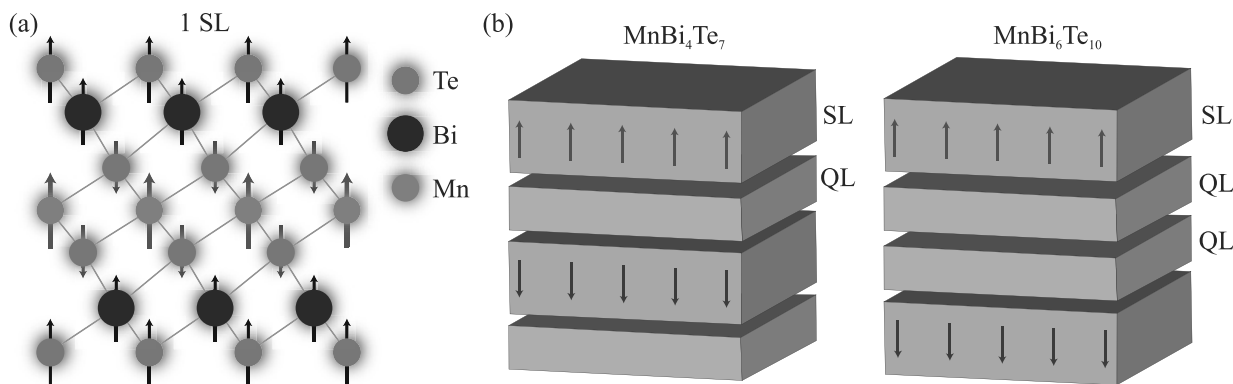


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Структура семислойного блока MnBi_2Te_4 с расположением атомов и ориентацией магнитных моментов внутри блока. (b) – Изменения общей структуры и ориентации магнитных моментов внутри каждого СБ и между соседними СБ для соединений из данной серии при изменении величины m в стехиометрической формуле для MnBi_4Te_7 ($m = 1$) и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ ($m = 2$). Семислойные и пятислойные блоки обозначены как SL и QL соответственно

временно с этим была показана возможность реализации квантового эффекта Холла в таких системах как теоретически [19, 20], так и экспериментально [21–23], а для тонких слоев MnBi_2Te_4 показана возможность реализации КАЭХ при более высоких температурах [21, 24], что существенно повышает прикладной интерес к исследованию электронных и магнитных свойств данного материала. После этого была успешно разработана и синтезирована серия собственных магнитно-упорядоченных АФМ ТИ со стехиометрией $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ [14, 25–29] с модуляцией магнитных свойств путем введения немагнитных слоев между магнитными СБ. При этом каждое из соединений в данной серии характеризуется как общими, так и уникальными особенностями электронной структуры данных соединений.

Семейство $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ включает в себя ряд топологически нетривиальных соединений типа MnBi_2Te_4 ($m = 0$), MnBi_4Te_7 ($m = 1$), $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ ($m = 2$), $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ ($m = 3$) и т.д., которые характеризуются слоистой структурой, состоящей из магнитных СБ со структурой MnBi_2Te_4 , разделенных слоями немагнитных ПБ со структурой Bi_2Te_3 . Все СБ и ПБ разделены Ван-дер-Ваальсовыми (ВдВ) промежутками. При этом соседние магнитные слои связаны АФМ взаимодействием, формируемым между магнитными Мп-слоями. Связь внутри каждого магнитного Мп-слоя имеет ферромагнитный характер. (Для MnBi_2Te_4 магнитные СБ связаны напрямую без промежуточных ПБ Bi_2Te_3). На рисунке 1а показана структура СБ MnBi_2Te_4 с расположением и ориентацией магнитных моментов внутри блока, а на рис. 1б показаны изменения общей структуры и ориентация магнитных моментов в соседних СБ для соединений из дан-

ной серии MnBi_4Te_7 ($m = 1$), $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ ($m = 2$), являющихся предметом исследования в данной работе.

На данный момент анализ особенностей электронной и спиновой структуры для соединений из серии $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ носит ограниченный характер, особенно с представлением и анализом спиновой структуры ТПС в направлениях параллельно и перпендикулярно поверхности, а также изменений их электронной и спиновой структуры ТПС при приложении электрического поля. Именно спиновая структура ТПС и величина ЭЗЗ в точке Дирака и определяет возможность эффективной реализации КАЭХ (в том числе высокотемпературного) в данных соединениях.

Представленная работа в этой связи посвящена изучению особенностей электронной и спиновой структуры соединений MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, рассчитанных методом ТФП, для поверхностей с различными терминациями и сравнению результатов теоретических расчетов с экспериментальными спектрами, измеренными методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР). В работе будет проведено сравнение величины ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака, оцененной из экспериментальных измерений и теоретических расчетов при вариации параметров расчетов. При этом будет также проведен анализ изменений электронной и спиновой структуры и соответствующей модификации ЭЗЗ в точке Дирака при приложении электрического поля перпендикулярно поверхности (для полей различной напряженности и противоположной направленности), что должно быть интересным для практических применений.

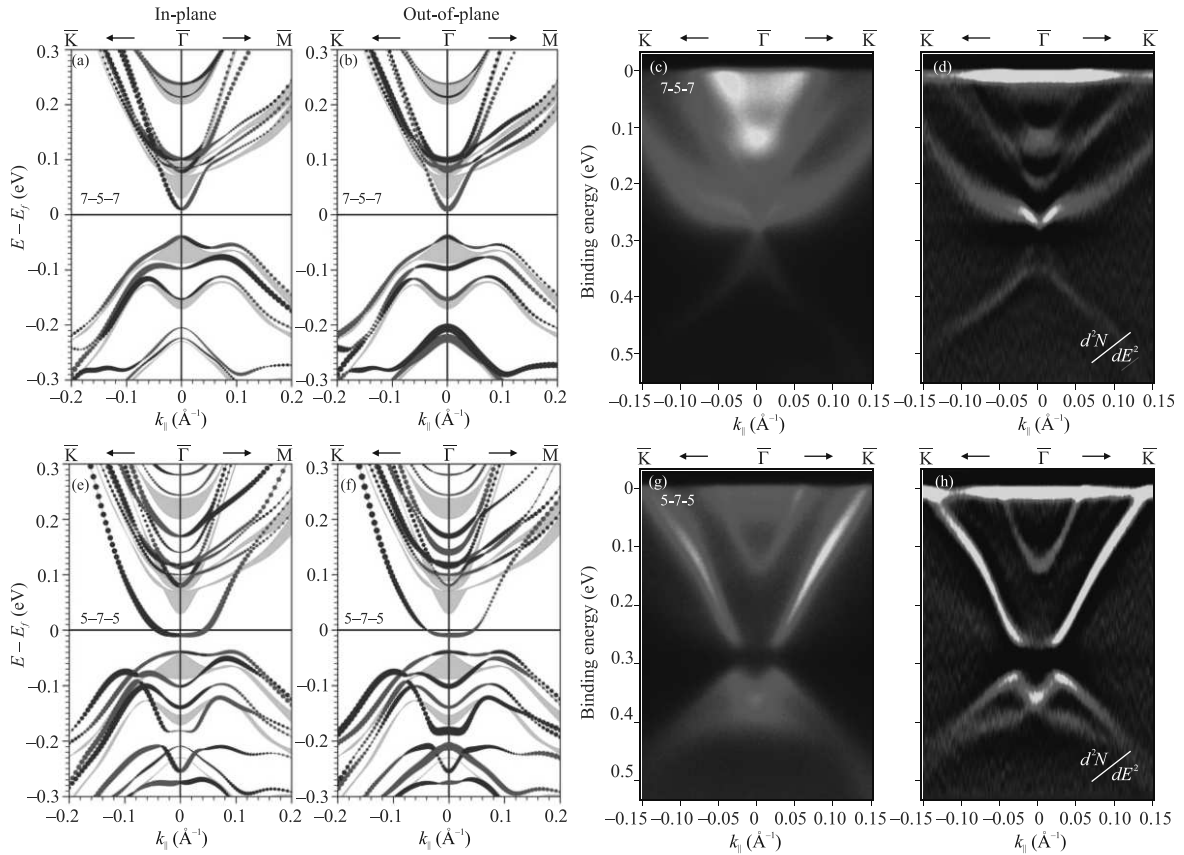


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a), (b) и (e), (f) – Рассчитанная электронная и спиновая структура ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для MnBi_4Te_7 для терминаций поверхности СВ (7–5–7–5) и ПБ (5–7–5–7). Отдельно показаны дисперсионные зависимости для in-plane (a), (e) и out-of-plane (b), (f) спиновой ориентации. Противоположные направления по k_{\parallel} и k_{\perp} показаны красными и синими символами. (c), (d) и (g), (h) – Соответствующие экспериментально измеренные дисперсионные зависимости, представленные в форме $N(E)$ (c), (g) и d^2N/dE^2 (d), (h)

Анализ особенностей электронной структуры и величины ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака, для поверхностей MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ с различными терминациями. На рисунках 2 и 3 представлены результаты расчетов электронной и спиновой структуры ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости методом ТФП для соединений MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ при различной терминации поверхности – магнитным СВ (рис. 2а, b и 3а, b), одним поверхностным ПБ (1 ПБ) (рис. 2е, f и 3е, f) и двумя поверхностными ПБ (2 ПБ) (рис. 3и, j). Представлены расчеты спиновой электронной структуры со спиновой ориентацией как в плоскости поверхности (in-plane), так и перпендикулярно поверхности (out-of-plane). Состояния с противоположной спиновой ориентацией по направлениям k_{\parallel} и k_{\perp} показаны красными и синими символами. Здесь же на рисунках 2с, d и 3с, d и g, h и k, l для сравнения показаны соответствующие экспериментальные дисперсионные зависимо-

сти для данных соединений, измеренные методом ФЭСУР при лазерном возбуждении ($h\nu = 6.3$ эВ). Экспериментальные дисперсионные зависимости, измеренные для случаев соответствующей поверхностной терминации (СВ, 1 ПБ или 2 ПБ), представлены в форме $N(E)$ рис. 2с, g, рис. 3с, g, k и d^2N/dE^2 рис. 2d, h, рис. 3d, h, l. Детали проведенных расчетов приведены в разделе “Методы”.

Представленные результаты свидетельствуют о том, что электронная структура ТПС для магнитных ТИ MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ существенно различается, в первую очередь, для различных поверхностных терминаций, когда на поверхность выходит либо магнитный СВ со структурой MnBi_2Te_4 , либо немагнитный ПБ со структурой Bi_2Te_3 . При этом для терминаций с одним или двумя ПБ на поверхности наблюдается существенное различие в энергиях связи для точки Дирака, а также более сложная электронная структура ТПС и состояний валентной зоны и зоны проводимости. Результаты представленных рас-

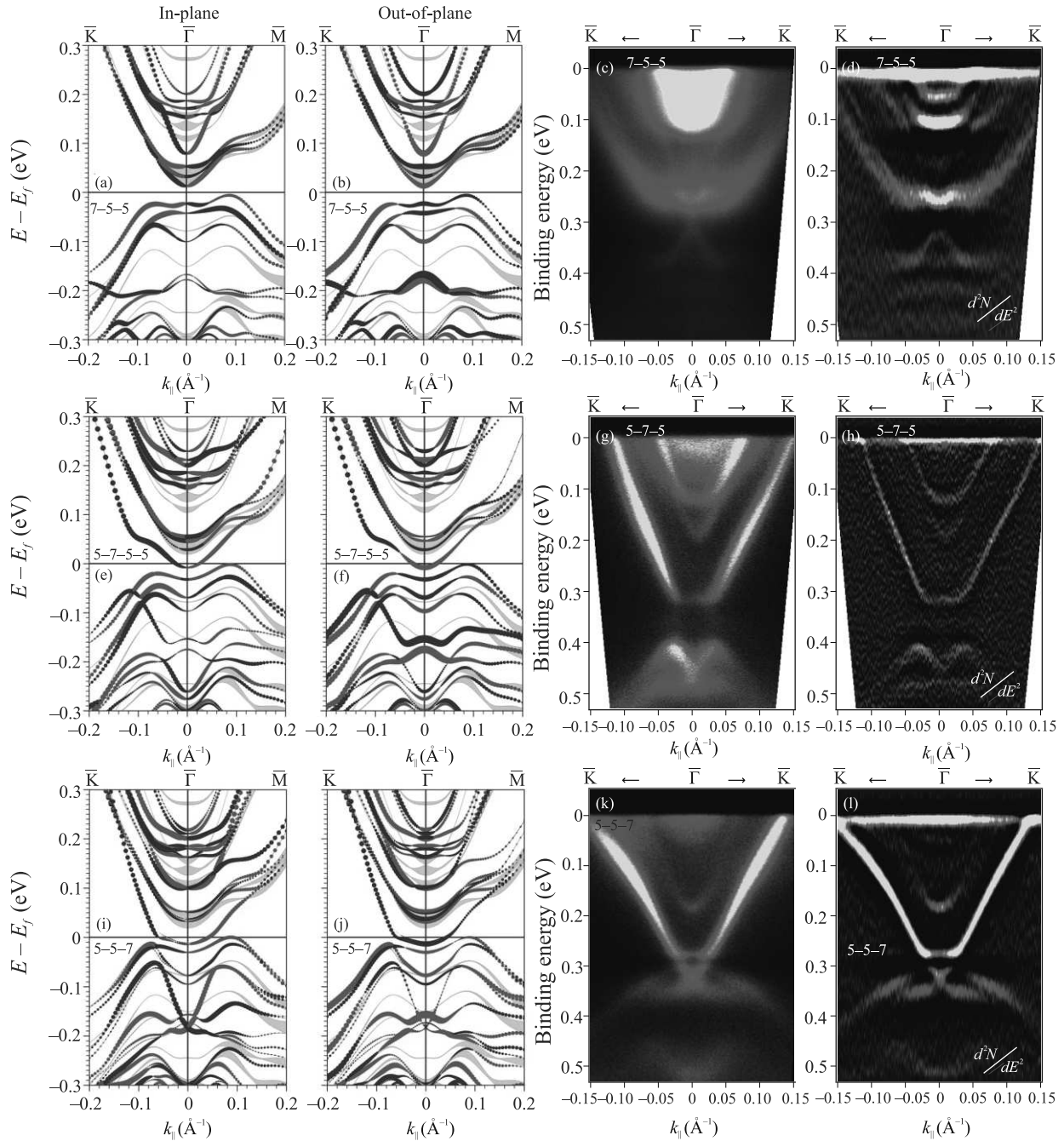


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a), (b) и (e), (f) и (i), (j) – Рассчитанная электронная и спиновая структура ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для $\text{MnVi}_6\text{Te}_{10}$ для поверхности, терминированной СБ (7-5-5-7), одним ПБ (5-7-5-5) и двумя ПБ (5-5-7-5). Отдельно показаны дисперсионные зависимости для in-plane (a), (e), (i) и out-of-plane (b), (f), (j) спиновой ориентации. Противоположные направления по $k_{||}$ и k_{\perp} показаны красными и синими символами. (c), (d) и (g), (h) и (k), (l) – Соответствующие экспериментально измеренные дисперсионные зависимости, представленные в форме $N(E)$ (c), (g), (k) и d^2N/dE^2 (d), (h), (l)

четов электронной структуры в основном коррелируют с данными расчетов, опубликованных в работах [27, 30–37], и подтверждаются в целом эксперимен-

тальными данными. В дополнение в данной работе представлены расчеты спиновой структуры данных систем.

Из анализа приведенных теоретических зависимостей электронной и спиновой структуры ТПС видно, что при терминции поверхности магнитным СБ оба типа образцов (MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$) в области точки $\bar{\Gamma}$ характеризуются геликоидальной in-plane спиновой структурой (аналогично MnBi_2Te_4 [9, 18, 38]). При этом в области точки $\bar{\Gamma}$ для терминций магнитным СБ все представленные спектры характеризуются открытием ЭЗЗ в точке Дирака (при $(k_{\parallel}=0)$). Согласно приведенным расчетам величина ЭЗЗ в точке $\bar{\Gamma}$ для MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ должна быть 42 и 36 мэВ соответственно. Это, в частности, коррелирует с данными в работе [35], где величина ЭЗЗ в точке Дирака для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ также оценивалась теоретически на уровне 35 мэВ. Данная величина ЭЗЗ как для MnBi_4Te_7 , так и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ меньше, чем величина Дираковской ЭЗЗ для MnBi_2Te_4 , которая согласно расчетам должна достигать величины 55–88 мэВ. Уменьшение величины ЭЗЗ может быть обусловлено уменьшением обменного взаимодействия между соседними Mn слоями в соединениях MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ по сравнению с MnBi_2Te_4 . Причем ввиду того, что для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ между СБ вводится уже 2 немагнитных ПБ (по сравнению с одним ПБ в MnBi_4Te_7), формируемая ЭЗЗ в точке Дирака для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ имеет меньшую величину. Сравнение с экспериментом показывает хорошее согласие как для общей структуры ТПС, так и для состояний валентной зоны и зоны проводимости.

В случае терминции поверхности немагнитными ПБ электронная и спиновая структура имеет более сложный характер. Для ПБ-терминции для MnBi_4Te_7 , в соответствии с представленными экспериментальными спектрами, точка Дирака сдвигается в сторону более высоких энергий связи. При этом в области верхнего Дираковского конуса формируется дополнительная ЭЗЗ вследствие гибридизации состояний верхнего ПБ с состояниями более низколежащего СБ в области точки Дирака данного СБ [27, 30–37]. Для рассчитанных спектров (в особенности для MnBi_4Te_7) также явно видно формирование такой гибридизационной ЭЗЗ. Для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ дополнительно имеет место сдвиг по энергии для точки, соответствующей нижнему краю верхней части Дираковского конуса, как для рассчитанных, так и для экспериментальных спектров. Для образцов $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ с поверхностной терминцией двумя немагнитными ПБ спектр уже более похож на Дираковский конус, характерный для Bi_2Te_3 .

При этом, если сравнивать теоретические и экспериментальные спектры, в экспериментальных спектрах по обеим сторонам Дираковского конуса в зоне

проводимости появляются дополнительные состояния. Предполагается, что появление этих состояний обусловлено некоторой гибридизацией состояний Дираковского конуса в верхнем СБ MnBi_2Te_4 с объемными состояниями из нижележащего ПБ Bi_2Te_3 [27, 30–37]. Причем эти состояния проявляются более явно при фотоэлектронных (ФЭ) измерениях с использованием лазерного излучения [30–34, 36, 37, 39], которые характеризуются значительно большей глубиной выхода фотоэлектронов, что позволяет чувствовать вклад в ФЭ спектры также второго более низколежащего ПБ. При измерениях с использованием синхротронного излучения с большей энергией возбуждающих фотонов (что соответствует меньшей глубине выхода фотоэлектронов) данные состояния проявляются в значительно меньшей степени [27], несмотря на то, что положение точки Дирака при измерениях с использованием синхротронного и лазерного излучения практически совпадает. Данные гибридизационные эффекты особенно ярко проявляются для случаев поверхностной терминции одним ПБ Bi_2Te_3 путем формирования ярко выраженной гибридизационной ЭЗЗ в области состояний верхнего конуса Дираковских состояний, находящихся в области края валентных состояний у нижележащего СБ. В случае поверхностной терминции двумя ПБ данные гибридизационные эффекты проявляются уже в меньшей степени. Здесь также следует отметить, что существует и другая интерпретация появления дополнительных состояний по обеим сторонам от состояний верхнего Дираковского конуса, обусловленная формированием соответствующих Рашба состояний и их гибридизацией с ТПС (см. [33, 40]).

Сравнение с экспериментально измеренными данными. Для экспериментального анализа величины ЭЗЗ в точке Дирака на рис. 4а–j показаны экспериментальные дисперсии, измеренные методом ФЭСУР для поверхности MnBi_4Te_7 , терминированной магнитным СБ, для двух различных образцов. Здесь следует отметить, что формирование ЭЗЗ в точке Дирака напрямую связано с инверсией out-of-plane спиновой поляризации между состояниями верхнего и нижнего Дираковского конуса в точке Дирака (см. out-of-plane спиновую структуру на рис. 2 и 3), которая наиболее ярко проявляется именно для СБ-терминированной поверхности. Спектры были измерены с использованием лазерного излучения с энергией фотонов 6.3 эВ при температуре 10 К, что ниже температуры Нееля. На рисунке 4а, б, с и f, g, h представлены дисперсионные зависимости в форме $N(E)$ (а), (f), а также d^2N/dE^2 (б), (g) (для лучшей визуализации ЭЗЗ в точке Дирака

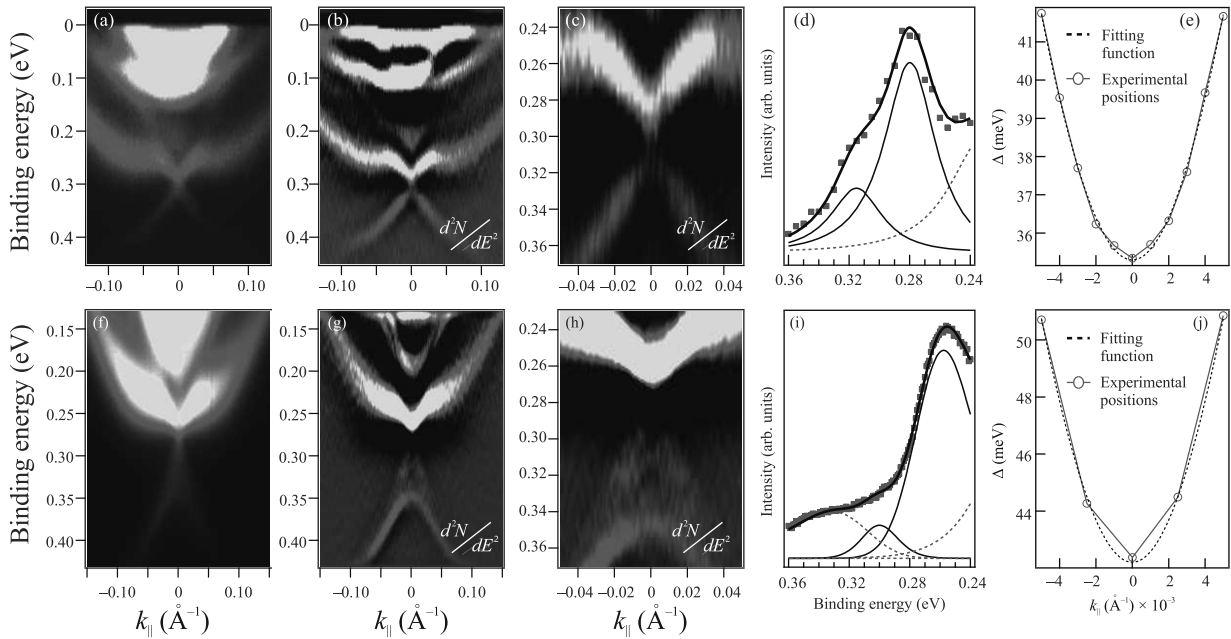


Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментально измеренные дисперсии электронных состояний для поверхности MnBi_4Te_7 , терминированной магнитным СБ. Спектры представлены в форме $N(E)$ (a), а также d^2N/dE^2 (b) с дополнительной детализацией в области точки Дирака (c). (d) – Соответствующие распределения плотности электронных состояний, измеренные непосредственно в $\bar{\Gamma}$ -точке при $k_{||}=0$, с разложением на спектральные компоненты (черные сплошные линии – состояния конуса Дирака, показывающие величину ЭЗЗ). (e) – Изменения в энергетическом расщеплении между состояниями верхнего и нижнего конуса ТПС при изменении значения $k_{||}$ в положительном и отрицательном направлениях относительно $\bar{\Gamma}$ -точки. (f)–(j) – То же самое для другого образца

(при $k_{||} = 0$) и с дополнительной детализацией в области точки Дирака (c), (h)). На рисунке 4d, i красными символами и черными линиями показаны соответствующие распределения плотности электронных состояний (ПЭС), измеренные непосредственно в $\bar{\Gamma}$ -точке. Здесь же черными линиями представлено разложение измеренных ПЭС на спектральные составляющие (компоненты). Энергетические положения данных спектральных компонент соответствуют краям ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака. Рисунки 4e, j показывают изменения в энергетическом расстоянии между состояниями верхнего и нижнего конуса ТПС вне $\bar{\Gamma}$ -точки (полученные из аналогичных разложений на спектральные составляющие) при изменении значения $k_{||}$ в положительном и отрицательном направлениях относительно $\bar{\Gamma}$ -точки. Представленные зависимости аппроксимируются модельной кривой, характерной для Дираковского конуса с ЭЗЗ: $E \sim (\alpha^2 k^2 + \Delta^2)^{1/2}$, где Δ определяет размер ЭЗЗ в точке Дирака. Такой подход позволяет уменьшить ошибку при оценке величины ЭЗЗ. Минимальное энергетическое расщепление в $\bar{\Gamma}$ -точке соответствует величине ЭЗЗ в точке Дирака.

Представленные на рис. 4 экспериментальные данные показывают, что поверхностная терминировка MnBi_4Te_7 магнитным СБ действительно характеризуется наличием ЭЗЗ (порядка 35–42 мэВ), открываемой в точке Дирака. Причем экспериментально измеренная величина ЭЗЗ в точке Дирака коррелирует с величиной ЭЗЗ, полученной из теоретических расчетов (порядка 42 мэВ). Анализ того, как может изменяться величина ЭЗЗ при возможной вариации ВдВ расстояния между СБ и ПБ, составляющими систему, будет представлен ниже на рис. 5. При этом следует отметить, что в литературе существуют работы, предполагающие как отсутствие ЭЗЗ непосредственно в точке Дирака [32–34], так и наличие ЭЗЗ в точке Дирака для различных ТИ из семейства $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$, что было показано как теоретически [27, 35–37], так и экспериментально [27, 29, 39]. Однако, если проанализировать out-of-plane спиновую структуру для поверхностей, терминированных магнитным СБ на рис. 2, 3, то как для MnBi_4Te_7 , так и для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ данная спиновая структура характеризуется ярко выраженной инверсией спиновой поляризации по краям Дираковской ЭЗЗ непосредственно

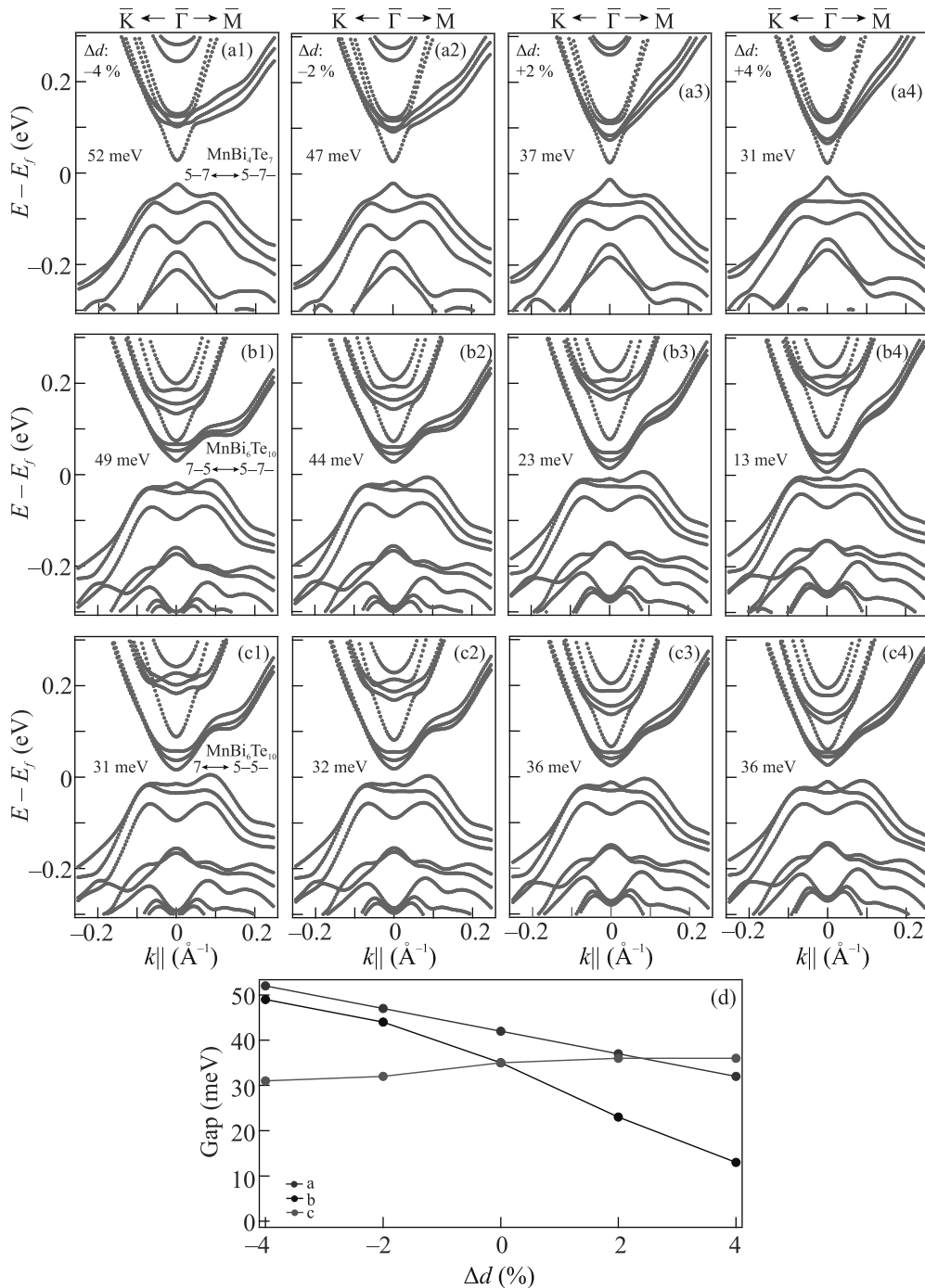


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a1–a4) – Изменение электронной структуры при вариации ВдВ расстояния между СБ и ПБ для поверхности MnBi₄Te₇, терминированной магнитным СБ. (b1–b4) и (c1–c4) – То же самое для MnBi₆Te₁₀ при вариации расстояния между ПБ, а также ПБ и СБ соответственно. (d) – Соответствующие изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака для всех трех рассчитанных вариантов

ственно в точке $\bar{\Gamma}$. Подобная out-of-plane спиновая поляризация обусловлена появлением массового члена в Гамильтониане и формированием ЭЗЗ в точке Дирака. Для терминирования поверхности немагнитным

ПБ выделить out-of-plane спиновую поляризацию между верхним и нижним конусом в области точки Дирака значительно труднее ввиду сильного перекрытия с ветвями состояний валентной зоны.

Зависимость особенностей электронной структуры от параметров расчетов.

Следует отметить, что в расчетах, представленных в литературе, в различных работах используются различные величины как ВдВ расстояний между СБ и ПБ, так и внутрислойных межатомных расстояний. В литературе существует определенный разброс в значениях используемых параметров, что обуславливает возможные небольшие различия в особенностях рассчитанных электронных спектров, включая различие в величине ЭЗЗ в точке Дирака. Представленные на рис. 2, 3 теоретические дисперсионные зависимости были рассчитаны исходя из атомной структуры элементарной ячейки MnBi_4Te_7 , используемой в работах [9, 17, 18]. При этом величины ВдВ расстояний между СБ и ПБ выбирались как средние значения между значениями, используемыми в работах [25, 27]. Для выяснения вопроса о том, как выбор величин ВдВ интервалов может влиять на детали электронной структуры и величину ЭЗЗ в точке Дирака в данной работе были проведены дополнительные сравнительные расчеты с использованием структурных параметров для СБ, как в [41], с дополнительной вариацией ВдВ интервала между ПБ и СБ как в сторону его увеличения, так и уменьшения.

На рисунке 5a1–a4 представлены расчеты изменений электронной структуры для MnBi_4Te_7 с поверхностью, терминированной магнитным СБ, и величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации ВдВ интервала между СБ и ПБ по всему объему образца относительно исходного ВдВ интервала 2.726 \AA . Данное значение было взято как среднее между значениями ВдВ расстояний, используемых в работах [25, 27]. Параметры структуры СБ были взяты из работы [41]. На рисунке 5b1–b4 и c1–c4 показаны аналогичные изменения электронной структуры для поверхности $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, также терминированной магнитным СБ, при вариации ВдВ интервала между ПБ, а также между ПБ и СБ соответственно. Результирующие изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации ВдВ расстояний для всех трех рассчитанных вариантов показаны на рис. 5d.

Представленные результаты показывают, что при вариации ВдВ интервала для MnBi_4Te_7 в пределах $\pm 4\%$ величина ЭЗЗ в точке Дирака может изменяться в пределах от 52 до 31 мэВ. Аналогичные оценки для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ показывают возможные изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака в пределах от 49 до 13 мэВ или от 31 до 36 мэВ при вариации расстояния между ПБ, а также ПБ и СБ соответственно. Если брать все изменения ВдВ в пределах $\pm 2\%$, то общие

изменения в величине ЭЗЗ в точке Дирака находятся в пределах от 23 до 47 мэВ. Если сравнивать с работами [25, 27], то различия в отмеченных параметрах не превышают $\pm(2-4)\%$. Это ведет к возможному изменению величины ЭЗЗ в точке Дирака в основном в пределах от 30 до 50 мэВ, что укладывается в диапазон изменения экспериментально измеренных величин ЭЗЗ в точке Дирака, представленных в данной и других работах. При этом существенных изменений в электронной структуре для данных соединений не наблюдается.

Из проведенного сравнения и анализа можно сделать вывод, что представленные на рис. 2 и 3 рассчитанные зависимости электронной и спиновой структуры для различных поверхностных терминаций для MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ и их принципиальные особенности не определяются в значительной степени вариацией ВдВ расстояний и коррелируют с данными в литературе.

Изменение электронной структуры MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ при приложении электрического поля.

В рамках работы дополнительно была исследована возможность изменения ЭЗЗ при изменении внешних факторов исследуемых образцов. На рис. 6a1–a8 и b1–b8 представлены соответственно результаты расчетов электронной и спиновой структуры ТПС для поверхности MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, терминированной магнитным СБ при приложении электрического поля различной напряженности и противоположной направленности (от $+0.11 \text{ В/\AA}$ до -0.34 В/\AA), приложенного по нормали к поверхности. Показаны вклады состояний, локализованных, в основном, в области первого поверхностного СБ. Левые и правые панели на каждом вкладыше показывают спиновую структуру топологических состояний со спиновой ориентацией вдоль поверхности (in-plane) и перпендикулярно поверхности (out-of-plane) соответственно. Противоположные направления спиновой компоненты (S_x и $-S_x$) и (S_z и $-S_z$) для ориентации вдоль и перпендикулярно поверхности показаны красными и синими цветами соответственно.

Представленные спектры показывают, что при приложении электрического поля топологические состояния Дираковского конуса смещаются по энергии относительно состояний валентной зоны и зоны проводимости (как для MnBi_4Te_7 , так и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$) различным образом в зависимости от знака и напряженности приложенного поля. При этом величина ЭЗЗ в точке Дирака также изменяется. При приложении поля “отрицательной” направленности величина ЭЗЗ уменьшается, и при напряженности при-

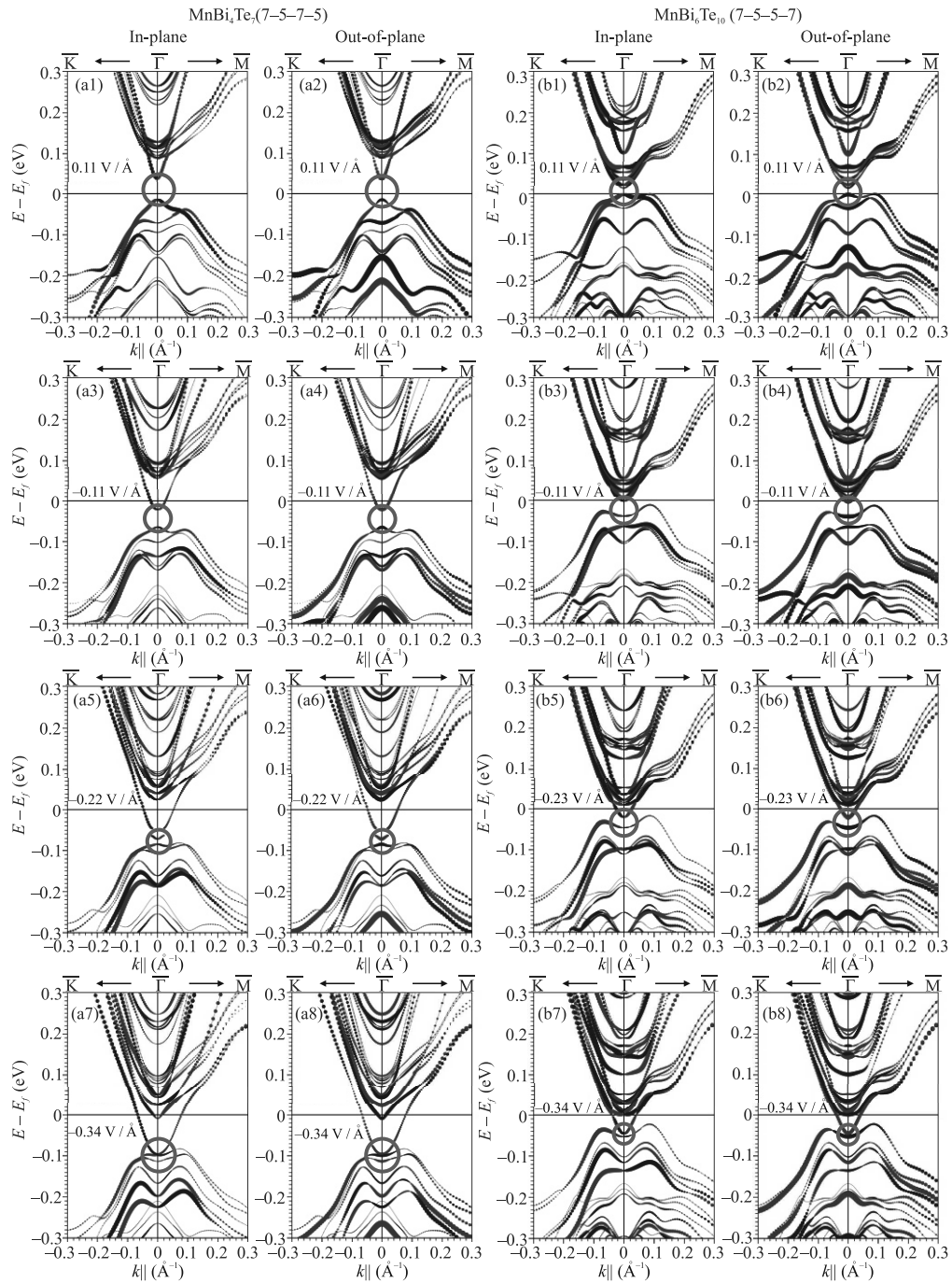


Рис. 6. (Цветной онлайн) Изменения электронной и спиновой структуры с in-plane и out-of-plane спиновой ориентацией для поверхностей MnBi_4Te_7 (a1–a8) и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ (b1–b8), терминированных магнитным СБ, при приложении электрического поля по нормали к поверхности различной направленности и напряженности (от $+0.11 \text{ В}/\text{Å}$ до $-0.34 \text{ В}/\text{Å}$). Кружки показывают локализацию точки Дирака и изменение величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации приложенного электрического поля

ложенного электрического поля $-0.34 \text{ В}/\text{Å}$ величина ЭЗЗ уменьшается практически до нуля как для MnBi_4Te_7 , так и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$. Положение точки Дирака и соответствующей ЭЗЗ показано кружками для

лучшей визуализации. Подобные тенденции в изменении величины ЭЗЗ в точке Дирака при приложении электрического поля наблюдались также для MnBi_2Te_4 [18, 38]. Хотя для уменьшения величины

ЭЗЗ практически до нулевых значений в случае поверхности MnBi_2Te_4 требовалась более высокая напряженность приложенного электрического поля.

Следует отметить, что при всех изменениях приложенного электрического поля геликоидальный характер in-plane спиновой структуры (т.е. противоположные направления спинов для противоположных k_{\parallel} -направлений вблизи точки $\bar{\Gamma}$) сохраняется как для MnBi_4Te_7 , так и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$. Инверсия out-of-plane спиновой структуры по краям ЭЗЗ в точке Дирака также сохраняется для всех напряженностей приложенного электрического поля вплоть до почти нулевых значений ЭЗЗ. Данное наблюдение позволяет сделать предположение о возможности целенаправленного изменения физико-химических свойств АФМ ТИ MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ путем модулирования величины ЭЗЗ в точке Дирака за счет приложения внешнего электрического поля.

Заключение. В работе представлены расчеты особенностей электронной и спиновой (in-plane и out-of-plane) структуры ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости, проведенные методом ТФП для образцов MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ с различной термацией поверхности – магнитным СБ или немагнитными ПБ. Было показано, что для образцов MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ с термацией поверхности магнитным СБ в электронной структуре ТПС в точке Дирака открывается ЭЗЗ, величина которой может быть оценена на уровне 42 мэВ для MnBi_4Te_7 и 36 мэВ для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$. Сравнение с результатами экспериментальных исследований, проведенных методом ФЭСУР, показали корреляцию между результатами расчетов и экспериментальными измерениями. Было исследовано влияние вариации величины ВдВ расстояния между слоями на поверхности и было показано, что при вариации поверхностного ВдВ интервала в пределах $\pm 4\%$ для обеих систем возможное изменение величины ЭЗЗ в точке Дирака находится в пределах 30–50 мэВ, что коррелирует с экспериментально измеренными значениями. При этом существенных изменений электронной структуры не наблюдается.

Приложение электрического поля перпендикулярно поверхности приводит к различному энергетическому сдвигу конуса Дираковских состояний и состояний валентной зоны и зоны проводимости. При этом приложенное электрическое поле изменяет величину ЭЗЗ в точке Дирака, и при напряженности электрического поля $-0.34 \text{ В}/\text{Å}$ ЭЗЗ в точке Дирака практически закрывается, что может быть использовано для модуляции магнитных и физико-химических свойств данных магнитных ТИ.

Рассчитанные спектры демонстрируют in-plane геликоидальную спиновую структуру ТПС, инверсную относительно $\pm k_{\parallel}$, и out-of-plane инверсную спиновую структуру относительно краев ЭЗЗ в точке Дирака, что характерно для магнитных ТИ.

Методы. В расчетах исследуемые поверхности представлялись повторяющимися слэбами, составленными из 4 СБ MnBi_2Te_4 и 4 ПБ Bi_2Te_3 в случае структуры MnBi_4Te_7 и, соответственно, из 4 и 8 блоков в случае $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$. Гексагональный параметр решетки a брали равным 4.33 Å , а параметр c подбирался таким образом, чтобы межблочные ВдВ расстояния соответствовали таковым $d_{vdW} = 2.73 \text{ Å}$ для структуры MnBi_2Te_4 [18, 38]. Между слэбами помещался вакуумный слой толщиной 12 Å .

Электронную структуру интерфейсов рассчитывали с помощью программы OPENMX [42], в которой реализован полностью релятивистский метод функционала электронной плотности с использованием псевдопотенциала сохраняющего норму [43] и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [44–46]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его РВЕ версии [47]. Базисные функции задавались следующим образом: $\text{Mn}6.0\text{-}s3p3d2$, $\text{Te}7.0\text{-}s3p3d2f1$ и $\text{Bi}8.0\text{-}s3p3d2f1$. На примере Mn нотация означает, что 3 примитивные орбитали использовались для представления s - и p -орбиталей, и только две – для представления d -орбитали, с радиусом обрезания 6.0 атомных единиц. Сетка интегрирования в прямом пространстве определялась энергией обрезания 200 Ry, а в обратном пространстве, для разбивки поверхностной зоны Бриллюэна, сетка задавалась как 9×9 k -точек. Критерий сходимости по полной энергии $1.4 \cdot 10^{-5}$ эВ. Для корректировки d -состояний марганца использовался метод DFT + U [48] в схеме Дударева [49] с параметром $U = 5$ эВ [18]. Внешний электрический градиент вдоль нормали к поверхности задавался путем размещения дополнительного заряда в области вакуума совместно с граничными условиями “вакуум–слэб–метал” в рамках метода эффективной экранирующей среды [50], во избежание кулоновского взаимодействия между слэбами.

Измерения дисперсионных карт проводились на установке μ -Laser ARPES в центре HiSOR (Хиросима, Япония) при фотовозбуждении лазерным излучением с энергией $h\nu = 6.3$ эВ. Пространственное разрешение составляло около 5 мкм (определяется размером сфокусированного лазерного пятна). Использовался энергоанализатор Scienta R4000, установленный под углом 50° относительно падающего пучка фотонов. Чистые поверхности образцов были

получены путем скола в сверхвысоком вакууме. Давление во время всех фотоэмиссионных экспериментов было лучше, чем 1×10^{-11} мбар.

Работа была выполнена в рамках финансовой поддержки Министерством Науки и Высшего образования РФ (грант # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

1. X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
2. X.-L. Qi, , and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
3. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), *Science* **340**, 167 (2013).
4. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).
5. C.-Z. Chang, W. Zhao, D.Y. Kim, H. Zhang, B. A. Assaf, D. Heiman, Sh.-C. Zhang, C. Liu, M. Chan, and J.S. Moodera, *Nat. Mater.* **14**, 473 (2015).
6. V.N. Men'shov, V.V. Tugushev, and E.V. Chulkov, *JETP Lett.* **104**, 453 (2016).
7. M.M. Otrokov, T.V. Menshchikova, I.P. Rusinov, M.G. Vergniory, V.M. Kuznetsov, and E.V. Chulkov, *JETP Lett.* **105**, 297 (2017).
8. E.K. Petrov, I.V. Silkin, T.V. Menshikova, and E.V. Chulkov, *JETP Lett.* **109**, 121 (2019).
9. M.M. Otrokov, I.I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
10. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
11. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **15**, eaaw5685 (2019).
12. Y. Gong, J. Guo, J. Liet al. (Collaboration), *Chin. Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
13. S. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al (Collaboration), *Phys. Rev. Res.* **1**, 012011 (2019).
14. Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, D.I. Nasonova, A.V. Shevelkov, N.A. Abdullayev, Z.A. Jahangirli, E.N. Orujlu, M.M. Otrokov, N.T. Mamedov, M.B. Babanly, and E.V. Chulkov, *J. Alloys Compd.* **789**, 443 (2019).
15. Y. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
16. D.A. Estyunin, I.I. Klimovskikh, A.M. Shikin, E.F. Schvier, M.M. Otrokov, A. Kimura, S. Kumar, S.O. Filnov, Z.S. Aliev, M.B. Babanly, and E.V. Chulkov, *APL Mater.* **8**, 021105 (2020).
17. A.M. Shikin, D.A. Estyunin, I.I. Klimovskikh et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
18. A.M. Shikin, D.A. Estyunin, N.L. Zaitsev et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
19. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, *Nat. Nanotechnol.* **11**, 231 (2016).
20. L. Smejkal, Y. Mokrousov, B. Yan, and A.H. MacDonald, *Nat. Phys.* **14**, 242 (2018).
21. Y. Deng, Y. Yu, M.Z. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X.H. Chen, and Y. Zhang, *Science* **367**, 895 (2020).
22. C. Liu, Y. Wang, H. Li, Y. Wu, Y. Li, J. Li, K. He, Y. Xu, J. Zhang, and Y. Wang, *Nat. Mater.* **19**, 522 (2020).
23. J. Ge, Y. Liu, J. Li, H. Li, T. Luo, Y. Wu, Y. Xu, and J. Wang, *Natl. Sci. Rev.* **7**, 1280 (2020).
24. A. Gao, Y. F. Liu, C. Hu et al. (Collaboration), *Nature* **595**, 521 (2021).
25. J. Wu, F. Liu, M. Sasase, K. Ienaga, Y. Obata, R. Yukawa, K. Horiba, H. Kumigashira, S. Okuma, T. Inoshita, and H. Hosono, *Sci. Adv.* **5**, eaax9989 (2019).
26. C. Hu, K. N. Gordon, P. Liu et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **11**, 97 (2020).
27. I.I. Klimovskikh, M.M. Otrokov, D.A. Estyunin et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **5**, 54 (2020).
28. Z.A. Jahangirli, E.H. Alizade, Z.S. Aliev, M.M. Otrokov, N.A. Ismayilova, S.N. Mammadov, I.R. Amiraslanov, N.T. Mamedov, G.S. Orudzhev, M.B. Babanly, A.M. Shikin, and E.V. Chulkov, *J. Vac. Sci. Technol. B* **37**, 062910 (2019).
29. R.C. Vidal, A. Zeugner, J.I. Facio et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041065 (2019).
30. A.M. Shikin, D.A. Estyunin, D.A. Glazkova, S.O. Filnov, and I.I. Klimovskikh, *JETP Lett.* **115**, 213 (2022).
31. R.C. Vidal, H. Bentmann, J.I. Facio et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **126**, 176403 (2021).
32. Y. Hu, L. Xu, M. Shi, A. Luo, S. Peng, Z.Y. Wang, J.J. Ying, T. Wu, Z.K. Liu, C.F. Zhang, Y.L. Chen, G. Xu, X.-H. Chen, and J.-F. He, *Phys. Rev. B* **101**, 161113(R) (2020).
33. X.-M. Ma, Z. Chen, E.F. Schvier et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **102**, 245136 (2020).
34. L. Xu, Y. Mao, H. Wang et al. (Collaboration), *Sci. Bull.* **65**, 2086 (2020).
35. K.N. Gordon, H. Sun, C. Hu, A.G. Linn, H. Li, Y. Liu, P. Liu, S. Mackey, Q. Liu, N. Ni, and D. Dessau, *arXiv:1910.13943* (2019).
36. X. Wu, J. Li, X.-M. Ma et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **10**, 031013 (2020).
37. S. Tian, S. Gao, S. Nie et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **102**, 035144 (2020).
38. A.M. Shikin, D.A. Estyunin, N.L. Zaitsev, D.A. Glazkova, I.I. Klimovskikh, S.O. Filnov, A.G. Rybkin, K.A. Kokh, O.E. Tereshchenko, K.A. Zvezdin, and A.K. Zvezdin, *JETP* **134**, 103 (2022).

39. R. Lu, H. Sun, S. Kumar et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **11**, 011039 (2021).
40. A. Liang, C. Chen, H. Zheng et al. (Collaboration), *Nano Lett.* **22**, 4307 (2022).
41. A. M. Shikin, T. P. Makarova, A. V. Eryzhenkov, D. Yu. Usachov, D. A. Estyunin, D. A. Glazkova, I. I. Klimovskikh, A. G. Rybkin, and A. V. Tarasov, arXiv:2205.07501 (2022).
42. T. Ozaki, H. Kino, J. Yu et al. (Collaboration), <http://openmx-square.org>.
43. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
44. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
45. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
46. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
47. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
48. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).
49. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, *Phys. Rev. B* **57**, 1505 (1998).
50. M. Otani and O. Sugino, *Phys. Rev. B* **73**, 115407 (2006).

Магнитные свойства FeVO_3 в низкоспиновом состоянии

Ю. В. Князев¹⁾, Н. В. Казак¹⁾, В. А. Гавричков, С. И. Полукеев, С. Г. Овчинников¹⁾

Институт физики им. Л. В. Киренского
Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН”,
660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 12 сентября 2022 г.

После переработки 16 сентября 2022 г.

Принята к публикации 16 сентября 2022 г.

Экспериментально и теоретически исследованы изменения магнитных свойств монокристаллов FeVO_3 при спиновом кроссовере с ростом давления до 63 ГПа. Одновременные измерения спектров ядерной дифракции и ядерного рассеяния вперед позволили детектировать антиферромагнитное высокоспиновое состояние при малых давлениях до 48 ГПа, обнаружить антиферромагнитное состояние в области сосуществования ионов Fe^{3+} в высокоспиновом (HS) и низкоспиновом (LS) состояниях в области гистерезиса от 48 до 54 ГПа. Выше 58 ГПа наблюдается только LS состояние, магнитный порядок отсутствует до 9 К. Анализ изменений обменных взаимодействий в результате спинового кроссовера привел к выводу о наличии конкурирующих ферромагнитных и антиферромагнитных вкладов, практически компенсирующих друг друга. Возможная температура Нееля в LS состоянии не более 7 К, что не позволило наблюдать упорядоченное состояние в нашем эксперименте.

DOI: 10.31857/S1234567822200095, EDN: koyuum

I. Введение. Большое число оксидов железа с Fe^{3+} и Fe^{2+} ионами демонстрируют спиновый кроссовер между HS и LS-состояниями с ростом давления в интервале $P_c = 50\text{--}70$ ГПа [1–8]. При нормальном давлении большинство этих оксидов являются моттовскими изоляторами с антиферромагнитным (АФМ) порядком в HS-состоянии [9]. Кристаллы с Fe^{2+} ионами выше P_c имеют спин $S = 0$ и немагнитны. Кристаллы с Fe^{3+} ионами выше P_c имеют $S = \frac{1}{2}$ в LS-состоянии и могли бы быть магнитноупорядочены. Магнитные свойства при высоких давлениях обычно измеряются методами лабораторной мессбауэровской спектроскопии или с использованием синхротронного излучения (NFS – ядерное рассеяние вперед). Для HS-состояния FeVO_3 NFS-спектры показали рост температуры Нееля от 350 К при атмосферном давлении до 600 К при $P = 47$ ГПа [10].

Магнитный коллапс и резкое уменьшение энергии края оптического поглощения обнаружены в точке кроссовера при $P_c = 47$ ГПа [11]. Выше P_c в LS-состоянии температурные зависимости NFS-спектров были интерпретированы в работе [10] как проявление АФМ порядка ниже 50 К. Следует отметить, что симметрия кристалла FeVO_3 не меняется в случае спинового кроссовера, но объем элементарной ячейки и параметры решетки меняются скачком

в результате изоструктурного фазового перехода 1-го рода. Причина таких скачков связана с заметным (до 10 %) различием ионных радиусов HS и LS ионов. Недавние тщательные измерения рентгеновской дифракции и мессбауэровских спектров также подтвердили изоструктурный характер спинового кроссовера в FeVO_3 [12] с сохранением структуры исходного кристалла, по крайней мере, до 105 ГПа. При 106 ГПа обнаружен переход из структуры $R\bar{3}c$ в $C2/c$ [12]. Вопрос о магнитных свойствах LS-состояния остался открытым. Две точки с $T_N = 50$ К на фазовой диаграмме [10] относятся к области гистерезиса, где сосуществуют HS и LS-состояния, поэтому магнитный порядок может быть индуцирован наличием HS состояний. В работе [12] сосуществование ионов Fe^{3+} в HS и LS состояниях обнаружено вплоть до 140 ГПа с величиной $T_N = 60$ К. Более того, в теоретической работе [13] обсуждалось появление ферромагнитных (ФМ) обменных взаимодействий в низкоспиновом состоянии. Таким образом, возможно изменение типа магнитного порядка.

В настоящей работе описаны результаты экспериментальных измерений магнитной структуры FeVO_3 на синхротроне DESY по оригинальной методике, предложенной И. Сергеевым. Подробности эксперимента можно найти в отчете [14]. Измерялись времяпролетные спектры ядерного рассеяния вперед (NFS) и ядерной дифракции (ND) для (111) и (222) рефлексов с использованием натуральных (для NFS)

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

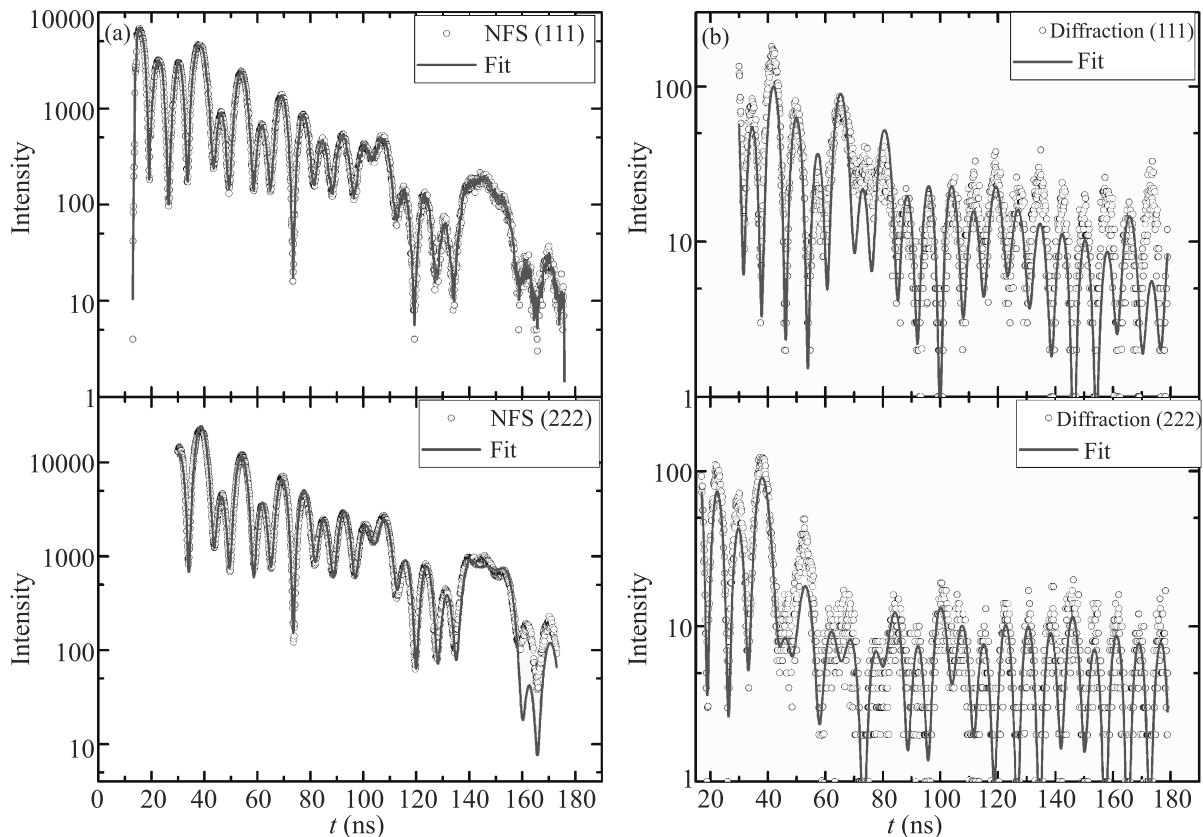


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Спектры NFS и (б) – ядерной дифракции для монокристалла FeBO_3 при комнатной температуре и нормальном давлении для двух рефлексов (111) и (222). Сплошные линии показывают результаты обработки

и обогащенных (для ND) кристаллов $^{57}\text{FeBO}_3$ при давлениях 0–70 ГПа и температурах 9–300 К. Образцы помещались в камеру высокого давления с алмазными наковальнями (DAC) вместе с рубиновым чипом и Ne в качестве передающей давление среды, использовались бериллиевые гasketы. Камера высокого давления находилась в криостате. Небольшое (~ 50 Э) внешнее магнитное поле было приложено для намагничивания образца вдоль направления рентгеновского луча. При таких условиях времяпролетные спектры NFS и ND качественно отличаются для ФМ и АФМ упорядочения [15]. В то время как рефлекс (222) существует для любых магнитных структур, рефлекс (111) характерен только для АФМ состояния. Для обработки полученных спектров использовался пакет программ CONUSS, в котором учитывается выбранная геометрия эксперимента ядерной дифракции [16]. Таким образом, предложенная методика позволяет получить надежные и однозначные выводы.

II. Экспериментальные результаты. Спектры NFS и ND FeBO_3 при нормальном давлении показаны на рис. 1 при комнатной температуре, их вид

подтверждает наличие АФМ дальнего порядка. Параметры сверхтонкой структуры по данным NFS и ND близки друг другу. Найденное значение сверхтонкого поля 43.5 Тл соответствует предыдущим данным [17]. Из дифракционных спектров видно, что квантовые биения для направлений (222) и (111) практически совпадают, это возможно благодаря периоду магнитной решетки [18]. Поскольку выбранное кристаллографическое направление (222) учитывает все квантовые биения, в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением данных именно для этого направления.

Изменения формы спектров при комнатной температуре, вызванные ростом приложенного гидростатического давления, показаны на рис. 2. Они тривиальны до давления 48 ГПа, в этом диапазоне давлений сверхтонкое поле монотонно растет от 34.5 до 48.6 Тл. Эти значения близки к полученным ранее в HS-состоянии [10]. Монотонный рост величины сверхтонкого поля связан с увеличением перекрытия электронных волновых функций. При достижении критического давления $P_c = 48$ ГПа (это значение в работе [10] составляет 46.5 ГПа, небольшие различия,

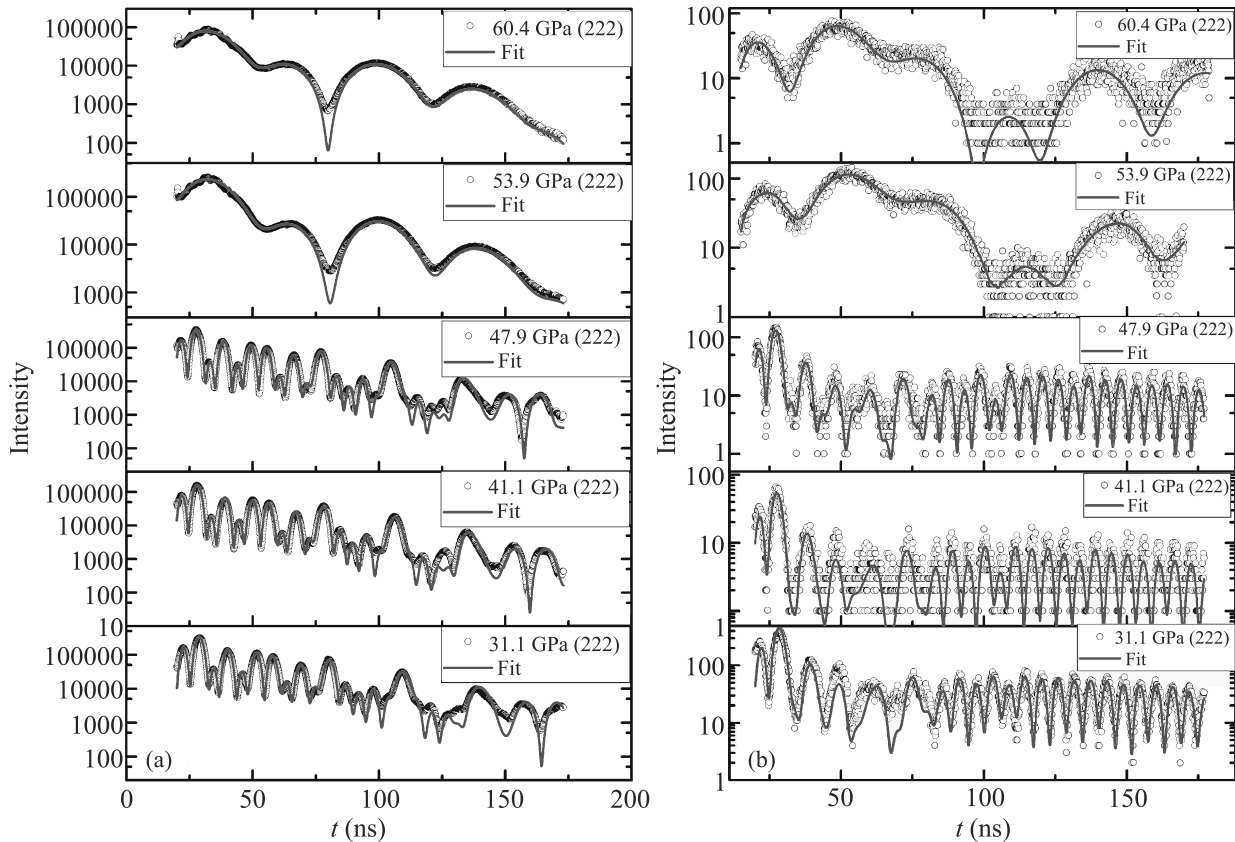


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Спектры NFS и (б) – ядерной дифракции FeBO_3 для разных давлений при комнатной температуре. Сплошные линии показывают результаты обработки спектров

очевидно, связаны с погрешностью измерения давления в камерах с алмазными наковальнями ~ 3 ГПа) мы наблюдаем резкие изменения вида спектров. При $P > P_c$ остаются только низкочастотные биения, обусловленные квадрупольными ядерными переходами. Такие изменения свидетельствуют о спиновом кроссовере между HS и LS-состояниями ионов Fe^{3+} и о подавлении магнитного порядка при комнатной температуре.

Отметим, что причиной кроссовера между конфигурациями $|^6A_1\rangle \rightarrow |^2T_2\rangle$ является рост кубической компоненты энергии кристаллического поля $10Dq$ в соответствии с диаграммами Танабе–Сугано для d^5 -ионов. Поскольку в низкоспиновом состоянии спин иона равен $S = \frac{1}{2}$, то возможно магнитное упорядочение и выше P_c . В простейшем предположении о неизменности межатомного обменного взаимодействия от давления величина T_N должна уменьшиться пропорционально фактору $S(S+1)$, равному $35/4$ для HS и $3/4$ для LS, т.е. можно ожидать АФМ в низкоспиновом состоянии ниже 30 К. Интересная ситуация наблюдалась при давлении 51.6 ГПа, соответствующему двухфазной области внутри петли гистерезиса.

Перед охлаждением при давлении 47.9 ГПа образец показывал магнитные биения. При охлаждении до 18 К магнитные биения исчезают в центре образца, но сохраняются на краю образца. Эти две точки видны для рефлекса (222). Одна точка соответствует HS-фазе, а другая – LS-фазе, расстояние между ними около 3 мм. При давлении выше 53.9 ГПа, времяпролетные спектры показывают только квадрупольные биения, соответствующие низкоспиновому состоянию (что видно из дифракционных данных). Типичные временные спектры NFS и ядерной дифракции для давления 60.4 ГПа при температуре 9 К показаны на рис. 3. Видно, что магнитный порядок в низкоспиновом состоянии отсутствует выше 9 К.

Обработка этих спектров показала существование двух состояний железа в парамагнитном состоянии (в отличие от обычных условий) с величинами квадрупольного расщепления $\Delta E_Q = 1.85$ мм/с и $\Delta E_Q = 2.25$ мм/с, соответственно. Мы отмечаем одинаковую атомную долю этих LS-состояний Fe^{3+} . Обнаруженные нами два состояния железа согласуются с наблюдениями авторов в работе [12]. Несмотря

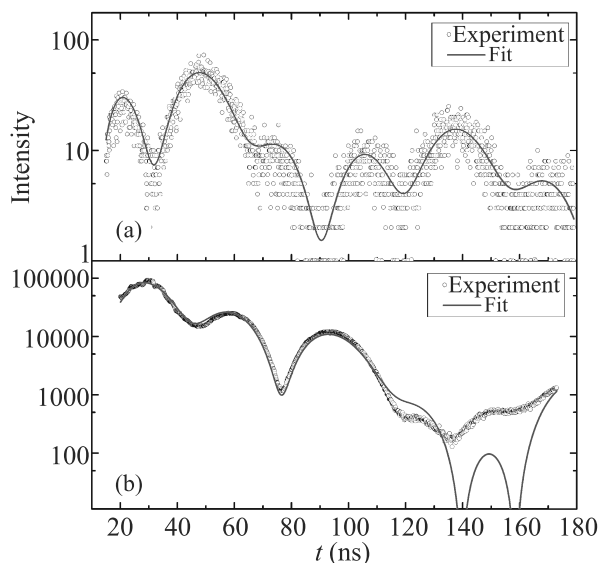


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Спектры ядерной дифракции и (b) – NFS при температуре 9 К и давлении 60.4 ГПа

на то, что в этой работе атомная доля этих состояний имеет соотношение около 1 : 2, мы можем однозначно говорить о наличии двух разных характерных локальных искажений на ядрах железа в кристалле. И это является следствием нескомпенсированного электрона оболочки Fe^{3+} в LS-состоянии. В то же время, в нашем эксперименте мы не наблюдаем признаков нахождения железа в высокоспиновом состоянии в отличие от данных [12]. Некоторое различие значений ΔE_Q , на наш взгляд, не может быть связано с сосуществованием LS и HS-фаз ввиду близости значений.

III. Теоретические результаты. Для металлов и сплавов параметры эффективного гейзенберговского гамильтониана могут быть рассчитаны в рамках теории функционала плотности [19]. Для FeVO_3 и других моттовских изоляторов такой подход неприменим, поскольку не учитывает сильные электронные корреляции. Недавно было предложено некоторое обобщение DFT подхода для сильно коррелированных систем типа эффективной $s-d$ -модели [20], которое неприменимо для случая FeVO_3 . Поэтому мы воспользуемся многоэлектронным подходом [21], который для случая спиновых кроссоверов необходимо обобщить с учетом не только основного, но и возбужденного состояний, которые в результате кроссовера меняются местами. Такое обобщение расчета суперобменного взаимодействия в моттовских изоляторах с учетом различных многоэлектронных термов катиона было сделано в наших работах [13, 22]. На рисунке 4 показано локальное окруже-

ние центрального катиона из A -подрешетки. Из этого рисунка видно, что наибольший вклад в суперобмен $\text{Fe}(A)\text{--Fe}(B)$ связан с перескоками через анион кислорода из VO_3 -группы с углом связи, близким к 120 градусам. 180-градусное взаимодействие вдоль вертикальной оси на рис. 4 формируется для катионов, следующих за ближайшими.

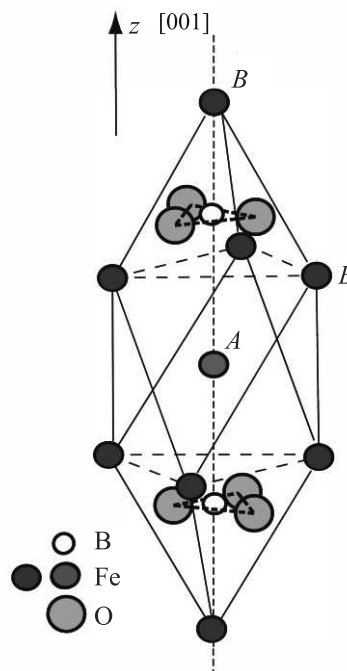


Рис. 4. (Цветной онлайн) Локальное окружение центрального катиона из A -подрешетки (серый кружок) и шесть ближайших соседей из подрешетки B (синие кружки). Кислородные треугольники из VO_3 -групп показаны голубым цветом. Группы VO_3 дают большой вклад в формирование химической связи, ионы бора показаны пустыми кружками

В рамках модели Хаббарда суперобменное взаимодействие появляется во втором порядке теории возмущений по параметру $\frac{t}{U} \ll 1$ [23, 24]. Этот механизм не противоречит традиционной картине перескоков катион–лиганд–катион, поскольку параметр t эффективной модели Хаббарда выражается через параметр $p-d$ перескоков t_{pd} . Обменное взаимодействие возникает как следствие рождения и последующего уничтожения виртуальных электрон-дырочных пар. В начальный момент времени имеется два соседних катиона со спином $S = \frac{1}{2}$ в конфигурации d^1 . Виртуальный перескок электрона с атома 1 на атом 2 приводит к появлению дырки на атоме 1 в конфигурации d^0 и электрона на атоме 2 в конфигурации d^2 . Обратный перескок уничтожает вирту-

альную электрон-дырочную пару и восстанавливает исходные $S = \frac{1}{2}$ конфигурации d^1 , связанные обменом $J = \frac{4t^2}{U}$. Этот известный механизм формирования суперобменного взаимодействия в модели Хаббарда приведен здесь для пояснения многоэлектронных расчетов обменного взаимодействия с учетом возбужденных термов [13, 22]. В многоэлектронном случае мы рассматриваем два иона в электронейтральных конфигурациях d^n (d^5 для Fe^{3+}) с учетом всех необходимых термов (в данном случае HS, LS). Межатомный перескок приводит в формированию дырочных состояний в конфигурации d^{n-1} (d^4 здесь) и электронных в конфигурации d^{n+1} (d^6 здесь). Используя проекционные свойства операторов Хаббарда, построенных на базе многоэлектронных термов электронейтральной, дырочной и электронной конфигураций, мы обобщили метод расчета суперобменного взаимодействия для модели Хаббарда [25] на случай произвольных многоэлектронных конфигураций [13]. Этот подход позволил записать полное обменное взаимодействие в виде суммы парциальных вкладов от различных термов, не только от основного, но и возбужденных. Таким образом, мы можем разделить вклады от HS и LS-термов и проследить изменения обменного взаимодействия при спиновом кроссовере [22].

Все возможные электрон-дырочные виртуальные возбуждения из HS и LS-конфигураций Fe^{3+} ионов показаны на рис. 5. Электронейтральные термы мы нумеруем индексом n_0 , термы с формированием дополнительного электрона – индексом e , термы с удалением одного электрона и формированием дырки – индексом h . Эти термы различаются для случая высокоспиновых и низкоспиновых конфигураций электронейтрального иона.

Гамильтониан суперобменного взаимодействия можно записать, используя модель Гейзенберга

$$\hat{H}_s = - \sum_{i \neq j} J_{ij}^{\text{tot}} \left(\hat{S}_{i n_0} \hat{S}_{j n_0} - \frac{1}{4} \hat{n}_{i n_0}^{(h)} \hat{n}_{j n_0}^{(e)} \right) \quad (1)$$

с обменным взаимодействием

$$J_{ij}^{\text{tot}} = \sum_{he} \frac{J_{ij}(n_0 h, n_0 e)}{(2S_h + 1)(2S_{n_0} + 1)}. \quad (2)$$

Выражение (2) определяется суммой всех возможных виртуальных электрон-дырочных процессов рождения и уничтожения (названных обменными петлями в работе [13]). Знак каждого парциального вклада легко определяется следующим правилом: если спины дырочного и электронного терма равны $S_h = S_e$, то взаимодействие носит АФМ характер.

Если спины электронных и дырочных термов отличаются, $S_h = S_e \pm 1$, то взаимодействие имеет ФМ знак. Полный обмен есть сумма АФМ и ФМ вкладов. Такое же правило определения знака суперобмена было получено ранее в работе [21] для обменного взаимодействия ионов в основном состоянии. Что касается величины каждого вклада, она имеет стандартный вид второго порядка теории возмущений $\sim \frac{t^2}{U_{\text{eff}}}$, где эффективный параметр Хаббарда для каждой обменной петли определяется энергиями участвующих термов как $E(d^{n-1}) + E(d^{n+1}) - 2E(d^n)$. Например, энергии низкоспиновых термов, участвующих в формировании АФМ вклада $J_{3T_1^3T_2}^{\text{AFM}}$ (120°) могут быть записаны следующим образом:

$$E(d^4, {}^3T_1) = E_c(d^4) - 3J_H - 16Dq, \quad (3)$$

$$E(d^5, {}^2T_2) = E_c(d^5) - 4J_H - 20Dq, \quad (4)$$

$$E(d^6, {}^3T_2) = E_c(d^6) - 7J_H - 14Dq. \quad (5)$$

Здесь $E_c(d^n)$ есть независимая от величины спина часть кулоновской энергии иона. $10Dq$ есть энергия кубического кристаллического поля, и хундовский обменный параметр J_H приводит к понижению энергии каждой пары электронов с параллельными спинами. Параметр Хаббарда $U = E_c(d^4) + E_c(d^6) - 2 \cdot E_c(d^5)$. При низких давлениях в HS состоянии оба вклада $J_{5E^5E}(180^\circ)$ и $J_{5E^5T_2}(120^\circ)$ имеют АФМ знак, поскольку $S_e = S_h = \frac{3}{2}$. С ростом давления кристаллическое поле увеличивается. При достижении критического давления P_c достигается величина $10Dq = 3J_H$, происходит спиновый кроссовер, и HS основной терм $|{}^6A_1\rangle$ Fe^{3+} иона сменяется на $|{}^2T_2\rangle$ LS. В LS-состоянии 180° e_g -связь исчезает и 120° -обмен с шестью ближайшими соседями также изменяется. На рисунке 5b показаны четыре обменных вклада $J_{3T_1^3T_2}^{\text{AFM}}$ (120°), $J_{3T_1^1T_1}^{\text{FM}}$ (120°), $J_{1T_2^3T_2}^{\text{FM}}$ (120°), $J_{1T_2^1T_1}^{\text{AFM}}$ (120°), два из которых ФМ и два АФМ характера. Все вклады формируются одинаковым перекрытием t_{2g} и e_g орбиталей с параметром перескока t . Полный обмен в LS состоянии равен $J_{\text{tot}}(120^\circ) = (J_{3T_1^3T_2}^{\text{AFM}} - J_{3T_1^1T_1}^{\text{FM}}) + (J_{1T_2^1T_1}^{\text{AFM}} - J_{1T_2^3T_2}^{\text{FM}})$. Парциальные вклады могут быть записаны следующим образом

$$J_{3T_1^3T_2}^{\text{AFM}} = 4t^2/\Delta({}^3T_1^3T_2),$$

$$\text{где } \Delta({}^3T_1^3T_2) = U + 10Dq - 2J_H, \quad (6)$$

$$J_{3T_1^1T_1}^{\text{FM}} = 4t^2/\Delta({}^3T_1^1T_1),$$

$$\text{где } \Delta({}^3T_1^1T_1) = U + 10Dq - J_H, \quad (7)$$

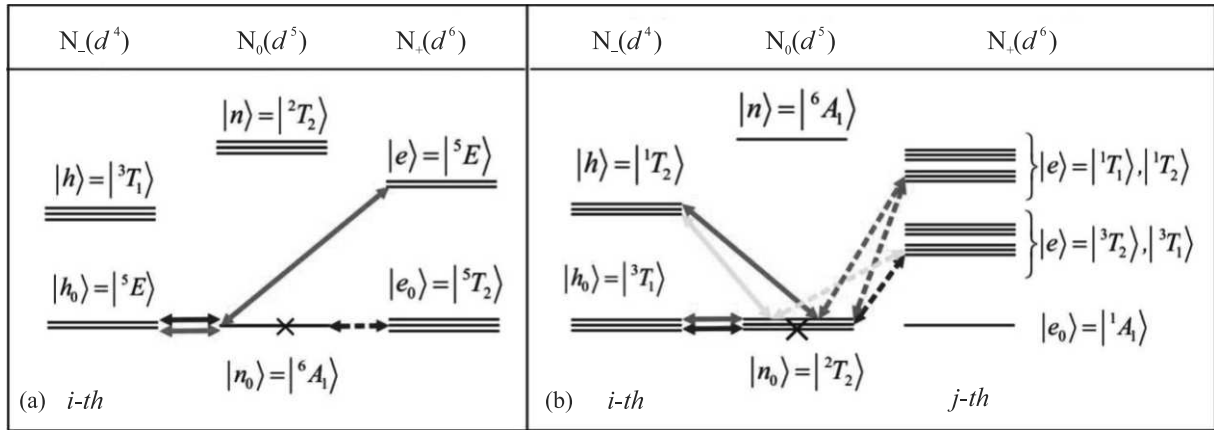


Рис. 5. (Цветной онлайн) Схема формирования Fe-O-Fe суперобмена: (a) – Крестом отмечено заполненное HS основное состояние при давлении $P < P_c$. Синим и зеленым цветом показаны электронные и дырочные возбуждения с ненулевыми матричными элементами, формирующие АФМ обмен между ближайшими соседями J_{5E5E}^{AFM} (180-градусный обмен) и между следующими соседями J_{3T1}^{FM} (120°). Пунктирные и сплошные линии обозначают t_{2g} и e_g виртуальные электроны и дырки. (b) – Крестом отмечено заполненное LS-состояние при высоких давлениях $P > P_c$. FM-вклады J_{3T1}^{FM} (120°), J_{1T2}^{FM} (120°) помечены красным и желтым цветами, АФМ вклады J_{3T1}^{AFM} (120°), J_{1T2}^{AFM} (120°) отмечены синим и зеленым цветом

$$J_{1T2}^{FM} = 4t^2/\Delta ({}^1T_2{}^3T_2),$$

где $\Delta ({}^3T_1{}^3T_2) = U + 10Dq - J_H$, (8)

$$J_{1T2}^{AFM} = 4t^2/\Delta ({}^1T_2{}^1T_1),$$

где $\Delta ({}^3T_1{}^3T_2) = U + 10Dq$. (9)

Сумма вкладов (6)–(9) дает полный обмен в низкоспиновом состоянии. В точке кроссовера, где $10Dq = 3J_H$, этот обмен можно записать в компактной форме

$$J_{LS} = \frac{4t^2 J_H^2}{(3(U + J_H)(U + 2J_H)(U + 3J_H))}. \quad (10)$$

Аналогично можно записать суперобменное взаимодействие для высокоспинового состояния в точке кроссовера

$$J_{HS} = \frac{2t^2}{(15(U + J_H))}, \quad (11)$$

$$\frac{J_{LS}}{J_{HS}} (P = P_c) = \frac{10J_H^2}{(U + 2J_H)(U + 3J_H)}. \quad (12)$$

Типичные значения параметров для $FeVO_3$, найденные из сопоставления с экспериментальными данными [10], равны $U = 4.2$ эВ, $J_H = 0.7$ эВ. С этими параметрами отношение (12) равно 0.14. В приближении среднего поля можно записать $T_N = JzS(S + 1)/3$ с $S = \frac{5}{2}$ для HS и $S = \frac{1}{2}$ для LS, отношение

$T_N(LS)/T_N(HS)$ при $P = P_c$ равно 0.012. Температура Нееля перед кроссовером в HS состоянии равняется 600 К [10], для температуры Нееля в LS находим $T_N(P > P_c) = 7.2$ К. Как известно, в приближении среднего поля температура Нееля в 2–3 раза выше экспериментального значения, так что более реалистичная оценка возможной температуры магнитного упорядочения в низкоспиновом состоянии будет 2–3 К.

IV. Заключение. Использованный в настоящей работе метод ядерной дифракции позволяет разделить ФМ и АФМ порядок, в отличие от измерений мессбауэровских спектров и спектров ядерного рассеяния вперед. Спектры ядерной дифракции, измеренные для рефлекса (222), имеют место и для ФМ, и для АФМ порядка. В то же время спектры для рефлекса (111) характерны только для АФМ порядка. Обнаруженное нами сосуществование HS и LS состояний в интервале давлений 48–54 ГПа связано с двухфазностью системы в области гистерезиса фазового перехода первого рода. Приведенные выше теоретические оценки объясняют отсутствие магнитного упорядочения в низкоспиновом состоянии при измерениях выше 9 К. Резкое понижение обменного взаимодействия выше точки кроссовера обусловлено значительной компенсацией АФМ и ФМ вкладов. Отметим, что в высокоспиновом состоянии нет ФМ вкладов в обменное взаимодействие.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда # 18-12-00022.

Авторы благодарны А. Чумакову за предоставленные образцы монокристаллов, обогащенных изотопом ^{57}Fe , и И. Сергееву, К. Глазырину, О. Леопольду, Р. Руфери, А. Джафари и Р. Штейнбрюгге за проведение измерений в условиях, когда российские заявители проекта не могли выехать на эксперимент в DESY из-за COVIDa.

1. I. S. Lyubutin and A. G. Gavriiliuk, *Phys.-Uspekhi* **52**, 989 (2009).
2. R. Sinmyo, C. McCammon, and L. Dubrovinsky, *American Mineralogist: Journal of Earth and Planetary Materials* **102**, 1263 (2017).
3. J.-F. Lin, S. Speziale, Z. Mao, and H. Marquardt, *Rev. Geophys.* **51**, 244 (2013).
4. C. McCammon, K. Glazyrin, A. Kantor, I. Kantor, I. Kupenko, O. Narygina, V. Potapkin, C. Prescher, R. Sinmyo, A. Chumakov, R. Rüffer, I. Sergueev, G. Smirnov, and L. Dubrovinsky, *High Pressure Research* **33**, 663 (2013).
5. V. Cerantola, C. McCammon, I. Kupenko, I. Kantor, C. Marini, M. Wilke, L. Ismailova, N. Solopova, A. Chumakov, S. Pascarelli, and L. Dubrovinsky, *American Mineralogist* **100**, 2670 (2015).
6. I. Y. Kantor, L. Dubrovinsky, and C. McCammon, *Phys. Rev. B* **73**, 100101 (2006).
7. S. Aksenov, A. Mironovich, I. S. Lyubutin, A. G. Ivanova, I. Troyan, R. A. Sadykov, S. S. Saxen-Montua, and A. G. Gavriiliuk, *JETP Lett.* **114**, 742 (2021).
8. Y. S. Orlov, S. Nikolaev, and S. Ovchinnikov, *JETP* **129**, 1062 (2019).
9. S. Ovchinnikov, V. Rudenko, N. Kazak, I. Edelman, and V. Gavrichkov, *JETP* **131**, 177 (2020).
10. A. Gavriiliuk, I. Trojan, I. Lyubutin, S. Ovchinnikov, and V. Sarkissian, *JETP* **100**, 688 (2005).
11. I. Troyan, M. Eremets, A. Gavriiliuk, I. Lyubutin, and V. Sarkisyan, *JETP* **78**, 13 (2003).
12. W. Xu, W. Dong, S. Layek, M. Shulman, K. Glazyrin, E. Bykova, M. Bykov, M. Hanfland, M. P. Pasternak, I. Leonov, E. Greenberg, and G. Kh. Rozenberg, *Sci. Rep.* **12**, 1 (2022).
13. V. Gavrichkov, S. Polukeev, and S. Ovchinnikov, *JETP* **127**, 713 (2018).
14. N. Kazak, Nfs and nd measurements on febo3. Experimental report desy # 11009361, petra iii p01.
15. R. Röhlsberger, *Nuclear condensed matter physics with synchrotron radiation*, Springer Science & Business Media, Berlin (2004), v. 208.
16. W. Sturhahn, *Hyperfine Interactions* **125**, 149 (2000).
17. M. Eibschütz, L. Pfeiffer, and J. Nielsen, *J. Appl. Phys.* **41**, 1276 (1970).
18. M. Pernet, D. Elmale, and J.-C. Joubert, *Solid State Commun.* **8**, 1583 (1970).
19. A. I. Liechtenstein, M. Katsnelson, V. Antropov, and V. Gubanov, *J. Magn. Magn. Mater.* **67**, 65 (1987).
20. E. Stepanov, S. Brener, F. Krien, M. Harland, A. Lichtenstein, and M. Katsnelson, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 037204 (2018).
21. V. Y. Irkhin and Y. P. Irkhin, *Physica Status Solidi (b)* **183**, 9 (1994).
22. V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **101**, 094409 (2020).
23. P. W. Anderson, in *Solid state physics*, Elsevier, N.Y., London (1963), v. 14, p. 99.
24. L. Bulaevski, E. Nagaev, and D. Khomskii, *JETP* **27**, 836 (1968).
25. K. Chao, J. Spalek, and A. Oles, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **10**, L271 (1977).

Униполярные локализованные автоволны сдвиговой деформации в неравновесном парамагнетике

С. В. Сазонов¹⁾

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

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

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

Поступила в редакцию 12 сентября 2022 г.

После переработки 18 сентября 2022 г.

Принята к публикации 18 сентября 2022 г.

Показано, что в кубическом парамагнитном кристалле, подвергнутом в направлении внешнего магнитного поля продольной статической деформации, может сформироваться наносекундный униполярный солитоноподобный импульс типа локализованной автоволны сдвиговой деформации, которая распространяется перпендикулярно к магнитному полю. Приток в импульс запасенной в парамагнитных ионах энергии за счет неравновесной начальной населенности их стационарных квантовых состояний компенсируется необратимыми потерями, вызванными затуханием импульса из-за его взаимодействия с тепловыми колебаниями кристаллической решетки, дефектами и микронеоднородностями.

DOI: 10.31857/S1234567822200101, EDN: kpgogg

1. Введение. Одной из тенденций развития физической акустики является поиск и предсказание явлений, аналогичных тем, что были обнаружены или предсказаны в нелинейной оптике [1]. В значительной степени это касается нелинейных явлений, связанных с солитонной динамикой. Так, вслед за открытием и теоретическим объяснением резонансного оптического эффекта самоиндуцированной прозрачности (СИП) [2] была обнаружена и всесторонне исследована теоретически акустическая СИП (АСИП) на парамагнитных примесях в твердых телах [3–5]. Довольно активно исследовались также акустические аналоги нерезонансных оптических солитонов [6].

Временные длительности исследованных акустических солитонов лежат в широком интервале значений от микро- до субмикросекунд [7, 8]. При этом несущие частоты заполняют дальний ультразвуковой диапазон от единиц до сотен гигагерц.

Отмеченная выше тенденция также имеет место в исследовании оптических и акустических солитонов все более коротких длительностей, содержащих порядка одного и даже половины периода колебаний соответствующей физической природы [9–17]. На сегодняшний день можно с уверенностью говорить об оптических и акустических униполярных (полупериодных) импульсах [15, 16].

Отдельной строкой следует выделить исследования диссипативных оптических солитонов [18–24]. Здесь изучены свойства как квазимонохроматических, так и униполярных солитонов. В согласии с отмеченной выше тенденцией рассмотрены акустические аналоги оптических диссипативных солитонов [25, 26].

Следует отметить, что солитоноподобные решения, исследованные в [25, 26], а также в [27–29] нельзя в строгом смысле назвать диссипативными солитонами. Дело в том, что в отличие от диссипативных солитонов, описанных, например, в монографии [18], данные солитоноподобные решения могут быть реализованы в течение короткого времени, ограниченного характерным временем T_1 релаксации населенностей квантовых уровней. Поэтому такие решения названы солитоноподобными диссипативными структурами (объектами) [25, 26], имеющими свои аналоги в оптике [27–29]. Таким образом, чем длиннее T_1 , тем больше время жизни данных солитоноподобных объектов.

В работе [30] в качестве долгоживущих квантовых состояний предложено использовать возбужденные рамановские подуровни. Непосредственный квантовый переход между рамановскими подуровнями запрещен. Такой переход возможен только через вышележащий по энергетической шкале промежуточный квантовый уровень. Таким образом, разрешенный переход является двухфотонным. В таких

¹⁾e-mail: sazonov.sergey@gmail.com

условиях при инверсной населенности рамановских подуровней возможно формирование униполярных солитоноподобных объектов [30]. При этом усиление таких объектов за счет притока запасенной на рамановских подуровнях энергии компенсируется потерями в результате необратимой релаксации в системе других квантовых переходов.

Целью настоящей работы является исследование принципиальной возможности и условий формирования униполярных локализованных объектов акустической природы из-за двухфононных переходов в системе неравновесно населенных штарковских и зеэмановских подуровней примесных парамагнитных ионов.

2. Постановка задачи и основные уравнения. Будем считать, что кубический кристалл, содержащий примесные парамагнитные ионы, помещен во внешнее магнитное поле \mathbf{B} и в поле продольной статической деформации. Оба поля направлены вдоль оси z , параллельной кристаллической оси четвертого порядка. Статическая деформация создает градиент внутрикристаллического электрического поля, вызывающий квадрупольное штарковское расщепление квантовых уровней парамагнитных ионов. В свою очередь, магнитное поле вызывает зеэмановское расщепление данных уровней. При этом в перпендикулярном направлении, вдоль оси x , на кристалл подается униполярный импульс поперечного ультразвука (импульс сдвиговой деформации). Данный импульс создает в кристалле локальные градиенты внутреннего электрического поля, вызывающие за счет механизма ван Флека [31, 32] квадрупольные квантовые переходы между образовавшимися в упомянутых выше статических полях подуровнями парамагнитных ионов.

Опыт показывает, что наиболее сильное взаимодействие с полем деформации кристаллической решетки испытывают парамагнитные ионы с эффективным спином $S = 1$ [32]. Магнитное поле снимает вырождение по проекции S_z данного спина на ось z . Из-за квадрупольного эффекта Штарка в статическом поле деформации снимается вырождение по модулю проекции S_z данного спина на ось z . Как результат, внутри парамагнитного иона формируется неэквидистантная трехуровневая система, показанная на рис. 1. При этом считается, что штарковское расщепление доминирует над зеэмановским.

Оператор Гамильтона эффективного спина, взаимодействующего с отмеченными выше статическими полями и локальным полем сдвиговой деформации ультразвукового импульса, имеет вид [32]

$$\hat{H}_s = \hbar\omega_0 \hat{S}_z + G_{\parallel} \varepsilon_{zz}^{(0)} \hat{S}_z^2 + 0.5G_{\perp} \varepsilon_{zx} (\hat{S}_z \hat{S}_x + \hat{S}_x \hat{S}_z). \quad (1)$$

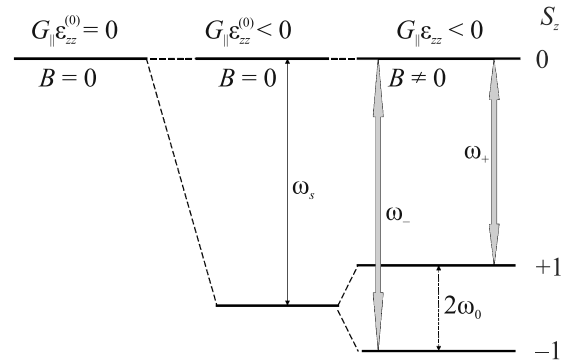


Рис. 1. Расщепление квантового состояния эффективного спина в сильном поле продольной статической деформации $\varepsilon_{zz}^{(0)}$ и параллельном ему слабом магнитном поле. Магнитное поле, направленное вдоль оси z , снимает вырождение по проекции эффективного спина на данное направление, а поле статической деформации – по модулю данной проекции

Здесь \hbar – постоянная Планка, $\omega_0 = g\mu_B B/\hbar$ – частота зеэмановских расщеплений спиновых подуровней, μ_B – магнетон Бора, g – фактор Ланде, G_{\parallel} и G_{\perp} – постоянные взаимодействия, соответственно, продольных и поперечных деформаций кристалла с эффективным спином, $\varepsilon_{zx} = 0.5\partial u_z/\partial x$ – компонента тензора сдвиговой деформации кристалла, u_z – компонента вектора сдвига униполярного импульса, подаваемого на кристалл, \hat{S}_z и \hat{S}_x – спиновые матрицы, имеющие вид [32]:

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Представляя матрицу плотности $\hat{\rho}$ эффективного спина в виде

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+0} & \rho_{+-} \\ \rho_{+0}^* & \rho_{00} & \rho_{0-} \\ \rho_{+-}^* & \rho_{0-}^* & \rho_{--} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

после использования операторного уравнения фон Неймана с учетом (1) и (2) будем иметь

$$i \frac{\partial \rho_{+0}}{\partial t} = -\omega_+ \rho_{+0} + \Omega(\rho_{00} - \rho_{++} + \rho_{+-}),$$

$$i \frac{\partial \rho_{0-}}{\partial t} = \omega_- \rho_{0-} + \Omega(\rho_{00} - \rho_{--} + \rho_{+-}), \quad (4)$$

$$i \frac{\partial \rho_{+-}}{\partial t} = 2\omega_0 \rho_{+-} + \Omega(\rho_{0-}^* - \rho_{0-}), \quad (5)$$

$$i \frac{\partial \rho_{++}}{\partial t} = \Omega(\rho_{+0}^* - \rho_{+0}), \quad i \frac{\partial \rho_{--}}{\partial t} = \Omega(\rho_{0-}^* - \rho_{0-}), \quad (6)$$

$$i \frac{\partial \rho_{00}}{\partial t} = \Omega(\rho_{+0} - \rho_{+0}^* + \rho_{0-} - \rho_{0-}^*). \quad (7)$$

Здесь

$$\Omega = \frac{G_{\perp} \varepsilon_{zx}}{2\sqrt{2}\hbar} = \frac{G_{\perp}}{4\sqrt{2}\hbar} \frac{\partial u_z}{\partial x}, \quad (8)$$

нижние индексы $+$, 0 и $-$ у элементов матрицы плотности обозначают значения проекции S_z эффективного спина $+1$, 0 и -1 соответственно (рис. 1), $\omega_+ = \omega_S + \omega_0$ и $\omega_- = \omega_S - \omega_0$ – частоты квантовых переходов $+\leftrightarrow 0$ и $- \leftrightarrow 0$ соответственно, $\omega_S = |G_{\parallel} \varepsilon_{zz}^{(0)}|/\hbar$ – частота квадрупольного штарковского расщепления из-за статической деформации кристалла.

Населенности квантовых состояний удовлетворяют условию нормировки $\rho_{++} + \rho_{00} + \rho_{--} = 1$.

В материальных уравнениях (4)–(7) мы пренебрегли релаксационными слагаемыми, так как считаем, что длительность τ_p импульса значительно короче всех времен релаксации. Такое условие с хорошим запасом выполняется для наносекундных импульсов, так как характерные время T_2 фазовой релаксации и время T_1 релаксации населенностей квантовых уровней порядка 10^{-5} с и 10^{-3} с соответственно [3].

Здесь важно выполнение неравенства $G_{\parallel} \varepsilon_{zz}^{(0)} < 0$. Именно в этом случае состояния с $S_z = \pm 1$ лежат ниже по энергии, чем состояние с $S_z = 0$ (рис. 1). Например, для ионов Fe^{2+} , внедренных в кубический кристалл MgO , имеем $G_{\parallel} > 0$ [3]. Следовательно, в этом случае $\varepsilon_{zz}^{(0)} < 0$. Таким образом, статическая деформация должна быть деформацией сжатия.

Условие доминирования квадрупольного штарковского расщепления над зеемановским имеет вид неравенства $\omega_S \gg \omega_0$. Взяв для только что рассмотренного примера $G_{\parallel} \sim 10^{-13}$ эрг [3, 31], $|\varepsilon_{zz}^{(0)}| \sim 10^{-4}$, будем иметь $\omega_S \sim 10^{10}$ с $^{-1}$. Величину B магнитного поля можно подобрать таким, чтобы частота зеемановского расщепления ω_0 была порядка 10^8 с $^{-1}$. В этих условиях можно пренебречь неоднородным уширением $\delta\omega$ задействованных квантовых переходов, для которых $\delta\omega \sim 10^7$ с $^{-1}$ [33].

Используя полуклассический подход, запишем одномерные уравнения для поля сдвиговой деформации [13]:

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} = \frac{\delta}{\delta p_z} (H_a + \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{H}_s)),$$

$$\frac{\partial p_z}{\partial t} = -\frac{\delta}{\delta u_z} (H_a + \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{H}_s)),$$

где

$$H_a = 0.5 \int [p_z^2/\rho + \rho a^2 (\partial u_z/\partial x)^2] d^3 \mathbf{r},$$

p_z – объемная плотность импульса локальной сдвиговой деформации в направлении оси z , ρ и a – соответственно равновесная плотность кристалла и линейная скорость поперечного звука в нем, а интегрирование ведется по всему объему кристалла.

Отсюда, а также из (1)–(3) и (8) будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} - 2qa \frac{\partial^3 \Omega}{\partial t^3} = \\ = \frac{nG_{\perp}^2}{32\hbar\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\rho_{+0} + \rho_{+0}^* - \rho_{0-} - \rho_{0-}^*), \end{aligned} \quad (9)$$

где n – концентрация парамагнитных ионов.

В левой части (9) добавлено последнее эмпирическое слагаемое, описывающее затухание ультразвука при его взаимодействии с тепловыми колебаниями кристаллической решетки, дефектами, микронеоднородностями и т.п. [37, 38], где q – параметр, характеризующий данное затухание.

Таким образом, самосогласованная система уравнений (4)–(7) и (9) описывает нелинейное распространение поперечного ультразвука в намагниченном и статически деформированном парамагнитном кристалле.

Затухание ультразвука, описываемое последним слагаемым в левой части, может быть компенсировано запасом энергии при неравновесной населенности зеемановских состояний парамагнитных ионов. Например (ниже это мы будем предполагать), состояние с $S_z = +1$ может вначале быть более заселенным, чем состояние с $S_z = -1$ (рис. 1).

Из приведенных выше оценок видно, что выполняется условие

$$\omega_S \tau_p \gg 1, \quad (10)$$

которое можно использовать для упрощения материальных уравнений (4)–(7). Тогда в левых частях уравнений (4) можно положить приближенно $\partial \rho_{+0}/\partial t = \partial \rho_{0-}/\partial t = 0$. Выражая в этих случаях из (4) ρ_{+0} и ρ_{0-} , после подстановки получившихся выражений в (5) и (6) при учете неравенства $\omega_S \gg \omega_0$ придем к системе вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} = 2\omega_0 V, \quad \frac{\partial V}{\partial t} = -2\omega_0 U + QW, \\ \frac{\partial W}{\partial t} = -QV, \end{aligned} \quad (11)$$

где $Q = \Omega^2/\omega_S$ и введены вещественные блоховские переменные

$$U = \frac{\rho_{+-} + \rho_{+0}^*}{2}, \quad V = \frac{\rho_{+-} - \rho_{+0}^*}{2i}, \quad W = \frac{\rho_{++} - \rho_{--}}{2}.$$

Совершая аналогичные преобразования в правой части (9), будем иметь

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} - a_0^2 \frac{\partial \Omega}{\partial x^2} = 2a^2 \eta \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\Omega U) + 2qa \frac{\partial^3 \Omega}{\partial t^3}, \quad (12)$$

где $a_0^2 = a^2[1 - \eta(1 - 3w_0)]$, $\eta = \frac{nG_{\perp}^2}{16\hbar\omega_S\rho a^2}$, w_0 – начальная населенность верхнего квантового состояния с $S_z = 0$.

При выводе (12) использовано условие нормировки населенностей квантовых уровней, в котором из условия (10) было положено $\rho_{00} \approx w_0$.

Система материальных уравнений (11) аналогична системе, описывающей двухквантовые переходы между рамановскими подуровнями при вынужденном комбинационном рассеянии света [36]. В (11) роль рамановских подуровней и частоты нормальной колебательной моды молекулы выполняют, соответственно, зеэмановские подуровни, характеризуемые проекциями эффективного спина $S_z = \pm 1$, и частота $2\omega_0$ перехода между ними (рис. 1).

Взяв $n \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $G_{\perp} \sim 10^{-14} \text{ эрг}$, $\rho \approx 5 \text{ г/см}^3$ [3, 31, 32], $a \approx 5 \cdot 10^5 \text{ см/с}$, $\omega_S \sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$, найдем $\eta \sim 10^{-5} \ll 1$. По этой причине в (12) можно положить $a_0 \approx a$ и считать малой правую часть данного уравнения. Тогда можно редуцировать волновое уравнение от второго порядка к первому с помощью приближения однонаправленного распространения импульса со скоростью, близкой к линейной скорости a [37]. В результате получим

$$\frac{\partial \Omega}{\partial x} + \frac{1}{a} \frac{\partial \Omega}{\partial t} = \frac{\eta}{a} \frac{\partial}{\partial t} (\Omega U) + q \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2}. \quad (13)$$

Таким образом, условие (10) позволило нам формально исключить из рассмотрения возбуждение квантовых переходов $- \leftrightarrow 0$ и $+ \leftrightarrow 0$. Исследование свелось к рассмотрению динамики поля импульса и возбуждения запрещенного перехода $- \leftrightarrow +$ квадратом поля через промежуточное состояние с $S_z = 0$ на основе самосогласованной системы уравнений (11) и (13).

3. Униполярная автоволна. Из приведенных выше численных оценок следует, что с хорошей точностью выполняется условие

$$\omega_0 \tau_p \ll 1. \quad (14)$$

Используя (14), можно из системы (11), (13) исключить материальные переменные. Для этого в (11) положим в нулевом приближении по малому параметру (14) $\omega_0 = 0$. Тогда, считая, что до импульсного воздействия на среду (при $t = -\infty$) $U = V = 0$, $W = W_{-\infty}$, из (11) найдем

$$U = 0, \quad V = W_{-\infty} \sin \theta, \quad W = W_{-\infty} \cos \theta, \quad (15)$$

где

$$\theta = \int_{-\infty}^t Q dt' = \frac{1}{\omega_S} \int_{-\infty}^t \Omega^2 dt'. \quad (16)$$

В этом случае из первого выражения (11) будем иметь

$$\frac{\partial U}{\partial t} = 2\omega_0 W_{-\infty} \sin \theta. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (13) с учетом первого выражения (15), придем к нелинейному интегродифференциальному волновому уравнению

$$\frac{\partial \Omega}{\partial x} + \frac{1}{a} \frac{\partial \Omega}{\partial t} = \mu \Omega \sin \theta + q \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2}, \quad (18)$$

где $\mu = 2\omega_0 \eta W_{-\infty} / a$.

При инверсной начальной населенности зеэмановских подуровней имеем $W_{-\infty} > 0$. Следовательно, $\mu > 0$. Данный запас энергии, как было замечено выше, способен компенсировать потери, описываемые последним слагаемым в правой части (18).

Инверсная населенность зеэмановских подуровней может быть создана, например, предварительным импульсным воздействием на парамагнитные ионы резонансным импульсом продольного ультразвука [3, 28]. В этом случае ответственным за резонансный квантовый переход $- \rightarrow +$ является отмеченный выше механизм ван Флека. Для дополнительного уменьшения населенности основного состояния, характеризующегося проекцией эффективного спина $S_z = -1$, может быть задействован также квантовый переход $- \rightarrow 0$ за счет резонансного магнитно-дипольного взаимодействия с электромагнитным импульсом частоты ω_+ (рис. 1).

Уравнение (18) (см. также (16)) формально совпадает с уравнением (12) из статьи [30]. Поэтому проведем здесь анализ, воспользовавшись найденным в [30] приближенным солитоноподобным решением уравнения (18):

$$\Omega = \Omega_m \text{sech} \left(\frac{t - x/v}{\tau_p} \right), \quad (19)$$

где

$$\Omega_m = \sqrt{\frac{2\pi\omega_S}{3\tau_p}}, \quad \frac{1}{v} = \frac{1}{a} - \frac{q}{\tau_p}, \quad \tau_p = \sqrt{\frac{3\pi q}{8\mu}}. \quad (20)$$

На первый взгляд, данное решение обладает всеми свойствами диссипативного солитона. Действительно, в данном локализованном решении отсутствуют непрерывные свободные параметры. Амплитуда Ω_m солитоноподобного униполярного импульса, его скорость v и временная длительность τ_p

принимают фиксированные значения, зависящие от параметров среды, которые определяются коэффициентами уравнения (18). В то же время состояния среды до и после прохождения импульса отличаются друг от друга и обладают конечными временами жизни, т.е. являются метастабильными. Из (15), (16) и (19) следует, что при $t \rightarrow +\infty$ динамические параметры W и V принимают соответственно значения $W_{+\infty} = -W_{-\infty}/2 < 0$ и $V_{+\infty} = -\sqrt{3}W_{-\infty}/2$. В то же время параметр U остается пренебрежимо малым. Таким образом, приток энергии в импульс сдвиговой деформации от каждого парамагнитного иона составляет $2\hbar\omega_0(W_{-\infty} - W_{+\infty}) = 3\hbar\omega_0W_{-\infty}$. Данный приток компенсируется необратимыми потерями, не связанными с парамагнитными ионами.

Так как $W_{+\infty} \neq 0$, на запрещенном переходе с частотой $2\omega_0$ остается индуцированная прошедшим импульсом когерентность. Однако данная когерентность, как видно из (11) и (12), неспособна без дополнительного затравочного поля стимулировать генерацию колебаний сдвиговой деформации в кристалле. Время жизни в данном суперпозиционном состоянии порядка времени необратимой фазовой релаксации T_2 на рассматриваемом переходе. При $\omega_0 \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$ для ионов Fe^{2+} в кристалле MgO $T_2 \sim 10^{-5} \text{ с}$ [3]. В нашем случае для $\omega_0 \sim 10^8 \text{ с}^{-1}$ и температурах T жидкого гелия выполняется условие $\hbar\omega_0 \ll k_B T$, где k_B – постоянная Больцмана. При такой ситуации $T_2 \sim \omega_0^{-2}$ [38]. Тогда в рассматриваемом нами случае имеем $T_2 \sim 10 \text{ с}$. Время жизни начального состояния парамагнитных ионов, характеризующегося инверсной населенностью зеемановских подуровней и нулевой когерентностью на соответствующем квантовом переходе, порядка времени энергетической релаксации T_1 , которое на два порядка превышает время T_2 .

Итак, при прохождении солитоноподобного импульса (19) среда совершает переход между двумя долгоживущими метастабильными состояниями. Следуя терминологии, принятой в [39], назовем солитоноподобный сигнал (19) локализованной автоволной.

Воспользовавшись результатами работы [30], запишем пороговые условия на входные параметры импульса сдвиговой деформации, при которых данный униполярный импульс способен преобразоваться в локализованную автоволну (19):

$$\tau_0 > \tau_c \equiv \frac{4\sqrt{2}}{9}\tau_p \approx 0.63\tau_p,$$

$$A_0 \equiv \frac{1}{\omega_s} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_0^2 dt > A_c \equiv \frac{3\pi}{4} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\tau_c^2}{\tau_0^2}} \right). \quad (21)$$

Здесь τ_0 и Ω_0 – соответственно длительность и временной профиль импульса деформации на входе в среду, величина A_0 , очевидно, пропорциональна входной энергии импульса.

Приняв к сведению, что $I = 0.5\rho a^3 \varepsilon_{zx}^2$ есть интенсивность импульса, приходим к выводу, что величина $\sigma = \rho a^3 \varepsilon_{zx}^2 \tau_p$ имеет смысл энергии импульса на единицу площади его поперечного сечения. Тогда можно записать $A_0 = \sigma_0/\sigma_c$, где σ_0 – входная энергия импульса на единицу площади, а $\sigma_c = 4\hbar^2\omega_s\rho a^3/G_{\perp}^2$ – характерное для рассматриваемой среды значение такой удельной энергии.

Униполярный импульс на входе в среду может быть создан за счет электрострикции с помощью воздействия на кристалл мощным наносекундным импульсом [6, 7].

При этом легко видеть, что введенная выше энергия на единицу поперечной площади сформировавшейся локализованной автоволны (19) равна $A \equiv \omega_s^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega^2 dt = \sigma/\sigma_c = 4\pi/3$.

Приведем некоторые численные оценки. Для гигагерцовых частот имеем $q\omega^2 = 0.3 \text{ см}^{-1}$ [40]. Взяв $\omega = 5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, найдем отсюда $q \sim 10^{-20} \text{ с}^2/\text{см}$. При принятых выше параметрах среды имеем $\mu \sim 10^{-2} \text{ см}^{-1}$. Тогда из последнего выражения (20) получим $\tau_p \sim 10^{-9} \text{ с}$. Из последнего выражения (20) будем иметь, $q/\tau_p \sim 10^{-11} \text{ с}/\text{см} \ll 1/a$. Отсюда, в частности, следует, что скорость автоволны практически равна линейной скорости волны сдвиговой деформации в рассматриваемом кристалле.

Для характерной удельной энергии σ_c при использованных выше значениях параметров имеем оценку $\sigma_c \sim 10 \text{ мкДж}/\text{см}^2$. Так как $\sigma \sim \sigma_c$, то для интенсивности I импульса находим $I \sim \sigma/\tau_p \sim 10^4 \text{ Вт}/\text{см}^2$. Тогда его относительная деформация $\varepsilon_{zx} \sim \sqrt{I/\rho a^3} \sim 10^{-4} - 10^{-3}$. Считая, что характерный поперечный размер упругого импульса $d \sim 1 \text{ мм}$, для его мощности P и энергии w найдем соответственно $P \sim Id^2 \sim 10^2 \text{ Вт}$ и $w \sim P\tau_p \sim 0.1 \text{ мкДж}$.

Таким образом, локализованная униполярная автоволна сдвиговой деформации представляет собой достаточно мощный сигнал наносекундной длительности.

4. Заключение. Проведенное исследование показало, что в парамагнитном кристалле, помещенном во внешнее магнитное поле и поле продольной статической деформации, могут быть созданы условия для двухквантовых спин-фононных переходов, аналогичных рамановским двухфотонным переходам в оптике. Роль частоты данных переходов играет частота зеемановского расщепления состояний

эффективных спинов. При инверсной начальной населенности зеэмановских подуровней в кристалле может сформироваться наносекундный униполярный солитоноподобный импульс сдвиговой деформации, который мы назвали локализованной автоволной. Здесь приток энергии из парамагнитных ионов компенсируется необратимыми потерями, обусловленными затуханием импульса из-за его рассеяния на тепловых колебаниях кристаллической решетки, дефектах и микронеоднородностях. Важно отметить, что при прохождении импульса парамагнитные ионы переходят из неравновесного состояния с инверсной населенностью зеэмановских подуровней в другое метастабильное состояние. Поэтому время, в течение которого такие объекты могут наблюдаться в экспериментальных условиях, ограничены сверху характерными временами жизни ионов в этих состояниях. Как показали проведенные выше оценки, это время достаточно велико и составляет порядка десятков секунд.

Пороговые условия (21) отражают существенно нелинейный характер формирования рассмотренной здесь локализованной автоволны.

1. Ф. В. Бункин, Ю. А. Кравцов, Г. А. Ляхов, УФН **149**, 391 (1986) [F. V. Bunkin, Yu. A. Kravtsov, and G. A. Lyakhov, Sov. Phys.-Uspekhi **29**, 607 (1986)].
2. S. L. McCall and E. L. Hahn, Phys. Rev. Lett. **18**, 908 (1967).
3. N. S. Shiren, Phys. Rev. B **2**, 2471 (1970).
4. Г. А. Денисенко, ЖЭТФ **60**, 2270 (1971) [G. A. Denisenko, JETP **33**, 1220 (1971)].
5. В. В. Самарцев, Б. П. Смоляков, Р. З. Шарипов, Письма в ЖЭТФ **20**, 644 (1974) [V. V. Samartsev, B. P. Smolyakov, and R. Z. Sharipov, JETP Lett. **20**, 296 (1974)].
6. В. Э. Гусев, А. А. Карабутов, *Лазерная оптоакустика*, Наука, М. (1991).
7. С. А. Ахманов, В. Э. Гусев, УФН **162**, 3 (1992) [S. A. Akhmanov and V. E. Gusev, Sov. Phys.-Uspekhi **35**, 153 (1992)].
8. С. А. Ахманов, В. А. Выслоух, А. С. Чиркин, *Оптика фемтосекундных лазерных импульсов*, Наука, М. (1988).
9. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
10. 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)].
11. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, Письма в ЖЭТФ **51**, 252 (1990) [E. M. Belenov and A. V. Nazarkin, JETP Lett. **51**, 288 (1990)].
12. D. H. Auston, K. P. Cheung, J. A. Valdmanis, and D. A. Kleinman, Phys. Rev. Lett. **53**, 1555 (1984).
13. S. V. Sazonov, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 6295 (1994).
14. А. А. Заболотский, Письма в ЖЭТФ **76**, 709 (2002) [A. A. Zabolotskii, JETP Lett. **76**, 607 (2002)].
15. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Phys. Rev. E **73**, 056614 (2006).
16. Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **113**, 636 (2021) [R. M. Arkhipov, JETP Lett. **113**, 611 (2021)].
17. 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. Tsypkin, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **113**, 242 (2021)].
18. Н. Н. Розанов, *Диссипативные оптические и родственные солитоны*, Физматлит, М. (2021).
19. N. Akhmediev, A. Ankiewicz, J. M. Soto-Crespo, and Ph. Grelu, International Journal of Bifurcation and Chaos **19**, 2621 (2009).
20. N. A. Veretenov, N. N. Rosanov, and S. V. Fedorov, Phys. Rev. Lett. **117**, 183901 (2016).
21. С. В. Федоров, Н. Н. Розанов, Н. А. Веретенев, Письма в ЖЭТФ **107**, 342 (2018) [S. V. Fedorov, N. N. Rosanov, and N. A. Veretenov, JETP Lett. **107**, 327 (2018)].
22. 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)].
23. Н. А. Веретенев, Н. Н. Розанов, С. В. Федоров, УФН **192**, 143 (2022) [N. A. Veretenov, N. N. Rosanov, and S. V. Fedorov, Phys.-Uspekhi **65**, 131 (2022)].
24. V. E. Lobanov, N. M. Kondratiev, and I. A. Bilenko, Opt. Lett. **46**, 2380 (2021).
25. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **113**, 612 (2021) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **113**, 592 (2021)].
26. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **114**, 102 (2021) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **114**, 104 (2021)].
27. S. V. Sazonov, Phys. Rev. A **103**, 053512 (2021).
28. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **114**, 160 (2021) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **114**, 132 (2021)].
29. S. V. Sazonov, Laser Physics Lett. **18**, 105401 (2021).
30. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **116**, 25 (2022) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **116**, 22 (2022)].
31. В. А. Голенищев-Кутузов, В. В. Самарцев, Н. К. Соловаров, Б. М. Хабибуллин, *Магнитная квантовая акустика*, Наука, М. (1977).

32. Дж. Такер, В. Рэмpton, *Гиперзвук в физике твердого тела*, Мир, М. (1975) [J. W. Tucker and V. W. Rampton, *Microwave Ultrasonics in Solid State Physics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1972)].
33. У.Х. Копвиллем, В.Р. Ризаев, *ЖЭТФ* **65**, 2297 (1973) [U. Kh. Korvillem and V. R. Rizaev, *Sov. Phys. JETP* **38**, 1147 (1974)].
34. К. Н. Баранский, *Физическая акустика кристаллов*, МГУ, М. (1991).
35. В. А. Красильников, В. В. Крылов, *Введение в физическую акустику*, Наука, М. (1984).
36. Н. И. Коротеев, И. Л. Шумай, *Физика мощного лазерного излучения*, Наука, М. (1991).
37. J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, P. J. Caudrey, and R. K. Bullough, *J. Phys. A* **6**, 1337 (1973).
38. С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев, *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп*, Наука, М. (1972).
39. В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно, *Автоволновые процессы*, Наука, М. (1987).
40. J. de Klerk, *Phys. Rev.* **139**, A1635 (1965).

Numerical simulation of the performance of single qubit gates for trapped ions

L. A. Akopyan⁺¹⁾, O. Lakhmanskaya⁺, S. Yu. Zarutskiy⁺, N. D. Korolev⁺, O. Guseva⁺, K. Lakhmanskii^{+*}

⁺Russian Quantum Center, Skolkovo, 143025 Moscow, Russia

^{*}Higher School of Systems Engineering MIPT, 141701 Dolgoprudny, Russia

Submitted 2 September 2022
Resubmitted 2 September 2022
Accepted 15 September 2022

DOI: 10.31857/S1234567822200113, EDN: kpoidh

Quantum computing with trapped ions has shown significant progress over the last couple of decades [1–5]. The main advantages are the highest-fidelity quantum computing gates, long coherence times, inherent uni-formality and all-to-all connectivity [6–11]. Nowadays the attention has shifted from miniature architectures towards more practical implementations requiring to scale up the computer performance [12–19]. For large ion crystals system performance is known to degrade [1]. Therefore, it is crucial to understand scaling of the finite errors in quantum gates with the system size due to noise, decoherence, and control imperfections. In particular, we numerically studied the performance of global single-qubit gates depending on the Lamb–Dicke parameter, gate time, the number of ions, and the initial phonon mode occupation numbers.

The dynamics of single-qubit gates in trapped-ion systems is typically described using Lamb–Dicke approximation meaning the exclusion of the phonon modes [2, 7, 20]. In this work we performed numerical simulation of the action of the single qubit gate $R_\phi(\theta)$ using full Hamiltonian of the system (1):

$$\hat{H}_N = \sum_{p=1}^N \hbar \frac{\omega_q}{2} \hat{\sigma}_z^p + \sum_j \sum_{k=1}^N \hbar \omega_{jk} \left(\hat{a}_{jk}^\dagger \hat{a}_{jk} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar}{2} \sum_{p=1}^N \Omega \left[e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \hat{\mathbf{R}}_p + \phi)} \sigma_p^+ + \text{h.c.} \right]. \quad (1)$$

Here indexes p and j refer to the ion index in the chain and to the choice of the Cartesian axis (x, y, z) respectively, ω_q is the qubit transition frequency, ω is the laser frequency, ω_{jk} is the frequency of the normal mode k along axis j , $\hat{a}_{jk}^\dagger/\hat{a}_{jk}$ are creation/annihilation operators of the normal mode k along axis j , \mathbf{k} is the wave vector of the laser, ϕ is the phase of the laser, and angle $\theta = \tau\Omega$ of the gate is controlled via the gate time τ , $\hat{\mathbf{R}}_p$ is the quantised coordinate of the center of mass of

ion p . Full Hamiltonian allows to account for the two effects responsible for gate errors: entanglement between the qubit states and the phonon modes and phonon mode heating which leads to the finite occupation of the phonon modes.

The results are obtained for optical Ca qubits and for the two types of gates, G_1 and G_{15} for which the $\pi/2$ pulse is performed during 1 s and 15 s, respectively [7, 2]. Figure 1 shows the fidelity of single-qubit $R_\phi(\theta)$ gate for 3 ions for gates G_1 and G_{15} with different levels of corrections to the Rabi frequency obtained in the Lamb–Dicke approximations (for details see [21]):

$$\Omega_p = \Omega \left(1 - \sum_j \sum_{k=1}^N \eta_{pjk}^2 (n_{kj} + 1/2) \right). \quad (2)$$

The corrected Rabi frequencies Ω account only for the finite occupation of the phonon modes. According to Fig. 1, the minimum infidelity of 10^{-4} is achieved for the gate G_{15} , when the corrections for all the modes are included. Additional simulations indeed have shown that the phonon mode occupation leads to a more rapid decrease in the fidelity. For the fast G_1 gate the situation is worse: the oscillations of fidelity can not be removed by correcting Rabi frequency. These oscillations come from the entanglement between the phonon modes and the qubit states. Comparison of the two different types of fidelities (obtained with and without tracing of the phonon modes) and calculations of the entanglement entropy also show the existence of entanglement between phonons and ions. The amplitude of the fidelity oscillations scales with Ω and increases with the phonon mode occupation number. The largest contribution to the infidelity and to the amplitude of its oscillations comes from the population of the center of mass (COM) mode. We also studied the dependence of the fidelity on the Lamb–Dicke parameter and on the number of ions (from 1 to 4) for the initial phonon mode state $|100\rangle$ corresponding to a single phonon in a COM mode. We observe less

¹⁾e-mail: l.akopyan@rqc.ru

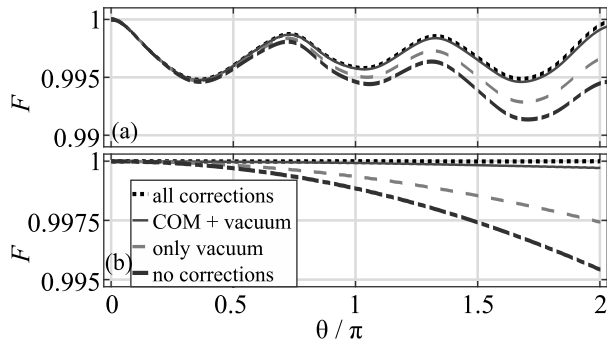


Fig. 1. (Color online) Computed fidelities of the single-qubit gates G_1 (top panel) and G_{15} (bottom panel) depending on angle θ . The initial state of phonon modes is $|n_{\text{COM}}n_2n_3\rangle = |211\rangle$. Different line styles distinguish different cases depending on how the ideal gate operation was simulated: using corrections for the Rabi frequency (the colored lines except the dashed-dotted one) from Eq. (2) or without the corrections (dashed-dotted line). The number of modes/phonons accounted for the corrections is specified in the legend

profound decrease of the fidelity as the ion chain gets longer and for the larger axial frequencies.

In summary, the gate fidelities improve for slower gates and small Lamb–Dicke parameter η . For slow gates, the gate performance can be well characterised with modified Rabi frequency using Eq. (2), whereas for gates as fast as G_1 numerical simulations are required to account for the entanglement effects and oscillatory behaviour of gate fidelity which originates from the ion-phonon entanglement. Its period and amplitude scale with the Rabi frequency Ω , the Lamb–Dicke parameter η and the phonon mode occupation number. The developed software package will be used to optimise single-qubit gate parameters for experimental setup handling trapped ions. The results and analyses will be useful for error mitigation in quantum algorithms performed on ions, optimisation of long gate sequences as well as the development of new variational algorithms accounting for present error models.

We are grateful to E. Anikin, A. Matveev, and M. Popov for fruitful discussions.

This work was supported by Rosatom in the framework of the Roadmap for Quantum computing (Contract # 868-1.3-15/15-2021 dated October 5).

This is an excerpt of the article “Numerical simulation of the performance of single qubit gates for trapped ions”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601956

2. I. Pogorelov, T. Feldker, Ch.D. Marciniak, L. Postler, G. Jacob, O. Kriegelsteiner, V. Podlesnic, M. Meth, V. Negnevitsky, M. Stadler, B. Höfer, C. Wächter, K. Lakhmanskii, R. Blatt, P. Schindler, and T. Monz, *PRX Quantum* **2**, 1 (2021).
3. C. Monroe, W.C. Campbell, L.-M. Duan, Z.-X. Gong, A.V. Gorshkov, P.W. Hess, R. Islam, K. Kim, N.M. Linke, G. Pagano, P. Richerme, C. Senko, and N.Y. Yao, *Rev. Mod. Phys.* **93** (2021).
4. M. Ringbauer, M. Meth, L. Postler, R. Stricker, R. Blatt, P. Schindler, and T. Monz, *Nature Phys.* **18**, 1053 (2022).
5. K. Wright, K. Beck, S. Debnath et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **10**, 1 (2019).
6. P. Zoller and J.I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1 (1995).
7. P. Schindler, D. Nigg, T. Monz, J.T. Barreiro, E. Martinez, S.X. Wang, S. Quint, M.F. Brandl, V. Nebendahl, and C.F. Roos, *New J. Phys.* **15**, 123012 (2013).
8. M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, 10 ed., Cambridge University Press, Cambridge (2010).
9. H. Häffner, C. Roos, and R. Blatt, *Phys. Rep.* **469**, 155 (2008).
10. R. Blatt and D. Wineland, *Nature* **453**, 1008 (2008).
11. T.P. Harty, D.T.C. Allcock, C.J. Ballance, L. Guidoni, H.A. Janacek, N.M. Linke, D.N. Stacey, and D.M. Lucas, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 2 (2014).
12. F. Arute, K. Arya, R. Babbush, et al. (Collaboration), *Nature* **574**, 505 (2019).
13. J. Zhang, G. Pagano, P.W. Hess, A. Kyprianidis, P. Becker, H. Kaplan, A.V. Gorshkov, Z.-X. Gong, and C. Monroe, *Nature* **551**, 601 (2017).
14. J. Benhelm, G. Kirchmair, C.F. Roos, and R. Blatt, *Nature Physics* **4**, 463 (2008).
15. T. Monz, D. Nigg, E.A. Martinez, M.F. Brandl, P. Schindler, R. Rines, S.X. Wang, I.L. Chuang, and R. Blatt, *Science* **351**, 1068 (2016).
16. C. Figgatt, A. Ostrander, N.M. Linke, K.A. Landsman, D. Zhu, D. Maslov, and C. Monroe, *Nature* **572**, 368 (2019).
17. C. Hempel, C. Maier, J. Romero, J. McClean, T. Monz, H. Shen, P. Jurcevic, B.P. Lanyon, P. Love, R. Babbush, A. Aspuru-Guzik, R. Blatt, and C.F. Roos, *Phys. Rev. X* **8**, 031022 (2018).
18. K.K. Mehta, C. Zhang, M. Malinowski, T.L. Nguyen, M. Stadler, and J.P. Home, *Nature* **586**, 533 (2020).
19. R.J. Niffenegger, J. Stuart, C. Sorace-Agaskar, D. Kharras, S. Bramhavar, C.D. Bruzewicz, W. Loh, R.T. Maxson, R. McConnell, D. Reens, G.N. West, J.M. Sage, and J. Chiaverini, *Nature* **586**, 538 (2020).
20. D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe, and D. Wineland, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 281 (2003).
21. N. Semenina, A.S. Borisenko, V. Zalivako, I.A. Semerikov, M.D. Aksenov, K.Yu. Khabarova, and N.N. Kolachevsky, *JETP Lett.* **116**(2), 75 (2022).

1. C.D. Bruzewicz, J. Chiaverini, R. McConnell, and J.M. Sage, *Appl. Phys. Rev.* **6**, 021314 (2019).

Содержание
Том 116, выпуск 7
Поля, частицы, ядра

Филатов Ю.Н., Кондратенко А.М., Кондратенко М.А., Цыплаков Е.Д., Бутенко А.В., Костромин С.А., Ладыгин В.П., Сыресин Е.М., Гурылева И.Л., Мельников А.А., Аксентьев А.Е. Спиновый навигатор на базе корректирующих диполей Нуклотрона/ОИЯИ 411

Галынский М.В. Угловая зависимость переданной протону поляризации в процессе $e\vec{p} \rightarrow e\vec{p}'$ 419

Оптика, лазерная физика

Авчян Б.Р., Казарян А.Г., Саргсян К.А., Седракян Х.В. О лазерно-индуцированной генерации высших гармоник и смещении волн высокого порядка в графеновой квантовой точке 426

Дормидонов А.Е., Залозная Е.Д., Компанец В.О., Чекалин С.В., Кандидов В.П. Определение длительности одноцикловой световой пули среднего инфракрасного диапазона по структуре индуцированных плазменных каналов или центров окраски 434

Конденсированное состояние

Saikia D., Parnami Sugam, Borah J.P. Half-metallic ferromagnetism in Co doped CdS diluted magnetic semiconductor 442

Туманов В.А., Зайцева В.Е., Прошин Ю.Н. Критическая температура наноструктуры сверхпроводник/ферромагнетик вблизи магнитного скирмиона 443

Матвеев А.А., Сафин А.Р., Никитов С.А. Нелинейный резонанс при возбуждении магнитного наноцилиндра спин-поляризованным током 450

Пудалов В.М. Фазовое расслоение в двумерных электронных системах: экспериментальная картина явлений (Миниобзор) 456

Гаврюшкин П.Н., Мартиросян Н.С., Раценко С.В., Сагатова Д.Н., Сагатов Н.Е., Семерикова А.И., Федотенко Т.М., Литасов К.Д. Первый экспериментальный синтез ортокарбоната Mg по реакции $MgCO_3 + MgO = Mg_2CO_4$ при давлениях нижней мантии Земли 472

Бабунц Р.А., Успенская Ю.А., Гурин А.С., Бундакова А.П., Мамин Г.В., Анисимов А.Н., Мохов Е.Н., Баранов П.Г. Проявления электронно-ядерных взаимодействий в спектрах высокочастотного ДЭЯР/ОДМР для триплетных Si-C дивакансий в SiC, обогащенном изотопом ^{13}C 481

Содержание
Том 116, выпуск 8
Астрофизика и космология

Гриб А.А., Павлов Ю.В. К вопросу о фазовых переходах в окрестности черных дыр 493

Оптика, лазерная физика

Максимов А.А., Филатов Е.В., Тартаковский И.И. Температурная зависимость циркулярно поляризованного излучения инжекционного полупроводникового лазера 500

Astafiev A.A., Shakhov A.M., Nadtochenko V.A. Resonance energy transfer reveals presence of multiple luminescence emission centers within a carbon nanodot 506

Пушкин А.В., Потемкин Ф.В. Особенности получения мощных (до 1 МВт, 100 мДж) 3-мкм наносекундных лазерных импульсов в эрбиевых кристаллах в частотном режиме 508

Конденсированное состояние

Хохлов Д.А., Акзянов Р.Ш., Рахманов А.Л. Теория нематической сверхпроводимости в допированных топологических изоляторах (Миниобзор) 517

Behera D., Mukherjee S.K. Theoretical investigation of the lead-free K_2InBiX_6 ($X = Cl, Br$) double perovskite compounds using first principle calculation 533

Иконников А.В., Криштопенко С.С., Бовкун Л.С., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А., Пио Б.А., Потемски М., Орлита М., Тепп Ф., Гавриленко В.И. Природа структурной асимметрии в двойных квантовых ямах HgTe 535

Шикин А.М., Зайцев Н.Л., Тарасов А.В., Макарова Т.П., Глазкова Д.А., Естюнин Д.А., Климовских И.И. Электронная и спиновая структура топологических поверхностных состояний $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ и их модификация приложенным электрическим полем 544

Князев Ю.В., Казак Н.В., Гавричков В.А., Полукеев С.И., Овчинников С.Г. Магнитные свойства $FeVO_3$ в низкоспиновом состоянии 556

Сазонов С.В. Униполярные локализованные автоволны сдвиговой деформации в неравновесном парамагнетике 563

Квантовая информатика

Акопян Л.А., Lakhmanskaya O., Zarutskiy S.Yu., Korolev N.D., Guseva O., Lakhmanskiy K. Numerical simulation of the performance of single qubit gates for trapped ions 570

