

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 161, ВЫПУСК 6

ИЮНЬ 2022

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Моделирование переноса излучения в терминах уравнения Бете–Солпитера для двухслойных систем биотканей Кузьмин В. Л., Жаворонков Ю. А., Ульянов С. В., Вальков А. Ю. 779

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Влияние коллективных ядерных колебаний на эксцентриситеты начального состояния в столкновениях Pb+Pb Захаров Б. Г. 788

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Влияние низкоэнергетического ионного ассистирования на структуру и оптическое поглощение композитных покрытий α -Si:Ag Завидовский И. А., Нищак О. Ю., Савченко Н. Ф., Стрелецкий О. А. 803

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

- Фрустрированная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ в магнитном поле Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А. 816

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

Влияние малых предварительных деформаций и начальной температуры на сопротивление высоко- скоростному деформированию Армко-железа в ударных волнах и волнах разрежения	825
..... Савиных А. С., Гаркушин Г. В., Разоренов С. В.	
Анизотропная намагниченность пленки NbN	833
..... Гохфельд Д. М., Савицкая Н. Е., Попков С. И., Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Балаев Д. А.	
Фрустрации в разбавленном изинговском магнетике на решетке Бете	840
..... Сёмкин С. В., Смагин В. П., Тарасов В. С.	
Фазовые переходы в двумерных моделях Поттса на гексагональной решетке	847
..... Муртазаев А. К., Бабаев А. Б.	
Магнитный резонанс в металл-диэлектрических наногранулярных композитах с парамагнитными ионами в изолирующей матрице	853
..... Дровосеков А. Б., Крейнес Н. М., Ковалев О. А., Ситников А. В., Николаев С. Н., Рыльков В. В.	

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Спиновый транспорт в полупроводниках InSbc различной плотностью электронного газа	866
..... Виглин Н. А., Никулин Ю. В., Цвелиховская В. М., Павлов Т. Н., Проглядо В. В.	
Электронная структура и механические свойства Ti_5Si_3	874
..... Чумакова Л. С., Бакулин А. В., Кулькова С. Е.	

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Особенности генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза	887
..... Вергунова Г. А., Гуськов С. Ю., Вичев И. Ю., Грушин А. С., Ким Д. А., Соломянная А. Д.	
Особенности динамики самовоздействия волновых пакетов с исходно нормальной дисперсией груп- повой скорости в нелинейных решетках ..	897
..... Смирнов Л. А., Миронов В. А., Литвак А. Г.	
Алфавитный указатель тома 161 за 2022 г.	909
Предметный указатель тома 161 за 2022 г.	920

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ В ТЕРМИНАХ УРАВНЕНИЯ БЕТЕ – СОЛПИТЕРА ДЛЯ ДВУХСЛОЙНЫХ СИСТЕМ БИОТКАНЕЙ

В. Л. Кузьмин^{a*}, Ю. А. Жаворонков^{b**}, С. В. Ульянов^{b***}, А. Ю. Вальков^{a,b****}

^a Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия

^b Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 23 декабря 2021 г.,
после переработки 29 декабря 2021 г.
Принята к публикации 30 декабря 2021 г.

Интенсивность обратного рассеяния излучения ближнего инфракрасного диапазона рассчитана для двухслойной модели сильно неоднородной среды, которую можно рассматривать как систему биотканей «череп–мозг». На основе уравнения Бете – Солпитера описана процедура моделирования многократного рассеяния методом Монте-Карло для двухслойной случайно-неоднородной среды. В качестве индикатрисы однократного рассеяния использована фазовая функция Хеньи – Гринштейна. Рассчитаны зависимости интенсивности обратного рассеяния от расстояния вдоль поверхности головы между источником излучения и приемником. Вид этих зависимостей оказался чувствительным к изменению таких параметров системы, как анизотропия индикатрисы рассеяния, толщина слоев, длина волны лазерного излучения. Эта особенность может быть использована в медицинской диагностике. Предложен альтернативный подход к расчету плотности распределения вероятности длины свободного пробега фотона. Показано, что, начиная с расстояния между источником и приемником порядка нескольких транспортных длин, рассчитанная интенсивность находится в хорошем согласии с предсказаниями диффузионной теории.

DOI: 10.31857/S0044451022060013

EDN: DTRSKT

1. ВВЕДЕНИЕ

Методы рассеяния света в настоящее время активно используются для исследования биотканей, прежде всего в связи с медицинской диагностикой [1–4]. Важную область здесь составляет быстрая «полевая» диагностика различных травм головного мозга [5–11]. Наличие так называемого «окна прозрачности» биологических тканей в ближнем инфракрасном диапазоне привело к развитию метода диффузной спектроскопии ближнего инфракрасного диапазона DNIRS (Diffuse Near-infrared Spectroscopy, см. [1–4, 7–9]). Указанный метод широко используется для определения глубины и степени повреждения кожных покровов и подкожной клет-

чатки, диагностики венозных повреждений, травм мозга и мягких тканей [2, 9, 11–14].

Для корректного описания состояния мозга по данным обратно рассеянного лазерного излучения обязательно требуется дополнительный учет наличия черепа, т.е. для теории — как минимум двухслойная модель головы «череп–мозг» [15, 16]. Задача определения оптических параметров модели «череп–мозг» по данным эксперимента в биофантомах и теоретического описания интенсивности как аналитически — на основе уравнения переноса, так и численно — моделированием методом Монте-Карло (МК), рассматривалась в работе [17]. Аналогичная модель была описана в [18] и использовалась для неинвазивного определения оптических свойств мозга в рамках DNIRS. В работе [19] показано, что оптические параметры мозга можно получить, если расстояние между источником и детектором вдоль поверхности черепа больше некоторого характерного значения.

* E-mail: kuzmin_vl@mail.ru

** E-mail: zhavoronkov95@gmail.com

*** E-mail: ulyanov_sv@mail.ru

**** E-mail: alexvalk@mail.ru

Данная работа посвящена МК-моделированию обратного рассеяния в двухслойной среде. Выбор для исследования двухслойной модели продиктован желанием избежать громоздкости в теоретическом описании, эта модель является удобной базой для верификации результатов для реальных многослойных моделей, учитывающих дополнительно слой скальпа, прозрачную цереброспинальную жидкость и сложную структуру мозга (см., например, [11]).

Наш расчет интенсивности обратно рассеянного лазерного излучения основан на итерационном решении уравнения Бете–Солпитера. Многократные интегралы, являющиеся членами разложения решения по кратностям рассеяния, вычисляются методом Монте-Карло. Широко применяемая процедура MCML (Monte Carlo Multi Layer) [20] основана на подсчете числа фотонов, покинувших систему в результате случайных блужданий. MCML-подход модифицирован нами так, чтобы вклады в интенсивность обратного рассеяния определялись на каждом акте рассеяния [21, 22], это приводит к существенному снижению времени расчета. Также мы модифицируем процедуру обратного преобразования в методе МК, явно учитывая наличие абсорбции в каждом порядке рассеяния.

В разд. 2 данной работы приведено решение уравнения Бете–Солпитера в лестничном приближении для интенсивности обратного рассеяния в виде ряда по кратностям рассеяния. В разд. 3 описана процедура МК-вычисления интегралов методом обратного преобразования. В разд. 4 в явном виде приведен метод MCML обратного преобразования кумулятивной функции распределения вероятности длины пробега фотона в двухслойной случайно неоднородной среде. В разд. 5 описана предложенная нами модификация метода обратного преобразования. В разд. 6 представлены результаты расчетов интенсивности обратного рассеяния, а в разд. 7 проведен анализ полученных результатов и сделаны выводы.

2. УРАВНЕНИЕ БЕТЕ–СОЛПИТЕРА

Мы описываем перенос излучения в случайной среде с помощью уравнения Бете–Солпитера [21, 22]

$$\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \mu_s p(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + \mu_s \int d\mathbf{r}_3 p(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_{23}) \Lambda(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \Gamma(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_{23}, \mathbf{k}_i), \quad (1)$$

где пропагатор $\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ соответствует излучению из точки \mathbf{r}_1 в точку \mathbf{r}_2 с начальным \mathbf{k}_i и ко-

нечным \mathbf{k}_f волновыми векторами, \mathbf{k}_{ij} — волновой вектор, направленный из точки \mathbf{r}_j в точку \mathbf{r}_i , $\mathbf{k}_{ij} = k_0 \mathbf{r}_{ij} / r_{ij}$, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Здесь $k_0 = 2\pi/\lambda$ — волновое число в вакууме, λ — длина волны. Пропагатор однократного рассеяния $\Lambda(r) = r^{-2} \exp(-\mu r)$ возникает из произведения двух комплексно-сопряженных средних функций Грина скалярного поля, $\mu = \mu_s + \mu_a$ — коэффициент экстинкции, μ_s и μ_a — коэффициенты рассеяния и абсорбции соответственно, $p(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)$ — фазовая функция,

$$p(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) = \frac{G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)}{\int d\Omega_f G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)}, \quad (2)$$

$G(\mathbf{k})$ — преобразование Фурье корреляционной функции диэлектрической проницаемости,

$$G(\mathbf{k}) = \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)} \langle \delta\varepsilon(\mathbf{r}) \delta\varepsilon^*(\mathbf{r}_0) \rangle. \quad (3)$$

Уравнение (1) написано в лестничном приближении, подразумевающим условие слабого рассеяния: $\lambda \ll l_s = \mu_s^{-1}$. В формуле (1) мы использовали оптическую теорему для скалярного поля,

$$\mu_s = \frac{k_0^4}{(4\pi)^2} \int d\Omega_f G(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i). \quad (4)$$

Пусть z — декартова координата, нормальная к границе полубесконечной среды, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_\perp, z)$, $z > 0$. Для исходящего поля мы используем приближение Фраунгофера, когда поле в дальней зоне является произведением сферической волны и плоской волны, направленной в точку наблюдения [22]. Тогда основная, некогерентная часть интенсивности обратного рассеяния [23] представляется в виде

$$J(s_i, s_f) = 4\pi \int_0^\infty dz_1 \int_{z_2 > 0} d\mathbf{r}_2 \Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \times \exp(-\mu(s_f z_2 + s_i z_1)), \quad (5)$$

где $s_i = 1/\cos\theta_i$, $s_f = 1/\cos\theta_f$, θ_i — угол падения, а θ_f — угол обратного рассеяния, отсчитываемый от обратного направления.

Проводя итерации в уравнении Бете–Солпитера, представляем интенсивность рассеяния как ряд по кратностям рассеяния [22, 24]:

$$J(s_i, s_f) = \sum_{n=1}^\infty J^{(n)}(s_i, s_f), \quad (6)$$

где вклад в рассеяние n -го порядка

$$J^{(n)}(s_i, s_f) = 4\pi\mu_s^n \int_0^\infty dz_1 \int d\mathbf{r}_2 \dots \int d\mathbf{r}_n \Lambda(r_{21}) \times \int d\mathbf{r} \Lambda(r) p(t) = \frac{1}{2\pi\mu} \int_0^1 d\xi \int_0^1 d\chi \int_0^{2\pi} d\phi. \quad (10)$$

$$\times p(\mathbf{k}_{21} - \mathbf{k}_i) \prod_{j=2}^{n-1} \Lambda(r_{j+1j}) p(\mathbf{k}_{j+1j} - \mathbf{k}_{jj-1}) \times \times H(z_j) H(z_n) p(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_{n-1}) e^{-\mu(s_i z_1 + s_f z_n)}. \quad (7)$$

Функции Хевисайда $H(z)$ обеспечивают исчезновение этого вклада при вылете фотона из среды.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Опишем алгоритм моделирования для однородной полубесконечной среды. Метод основан на известной процедуре обратного преобразования [25], который представляет пространственные интегралы итерационного ряда (6) по полубесконечному интервалу в виде интегралов по единичным интервалам. Трехмерный пространственный интеграл в декартовых координатах $\mathbf{r}_j = (x_j, y_j, z_j)$ преобразуется в интеграл по сферическим координатам (r, θ, ϕ) , с началом в \mathbf{r}_{j-1} . Ось z находится под прямым углом к поверхности образца и уходит вглубь него. Форма пропагатора однократного рассеяния $\Lambda(r)$ показывает, что длина свободного пробега фотона имеет экспоненциальное распределение вероятности с плотностью $f(r) = \mu \exp(-\mu r)$ на интервале $r \in [0, \infty)$, где $r = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j-1}|$ – расстояние между точками j -го и $(j - 1)$ -го порядков актов рассеяния. Для экспоненциального распределения кумулятивная функция распределения $\xi = F(r)$ находится элементарно,

$$\xi = F(r) = \int_0^r f(r') dr' = 1 - \exp(-\mu r). \quad (8)$$

Обратное преобразование $r = F^{-1}(\xi)$ дает

$$r = -\mu^{-1} \ln(1 - \xi) = -\mu^{-1} \ln \xi', \quad (9)$$

где ξ и $\xi' = 1 - \xi$ – случайные величины, равномерно распределенные в единичном интервале $[0, 1]$. Аналогичное обратное преобразование выполняется с косинусом угла рассеяния: от $t = \cos \theta$ переходим к

$$\chi = 2\pi \int_{-1}^t p(t') dt'.$$

Таким образом, трехмерный пространственный интеграл по относительной координате $\mathbf{r} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j-1}$ преобразуется как

После этого интеграл вычисляется как среднее по выборке трех равномерно распределенных переменных ξ, χ, ϕ , где первые две принадлежат интервалу $[0, 1]$, а азимутальный угол ϕ – интервалу $[0, 2\pi]$.

Приближая член n -го порядка $J^{(n)}(1, s_f)$ средним по выборке из N_{ph} падающих фотонов, имеем

$$J^{(n)}(1, s_f) \simeq \sum_{i=1}^{N_{ph}} \frac{W_n^{(i)}}{N_{ph}} p(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_{n-1}^{(i)}) e^{-\mu s_f z_n^{(i)}}, \quad (11)$$

где веса $W_n^{(i)}$ для $n > 1$ задаются формулой

$$W_n^{(i)} = \left(\frac{\mu_s}{\mu}\right)^n \prod_{j \leq n} H(z_j^{(i)}) H(T - z_j^{(i)}). \quad (12)$$

Функция $H(z)H(T - z)$ учитывает, что реальная среда заполняет конечный слой толщиной $T, 0 \leq z \leq T$. Отметим, что интенсивность рассеяния, рассчитанная с помощью (11), может быть интерпретирована как среднее значение экспоненты $\exp(-\mu s_f z_n^{(i)})$, которая описывает затухание фотона, возвращающегося из среды к границе после n актов рассеяния.

Вес $W_n^{(i)}$ представляет собой случайное значение многократного пространственного интеграла, полученного в результате итерации n -го порядка уравнения Бете – Солпитера. Вычисляя его, моделируем стохастическую последовательность, или траекторию, точек рассеяния $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$. Переменная $z_j^{(i)}$ – это расстояние до границы от j -го события рассеяния. Функция $\phi_{BLB}(z_n^{(i)}) = \exp(-\mu s_f z_n^{(i)})$ возникает вследствие затухания рассеянного излучения, распространяющегося от случайной точки n -го события рассеяния $z_n^{(i)}$ к границе. Оно зависит от локальных оптических параметров на пути фотона, движущегося к границе, и имеет вид в приближении Фраунгофера закона Бугера – Ламберта – Бера. Для однородной среды $\phi_{BLB}(z) = \exp(-\mu s_f z)$. В формуле (12) мы пренебрегли потерями энергии на отражение на границах между слоями и с вакуумом. Эти потери можно учесть, если весовые коэффициенты $W_n^{(i)}$ умножить на коэффициенты отражения Френеля (см. [26]).

Метод МК широко используется для моделирования миграции фотонов в тканях и тканевых фантомах, в основном в рамках известного алгоритма MCML [20]. В рамках MCML в сигнал вносят вклад фотоны, выходящие из рассеивающей среды, что требует довольно большой выборки из-за того, что

число случайно выпавших фотонов с заданной геометрией задачи могут составлять очень малую долю падающего света. В развитой в настоящей работе модификации каждый фотон вносит свой вклад в сигнал при каждом акте рассеяния, пока не покинет среду. Таким образом, объем выборки и, соответственно, время вычислений, необходимое для получения результатов, существенно уменьшается.

4. МЕТОД ОБРАТНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ДВУХСЛОЙНОЙ СРЕДЫ

Рассмотрим неоднородную среду, в которой оптические параметры зависят от положения фотона, а именно — от декартовой координаты z по оси, нормальной к границам.

В общем случае положим $\mu = \mu(z)$. Мы предполагаем, что на границе раздела слоев отражение отсутствует. Таким образом, предполагая, что направление луча не меняется при движении в неоднородной среде, получаем, что экспоненциальная функция распределения, определяющая затухание фотона, движущегося из точки \mathbf{r}_0 в точку \mathbf{r} , может быть представлена в следующем виде:

$$\exp(-\mu|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \rightarrow \exp\left(-\frac{1}{\cos\theta} \int_{z_0}^z \mu(z') dz'\right). \quad (13)$$

Здесь θ — угол между направлением движения фотона и осью z , который должен быть определен заранее. Заметим, что распределение зависит от начального положения фотона \mathbf{r}_0 . Определим плотность вероятности для пространственной координаты z , задающей новое положение фотона, формулой

$$f(z, z_0) = C_0^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\cos\theta} \int_{z_0}^z \mu(z') dz'\right), \quad (14)$$

где C_0 — нормировочная постоянная.

Рассматривается двухслойная модель, состоящая из слоев А и В. Слой А занимает область $0 < z < T_A$, слой В — область $T_A < z < T$, где $T = T_A + T_B$ — толщина данной двухслойной системы. При построении обратного преобразования мы рассматриваем среду В как полубесконечный слой $T_A < z$, а в численных расчетах будем полагать T_B конечным, но $T_B \gg T_A$. Нам необходимо получить кумулятивную функцию, зависящую от знака $\cos\theta$, и выполнить обратное преобразование для шести различных случаев, а именно, как видно из рис. 1, для каждого возможного направления движения фотона, вверх или вниз на рисунке,

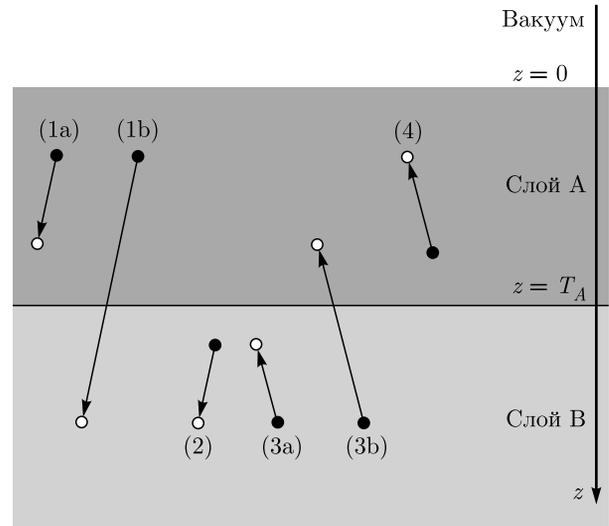


Рис. 1. Схематическое представление случайного пути фотона из начальной точки \mathbf{r}_j (черный кружок) в точку следующего рассеяния \mathbf{r}_{j+1} (белый кружок); варианты движения фотона вглубь образца, $\cos\theta > 0$: (1a) — из среды А в А, (1b) — из А в В, (2) — из В в В; варианты движения фотона в направлении поверхности, $\cos\theta < 0$: (3a) — из среды В в В, (3b) — из В в А, (4) — из А в А

а также с учетом того, движется ли фотон в слое А или В, либо пересекает границу этих слоев. Таким образом, нам необходимо построить алгоритм определения последовательных шагов, которые должен пройти фотон, начиная с точки z_0 .

Пусть начальная точка z_0 выбрана в слое А для фотона, движущегося вглубь среды, $\cos\theta > 0$, что соответствует путям (1a) или (1b) среди шести путей, показанных на рис. 1. Для описания случайного расстояния, пройденного фотоном между двумя последовательными актами рассеяния, определим функцию плотности вероятности [20]:

$$f(z, z_0) = \begin{cases} \frac{\mu(A)}{\cos\theta} \exp\left(-\frac{\mu(A)}{\cos\theta}(z - z_0)\right), & z \leq T_A, \\ \xi_A \frac{\mu(B)}{\cos\theta} \exp\left(-\frac{\mu(B)}{\cos\theta}(z - T_A)\right), & z > T_A, \end{cases} \quad (15)$$

где параметр $\xi_A = \exp(-\mu(A)(T_A - z_0)/\cos\theta)$ соответствует движению фотона от точки z_0 до границы $z = T_A$. Для краткости мы опускаем зависимость введенных параметров от z_0 . Интегрируя плотность вероятности (15), получаем кумулятивную функцию распределения

$$F(z) = \begin{cases} 1 - \exp\left(-\frac{\mu(A)}{\cos\theta}(z - z_0)\right), & z \leq T_A, \\ 1 - \xi_A \exp\left(-\frac{\mu(B)}{\cos\theta}(z - T_A)\right), & z > T_A. \end{cases} \quad (16)$$

Значение кумулятивной функции рассматривается далее как равномерно распределенная случайная величина $\xi = F(z, z_0)$. Выполняя обратное преобразование, т. е. определяя пространственную переменную z как обратную функцию $z = F^{-1}(\xi)$, получаем

$$z = \begin{cases} z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(A)} \ln(1 - \xi), & \xi \leq 1 - \xi_A, \\ T_A - \frac{\cos\theta}{\mu(B)} \ln\left(\frac{1 - \xi}{\xi_A}\right), & \xi > 1 - \xi_A. \end{cases} \quad (17)$$

В случае $z_0 > T_A$ и положительного направления движения фотона, $\cos\theta > 0$, коэффициент рассеяния не меняется, $\mu(z) = \mu(B)$, и применение обратного преобразования дает

$$z = z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(B)} \ln(1 - \xi). \quad (18)$$

Аналогично для фотона, движущегося из слоя B в отрицательном направлении, $\cos\theta < 0$, получаем

$$z = \begin{cases} z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(B)} \ln(1 - \xi), & \xi \leq 1 - \xi_B, \\ T_A - \frac{\cos\theta}{\mu(A)} \ln\left(\frac{1 - \xi}{\xi_B}\right), & \xi > 1 - \xi_B, \end{cases} \quad (19)$$

где $\xi_B = \exp(-\mu(B)(T_A - z_0)/\cos\theta)$. Для фотона, движущегося в сторону границы $z = 0$ из слоя A , аналогично получаем

$$z = z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(A)} \ln(1 - \xi). \quad (20)$$

Таким образом, формулы (17)–(20) определяют изменение координаты z фотона в результате одного акта рассеяния как функцию равномерно распределенной величины ξ для двухслойной среды. Число возможных случаев увеличивается как $k(k+1)$ с ростом числа слоев k ; так, в трехслойной среде имеется 12 различных вариантов движения фотона.

5. МОДИФИКАЦИЯ АЛГОРИТМА МСМЛ

Каждое событие рассеяния в члене n -го порядка в выражении (7) для интенсивности рассеяния порождает коэффициент $\mu_s(A)$ или $\mu_s(B)$. Мы разработали процедуру обратного преобразования, включающую эти множители в явном виде в функцию плотности вероятности. Это позволит нам при

МК-моделировании более точно учесть наличие абсорбции и, в частности, отличие альбедо μ_s/μ от 1.

Движение вглубь среды: $z > z_0, \cos\theta > 0$. Пусть фотон начинает двигаться в слое $A, z_0 < T_A$, в положительном направлении, $\cos\theta > 0$. Плотность вероятности для $z_0 < T_A$ имеет вид

$$f^{(+)}(z, z_0) = \begin{cases} \frac{\mu_s(A)}{C^{(+)} \cos\theta} \exp\left(-\frac{\mu(A)}{\cos\theta}(z - z_0)\right), & z \leq T_A, \\ \frac{\xi_A \mu_s(B)}{C^{(+)} \cos\theta} \exp\left(-\frac{\mu(B)}{\cos\theta}(z - T_A)\right), & z > T_A. \end{cases} \quad (21)$$

В нормировочную постоянную $C^{(+)} = C_1^{(+)} + C_2^{(+)}$ вносят вклад два члена,

$$C_1^{(+)} = (1 - \xi_A) \frac{\mu_s(A)}{\mu(A)}, \quad C_2^{(+)} = \xi_A \frac{\mu_s(B)}{\mu(B)}. \quad (22)$$

Теперь найдем обратную кумулятивную функцию $z = (F^{(+)})^{-1}(\xi)$. Выполняя схему обратного преобразования, находим переменную z как функцию случайной величины ξ :

$$z = \begin{cases} z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(A)} \ln\left(1 - C^{(+)} \xi \frac{\mu(A)}{\mu_s(A)}\right), & \xi \leq \xi^{(+)}, \\ T_A - \frac{\cos\theta}{\mu(B)} \ln\left((1 - \xi) \frac{C^{(+)}}{C_2^{(+)}}\right), & \xi > \xi^{(+)}. \end{cases} \quad (23)$$

Здесь

$$\xi^{(+)} = F^{(+)}(T_A) = (1 - \xi_A) \frac{\mu_s(A)}{\mu(A) C^{(+)}} \quad (24)$$

– значение кумулятивной функции на границе слоев A и B . При $z_0 > T_A$, при движении вглубь, $\cos\theta > 0$, обратное преобразование дает

$$z = z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(B)} \ln(1 - \xi). \quad (25)$$

Движение к поверхности: $z_0 > z, \cos\theta < 0$. Двигаясь в отрицательном направлении из слоя $B, \cos\theta < 0$, мы получаем аналогичный результат:

$$z = \begin{cases} z_0 - \frac{\cos\theta}{\mu(B)} \ln\left(1 + C^{(-)} \xi \frac{\mu(B)}{\mu_s(B)}\right), & \xi \leq \xi^{(-)}, \\ T_A - \frac{\cos\theta}{\mu(A)} \ln\left((1 - \xi) \frac{C^{(-)}}{C_2^{(-)}}\right), & \xi > \xi^{(-)}, \end{cases} \quad (26)$$

где

$$\xi^{(-)} = (1 - \xi_B) \frac{\mu_s(B)}{\mu(B) C^{(-)}}, \quad (27)$$

Таблица. Типичные коэффициенты рассеяния и абсорбции рассмотренных биотканей μ_a и μ'_s (в мм^{-1}) для различных длин волн λ (в нм)

	$\lambda = 750$		$\lambda = 850$		$\lambda = 950$		$\lambda = 1050$	
	μ_a	μ'_s	μ_a	μ'_s	μ_a	μ'_s	μ_a	μ'_s
Мозг	0.036	0.859	0.106	0.762	0.114	0.622	0.118	0.525
Череп	0.006	1.974	0.013	1.876	0.019	1.757	0.019	1.665

а нормировочная постоянная $C^{(-)} = C_1^{(-)} + C_2^{(-)}$ представляет собой сумму двух слагаемых,

$$C_1^{(-)} = (1 - \xi_B) \frac{\mu_s(B)}{\mu(B)}, \quad C_2^{(-)} = \xi_B \frac{\mu_s(A)}{\mu(A)}. \quad (28)$$

В случае $z_0 < T_A$, при движении к поверхности, $\cos \theta < 0$, обратное преобразование дает

$$z = z_0 - \frac{\cos \theta}{\mu(A)} \ln(1 - \xi). \quad (29)$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данном разделе приводятся результаты расчетов интенсивности обратного рассеяния лазерного излучения ближнего инфракрасного диапазона двухслойной средой.

Существуют обширные данные по оптическим параметрам биотканей (см., например, [27–30]). Параметры для системы «череп–мозг», использованные нами при моделировании, приведены в таблице.

Моделирование проводилось методом МК с использованием как традиционного метода обратного преобразования кумулятивной функции распределения вероятности длины свободного пробега фотона [20], так и предложенной в разд. 5 данной работы его модификации. В расчетах полагалось, что в среду, занимающую полупространство $z \geq 0$, лазерное излучение попадает вдоль направления оси z . Далее, в результате многократного рассеяния в двухслойной среде возникает обратное рассеяние, интенсивность которого рассчитывалась в точке на поверхности $z = 0$ на расстоянии ρ от точки входа лазерного луча в среду. В расчетах кратность рассеяния ограничивалась числом $n = 3 \cdot 10^5$, а объем выборки был выбран $N = 10^6$.

Результаты многократного рассеяния существенно зависят от анизотропии рассеяния. Для изучения этой зависимости нормированную фазовую функцию $p(\cos \theta)$, где θ — угол однократного рассеяния, мы описывали широко применяемой модельной фазовой функцией Хензи–Гринштейна (ХГ) [3, 31]:

$$p_{HG}(\cos \theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^{3/2}}, \quad (30)$$

где $g = \langle \cos \theta \rangle$ — параметр анизотропии однократного рассеяния. Удобство фазовой функции ХГ связано с тем, что для нее в элементарных функциях выражается обратная кумулятивная функция распределения вероятности по углу рассеяния θ .

Во многих оптических исследованиях биотканей и биофантомов используется приведенный коэффициент рассеяния μ'_s (обратная транспортная длина), связанный с коэффициентом рассеяния μ_s (обратной длиной рассеяния) соотношением $\mu'_s = (1 - g)\mu_s$. На рис. 2 показаны зависимости интенсивности обратно рассеянного излучения от расстояния между источником фотонов и приемником на плоскости $z = 0$ при изменении параметра анизотропии g . На рис. 2а приведены результаты расчетов для различных значений параметра g при одном и том же значении коэффициента рассеяния μ_s . В соответствии с оптической теоремой, для всех кривых рис. 2а неизменной остается интегральная интенсивность однократного рассеяния, в то время как приведенный коэффициент рассеяния μ'_s с изменением параметра g меняется.

Как видно из рис. 2а, с ростом параметра g , т. е. с увеличением вытянутости индикатрисы однократного рассеяния вперед, растет и интенсивность обратного рассеяния на любом расстоянии ρ между источником и приемником, исключая самую близкую к источнику область. Такое поведение находится в согласии с аналитическими расчетами [32, 33], выполненными для изотропной и сильно анизотропной фазовых функций. Отметим, что на рис. 2а для каждого значения g показаны результаты вычисления длины свободного пробега фотона, приведенным в разд. 4 и 5 данной работы: а именно — закрашенные символы соответствуют классическому алгоритму MCML из работы [20], а белые символы — нашему алгоритму. На рис. 2б приведены результаты МК-моделирования для другого варианта

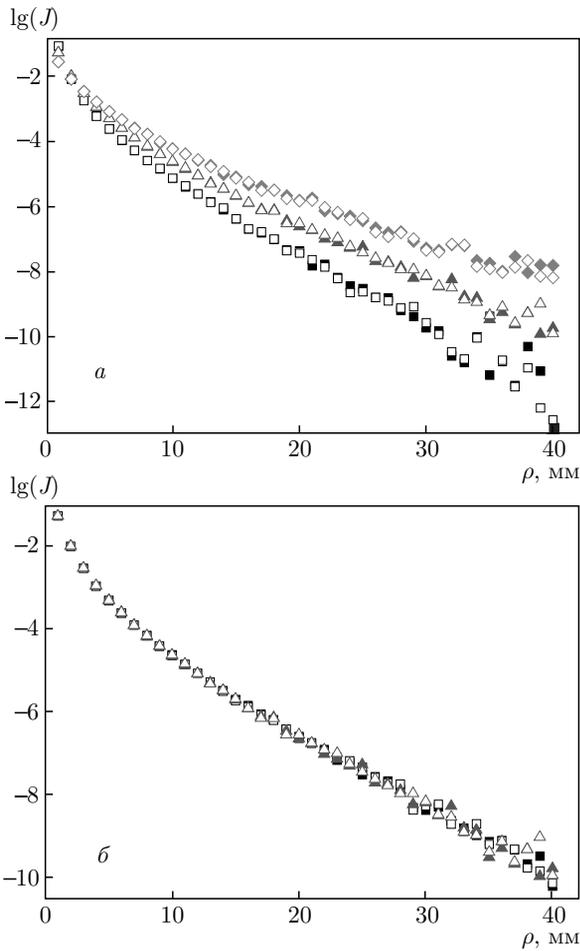


Рис. 2. Зависимости интенсивности обратного рассеяния в двухслойной модели череп (А) и мозг (В) от расстояния источник–приемник. Закрашенные символы соответствуют классическому алгоритму, белые — модифицированному. Значения параметра анизотропии $g = 0.8$ (\square и \blacksquare), 0.9 (\triangle и \blacktriangle), 0.95 (\diamond и \blacklozenge). Длина волны $\lambda = 750$ нм. Толщина слоя А — $T_A = 5$ мм. Графикам *a* и *b* отвечают варьируемые параметры μ'_s и μ_s соответственно

роста параметра анизотропии g , а именно — неизменной оставалась величина приведенного коэффициента рассеяния μ'_s , а коэффициент μ_s изменялся согласованно с изменением параметра анизотропии g . Из совпадения графиков на этом рисунке следует, что зависимость интенсивности обратного рассеяния от расстояния между приемником и источником в рассмотренной двухслойной системе определяется приведенными коэффициентами рассеяния $\mu'_s(A)$ и $\mu'_s(B)$, что свидетельствует о сформировавшемся диффузионном режиме переноса излучения.

На рис. 3 представлены результаты моделирования зависимости интенсивности обратного рассеяния от расстояния между источником и приемни-

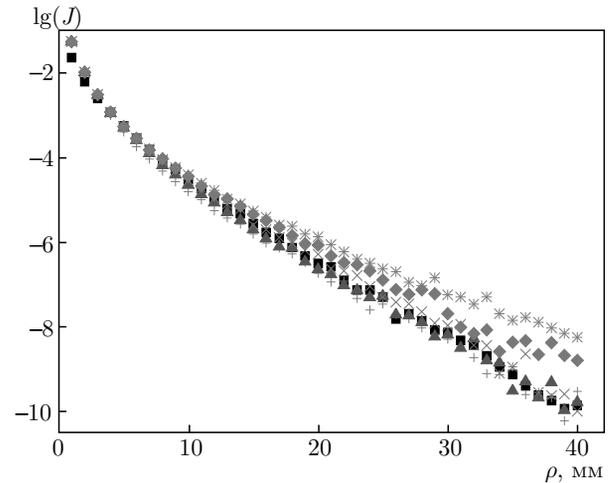


Рис. 3. Зависимости интенсивности обратного рассеяния в двухслойной модели череп (А) и мозг (В) от расстояния источник–приемник для различных толщин слоя А: 0 (\blacksquare), 3 мм ($+$), 5 мм (\blacktriangle), 7 мм (\times), 10 мм (\blacklozenge), 150 мм ($*$). Длина волны $\lambda = 750$ нм. Параметр анизотропии $g = 0.9$

ком для системы «череп–мозг» с различной толщиной верхнего слоя, т. е. черепа. Кривые для $T_A = 0$ и $T_A = 150$ мм показывают результаты обратного рассеяния на полупространстве, содержащем лишь вещество мозга и черепа соответственно. Другие кривые на рис. 3 показывают, как с увеличением толщины верхнего слоя, т. е. черепа, изменяется наклон кривых. По результатам МК-моделирования излучения, обратно рассеянного полупространством только из одной биоткани, определялся угловой коэффициент μ_{eff} в уравнении [34]

$$\ln[\rho^2 I(\rho)] = -\mu_{eff} \rho + I_0, \quad (31)$$

справедливом при $\rho \gg l_{tr} = 1/\mu'_s$, т. е. в случае применимости диффузионного приближения переноса излучения. По данным кривой на рис. 3 с $T_A = 0$, т. е. для полупространства с параметрами ткани мозга, было получено значение $\mu_{eff}(B) = 0.31$ мм⁻¹, которое очень близко к результату $\mu_{eff}(B) = 0.305$ мм⁻¹, найденному по данным таблицы:

$$\mu_{eff} = \sqrt{3\mu'_s\mu_a}. \quad (32)$$

По данным кривой на рис. 3 с $T_A = 150$ мм было найдено значение $\mu_{eff}(A) = 0.197$ мм⁻¹, которое также близко к значению $\mu_{eff}(A) = 0.188$ мм⁻¹, найденному по формуле (32) с данными из таблицы. Таким образом, для данных тканей при моделировании обратного рассеяния на расстояниях от источника излучения больших 10 мм можно пользоваться диффузионным приближением.

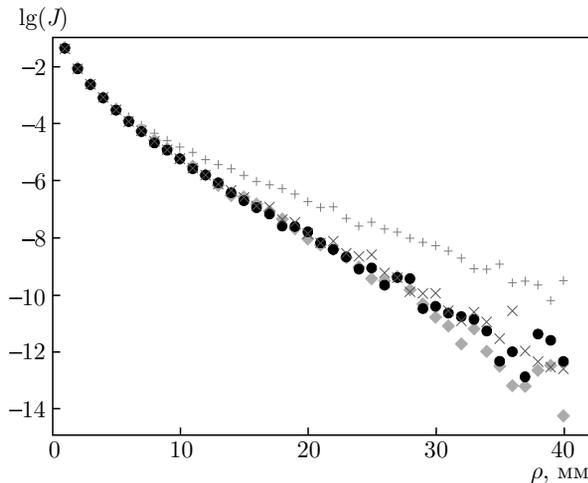


Рис. 4. Зависимости интенсивности обратного рассеяния в двухслойной модели череп (А) и мозг (В) от расстояния источник–приемник для различных длин волн λ : 750 нм (+), 850 нм (◆), 950 нм (●), 1050 нм (×). Параметр анизотропии $g = 0.9$. Толщина слоя А — $T_A = 3$ мм

На рис. 4 показано, как меняется зависимость интенсивности обратного рассеяния на двухслойной среде от расстояния источник–приемник для разных длин волн. Значительное отличие кривой, построенной для $\lambda = 750$ нм, от трех других кривых связано с большим отличием коэффициента абсорбции и согласуется с формулой (32) для μ_{eff} .

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен расчет интенсивности обратного рассеяния лазерного инфракрасного излучения на двухслойной случайно неоднородной биоткани. В качестве основной модели рассматривалась система «череп–мозг». Для сравнения с реальными биомедицинскими данными по обратному рассеянию инфракрасного излучения головой человека двухслойная модель является очень упрощенной. Однако она может служить предельным случаем для верификации результатов, учитывающих слой скальпа, прозрачную цереброспинальную жидкость и более сложную структуру мозга (см., например, [11]). Моделирование переноса излучения в биоткани основывалось на уравнении Бете–Солпитера в лестничном приближении, решение которого представлено в виде разложения по кратностям рассеяния. Каждый член разложения является многократным интегралом, вычисление которого проводится методом Монте-Карло. Были рассчитаны зависимости интенсивности обратного рассеяния от расстояния вдоль

поверхности черепа между приемником и источником излучения. Изучено влияние на интенсивность рассеяния изменения параметра анизотропии фазовой функции, толщины черепа и длины волны. Чувствительность интенсивности обратного рассеяния к изменению параметров биоткани позволяет использовать данные обратного рассеяния в медицинской диагностике. В расчетах мы применяли нашу модификацию известной процедуры MCML [20], отличающуюся способом регистрации фотонов [22], а для моделирования длины свободного пробега фотона мы пользовались как традиционным методом MCML, так и предложенной в данной работе его модификацией. Модифицированный метод позволил существенно сократить время вычислений, а также явно учесть в моделировании альбедо μ_s/μ .

ЛИТЕРАТУРА

1. S. L. Jacques, *Phys. Med. Biol.* **58**, R37 (2013).
2. D. J. Davies, Z. Su, M. T. Clancy et al., *J. Neurotrauma* **32**, 933 (2015).
3. В. В. Тучин, *Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике*, IPR Media, Москва (2021).
4. А. Н. Башкатов, А. В. Приезжев, В. В. Тучин, *КЭ* **41**, 283 (2011).
5. D. K. Joseph, T. J. Huppert, M. A. Franceschini, and D. A. Boas, *Appl. Opt.* **45**, 8142 (2006).
6. M. Dehaes, P. E. Grant, D. D. Sliva et al., *Biomed. Opt. Express* **2**, 552 (2011).
7. J. Selb, D. A. Boas, S.-T. Chan et al., *Neurophoton.* **1**, 015005 (2014).
8. A. Sabeeh and V. V. Tuchin, *J. Biomed. Photon. Eng.* **6**, 040201 (2020).
9. R. Francis, B. Khan, G. Alexandrakis et al., *Biomed. Opt. Express* **6**, 3256 (2015).
10. S. Mamani, L. Shi, T. Ahmed et al., *J. Biophotonics* **11**, e201800096 (2018).
11. A. P. Tran, S. Yan, and Q. Fang, *Neurophoton.* **7**, 015008 (2020).
12. E. Zinchenko, N. Navolokin, A. Shirokov et al., *Biomed. Opt. Express* **10**, 4003 (2019).
13. E. S. Papazoglou, M. D. Weingarten, S. Michael et al., *J. Biomed. Opt.* **13**, 044005 (2008).

14. E. S. Papazoglou, M. T. Neidrauer, L. Zubkov et al., *J. Biomed. Opt.* **14**, 064032 (2009).
15. S. Mahmoodkalayeh, M. A. Ansari, and V. V. Tuchin, *Biomed. Opt. Express* **10**, 2795 (2019).
16. M. S. Cano-Velazquez, N. Davoodzadeh, D. Halaney et al., *Biomed. Opt. Express* **10**, 3369 (2019).
17. A. Kienle, M. S. Patterson, N. Dögnitz et al., *Appl. Opt.* **37**, 779 (1998).
18. J. H. Choi, W. Martin, V. Yu. Toronov et al., *J. Biomed. Opt.* **9**, 221 (2004).
19. M. A. Franceschini, S. Fantini, L. A. Paunescu et al., *Appl. Opt.* **37**, 7447 (1998).
20. L. Wang, S. L. Jacques, and L. Q. Zheng, *Comput. Meth. Prog. Bio.* **47**, 131 (1995).
21. В. Л. Кузьмин, А. Ю. Вальков, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 261 (2017).
22. В. Л. Кузьмин, А. Ю. Вальков, Л. А. Зубков, *ЖЭТФ* **155**, 460 (2019).
23. V. L. Kuzmin, V. P. Romanov, and E. V. Aksenova, *Phys. Rev. E* **65**, 016601 (2001).
24. V. L. Kuzmin, M. T. Neidrauer, D. Diaz et al., *J. Biomed. Opt.* **20**, 105006 (2015).
25. L. Devroye, *Non-Uniform Random Variate Generation*, Springer-Verlag, New York (1986).
26. T. H. Pham, O. Coquoz, J. B. Fishkin et al., *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 2500 (2000).
27. A. N. Bashkatov, E. A. Genina, V. I. Kochubey et al., *J. Phys. D Appl.* **38**, 2543 (2005).
28. A. N. Bashkatov, E. A. Genina, V. I. Kochubey et al., *Proc. SPIE* **6163**, 616310 (2006).
29. J. D. Johansson, *J. Biomed. Opt.* **15**, 0570059 (2010).
30. E. A. Genina, A. N. Bashkatov, D. K. Tuchina et al., *Biomed. Opt. Express* **10**, 5182 (2019).
31. T. Durduran, R. Choe, W. B. Baker et al., *Rep. Progr. Phys.* **73**, 076701 (2010).
32. T. M. Nieuwenhuizen and J. M. Luck, *Phys. Rev. E* **48**, 569 (1993).
33. V. L. Kuzmin and A. Yu. Valkov, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **272**, 107760 (2021).
34. D. Tamborini, P. Farzam, B. B. Zimmermann et al., *Neurophoton.* **5**, 011015 (2017).

ВЛИЯНИЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ ЯДЕРНЫХ КОЛЕБАНИЙ НА ЭКСЦЕНТРИСИТЕТЫ НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ В СТОЛКНОВЕНИЯХ Pb+Pb

Б. Г. Захаров*

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
117334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 декабря 2021 г.,
после переработки 7 декабря 2021 г.
Принята к публикации 8 декабря 2021 г.

В рамках Монте-Карло-модели Глаубера изучается влияние коллективных квантовых эффектов в ядре Pb на коэффициенты азимутальной анизотропии $\epsilon_{2,3}$ в столкновениях Pb+Pb при энергиях коллайдера LHC. Для учета квантовых эффектов мы изменяем генерацию положений нуклонов, применяя подходящие фильтры, которые гарантируют, что сталкивающиеся ядра имеют среднеквадратичные квадрупольные и октупольные моменты, равные извлеченным из экспериментальных квадрупольных и октупольных силовых функций для ядра Pb с помощью энергетически взвешенного правила сумм. Наша Монте-Карло-модель Глаубера с модифицированной выборкой положений нуклонов приводит к $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \sim 0.8$ при центральности не более 1%, что позволяет решить загадку отношения v_2/v_3 .

DOI: 10.31857/S0044451022060025
EDN: DTVKIH

зависимость спектров адронов характеризуется коэффициентами потока v_n в разложении Фурье

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время принято считать, что образование адронов при столкновениях тяжелых ионов при энергиях коллайдеров RHIC и LHC проходит через стадию кварк-глюонной плазмы (КГП). Гидродинамический анализ экспериментальных данных с коллайдеров RHIC и LHC показывает, что КГП формируется на собственных временах $\tau_0 \sim 0.5\text{--}1$ фм [1–3] после взаимодействия лоренц-сжатых ядер. Файербол КГП, образованный между удаляющимися друг от друга ядерными дисками, наследует приблизительно форму области перекрытия сталкивающихся ядер. Для нецентральных AA-столкновений область перекрытия имеет миндалевидную форму. Это может привести к значительной анизотропии в поперечном расширении КГП в более поздние времена и, в конечном счете, к азимутальной асимметрии спектров частиц [4]. При наличии флуктуаций начальной плотности КГП азимутальная асимметрия может появляться и для центральных столкновений. Азимутальная

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

где N — это множественность адронов в определенной области p_T и области быстроты, а Ψ_n — углы плоскости реакции события. В гидродинамических моделях с гладкими начальными условиями в ряде Фурье (1) при средней скорости ($y = 0$) выживают только члены с $n = 2k$ (если адронизация происходит без флуктуаций). В этом приближении для AA-столкновений с нулевым прицельным параметром коэффициенты v_{2k} должны исчезать из-за азимутальной симметрии. Гидродинамические расчеты показывают, что для столкновений тяжелых ионов с малой центральностью в каждом событии коэффициенты потока v_n с $n \leq 3$ с хорошей точностью пропорциональны коэффициентам анизотропии ϵ_n для начального распределения энтропии [5–7]

$$v_n \approx k_n \epsilon_n. \quad (2)$$

* E-mail: bgz@itp.ac.ru

Коэффициенты ϵ_n определены как [8, 9]

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

где $\rho_s(\rho)$ — начальная плотность энтропии файерболла, и предполагается, что ρ вычисляется в системе центра масс в поперечной плоскости, т. е.

$$\int d\rho \rho \rho_s(\rho) = 0.$$

Гидродинамические расчеты требуют начальной плотности энтропии, которая в настоящее время не может быть определена *ab initio*. В настоящее время используются несколько моделей для расчетов начального распределения энтропии при столкновениях тяжелых ионов. Наиболее широко используемым и простым феноменологическим методом для генерации начального распределения энтропии является Монте-Карло (МК)-модель Глаубера поврежденных нуклонов [10, 11], в которой плотность энтропии выражается через линейную комбинацию числа участвующих нуклонов и бинарных столкновений. В МК-модели Глаубера флуктуации плотности энтропии от события к событию представляют собой совокупный эффект флуктуаций положений нуклонов в сталкивающихся ядрах и флуктуаций производства энтропии для заданной геометрии положений нуклонов. МК-модель Глаубера оказалась весьма успешной для описания в рамках гидродинамических моделей экспериментальных данных по коэффициентам потока в AA-столкновениях, полученных на RHIC и LHC. Гидродинамическое моделирование с начальными условиями модели Глаубера показало, что КГП, рождающаяся на RHIC и LHC, имеет очень малое отношение сдвиговой вязкости к плотности энтропии, которое близко к нижней квантовой границе $1/4\pi$ [12, 13]. Другой, более поздней феноменологической МК-схемой для производства энтропии в AA-столкновениях, которая успешно использовалась в гидродинамических анализах, является модель TRENTO [14]. В модели TRENTO, аналогично МК-схеме Глаубера, флуктуации плотности энтропии происходят из флуктуаций положений нуклонов в сталкивающихся ядрах и флуктуаций производства энтропии для заданной геометрии положений участвующих нуклонов. Это отличается от КХД-моделей IP-Glasma [15] и MAGMA [16], в которых флуктуации плотности энтропии происходят только от флуктуаций положений нуклонов.

Хотя гидродинамические модели могут воспроизводить обширный набор данных по столкновениям тяжелых ионов на RHIC и LHC, в последние го-

ды было установлено, что в них имеется проблема с описанием отношения $v_2\{2\}$ к $v_3\{2\}$ в ультрацентральном ($c \rightarrow 0$) столкновении Pb+Pb при энергиях LHC (так называемая загадка v_2 -to- v_3). Измерения коэффициентов потока в ультрацентральных Pb+Pb-столкновениях с энергиями 2.76 ТэВ [17] и 5.02 ТэВ [18] показывают, что $v_2\{2\}$ и $v_3\{2\}$ близки друг к другу. Это противоречит гидродинамическим расчетам с начальными условиями в МК-модели Глаубера и TRENTO, которые дают $v_2\{2\}/v_3\{2\} \sim 1.25$ – 1.4 [19, 20]. Это предсказание в основном связано с тем фактом, что для эллиптического потока коэффициент k_2 в соотношении линейного отклика (2) больше, чем коэффициент k_3 для треугольного потока (например, для идеальной гидродинамики расчеты, выполненные в [19], дают $k_2/k_3 \sim 1.35$ для Pb+Pb-столкновений с энергией 2.76 ТэВ в интервале центральности 0–0.2% для $0.3 < p_T < 3$ ГэВ, причем отношение k_2/k_3 растет с увеличением сдвиговой вязкости КГП [6, 19]). Моделирование начального распределения энтропии при нулевом прицельном параметре в МК-модели Глаубера и модели TRENTO дает эллиптичность $\epsilon_2\{2\}$ и треугольность $\epsilon_3\{2\}$, которые близки друг к другу (здесь, как обычно, $\epsilon_n\{2\} = \sqrt{\langle \epsilon_n^2 \rangle}$ является квадратным корнем от среднеквадратичного (RMS) эксцентриситета). Следовательно, для $k_2/k_3 > 1$ соотношение линейного отклика (2) приводит к $v_2\{2\}/v_3\{2\} > 1$. Проблема с воспроизведением экспериментального отношения $v_2\{2\}/v_3\{2\}$ в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb, безусловно, является серьезной проблемой для гидродинамической парадигмы столкновений тяжелых ионов, потому что предсказание, что $k_2 > k_3$, кажется вполне надежным.

В последние годы было предпринято несколько попыток объяснить, почему в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb $v_2\{2\}/v_3\{2\} > 1$. В [19] коэффициенты потока в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb были рассмотрены с использованием начальных условий для моделей МК Глаубера и MC-KLN [21, 22]. Было обнаружено, что как модель МК Глаубера, так и модель KLN не воспроизводят отношение $v_2\{2\}/v_3\{2\}$. Авторы [19] пришли к выводу, что наблюдаемое отношение $v_2\{2\}/v_3\{2\} \approx 1$ в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb требует $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \sim 0.5$ – 0.7 , что не согласуется как с предсказанием модели МК Глаубера, так и MC-KLN. В работе [23] было исследовано влияние объемной вязкости на коэффициенты потока в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb. Было показано, что для начальных условий модели IP-Glasma вклю-

чение объемной вязкости может несколько снизить отношение $v_2\{2\}/v_3\{2\}$. Хотя эффект недостаточно сильный, чтобы хорошо воспроизвести экспериментальное $v_2\{2\}/v_3\{2\}$. В работе [24] было исследовано влияние КХД уравнения состояния на $v_2\{2\}/v_3\{2\}$ для начальных условий модели TRENTO. Авторы обнаружили, что в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb $v_2\{2\}/v_3\{2\} \gtrsim 1.2$, и пришли к выводу, что изменение уравнения состояния не позволяет решить загадку v_2 -to- v_3 .

В работах [19, 23, 24] предполагалось, что ядро ^{208}Pb имеет сферическую форму. Сценарий с октупольной (грушевидной) деформацией ядра ^{208}Pb был рассмотрен в работе [20] для начальных условий TRENTO. Этот сценарий кажется привлекательным в контексте проблемы v_2 -to- v_3 , так как для заданного отношения k_2/k_3 имеем $v_2\{2\}/v_3\{2\} \propto \epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$. Таким образом, можно ожидать, что грушевидная деформация ядра ^{208}Pb должна несколько увеличивать $\epsilon_3\{2\}$ (без значительной модификации $\epsilon_2\{2\}$) и, следовательно, должна уменьшать $v_2\{2\}/v_3\{2\}$. На возможность грушевидной формы ядра ^{208}Pb указывают результаты работы [25], в которой в рамках расширения метода Хартри–Фока–Боголюбова для генерирующих координат авторы получили октупольный параметр деформации $\beta_3 \sim 0.0375$ для основного состояния. Однако в этой же работе значение $\beta_3 = 0$ было найдено в рамках обычного метода Хартри–Фока–Боголюбова. Совсем недавно в работе [26] значение $\beta_3 = 0$ для основного состояния ядра ^{208}Pb также было получено в рамках ковариантной теории функционала плотности. Результаты [20] показывают, что при разумных значениях β_3 сценарий с октупольной деформацией ^{208}Pb не приводит к значительному улучшению описания отношения $v_2\{2\}/v_3\{2\}$ в ультрацентральных столкновениях Pb+Pb.

В работах [19, 20, 23, 24] начальные условия были сгенерированы с использованием МК-генерации положений нуклонов для ядерного распределения Вудса–Саксона (WS). Фактически, в настоящее время этот метод является стандартным подходом для МК-расчетов начальных условий при столкновениях тяжелых ионов. Одним из очевидных недостатков МК-генерации позиций нуклонов для WS-распределения является то, что этот подход полностью игнорирует коллективные динамические эффекты для флуктуаций позиций нуклонов на больших расстояниях (которые особенно важны для расчетов коэффициентов азимутальной анизотропии ϵ_n). Действительно, хорошо известно, что флуктуации ядерной плотности на больших расстояни-

ях имеют коллективную природу [27, 28]. Коллективные эффекты проявляются в присутствии гигантских резонансов/колебаний, которые соответствуют когерентным колебаниям нуклонов [27, 28] (более поздние обзоры см. [29, 30]). Поскольку коллективные эффекты на больших расстояниях игнорируются при МК-генерации положений нуклонов для WS-распределения, нет никакой гарантии, что этот подход может имитировать истинные флуктуации ядерной плотности на больших расстояниях. Можно ожидать, что в контексте коэффициентов анизотропии ϵ_2 и ϵ_3 для ультрацентральных столкновений Pb+Pb, наиболее важными модами гигантских колебаний являются квадрупольная и октупольная. В нашей предыдущей работе [31] мы исследовали возможное влияние изо-синглетной квадрупольной гигантской вибрационной моды на отношение $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$. Анализ [31] был мотивирован тем фактом, установленным в [32], что МК-генерация положений нуклонов для WS-распределения приводит к значительному завышению среднеквадратичного квадрупольного момента ядра ^{208}Pb по сравнению с его значением, полученным с помощью экспериментальных параметров изосинглетного гигантского квадрупольного резонанса (ISGQR). Квантовый расчет с помощью энергетически взвешенного правила сумм (EWSR) для квадрупольной силовой функции (см., например, обзор [33]) дает среднеквадратичный квадрупольный момент, который меньше, чем рассчитанный с ядерной плотностью WS, на множитель порядка 2.2 [31] (после исправления ошибки, допущенной в [32]). Это означает, что вытянутые и сплюснутые эллиптические флуктуации ядра ^{208}Pb значительно слабее, чем предсказывает МК-выборка положений нуклонов для WS-распределения. По этой причине можно ожидать, что истинная ядерная многочастичная плотность должна давать меньшую эллиптичность ϵ_2 , чем МК-моделирование со стандартной ядерной плотностью WS. Для количественного изучения этого эффекта в [31] мы выполнили в МК-модели Глаубера расчеты коэффициентов анизотропии $\epsilon_{2,3}$ для центральных столкновений Pb+Pb, используя модифицированный МК-метод генерации положений нуклонов, который гарантирует, что усредненные по всем столкновениям квадрупольные моменты сталкивающихся ядер совпадают со среднеквадратичным квадрупольным моментом ядра ^{208}Pb , полученным с использованием EWSR. Результаты работы [31] показывают, что модифицированная МК-генерация с фильтрацией положений нуклонов по значению квадрупольного мо-

мента приводит к заметному уменьшению эллиптичности ϵ_2 . Было обнаружено, что фильтрация по квадрупольному моменту практически не изменяет предсказания для триангулярности ϵ_3 . Мы получили, что МК-модель Глаубера с фильтрацией по квадрупольному моменту положений нуклонов дает $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \approx 0.8$ для энергий 2.76 ТэВ и 5.02 ТэВ центральных столкновений Pb+Pb. Затем, используя коэффициенты гидродинамического линейного отклика $k_{2,3}$ из работ [19, 20, 34, 35]), мы получили $v_2\{2\}/v_3\{2\} \approx 0.96 - 1.12$, что разумно согласуется с данными ALICE [18].

Одним из недостатков анализа [31] является то, что центральные столкновения Pb+Pb рассматривались как столкновения при нулевом прицельном параметре, т.е. вычисления работы [31] соответствуют b -центральности, в работе [36] определяемой в терминах прицельного параметра b ($c = \pi b^2/\sigma_{in}^{AA}$ [37]). Однако экспериментально центральность столкновения обычно определяется через множественность заряженных частиц N_{ch} в определенной кинематической области. Эта n -центральность определяется как [36, 37]

$$c(N_{ch}) = \sum_{N=N_{ch}}^{\infty} P(N), \quad (4)$$

где $P(N)$ есть вероятность наблюдения множественности N . Из-за флуктуаций множественности (при заданном прицельном параметре) существует некоторое несоответствие между b - и c -центральностями [36, 37]. По этой причине можно обоснованно беспокоиться о влиянии этого несоответствия на результаты работы [31], где эффект размазывания n -центральности при заданной b -центральности был проигнорирован. Поэтому крайне желательно расширить вычисления [31] на случай n -центральности. Это наша главная цель в настоящей статье. Кроме того, мы расширим анализ [31] на случай октупольных флуктуаций. Исследование роли фильтрации положений нуклонов по октупольному моменту в МК-моделировании столкновений Pb+Pb представляет интерес, поскольку коллективные флуктуации грушевидной формы потенциально могут повлиять на триангулярность ϵ_3 файерболла. Из имеющихся экспериментальных данных можно сделать вывод, что для флуктуаций октупольной формы среднеквадратичный октупольный момент ядра ^{208}Pb может быть несколько больше, чем тот, который получается из МК-расчетов для модели WS (см. Приложение). Последняя возможность представляется очень интересной в контексте загадки v_2 -to- v_3 , по-

тому что она должна приводить к увеличению ϵ_3 (аналогично случаю с деформацией грушевидной формы основного состояния [20]) и, следовательно, к меньшему значению отношения $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$. Отметим, что в отличие от анализа [31], в настоящей работе мы выполняем расчеты для всего диапазона центральности. Как и в [31], мы используем МК-модель Глаубера, разработанную в [38, 39], которая позволяет учитывать наличие мезон-барионной компоненты в волновой функции нуклона на световом конусе.

План статьи следующий. В разд. 2 обсуждается теоретическая схема. В разд. 3 мы представляем численные результаты. Выводы приведены в разд. 4. В Приложении мы обсуждаем расчеты среднеквадратичных квадрупольного и октупольного моментов ядра ^{208}Pb с использованием модели EWSR.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ СХЕМА

В настоящем анализе для получения начальной плотности энтропии мы используем МК-подход Глаубера, разработанный в [38, 39]. Эта модель позволяет выполнять расчеты производства энтропии стандартным способом, когда каждый нуклон рассматривается как одночастичное состояние, а также с учетом наличия мезонного облака нуклона, когда волновая функция на световом конусе физического нуклона включает голый нуклон и мезон-барионные фоковские состояния. Результаты наших предыдущих анализов [39, 40] показывают, что для обеих версий предсказания этой модели для зависимости от центральности плотности заряженной множественности в центральной области быстрот очень хорошо согласуются с экспериментальными данными для столкновений Au+Au при энергии 0.2 ТэВ на RHIC и при энергиях 2.76 ТэВ, 5.02 ТэВ столкновений Pb+Pb и при энергии 5.44 ТэВ столкновений Xe+Xe на LHC.

2.1. Обзор МК-схемы Глаубера

В этом разделе мы кратко обрисовываем алгоритм, используемый в нашей МК-модели Глаубера для версии без мезон-барионной компоненты (в этом случае наша схема аналогична МК-генератору Глаубера GLISSANDO [11]). Генерация энтропии происходит через поврежденные нуклоны (WN) и через жесткие бинарные столкновения (BC). Мы предполагаем, что для каждой пары сталкивающихся нуклонов поперечное сечение жесткого бинарного

столкновения подавляется множителем α [41]. Полная плотность энтропии в поперечной плоскости записывается как (мы рассматриваем центральную область быстрой)

$$\rho_s(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{i=1}^{N_{wn}} S_{wn}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_i) + \sum_{i=1}^{N_{bc}} S_{bc}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'_i), \quad (5)$$

где члены S_{wn} соответствуют источникам WN, а члены S_{bc} источникам BC, N_{wn} и N_{bc} это соответственно числа WN и BC. Мы записываем S_{wn} и S_{bc} как

$$S_{wn}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1-\alpha}{2}s(\boldsymbol{\rho}), \quad S_{bc}(\boldsymbol{\rho}) = s(\boldsymbol{\rho}), \quad (6)$$

где $s(\boldsymbol{\rho})$ есть распределение для источника энтропии. Мы используем для $s(\boldsymbol{\rho})$ гауссовскую форму

$$s(\boldsymbol{\rho}) = s_0 \exp(-\boldsymbol{\rho}^2/\sigma^2)/\pi\sigma^2, \quad (7)$$

где s_0 дает полную энтропию источника, а σ — ширину источника. Мы предполагаем, что центр каждого источника энтропии WN совпадает с положением WN, а для каждого BC центр источника энтропии расположен посередине между сталкивающимися нуклонами.

Для каждого источника энтропии мы рассматриваем s_0 как случайную величину. Мы предполагаем, что расширение КГП является изэнтропийным. В этом приближении мы можем рассматривать каждый источник энтропии как источник заряженной множественности $n = as_0$ в единичном интервале псевдобыстроты $|\eta| < 0.5$ с $a \approx 7.67$ [42]. Мы описываем флуктуации n гамма-распределением

$$\Gamma(n, \langle n \rangle) = \left(\frac{n}{\langle n \rangle} \right)^{\kappa-1} \frac{\kappa^\kappa \exp[-n\kappa/\langle n \rangle]}{\langle n \rangle \Gamma(\kappa)} \quad (8)$$

с параметрами $\langle n \rangle$ и κ , подобранными для согласия с экспериментальной средней зарядовой множественностью и ее дисперсией в окне единичной псевдобыстроты $|\eta| < 0.5$ для столкновений pp .

Как и в анализах [39, 40], в версии с мезон-барионной компонентой нуклона для общего веса MB-состояний в физическом нуклоне мы берем 40 %, что позволяет описать данные DIS о нарушении правила суммы Готфрида [43]. В смысле источников энтропии расчет начальной плотности энтропии в этой версии аналогичен расчету для версии без MB-компоненты. Однако в этом случае источники энтропии могут рождаться в BB-, MB- и MM-столкновениях. Результаты работ [39, 40] показывают, что обе версии дают аналогичные предсказания для плотности заряженной множественности при средних быстройтах

$dN_{ch}/d\eta$. Однако версия с компонентой MB требует несколько меньшего значения параметра α , чтобы соответствовать измеренной $dN_{ch}/d\eta$ в центральной области быстрой. В настоящем анализе мы используем значения $\alpha = 0.14(0.09)$ для версий без(с) мезон-барионной компонентой нуклона. Эти значения позволяют очень хорошо воспроизвести данные о зависимости от центральности $dN_{ch}/d\eta$ при $\eta = 0$ для столкновений Pb+Pb при энергиях 2.76 ТэВ и 5.02 ТэВ. Более подробную информацию о нашей МК-схеме Глаубера можно найти в работах [39, 40].

2.2. Генерация позиций нуклонов

МК-модель Глаубера дает алгоритм расчета распределения энтропии при каждом AA-столкновении для заданных положений нуклонов в сталкивающихся ядрах. Она должна быть дополнена предписанием для МК-генерации положений нуклонов. Обычно при последовательном моделировании столкновений тяжелых ионов позиции нуклонов генерируются с использованием некоррелированного распределения WS (или распределения WS с ограничением на минимальное расстояние между двумя нуклонами [11, 44] для моделирования жесткого NN-кора). Однако эта процедура полностью игнорирует коллективный характер дальнедействующих флуктуаций ядерной плотности и может привести к неправильному описанию 3D-флуктуаций многочастичной плотности сталкивающихся ядер. Это может привести к неправильным предсказаниям для флуктуаций начального распределения энтропии в AA-столкновениях. Как уже упоминалось во Введении, с точки зрения столкновений тяжелых ионов наиболее важные коллективные флуктуации связаны с квадрупольными и октупольными модами колебаний. Их величина может быть охарактеризована квадратом L -мультипольного момента (мы обозначаем его как Q_L^2) для $L = 2$ и 3 , определенных с помощью сферических гармоник (см. Приложение). В [31] мы предложили простой систематический метод вычисления среднеквадратичных мультипольных моментов, $\langle Q_L^2 \rangle$, для произвольного L из экспериментальных силовых функций с использованием EWSR (для полноты изложения в Приложении мы описываем это). Для моды $L = 2$ этот метод дает среднеквадратичный квадрупольный момент ядра ^{208}Pb , который меньше, чем предсказывается МК-моделированием с ядерной плотностью WS, на коэффициент $r_2 \approx 2.25$ (см. Приложение). Можно ожидать, что завышение предсказаний для флуктуаций ядерной плотности

^{208}Pb с $L = 2$ может привести к завышению предсказаний эллиптичности ϵ_2 в МК-моделировании ультрацентральных столкновений Pb+Pb. В работе [31] мы предложили простой метод решения этой проблемы, выполняя МК-генерацию положений нуклонов с подходящим фильтром Q_2^2 , который должен гарантировать истинное значение $\langle Q_2^2 \rangle$ для окончательного набора положений нуклонов. В работе [31] мы выполнили вычисления, используя два разных фильтра Q_2^2 с плавной и резкой фильтрациями. В гладкой версии мы использовали фильтр Q_2^2 , который генерирует набор позиций нуклонов с распределением по Q_2^2 , которое равно масштабированному на коэффициент r_2 распределению по Q_2^2 для ядерной плотности WS. Во втором методе мы просто отбирали только конфигурации нуклонов с $Q_2^2 < Q_{2max}^2$ с Q_{2max}^2 подобранным так, чтобы обеспечить для МК-выборки $\langle Q_2^2 \rangle$ равного его правительному EWSR-значению. Было обнаружено, что эти два очень разных фильтра дают практически одинаковые результаты для $\epsilon_{2,3}\{2\}$.

Как и в работе [31], в настоящем анализе мы выполняем вычисления, используя плавные и разрывные Q_2^2 -фильтрации положений нуклонов. В первом случае мы используем в МК-генерации позиций нуклонов гладкий Q_2^2 -фильтр, который генерирует позиции нуклонов с распределением Q_2^2 , заданным формулой

$$P(Q_2^2) = C \exp(-(Q_2^2/a_2)^2) P_{WS}(Q_2^2), \quad (9)$$

где P_{WS} есть распределение Q_2^2 для обычной нефильтрованной МК-выборки WS позиций нуклонов, C — константа нормировки, а a_2 — параметр, подобранный так, чтобы иметь $\langle Q_2^2 \rangle = \langle Q_2^2 \rangle_{WS}/r_2$. С точки зрения численных вычислений, анзац (9) с гауссовским коэффициентом подавления $\exp(-(Q_2^2/a_2)^2)$ проще, чем метод [31] с масштабированием исходного WS-распределения $P_{WS}(Q_2^2)$. Во втором способе, как и в [31], мы используем резкий фильтр с обрезанием $Q_2^2 < Q_{2max}^2$ с Q_{2max}^2 подобранным так, чтобы иметь $\langle Q_2^2 \rangle = \langle Q_2^2 \rangle_{WS}/r_2$. Как и в [31], мы обнаружили, что предсказания для $\epsilon_{2,3}$, полученные для гладких и резких Q_2^2 -фильтров, практически неразличимы.

В настоящем анализе в дополнение к влиянию квадрупольных колебаний, рассмотренных в [31], мы также изучаем влияние на коэффициенты анизотропии $\epsilon_{2,3}$ октупольных ($L = 3$) колебаний ядра ^{208}Pb . Аналогично случаю квадрупольных флуктуаций 3D-плотности ядра, неправильное описание октупольных 3D-флуктуаций плотности ядра в МК-выборке положений нуклонов WS-распреде-

ления может вести к неправильным предсказаниям для 2D-флуктуаций начальной энтропии при столкновениях Pb+Pb. Разумно ожидать, что для ультрацентральных столкновений Pb+Pb изменения в октупольных 3D-флуктуациях плотности ядра в основном повлияют на триангулярность ϵ_3 .

К сожалению, в экспериментальных данных по октупольной силовой функции для ядра ^{208}Pb имеются довольно большие неопределенности (см. Приложение), которые приводят к значительным неопределенностям в значении среднеквадратичного октупольного момента, получаемого с использованием EWSR. Расчеты с использованием EWSR и доступных данных по октупольной силовой функции ядра ^{208}Pb показывают, что отношение среднеквадратичного октупольного момента, предсказываемого ядерной плотностью WS ^{208}Pb , к истинному, скорее всего, должно находиться в диапазоне $0.7 < r_3 < 0.84$ (см. Приложение). Таким образом, в отличие от ситуации с квадрупольной модой, возможно, что ядерная плотность WS несколько недооценивает октупольные 3D-флуктуации для ядра ^{208}Pb . Чтобы смоделировать влияние возможного усиления октупольных флуктуаций для ядра ^{208}Pb на начальное распределение энтропии, мы используем, как и в случае квадрупольной моды, два типа фильтров при генерации положений нуклонов. В первом методе мы используем гладкий фильтр Q_3^2 , который генерирует позиции нуклонов с распределением по Q_3^2 , заданным формулой

$$P(Q_3^2) = C [1 - \exp(-(Q_3^2/a_3)^2)] P_{WS}(Q_3^2). \quad (10)$$

Во втором методе мы используем резкий фильтр, который отбирает только конфигурации с $Q_3^2 > Q_{3min}^2$. Значения a_3 и Q_{2max}^2 подбираются так, чтобы иметь $\langle Q_3^2 \rangle = \langle Q_3^2 \rangle_{WS}/r_3$. Оба эти рецепта подталкивают $\langle Q_3^2 \rangle$ к более высоким значениям. Как и для моды $L = 2$, мы обнаружили, что предсказания для $\epsilon_{2,3}$, полученные для гладких и резких Q_3^2 -фильтров, практически идентичны. Стоит отметить, что, хотя наши $Q_{2,3}^2$ -фильтры дают значительные изменения в распределениях по $Q_{2,3}^2$ для сгенерированных наборов положений нуклонов, они оказывают практически нулевое влияние на распределение плотности для одного нуклона (т.е. после $Q_{2,3}^2$ -фильтрации мы получаем то же самое распределение плотности WS).

На рис. 1a показано распределение для квадрата $L = 2$ мультипольного момента, полученное для МК-генерации положений нуклонов для некоррелированной плотности WS ядра ^{208}Pb без и с

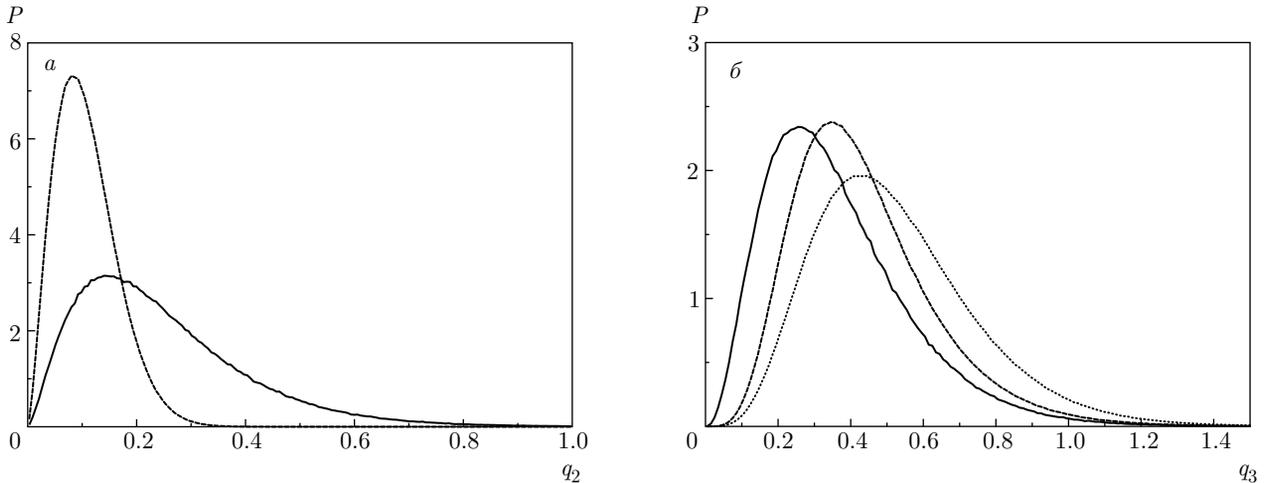


Рис. 1. а) Распределение квадрата квадрупольного момента в терминах безразмерной переменной $q_2 = Q_2^2/AR_A^4$ для ядра ^{208}Pb , полученное с использованием обычной МК-генерации положений нуклонов для плотности ядра WS (сплошная кривая) и с фильтрацией положений нуклонов (штриховая кривая), которая дает среднееквадратическое значение квадрупольного момента, уменьшенное на коэффициент $r_2 \approx 2.25$. б) Распределение квадрата октупольного момента в терминах безразмерной переменной $q_3 = Q_3^2/AR_A^6$ для ядра ^{208}Pb , полученное с использованием обычной МК-генерации положений нуклонов для плотности ядра WS (сплошная) и с фильтрацией положений нуклонов, которая дает среднееквадратичный октупольный момент, увеличенный на коэффициент $1/r_3$ для $r_3 = 0.84$ (штриховая кривая) и 0.7 (пунктир)

Q_2^2 -фильтрованием (для гладкого Q_2^2 -фильтра, который соответствует $r_2 = 2.25$). На рис. 1б показаны аналогичные результаты для моды $L = 3$. Для этой моды представлены результаты для двух отфильтрованных распределений для $r_3 = 0.84$ и 0.7 . На рис. 1 использованы безразмерные переменные $q_L = Q_L^2/AR_A^{2L}$, где R_A — радиус ядра в параметризации ядерной WS-плотности ^{208}Pb (A.1).

Стоит отметить, что наши численные расчеты показывают, что $Q_2^2(Q_3^2)$ -фильтрация практически не влияет на распределение по $Q_3^2(Q_2^2)$. Это происходит потому, что с очень хорошей точностью исходное двумерное распределение по $Q_{2,3}^2$ для МК-выборки позиций нуклонов WS может быть записано в факторизованной форме:

$$P_{WS}(Q_2^2, Q_3^2) \approx P_{WS}(Q_2^2)P_{WS}(Q_3^2). \quad (11)$$

При этом, как и в тех случаях, когда Q_2^2 - и Q_3^2 -фильтры применяются отдельно, наши численные расчеты показывают, что для одновременного использования Q_2^2 - и Q_3^2 -фильтров предсказания для $\epsilon_{2,3}$ оказываются практически идентичными для плавного и резкого фильтров.

Мы также исследовали влияние изменения распределения по изовекторному дипольному моменту. Для изовекторных дипольных флуктуаций МК-генерация ядерных конфигураций для ядерной WS-плотности приводит к среднееквадратичному

дипольному моменту, который в 5–6 раз больше, чем полученный из параметров изовекторного дипольного резонанса [32, 45]. Изовекторный гигантский дипольный резонанс соответствует коллективным колебаниям протонов и нейтронов в противоположных направлениях [27, 28]. Эта мода может привести к удлинненной форме распределения нуклонов (т.е. оно генерирует некоторый квадрупольный момент), и, в принципе, неадекватное описание этой моды может повлиять на геометрию распределения энтропии при столкновениях $\text{Pb}+\text{Pb}$. Однако мы обнаружили, что влияние модификации МК-генерации положений нуклонов для изовекторной дипольной моды (так же, как мы делаем это для изосинглетной квадрупольной моды) на результаты для $\epsilon_{2,3}$ оказывается практически пренебрежимо малым. Физически это связано с очень малым статистическим весом (среди квадрупольных флуктуаций) флуктуаций с коллективным смещением всех протонов и всех нейтронов в противоположных направлениях. Поэтому изменение распределения по изовекторному дипольному моменту при МК-генерации нуклонных позиций дает для $\epsilon_{2,3}$ почти нулевой эффект.

Стоит отметить, что отбор положений нуклонов для WS-плотности ядра приводит к некоторому завышению чисто радиальных флуктуаций, соответствующих монополюной ($L = 0$) колебательной мо-

де, по сравнению с предсказанием EWSR на основе экспериментальной монопольной силовой функции (см. Приложение). Однако интуитивно можно было бы ожидать, что влияние радиальных колебаний должно быть несущественным для эксцентриситетов $\epsilon_{2,3}$ (особенно при небольших центральных), и расхождение между моментом $L = 0$ для WS-выборки положений нуклонов с моментом, полученным из EWSR, не должны быть важными. Наши расчеты подтверждают это, мы действительно обнаружили, что добавление фильтрации для моды $L = 0$ практически не влияет на азимутальные коэффициенты $\epsilon_{2,3}$, поэтому мы не использовали никакого фильтра для моды $L = 0$.

Наконец, мы хотели бы подчеркнуть, что тот факт, что все наши предсказания для $\epsilon_{2,3}\{2\}$ для гладких и резких фильтров практически одинаковые, весьма обнадеживает с точки зрения нашей стратегии по имитации коллективных эффектов путем простых $Q_{2,3}^2$ -фильтраций для позиций нуклонов. Действительно, наши плавные и резкие фильтры приводят к радикально различным распределениям по Q_2^2 и Q_3^2 . Ясно, что многочастичные плотности для этих фильтров также радикально различаются. Тем не менее мы получаем практически идентичные $\epsilon_{2,3}\{2\}$, если обе версии приводят к одинаковым значениям $\langle Q_2^2 \rangle$ и $\langle Q_3^2 \rangle$, а различие в других характеристиках (скажем, разница в значениях $\langle (Q_{2,3}^2)^2 \rangle$) оказывает незначительное влияние на $\epsilon_{2,3}\{2\}$ ¹. Эта особенность предсказаний модели Глаубера для $\epsilon_{2,3}\{2\}$ позволяет ожидать, что наши результаты для $\epsilon_{2,3}\{2\}$ должны быть близки к тем, к которым приводит истинная многочастичная плотность при условии, что мы используем $Q_{2,3}^2$ -фильтры, обеспечивающие правильные значения $\langle Q_2^2 \rangle$ и $\langle Q_3^2 \rangle$.

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ $\epsilon_2\{2\}$ И $\epsilon_3\{2\}$

В этом разделе представлены наши численные результаты для RMS эллиптичности $\epsilon_2\{2\}$ и триангулярности $\epsilon_3\{2\}$ для энергии 5.02 ТэВ столкновений Pb+Pb²). Результаты для энергии 2.76 ТэВ

¹ Причина этого свойства $\epsilon_{2,3}\{2\}$ неясна. Это может быть связано с тем, что в модели Глаубера поврежденных нуклонов дисперсия ϵ_n (как и $\langle Q_{2,3}^2 \rangle$) зависит только от двухнуклонных корреляторов для сталкивающихся ядер. В то время как $\langle (Q_{2,3}^2)^2 \rangle$ зависят также и от четырехнуклонных корреляторов, которые вообще не важны для дисперсии ϵ_n .

² Отметим, что наши расчеты показывают, что Q_2^2 - и Q_3^2 -фильтрации дают почти нулевой эффект для высших гармоник ϵ_4 и ϵ_5 , и поэтому мы их не показываем.

столкновений Pb+Pb очень близки к таковым для энергии 5.02 ТэВ, и поэтому мы их не показываем. Для версий с $Q_{2,3}^2$ -фильтрацией мы представляем результаты, полученные с помощью гладких фильтров (как мы уже говорили, результаты для версий с гладкими и резкими $Q_{2,3}^2$ -фильтрами практически неразличимы). Результаты были получены путем генерации примерно $6 \cdot 10^6$ столкновений Pb+Pb, т. е. мы имеем около $6 \cdot 10^4$ событий в области $c \lesssim 1\%$, которая наиболее интересна в контексте загадки v_2 -to- v_3 . Проведены расчеты для схем Глаубера с мезон-барионной компонентой нуклона и без нее. Представлены результаты, полученные для источников энтропии с параметром ширины Гаусса $\sigma = 0.4$ фм. В области малых центральных (не более 5–10%), которая интересна в контексте загадки v_2 -to- v_3 , предсказания для $\epsilon_{2,3}\{2\}$ обладают очень низкой чувствительностью к значению σ . Мы проверили это, выполнив вычисления для значения $\sigma = 0.7$ фм. В этом случае $\epsilon_{2,3}\{2\}$ становятся несколько меньше для больших центральных (примерно на 5–7% при $c \sim 50\%$), но при центральных не более 5–10% результаты очень близки к таковым для $\sigma = 0.4$ фм.

На рис. 2 представлены результаты для зависимости $\epsilon_{2,3}\{2\}$ от центральности для обычной МК-выборки WS-позиций нуклонов (т. е. без применения каких-либо $Q_{2,3}^2$ -фильтров). На рис. 2 видно, что результаты для $\epsilon_{2,3}\{2\}$ в версиях без и с мезон-барионной компонентой очень похожи. Для кривых, показанных на рис. 2, мы имеем в среднем $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \approx 0.94$ –0.95 при $c \lesssim 1\%$. На рис. 3 представлены $\epsilon_{2,3}\{2\}$, полученные с помощью МК-генерации позиций нуклонов с применением плавного Q_2^2 -фильтра, который дает для сталкивающихся ядер $\langle Q_2^2 \rangle = \langle Q_2^2 \rangle_{WS}/r_2$ с $r_2 = 2.25$, т. е. среднеквадратичный квадрупольный момент, соответствующий предсказываемому EWSR. Из сравнения результатов, показанных на рис. 2 и 3, видно, что наличие Q_2^2 -фильтра заметно уменьшает $\epsilon_2\{2\}$, но почти не влияет $\epsilon_3\{2\}$. Для кривых, показанных на рис. 3, мы имеем в среднем $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \approx 0.82$ –0.84 при $c \lesssim 1\%$. Обратим внимание, что значение отношения $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$ при $c \lesssim 0.1\%$ для кривых, показанных на рис. 3, всего лишь примерно на 2% больше, чем значение, полученное в работе [31] в аналогичных расчетах для нулевого прицельного параметра.

На рис. 4 показаны $\epsilon_{2,3}\{2\}$, полученные с помощью МК-генерации положений нуклонов с одновременным применением гладких фильтров по Q_2^2 и Q_3^2 , которые дают для сталкивающихся ядер $\langle Q_{2,3}^2 \rangle =$

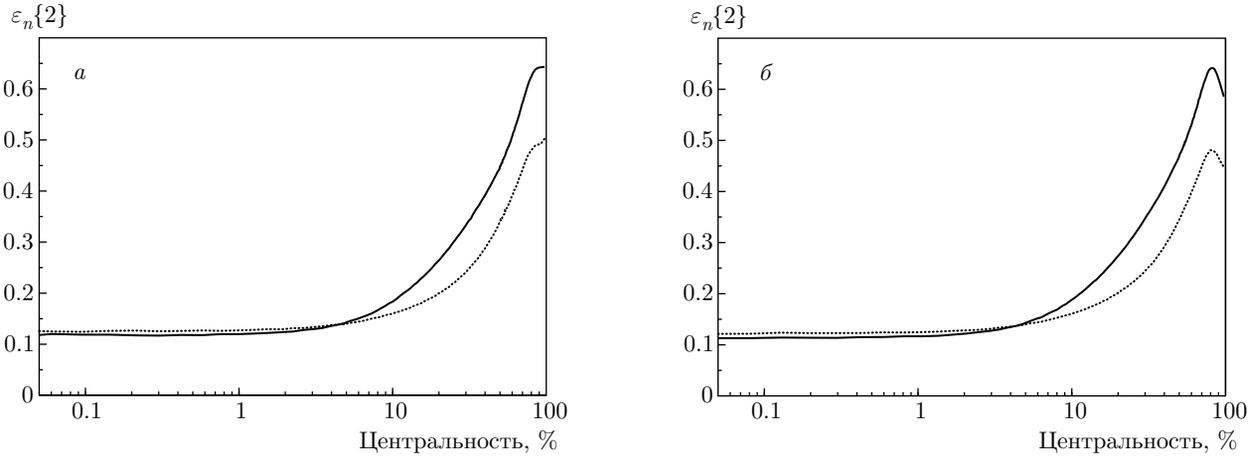


Рис. 2. Азимутальные RMS-коэффициенты $\epsilon_2\{2\}$ (сплошная) и $\epsilon_3\{2\}$ (пунктир) в зависимости от центральности для столкновений Pb+Pb с энергией 5.02 ТэВ, полученные в рамках МК-модели Глаубера без (а) и с (б) мезон-барионной компонентой нуклона с использованием обычной МК-генерации положений нуклонов WS

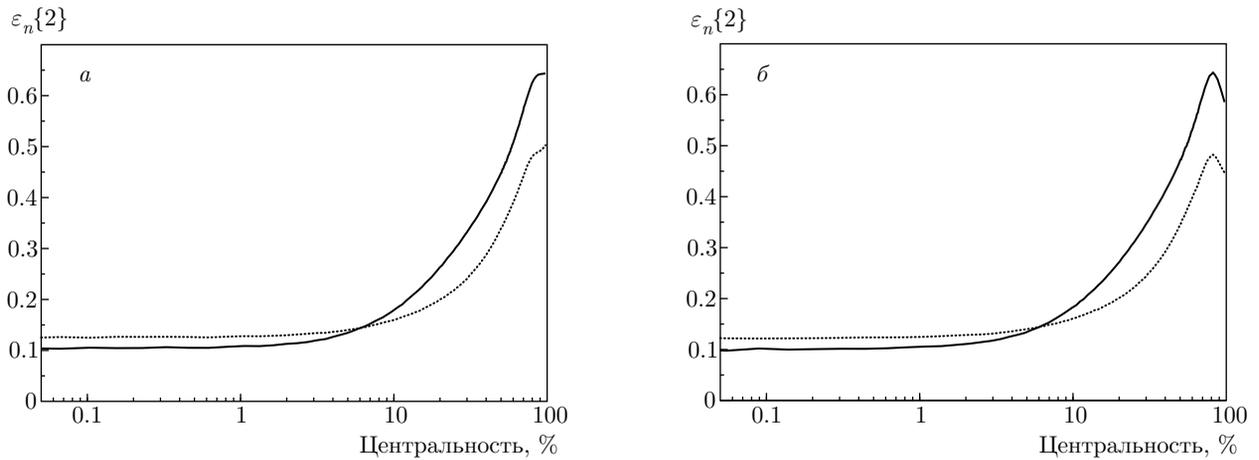


Рис. 3. Азимутальные RMS-коэффициенты $\epsilon_2\{2\}$ (сплошная) и $\epsilon_3\{2\}$ (пунктир) в зависимости от центральности для столкновений Pb+Pb с энергией 5.02 ТэВ, полученные в рамках модели МК Глаубера без (а) и с (б) мезон-барионной компонентой нуклона с использованием МК-генерации положений нуклонов WS с плавным Q_2^2 -фильтром, который приводит к $\langle Q_2^2 \rangle = \langle Q_2^2 \rangle_{WS} / r_2$ с $r_2 = 2.25$

$= \langle Q_{2,3}^2 \rangle_{WS} / r_{2,3}$ с $r_2 = 2.25$ и $r_3 = 0.84$. Добавление Q_3^2 -фильтрации для $r_3 = 0.84$ увеличивает $\epsilon_3\{2\}$ примерно на 2% при $c \lesssim 1\%$, так что в этой области центральностей мы имеем в среднем $\epsilon_2\{2\} / \epsilon_3\{2\} \approx 0.8 - 0.82$. На рис. 5 представлены результаты, аналогичные показанным на рис. 4, но для $r_3 = 0.7$. В этой версии при $c \lesssim 1\%$ мы имеем в среднем $\epsilon_2\{2\} / \epsilon_3\{2\} \approx 0.78 - 0.81$. Из сравнения результатов, показанных на рис. 3, с теми, что показаны на рис. 4 и 5, можно видеть, что Q_3^2 -фильтрация немного увеличивает $\epsilon_3\{2\}$, без заметного эффекта для значения $\epsilon_2\{2\}$. Результаты, показанные на рис. 3, 4, 5, демонстрируют, что влияние $Q_{2,3}^2$ -фильтров ста-

новится заметным только при $c \lesssim 10\%$. На рис. 3, 4, 5 можно видеть, что в наиболее интересной (в контексте загадки v_2 -to- v_3) области малых центральностей не более 1%, модификация МК-отбора нуклонных позиций с Q_2^2 - и Q_3^2 -фильтрами увеличивает разницу $\epsilon_3\{2\} - \epsilon_2\{2\}$ на коэффициент, равный примерно трем. Обратим внимание, что наши значения для отношения $\epsilon_2\{2\} / \epsilon_3\{2\}$ при $c \lesssim 1\%$ для версий с $Q_{2,3}^2$ -фильтрацией меньше на 15–20%, чем те, которые были получены в модели MC-KLN в работе [19], и примерно на 10–15%, чем полученные в схеме TRENTO в работе [20] (для октупольного параметра деформации $\beta_3 \sim 0 - 0.0375$). По сравнению с рас-

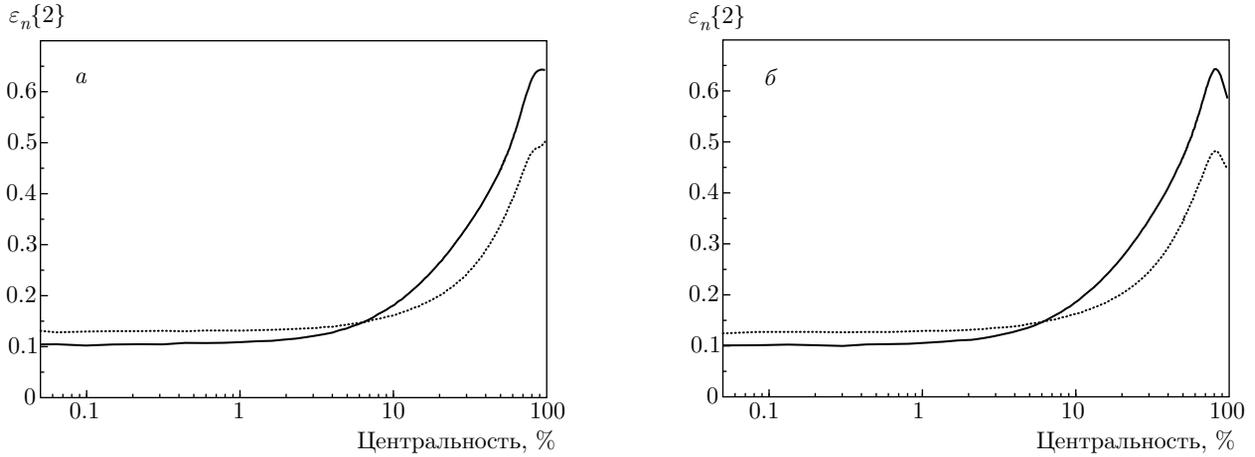


Рис. 4. Азимутальные RMS-коэффициенты $\epsilon_2\{2\}$ (сплошная) и $\epsilon_3\{2\}$ (пунктир) в зависимости от центральности для столкновений Pb+Pb с энергией 5.02 ТэВ, полученные в рамках МК-модели Глаубера без (а) и с (б) мезон-барионной компонентой нуклона с использованием МК-генерации положений нуклонов WS с плавным Q_2^2 -фильтром, который приводит к $\langle Q_2^2 \rangle = \langle Q_2^2 \rangle_{WS} / r_2$ с $r_2 = 2.25$ и $\langle Q_3^2 \rangle = \langle Q_3^2 \rangle_{WS} / r_3$ с $r_3 = 0.84$

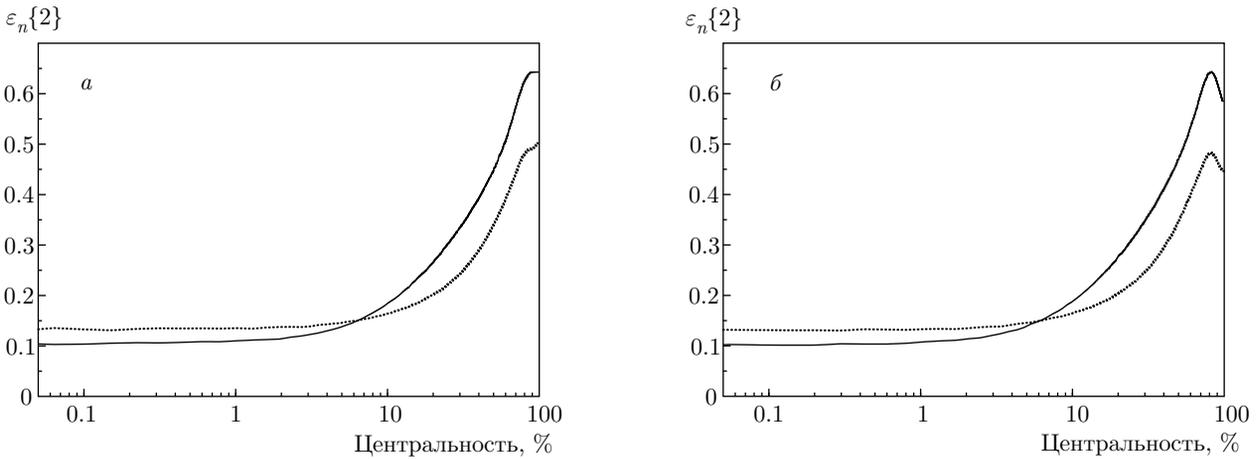


Рис. 5. То же самое что и на рис. 4, но для $r_3 = 0.7$

четами работы [46] в рамках модели MAGMA, наши значения отношения $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$ меньше на коэффициент примерно 1.65.

С точки зрения загадки v_2 -to- v_3 , интересно знать, каково отношение $k_2\epsilon_2\{2\}/k_3\epsilon_3\{2\}$. Гидродинамическое моделирование столкновений Pb+Pb при энергиях ЛHC дает $k_2/k_3 \approx 1.2 - 1.4$ [19, 20, 34, 35] для малых центральностей ($c \lesssim 2\%$). Наши результаты, показанные на рис. 4 и 5, с МК-генерацией позиций нуклонов с одновременным Q_2^2 -фильтрованием (с $r_2 = 2.25$) и Q_3^2 -фильтрованием для центральности примерно 0.1–0.2% дают $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \approx 0.8(0.78)$ при $r_3 = 0.84(0.7)$. Эти значения $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$ приводят к $0.96(0.94) <$

$< k_2\epsilon_2\{2\}/k_3\epsilon_3\{2\} < 1.12(1.1)$ для $r_3 = 0.84(0.7)$ и $1.2 < k_2/k_3 < 1.4$. Это разумно согласуется с результатом измерений ALICE [18] для энергий 2.76 ТэВ и 5.02 ТэВ соударений Pb+Pb, которые дают $v_2\{2\}/v_3\{2\} \approx 1.08 \pm 0.05$ при $c \rightarrow 0$.

Приведенные выше результаты были получены для некоррелированной WS-плотности ядра. Мы также выполнили расчеты, заменив ее ядерной WS-плотностью с жестким NN-отталкиванием для радиуса отталкивания $r_c = 0.9$ фм [44] и $r_c = 0.6$ фм [47]. Мы обнаружили, что твердый NN-кор немного изменяет значения $\epsilon_{2,3}$ для МК-моделирования без $Q_{2,3}^2$ -фильтрации. Однако для версии с одновременным $Q_{2,3}^2$ -фильтрованием предсказания для

$\epsilon_{2,3}\{2\}$ очень близки к таковым для некоррелированной ядерной плотности WS. Этот факт показывает, что предсказания для $\epsilon_{2,3}\{2\}$ зависят в основном от крупномасштабных ($L \sim R_A$) свойств многочастичного распределения ядра, а его свойства на малых расстояниях ($L \sim r_c \ll R_A$) имеют второстепенное значение. Это можно рассматривать как еще один аргумент в пользу нашей основной идеи моделирования коллективных эффектов в ядре ^{208}Pb путем применения подходящих $Q_{2,3}^2$ -фильтрований положений нуклонов в МК-моделировании, которые гарантируют, что выбранный набор положений нуклонов воспроизводит предсказания EWSR для $\langle Q_{2,3}^2 \rangle$.

В связи с моделированием эффекта жесткого NN-кора при МК-моделировании AA-столкновений стоит отметить, что неочевидно, что модели с исключенным объемом физически лучше обоснованы, чем моделирование с некоррелированной ядерной плотностью WS. Дело в том, что вполне возможно, что на самом деле «исключенный объем» не пуст. Действительно, короткодействующее NN-взаимодействие может быть успешно описано в дибарионной модели (см. обзоры [48, 49]), в которой область вытеснения не пуста, а занята $6q$ -кластером. В этом случае, аналогично hD -рассеянию [50], $6q$ -кластеры должны участвовать в обмене t -канальными глюонами между сталкивающимися ядрами и вносить вклад в производство энтропии при AA-столкновениях. Очевидно, что в этом сценарии использование некоррелированной ядерной WS-плотности более адекватно для моделирования начальных условий при столкновениях тяжелых ионов.

4. ВЫВОДЫ

Настоящее исследование является продолжением нашего предыдущего [31] анализа влияния коллективных квантовых эффектов в многочастичном распределении ядра на коэффициенты анизотропии $\epsilon_{2,3}$ в Pb+Pb-столкновениях при энергиях LHC, мотивированного загадкой v_2 -to- v_3 в ультрацентральных Pb+Pb-столкновениях. В отличие от наших предыдущих расчетов [31], где изучались только столкновения при нулевом прицельном параметре, мы выполняем вычисления для n -центральности и во всем диапазоне центральности. Моделируются коллективные эффекты в сталкивающихся ядрах Pb путем модификации МК-генерации положений нуклонов с помощью подходящих фильтров, которые гарантируют, что среднеквадратичные квадрупольные и октупольные моменты совпадают с те-

ми, которые получены с использованием EWSR из данных о квадрупольных и октупольных силовых функциях ядра ^{208}Pb . Мы обнаружили, что EWSR и экспериментальные данные ISGQR для ядра ^{208}Pb приводят к среднеквадратичному квадрупольному моменту, который меньше, чем для некоррелированной ядерной WS-плотности, на множитель $r_2 \approx 2.25$. Для октупольной моды имеющиеся экспериментальные данные о силовой функции указывают на то, что отношение между среднеквадратичным октупольным моментом для некоррелированной ядерной плотности WS и значением, полученным с помощью EWSR, должно быть примерно 0.7–0.84.

Выполнены расчеты по МК-модели Глаубера с применением плавного и резкого $Q_{2,3}^2$ -фильтров для генерации выборки положений нуклонов. Мы обнаружили, что результаты для $\epsilon_{2,3}\{2\}$, полученные с помощью гладкой и резкой $Q_{2,3}^2$ -фильтрации, практически идентичны. Наши численные результаты показывают, что влияние $Q_{2,3}^2$ -фильтрации позиций нуклонов на значения $\epsilon_{2,3}\{2\}$ становится заметным при $c \lesssim 10\%$. Для центральностей $c \sim 0.1$ – 1% наша МК-модель Глаубера с модифицированной выборкой положений нуклонов дает $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\} \sim 0.8$, что на коэффициент примерно 1.2 меньше, чем для обычной МК-выборки позиций нуклонов для некоррелированной ядерной плотности WS. Такое значение соотношения $\epsilon_2\{2\}/\epsilon_3\{2\}$ позволяет достичь разумного согласия с отношением $v_2\{2\}/v_3\{2\} \approx 1.08 \pm 0.05$ при $c \rightarrow 0$, полученным для энергий 2.76 ТэВ и 5.02 ТэВ столкновений Pb+Pb коллаборацией ALICE [18] для отношения $k_2/k_3 \approx 1.35$, которое принадлежит интервалу $1.2 < k_2/k_3 < 1.4$, получаемому в гидродинамических расчетах [19, 20, 34, 35].

Хотя наш анализ демонстрирует важность коллективных эффектов для начальной геометрии файрбола КГП для сферических ядер, можно ожидать, что коллективные эффекты могут быть важны и для столкновения несферических ядер (например, для соударений $^{197}\text{Au}+^{197}\text{Au}$ и $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$). Коллективные эффекты могут быть важны и для исследования формы ядер [51] и для интерпретации результатов отбора формы событий [52–54] в AA-столкновениях при энергиях RHIC и LHC и в области энергии NICA, где эффекты критической точки могут повлиять на расширение среды, и учет подавления квадрупольных флуктуаций для ядра Au особенно важен.

Благодарности. Я благодарен С. П. Камерджиеву за полезные обсуждения физики гигант-

ских резонансов и нашего метода расчета квадратов L -мультипольных моментов.

Финансирование. Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-02-40069mega).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Вычисление среднеквадратичных мультипольных моментов ядра ^{208}Pb

Для полноты изложения мы кратко обсуждаем метод работы [31] вычисления среднеквадратичных мультипольных моментов ядра ^{208}Pb с помощью EWSR [27, 33] и приводим отношения между среднеквадратичными мультипольными моментами, получаемыми с использованием обычного МК-отбора позиций нуклонов WS и рассчитанными с использованием EWSR.

Предполагается, что в основном состоянии ядро ^{208}Pb сферичное. Запишем ядерную плотность в WS-форме:

$$\rho_A(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp[(r - R_A)/d]} \quad (\text{A.1})$$

с $R_A = 6.62$ фм и $d = 0.546$ фм [55, 56]. Определим квадрупольный и октупольный моменты через шаровые функции, Y_{Lm} , с $L = 2$ и 3. Необходимый нам изосинглетный L -мультипольный оператор имеет вид (см., например, [27, 28, 30])

$$F_L = \sum_{i=1}^A r_i^L Y_{Lm}(\mathbf{n}_i), \quad (\text{A.2})$$

где $\mathbf{n}_i = \mathbf{r}_i/|\mathbf{r}_i|$. Среднеквадратичный L -мультипольный момент $\langle Q_L^2 \rangle$ ядра в основном состоянии может быть определен квантово-механически как

$$\langle Q_L^2 \rangle = \langle 0 | F_L^+ F_L | 0 \rangle. \quad (\text{A.3})$$

Классический расчет $\langle Q_L^2 \rangle$ для некоррелированной ядерной плотности WS дает³⁾

$$\langle Q_L^2 \rangle_{WS} = \langle F_L^+ F_L \rangle_{WS} = \frac{A(2L+1)\langle r^{2L} \rangle}{4\pi}. \quad (\text{A.4})$$

Конечно, эта формула становится несправедлива при учете корреляций малого радиуса от жесткого NN -кора. Но их эффект не очень велик (см. ниже). Для выполнения квантового вычисления $\langle Q_L^2 \rangle$ для

ядра ^{208}Pb мы используем EWSR (см. обзор [33]) для силовой функции $S(\omega)$ оператора F_L . Она определяется как

$$S(\omega) = \sum_n |\langle n | F_L | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_n), \quad (\text{A.5})$$

где $\omega_n = E_n - E_0$ и E_n — энергии состояний ядра. В терминах моментов силовой функции, определяемых как

$$m_k = \int_0^\infty d\omega \omega^k S(\omega), \quad (\text{A.6})$$

можно написать $\langle 0 | F_L^+ F_L | 0 \rangle = m_0$. Удобно переписать это в виде

$$\langle 0 | F_L^+ F_L | 0 \rangle = m_1 / E_c, \quad (\text{A.7})$$

где

$$E_c = m_1 / m_0 \quad (\text{A.8})$$

— так называемая центральная энергия E_c , которую можно рассматривать как типичную энергию возбуждения для оператора F_L , действующего на основное состояние. Представление (A.7) более удобно, чем представление через m_0 , потому что экспериментальные ошибки в нормировке силовой функции не важны для отношения m_1/m_0 , а момент m_1 может быть точно рассчитан с помощью EWSR, которое для $L \geq 2$ [27, 30, 33] дает

$$m_1 = \frac{AL(2L+1)^2 \langle r^{2L-2} \rangle}{8\pi m_N}, \quad (\text{A.9})$$

где m_N — масса нуклона. Таким образом, мы получаем

$$\langle Q_L^2 \rangle_{EWSR} = \frac{AL(2L+1)^2 \langle r^{2L-2} \rangle}{8\pi m_N E_c}. \quad (\text{A.10})$$

Сравнивая (A.10) с (A.4), мы видим, что отношение между среднеквадратичными мультипольными моментами для обычной МК-выборки положений нуклонов и для квантового расчета с помощью EWSR есть

$$r_L = \frac{\langle Q_L^2 \rangle_{WS}}{\langle Q_L^2 \rangle_{EWSR}} = \frac{2m_N E_c \langle r^{2L} \rangle}{L(2L+1) \langle r^{2L-2} \rangle}. \quad (\text{A.11})$$

Центральная энергия вычисляется с помощью параметризации Брейта–Вигнера силовой функции. Поскольку силовая функция пропорциональна мнимой части поляризуемости (восприимчивости) α (которая, как обычно, должна удовлетворять соотношению $\alpha(-\omega^*) = \alpha^*(\omega)$ [57]) для оператора F_L , то для каждого резонанса должна использоваться

³⁾ В этом Приложении мы игнорируем очень малый эффект от нуклонных корреляций центра масс. Однако в наших численных расчетах они учитывались точно.

параметризация Брейта–Вигнера с двумя полюсами (с одинаковыми вычетами) в точках $\pm\omega_R - i\Gamma_R/2$ (см. формулу (20) в [32]). Для N -резонансов это дает

$$E_c = \left[\sum_{i=1}^N \frac{2f_i}{\pi\omega_i} \arctg 2\omega_i/\Gamma_i \right]^{-1}, \quad (\text{A.12})$$

где f_i — относительная доля вклада резонанса i в EWSR.

Для изоскалярного оператора F_2 для ядра ^{208}Pb EWSR практически исчерпывается изоскалярным гигантским квадрупольным резонансом с $\omega \approx 10.89$ МэВ и $\Gamma \approx 3$ МэВ [58]. Формула (A.12) с этими параметрами дает $E_c \approx 11.9$ МэВ, тогда из (A.11) можно получить $r_2 \approx 2.25$. Таким образом, мы видим, что вероятностная трактовка ядра ^{208}Pb с WS-плотностью ядра переоценивает квадрупольные 3D-флуктуации. Понятно, что это может приводить также к неверным предсказаниям для 2D-флуктуаций начального файерболла КГП в АА-столкновениях. Как и в [31], наша стратегия решения этой проблемы заключается в изменении МК-генерации положений нуклонов путем применения подходящего фильтра, который генерирует ядерные конфигурации со среднеквадратичным квадрупольным моментом, соответствующим EWSR.

Для вычисления r_3 нам необходима силовая функция для F_3 . Для ядра ^{208}Pb функция $S(\omega)$ для оператора F_3 распределена в широкой области ω . Имеются несколько очень узких пиков в области низких энергий, $\omega \lesssim 7$ МэВ [59–61], в которой низколежащее 3^- -состояние с $\omega \approx 2.615$ МэВ поглощает около 20–25 % от EWSR [59–61] и еще несколько состояний в области $4.7 \lesssim \omega \lesssim 7$ МэВ (так называемая область низкоэнергетического октупольного резонанса (LEOR)), которая поглощает около 8–13 % от EWSR [59,60]. В области высоких энергий имеется широкий резонанс при $\omega \sim 16 - 20$ МэВ с $\Gamma \sim 5-8$ МэВ [58, 61–65]. Измеренная доля высокоэнергичного октупольного резонанса (HEOR) в EWSR варьируется примерно от 20–50 % [63, 64] до 60–90 % [58, 61, 62, 65]. Используя данные работы [60], где вклад в EWSR от 3^- -состояния с энергией 2.615 МэВ составляет 21 % и от LEOR-области 8.3 %, вместе с параметрами HEOR из работы [58] ($\omega \approx 19.6 \pm 0.5$ МэВ, $\Gamma \approx 7.4 \pm 0.6$ МэВ с долей в EWSR 70 ± 14 %) мы получаем $r_3 \approx 0.84$. Однако, если мы используем 25 % для вклада в EWSR от состояния с энергией 2.615 МэВ, как было получено в [61], и параметры HEOR, полученные в [63] ($\omega = 16$ МэВ, $\Gamma = 6$ МэВ), тогда мы получаем

$r_3 \approx 0.7$. Таким образом, мы видим, что экспериментальные данные по октупольной силовой функции ядра ^{208}Pb свидетельствуют в пользу $r_3 \lesssim 1$. Но из-за неопределенности в экспериментальных данных для октупольной силовой функции имеется неопределенность в значениях r_3 около 15–20 %. В данном анализе мы выполняем расчеты для двух значений: $r_3 = 0.84$ и $r_3 = 0.7$.

Приведенные выше значения множителей r_2 и r_3 соответствуют МК-выборке положений нуклонов для некоррелированной ядерной плотности WS. Расчеты с использованием распределения WS с ограничением на минимальное расстояние между нуклонами для имитации жесткого NN -кора дают несколько иные значения $r_{2,3}$. Однако влияние жесткого NN -кора на $r_{2,3}$ относительно невелико: мы получили уменьшение r_2 на коэффициент 0.78(0.926) и уменьшение r_3 на коэффициент 0.81(0.928) для радиуса кора $r_c = 0.9(0.6)$ фм.

В настоящем анализе мы модифицируем МК-генерацию положений нуклонов только с помощью фильтров для изоскалярных моментов $L = 2$ и 3 , которые соответствуют колебаниям формы ядра. Мы не используем фильтрацию для моды $L = 0$, которая соответствует чисто радиальным колебаниям. Радиальные колебания могут характеризоваться квадратом момента для монопольного изоскалярного оператора

$$F_0 = \sum_{i=1}^A (r_i^2 - \langle r^2 \rangle).$$

EWSR для этого оператора дает $m_1 = 2\langle r^2 \rangle/m_N$ [66]. Используя эту формулу для некоррелированной ядерной плотности WS, мы получаем для аналога (A.11) в случае моды $L = 0$

$$r_0 = \frac{m_N E_c}{2} \left[\frac{\langle r^4 \rangle}{\langle r^2 \rangle} - \langle r^2 \rangle \right]. \quad (\text{A.13})$$

Для изоскалярной моды $L = 0$ EWSR практически исчерпывается изоскалярным гигантским монопольным резонансом с $\omega \approx 13.6-13.9$ МэВ и $\Gamma \approx 3$ МэВ [58,67]. Эти параметры дают $E_c \approx 15$ МэВ, а расчет с использованием (A.13) для распределения WS (A.1) дает $r_0 \sim 1.6$. Это означает, что для МК-выборки ядерных конфигураций с некоррелированной ядерной плотностью WS величина чисто радиальных флуктуаций несколько завышена по сравнению с величиной, получаемой из экспериментальной монопольной силовой функции. Однако мы обнаружили, что добавление фильтрации для моды $L = 0$, которая уменьшает среднеквадратичный

момент $L = 0$ до его значения предсказываемого EWSR, практически не влияет на азимутальные коэффициенты $\epsilon_{2,3}$. Поэтому мы не используем фильтрование для флуктуаций $L = 0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Hirano, P. Huovinen, K. Murase, and Y. Nara, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **70**, 108 (2013) [arXiv:1204.5814].
2. R. Derradi de Souza, T. Koide, and T. Kodama, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **86**, 35 (2016) [arXiv:1506.03863].
3. P. Romatschke and U. Romatschke, arXiv:1712.05815.
4. J.-Y. Ollitrault, *Phys. Rev. D* **46**, 229 (1992).
5. F. G. Gardim, F. Grassi, M. Luzum, and J.-Y. Ollitrault, *Phys. Rev. C* **85**, 024908 (2012) [arXiv:1111.6538].
6. H. Niemi, G. S. Denicol, H. Holopainen, and P. Huovinen, *Phys. Rev. C* **87**, 054901 (2013) [arXiv:1212.1008].
7. M. Luzum and H. Petersen, *J. Phys. G* **41**, 063102 (2014) [arXiv:1312.5503].
8. D. Teaney and L. Yan, *Phys. Rev. C* **83**, 064904 (2011) [arXiv:1010.1876].
9. E. Retinskaya, M. Luzum, and J.-Y. Ollitrault, *Nucl. Phys. A* **926**, 152 (2014) [arXiv:1401.3241].
10. M. L. Miller, K. Reygers, S. J. Sanders, and P. Steinberg, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **57**, 205 (2007) [nucl-ex/0701025].
11. M. Rybczynski, G. Stefanek, W. Broniowski, and P. Bozek, *Comput. Phys. Commun.* **185**, 1759 (2014) [arXiv:1310.5475].
12. G. Policastro, D.T. Son, and A. O. Starinets, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 081601 (2001) [hep-th/0104066].
13. G. Policastro, D. T. Son, and A. O. Starinets, *JHEP* **09**, 043 (2002) [hep-th/0205052].
14. J. S. Moreland, J. E. Bernhard, and S. A. Bass, *Phys. Rev. C* **92**, 011901 (2015) [arXiv:1412.4708].
15. B. Schenke, P. Tribedy, and R. Venugopalan, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 252301 (2012) [nucl-th/1202.6646].
16. F. Gelis, G. Giacalone, Pablo Guerrero-Rodríguez, C. Marquet, and J.-Y. Ollitrault, arXiv:1907.10948.
17. S. Chatrchyan et al. [CMS Collaboration], *JHEP* **1402**, 088 (2014) [arXiv:1312.1845].
18. S. Acharya et al. [ALICE Collaboration], *JHEP* **1807**, 103 (2018) [arXiv:1804.02944].
19. C. Shen, Z. Qiu, and U. Heinz, *Phys. Rev. C* **92**, 014901 (2015) [arXiv:1502.04636].
20. P. Carzon, S. Rao, M. Luzum, M. Sievert, and J. Noronha-Hostler, arXiv:2007.00780.
21. D. Kharzeev and E. Levin, *Phys. Lett. B* **523**, 79 (2001) [arXiv:nucl-th/0108006].
22. D. Kharzeev, E. Levin, and M. Nardi, *Nucl. Phys. A* **747**, 609 (2005) [arXiv:hep-ph/0408050].
23. J.-B. Rose, J.-F. Paquet, G. S. Denicol, M. Luzum, B. Schenke, S. Jeon, and C. Gale, *Nucl. Phys. A* **931**, 926 (2014) [arXiv:1408.0024].
24. P. Alba, V. Mantovani Sarti, J. Noronha, J. Noronha-Hostler, P. Parotto, I. Portillo Vazquez, and C. Ratti, *Phys. Rev. C* **98**, 034909 (2018) [arXiv:1711.05207].
25. L. M. Robledo and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* **84**, 054302 (2011) [1107.3581].
26. S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **93**, 044304 (2016) [1603.03414].
27. A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. II, W. A. Benjamin, Inc., New York (1975).
28. W. Greiner and J. A. Maruhn, *Nuclear Models*, Springer, Berlin (1996).
29. S. Kamedzhiev, J. Speth, and G. Tertychny, *Phys. Rep.* **393**, 1 (2004) [nucl-th/0311058].
30. X. Roca-Maza and N. Paar, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **101**, 96 (2018) [1804.06256].
31. B. G. Zakharov, *JETP Lett.* **112**, 393 (2020) [2008.07304].
32. B. G. Zakharov, *JETP Lett.* **108**, 723 (2018) [arXiv:1810.08942].
33. E. Lipparini and S. Stringari, *Phys. Rep.* **175**, 103 (1989).
34. G. Giacalone, J. Noronha-Hostler, M. Luzum, and J.-Y. Ollitrault, *Phys. Rev. C* **97**, 034904 (2018) [arXiv:1711.08499].
35. J. Noronha-Hostler, Li Yan, F. G. Gardim, and J.-Y. Ollitrault, *Phys. Rev. C* **93**, 014909 (2016) [arXiv:1511.03896].
36. S. J. Das, G. Giacalone, P.-A. Monard, and J.-Y. Ollitrault, *Phys. Rev. C* **97**, 014905 (2018) [arXiv:1708.00081].

37. W. Broniowski and W. Florkowski, *Phys. Rev. C* **65**, 024905 (2002) [nucl-th/0110020].
38. B. G. Zakharov, *JETP Lett.* **104**, 6 (2016) [arXiv:1605.06012].
39. Б. Г. Захаров, *ЖЭТФ* **151**, 1011 (2017) [arXiv:1611.05825].
40. B. G. Zakharov, *Eur. Phys. J. C* **78**, 427 (2018) [arXiv:1804.05405].
41. D. Kharzeev and M. Nardi, *Phys. Lett. B* **507**, 121 (2001) [nucl-th/0012025].
42. B. Müller and K. Rajagopal, *Eur. Phys. J. C* **43**, 15 (2005) [arXiv:hep-ph/0502174].
43. J. Speth and A. W. Thomas, *Adv. Nucl. Phys.* **24**, 83 (1997).
44. W. Broniowski and M. Rybczynski, *Phys. Rev. C* **81**, 064909 (2010) [arXiv:1003.1088].
45. B. G. Zakharov, *JETP Lett.* **105**, 785 (2017) [arXiv:1703.04271].
46. G. Kh. Eyyubova, V. L. Korotkikh, A. M. Snigirev, and E. E. Zabrodin, *J. Phys. G* **48**, 095101 (2021) [arXiv:2107.00521].
47. K. A. Bugaev, A. I. Ivanytskyi, V. V. Sagun, B. E. Grinyuk, D. O. Savchenko, G. M. Zinovjev1, E. G. Nikonov, L. V. Bravina, E. E. Zabrodin, D. B. Blaschke, A. V. Taranenko, and L. Turko, *Universe* **5**, 63 (2019) [arXiv:1810.00486].
48. M. I. Krivoruchenko, D. K. Nadyozhin, T. L. Rasin-kova, Yu. A. Simonov, M. A. Trusov, and A. V. Yudin, *Phys. Atom. Nucl.* **74**, 371 (2011), and references therein. [arXiv:1006.0570].
49. V. I. Kukulín, *Phys. Atom. Nucl.* **74**, 1567 (2011), and references therein.
50. B. G. Zakharov and B. Z. Kopeliovich, *Sov. J. Nucl. Phys.* **42**, 677 (1985).
51. J. Jia, 2106.08768.
52. J. Schukraft, A. Timmins, and S. A. Voloshin, *Phys. Lett. B* **719**, 394 (2013) [arXiv:1208.4563].
53. L. Adamczyk, J. K. Adkins, G. Agakishiev et al. [STAR Collaboration], *Phys. Rev. Lett.* **115**, 222301 (2015) [arXiv:1505.07812].
54. A. Goldschmidt, Z. Qiu, C. Shen, and U. Heinz, *Phys. Rev. C* **92**, 044903 (2015) [arXiv:1507.03910].
55. B. Alver, M. Baker, C. Loizides, and P. Steinberg, arXiv:0805.4411.
56. H. De Vries, C.W. De Jager, and C. De Vries, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **36**, 495 (1987).
57. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Statistical Physics Part 1 (Landau Course of Theoretical Physics Vol. 5)*, Oxford, Pergamon Press (1980).
58. D. H. Youngblood, Y. W. Lui, H. L. Clark, B. John, Y. Tokimoto, and X. Chen, *Phys. Rev. C* **69**, 034315 (2004).
59. M. N. Harakeh, B. Van Heyst, K. Van Der Borg, and A. Van Der Woude, *Nucl. Phys. A* **327**, 373 (1979).
60. Y. Fujita, T. Shimoda, H. Miyatake, N. Takahashi, and M. Fujiwara, *Phys. Rev. C* **45**, 993 (1992).
61. T. Yamagata, S. Kishimoto, K. Yuasa, K. Iwamoto, B. Saeki, M. Tanaka, T. Fukuda, I. Miura, M. Inoue, and H. Ogata, *Phys. Rev. C* **23**, 937 (1981) [Erratum: *Phys. Rev. C* **23**, 2798 (1981)].
62. R. Pitthan, F. R. Buskirk, E. B. Dally, J. N. Dyer, and X. K. Maruyama, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 849 (1974) [Erratum *Phys. Rev. Lett.* **34**, 848 (1975)].
63. M. Sasao and Y. Torizuka, *Phys. Rev. C* **15**, 217 (1977).
64. T. A. Carey, W. D. Cornelius, N. J. Digiacomio, J. M. Moss, G. S. Adams et al., *Phys. Rev. Lett.* **45**, 239 (1980).
65. B. F. Davis, U. Garg, W. Reviol, M. N. Harakeh, A. Bacher et al., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 609 (1997).
66. J. P. Blaizot, *Phys. Rep.* **64**, 171 (1980).
67. D. Patel, U. Garg, M. Itoh, H. Akimune, G. P. A. Berg et al., *Phys. Lett. B* **735**, 387 (2014) [1406.6905].

ВЛИЯНИЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ИОННОГО АССИСТИРОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ КОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ a-C:H:Ag

*И. А. Завидовский**, *О. Ю. Нищак*, *Н. Ф. Савченко*, *О. А. Стрелецкий*

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

Поступила в редакцию 15 ноября 2021 г.,

после переработки 23 декабря 2021 г.

Принята к публикации 24 декабря 2021 г.

Исследовано влияние изменения энергии и тока низкоэнергетической (100–600 эВ) ионной стимуляции на структуру углеродных гидрогенизированных покрытий с серебряными включениями (a-C:H:Ag), синтезированных методом импульсно-плазменного осаждения. При помощи методов просвечивающей электронной микроскопии, электронной дифракции, спектроскопии характеристических потерь энергии электронов, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, поглощения в УФ и видимой областях спектра показано влияние энергии и тока стимуляции на проявление ионно-индуцированных эффектов, таких как дефектообразование, селективное распыление серебра, поверхностная диффузия и сегрегация серебряных частиц.

DOI: 10.31857/S0044451022060037

EDN: DUCVXI

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно исследуются аморфные углеродные покрытия, в которые инкапсулированы металлические наночастицы [1–4]. Такие структуры имеют перспективы применения для широкого спектра задач. Например, внедрение различных металлических включений позволяет уменьшить внутренние напряжения углеродной матрицы и улучшить адгезию — ключевые характеристики упрочняющих покрытий [1]. Помимо этого, металлические наночастицы позволяют в широком диапазоне управлять различными свойствами пленок, например, варьировать их электрофизические и оптические характеристики [4, 5].

Большой интерес представляют пленки, допированные серебром. Бактерицидные свойства серебра и его поверхностная сегрегация позволяют использовать углерод-серебряные пленки в качестве антимикробных покрытий [3]. В свою очередь, проявление поверхностного плазмонного резонанса при оптическом возбуждении серебряных наночас-

тиц, а также химическая инертность углеродной матрицы позволяют изготавливать высокостабильные углерод-серебряные подложки для реализации эффекта поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния (SERS-подложки) [4].

Вследствие структурного многообразия углеродных материалов для наименования углерод-серебряных пленок существует ряд терминов, отражающих свойства покрытия. Так, композиты, аморфная матрица которых преимущественно состоит из sp^3 -гибридизованных атомов, называют ta-C:Ag, ta-C/Ag, Ag-DLC или DLC-Ag (здесь DLC — diamond-like carbon, ta-C — tetrahedral amorphous carbon) [3, 6, 7]. Термины C/Ag и Ag/C соответствуют серебряным структурам, пассивированным слоем углерода, и углеродным структурам с серебряным покрытием [8]. В свою очередь, наиболее распространенным объектом исследования являются углерод-серебряные композиты типа a-C:Ag и a-C:H:Ag. Для таких структур аморфная матрица a-C состоит преимущественным образом из sp^2 -гибридизованного углерода. Подобная структура покрытий является наиболее распространенной, поскольку внедрение серебра вызывает разупорядочение углеродной матрицы и, как правило, приводит к ее графитизации [9].

* E-mail: ia.zavidovskii@physics.msu.ru

Доля и конфигурация атомов различной гибридизации, а также характеристики включений оказывают существенное влияние на оптические, электрофизические и механические свойства пленок а-C:Ag и а-СН:Ag. Вследствие этого представляет интерес исследование методов и параметров осаждения, позволяющих в широком диапазоне варьировать характеристики получаемых структур. Среди технологий вакуумного напыления можно выделить импульсно-плазменное осаждение. В число преимуществ данного метода входит возможность осуществлять послойное осаждение наноструктур и синтез метастабильных фаз углерода, а также отсутствие существенного нагрева, позволяющее осуществлять напыление на различные типы подложек [10, 11]. В свою очередь, введение ионного ассистирования (стимуляции) в процесс импульсно-плазменного осаждения позволяет управлять свойствами как углеродной матрицы, так и серебряных частиц [12, 13].

Однако для композитных материалов влияние ионного облучения существенно различается в зависимости от видов структур, токов, энергий и типов ионов [14]. Известно, что воздействие ионов пучка может вызывать химическую перестройку структуры, а также приводить к селективному распылению слабосвязанных атомов [12, 15]. Помимо этого, взаимодействие ионов с растущей пленкой может сопровождаться их каналированием, образованием ударных волн, активацией поверхности и формированием центров зародышеобразования [12, 15–17]. Актуальной задачей в настоящее время является модификация наноструктур при помощи ионов низких (до тысяч килоэлектронвольт) и сверхнизких (ниже порога распыления) энергий [12, 15, 18]. Такого рода воздействие позволяет свести к минимуму нежелательные эффекты, ухудшающие качество структуры, такие как ионное перемешивание, имплантация ионов, распыление, разупорядочение [18, 19], и в то же время оказывает существенное влияние на морфологию пленок.

В настоящей работе представлены результаты исследования покрытий а-СН:Ag, изготовленных при различных энергиях и токах ионной стимуляции методом импульсно-плазменного распыления графитовой мишени с серебряными вставками.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Синтез покрытий а-СН:Ag осуществлялся методом импульсно-плазменного осаждения. Схема

и принцип работы экспериментальной установки представлены в работах [2, 12]. Распыляемая мишень состояла из графита марки МПГ-7. В ней изготавливались отверстия, в которые помещались вставки, состоящие из 99.99% Ag. Распыляемая площадь серебра составляла около 10% от площади катода. Мощность разряда 0.5 кВт, длительность импульса около 1 мс, частота следования импульсов 1 Гц. Перед началом процесса распыления катода вакуумная камера откачивалась до давления 0.01 Па. Осаждение исследуемых образцов проводилось в атмосфере аргона при давлении 0.12 Па при различных энергиях и токах ионного ассистирования. Структуры, для которых выходной ток холловского ионного источника варьировался от 5 до 40 мА, осаждались при энергии ассистирования 100 эВ. С целью уменьшения распыления осаждаемого покрытия падающим ионным пучком были изготовлены образцы при энергии ионной стимуляции в диапазоне от 100 до 600 эВ при токе ионного пучка 5 мА. Значения тока разряда 5, 20 и 40 мА в исследуемом диапазоне параметров отвечают значениям ионного тока от источника ионов, которым соответствуют плотности ионного тока на поверхности осаждаемых образцов соответственно 15, 22 и 31 мкА/см².

В качестве подложек были использованы скол кристалла NaCl, полированный кремний и покровные стекла компании Deltalab.

Структура образцов исследовалась при помощи просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), спектроскопии характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и электронной дифракции образцов. Все перечисленные измерения проводились на электронном микроскопе LEO 912 ab при ускоряющем напряжении электронов 100 кэВ. Подготовка образцов к исследованию осуществлялась путем растворения пластин NaCl с осажденной на них пленкой в дистиллированной воде и последующей высадки фрагментов пленки на медные сеточки.

РФЭС-спектры были получены на спектрометре PHI VersaProbe II 5000. Использовалось монохроматизированное рентгеновское излучение AlK_α (1486.6 эВ), мощностью 50 Вт. Шкала энергии связи прибора была откалибрована по линиям Au4f (83.96 эВ) и Cu2p_{3/2} (932.62 эВ). Спектры были сняты с пленок, нанесенных на кремний. Травление пленок перед снятием спектров не проводилось, поскольку ионное облучение вызывает структурную перестройку образцов. Исследования были выполнены в Центре коллективного пользования «Ма-

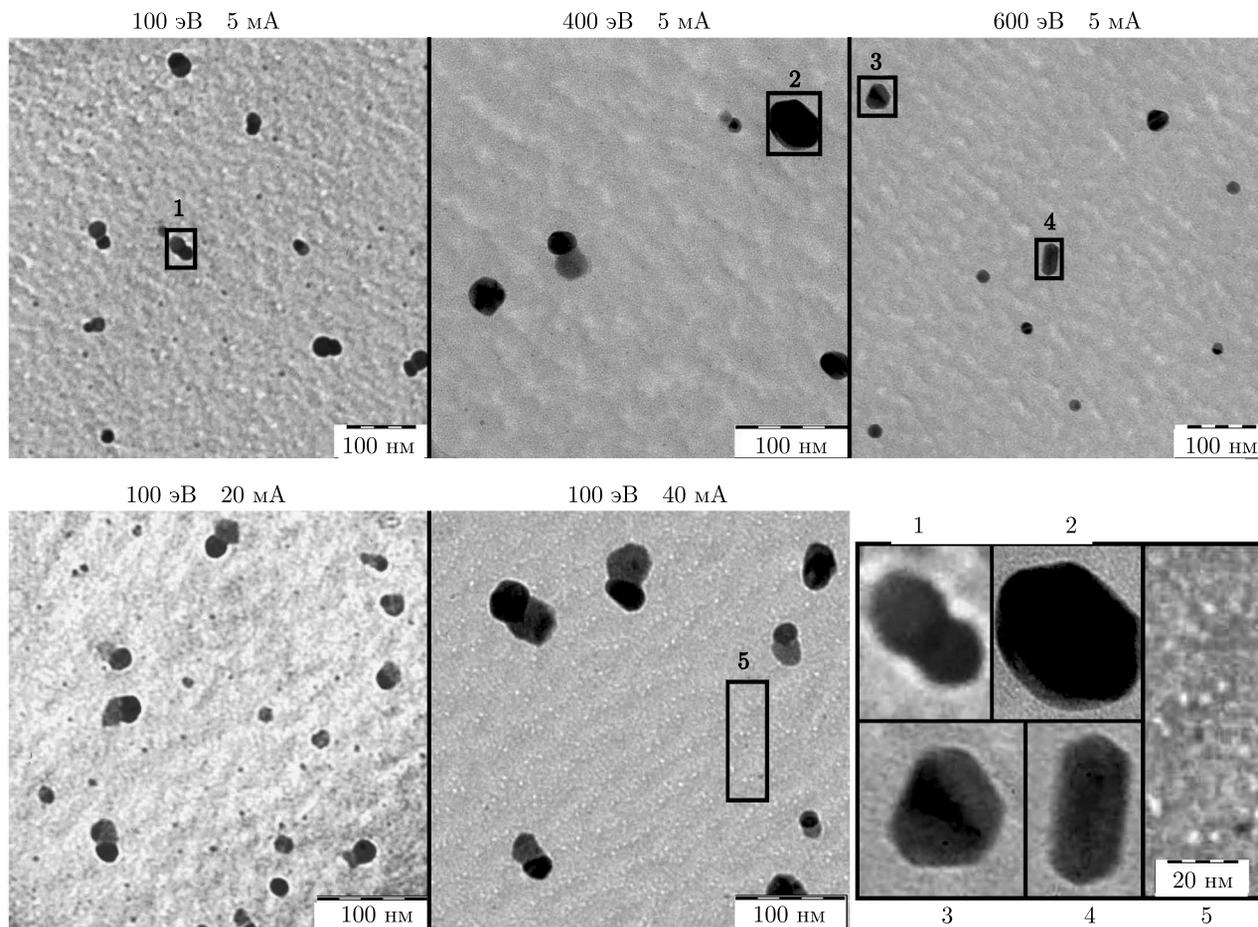


Рис. 1. ПЭМ-изображения пленок $a\text{-SN:Ag}$, изготовленных при различных энергиях (верхний ряд) и токах (нижний ряд) ионного ассистирования. На увеличенных фрагментах изображений показаны двойникование наночастиц (1), формирование огранки (2–4) и формирование полостей на поверхности покрытия (5)

териаловедение и металлургия» Московского института стали и сплавов (идентификатор проекта RFMEFI59414X0007).

Оптическое поглощение полученных структур в УФ и видимой областях спектра измерялось при нормальном падении светового потока от ксеноновой лампы с помощью спектрофотометра на базе монохроматора МДР-41. В качестве исследуемых образцов использовались пленки, нанесенные на покровные стекла.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. ПЭМ

На рис. 1 представлены ПЭМ-изображения для образцов, нанесенных при различных энергиях и токах ассистирования. На них можно видеть нано-

размерные серебряные включения, инкапсулированные в аморфную углеродную матрицу. Стоит отметить, что разрешение используемого микроскопа составляет $2.0\text{--}3.4 \text{ \AA}$, вследствие чего с помощью данного прибора не представляется возможным получить информацию о субнанометровых включениях. Характерной особенностью текстуры углеродной матрицы являются волнообразные неоднородности размером порядка нескольких десятков нанометров. Формирование схожих особенностей на поверхности типично для пленок, облучаемых ионным пучком под углом к поверхности, отличным от прямого [15]. Процесс появления волнообразной «ряби» связан с зависимостью коэффициента распыления от топографии поверхности, а также с диффузией и локальным распылением, вызванными ионным пучком [20].

Форма включений существенно изменяется в зависимости от условий осаждения: при увеличении

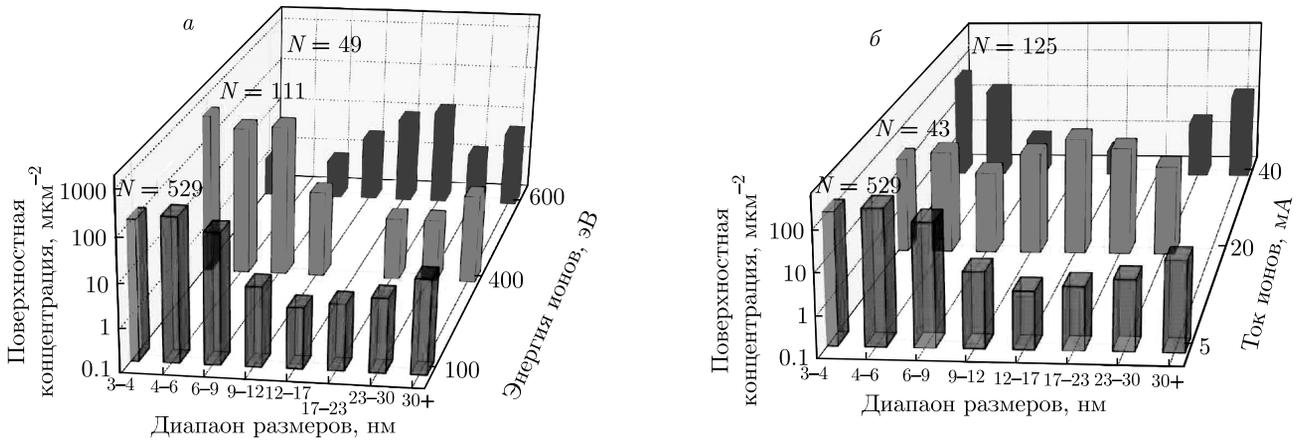


Рис. 2. (В цвете онлайн) Распределения по размерам серебряных наночастиц, инкапсулированных в матрицу аморфного углерода, полученные при различных энергиях (а) и токах (б) стимуляции. Указано количество частиц N , проанализированных для построения гистограмм

энергии ионной стимуляции они приобретают ограниченность, тогда как изменение тока ассистирования не оказывает подобного эффекта. В то же время для образцов, полученных при токах стимуляции 20 и 40 мА, наблюдается значительное число двойных наночастиц. Это может быть связано с тем, что увеличение тока ассистирования приводит к увеличению поверхностной диффузии зародышей в процессе осаждения материала [19], а также со структурной релаксацией при агломерации наночастиц [21]. В пользу второй гипотезы говорит то, что менее выраженный эффект двойникования наблюдался и в углерод-серебряных композитах, полученных схожим методом без ионной стимуляции [22]. Наличие небольших (3–5 нм) серебряных наночастиц вызвано тем, что ионная стимуляция индуцирует формирование дефектов в растущей пленке. Данные дефекты, в свою очередь, являются предпочтительными центрами зародышеобразования [23].

Стоит также отметить особенности структуры образца, нанесенного при энергии стимуляции 100 эВ и токе стимуляции 40 мА. Увеличенное ПЭМ-изображение характерных неоднородностей данного покрытия представлено на фрагменте изображения 5 на рис. 1. По нашему предположению, неоднородности представляют собой полости на поверхности пленки, формирование которых обусловлено селективным распылением серебряных кластеров ассистирующим ионным пучком. Существенное влияние данного процесса на структуру покрытий может являться следствием поверхностной сегрегации серебра. Сегрегация серебра часто наблюдается как в процессе высокотемпературного

осаждения, так и в результате «старения» синтезированных различными методами покрытий на основе аморфного углерода [24]. Общий характер явления позволяет предположить, что данный эффект имеет место для всех исследованных покрытий. Однако его наблюдение для большинства образцов может быть затруднено в силу того, что размер сегрегированных наночастиц не превышает разрешения прибора.

Таким образом, ионная стимуляция оказывает существенное влияние на концентрацию включений и их распределение по размерам. Для того чтобы оценить влияние различных процессов на характеристики серебряных наночастиц, с помощью программы Gwyddion было получено их распределение по размерам. Размер включений был вычислен как удвоенный радиус эквивалентного диска.

На рис. 2а представлено распределение частиц по размерам для образцов, полученных при различных энергиях стимуляции и токе стимуляции 5 мА. Можно видеть, что увеличение энергии стимуляции до 400 эВ приводит к увеличению числа наночастиц размером от 3 до 12 нм на единицу площади. Это может быть обусловлено ионно-индуцированным увеличением числа дефектов — предпочтительных центров образования зародышей с малым критическим размером [23]. В то же время снижение числа частиц, обладающих размером более 12 нм, может свидетельствовать об увеличении вклада селективного распыления серебра ассистирующими ионами, обусловленного тем, что коэффициент распыления серебра в исследуемом диапазоне энергий более чем в 10 раз превышает коэффи-

циент распыления углерода [25]. Однако при дальнейшем росте энергии до 600 эВ происходит увеличение числа частиц, имеющих размер 13–23 нм, и уменьшение концентрации меньших частиц. Смещение распределения в область более крупных включений может быть связано с усилением вклада поверхностной диффузии с ростом энергии ассистирования. Однако стоит отметить, что в работе [12] увеличение энергии при большем токе стимуляции приводило к формированию большого числа мелких частиц за счет усиления дефектообразования на поверхности растущей пленки. Возможно, в структуре исследуемых в настоящей работе образцов присутствуют субнаноразмерные частицы, которые не удастся разрешить с помощью используемого оборудования. Также уменьшение концентрации мелких частиц для образца, нанесенного при энергии стимуляции 600 эВ, может быть связано с селективным распылением серебра ионным пучком в процессе осаждения.

Изменение распределения частиц при увеличении тока стимуляции и энергии 100 эВ представлено на рис. 2б. Распределение по размерам для образца, полученного при токе стимуляции 20 мА, подобно распределению для образца, полученного при энергии 600 эВ и токе 5 мА: в обоих случаях наблюдается большое число частиц размером 10–20 нм. Таким образом, увеличение плотности тока в 2 раза и возрастание энергии ассистирования в 6 раз приводит к схожему усилению поверхностной диффузии. По-видимому, это свидетельствует о том, что увеличение тока в меньшей степени способствует дефектообразованию и в большей степени стимулирует поверхностную диффузию по сравнению с увеличением энергии. Этот результат находится в соответствии с литературными данными, показывающими, что при энергиях, не превышающих 100 эВ, роль ионного ассистирования главным образом проявляется на поверхности (например, как увеличение подвижности адатомов), а увеличение энергии до 1000 эВ способствует объемной модификации структуры, имеющей место благодаря имплантации ионов, формированию дефектов и усилению распыления [19, 26, 27]. Дальнейшее увеличение тока до 40 мА привело к формированию частиц двух характерных размеров: примерно 5 и 20–30 нм.

Таким образом, увеличение как тока, так и энергии стимуляции приводит к разделению частиц по размерам на включения диаметром до 10 и 20–30 нм. Данный эффект обусловлен комбинацией различных факторов: распыления; поверхностной диффузии, которая обеспечивает коалесценцию час-

тиц и приводит к росту размера включений; дефектообразования, способствующего появлению мелких частиц.

3.2. РФЭС

На рис. 3 представлен обзорный РФЭС-спектр покрытия, нанесенного при энергии стимуляции 100 эВ и токе стимуляции 20 мА. Спектры других образцов отличаются незначительно. Поскольку длина свободного пробега фотоэлектронов в твердом теле мала (0.5–3 нм) [28], существенное влияние на РФЭС-спектры оказывает поверхностный адсорбированный слой. Вследствие этого в элементном составе наблюдаются существенные доли кислорода (15–20 %) и азота (2–4 %), а также небольшая доля других атомов, что может быть связано с присутствием загрязнений.

В таблице представлен элементный состав, измеренный при помощи метода РФЭС для различных образцов. Стоит отметить, что малая концентрация серебра в приповерхностных слоях образцов, оцененная при помощи метода РФЭС, может объясняться распылением серебряных частиц, вызванным его поверхностной сегрегацией (см. разд. 3.1), что затрудняет объективную оценку доли серебра в объеме материала.

Измерялись РФЭС-спектры высокого разрешения в диапазоне, соответствующем выходу фотоэлектронов с основных уровней углерода, серебра и кислорода. Ниже приведены спектры $C1s$, $Ag3d$, $O1s$, измеренные для образца, полученного при энергии стимуляции 100 эВ и токе 5 мА. Форма линий в спектрах для покрытий, нанесенных при других энергиях и токах стимуляции, отличались от представленных незначительно. Для всех линий было проведено вычитание фона методом Ширли при помощи программы OriginPro. Разложение пиков на гауссовы составляющие было проведено при помощи программы MagicPlot. На рис. 4 представлен пик $C1s$ с сателлитом плазмонных потерь, отстоящим от основного пика на 23.2 эВ. Потери энергии на возбуждение $(\pi + \sigma)$ -плазмона варьируются в зависимости от плотности вещества [10]. При этом для графита характерно положение плазмона, равное 27 эВ, для алмаза — 34 эВ [29]. Более низкая энергия плазмона в диапазоне от 19.5 до 23.3 эВ характерна для аморфных пленок, содержащих в своем составе водород [30].

На вставке к рис. 4 представлено разложение $C1s$ -линии спектра. В нем наблюдаются пики, отвечающие химическим сдвигам, положения которых соответствуют присутствию C–C, C=C, C–H

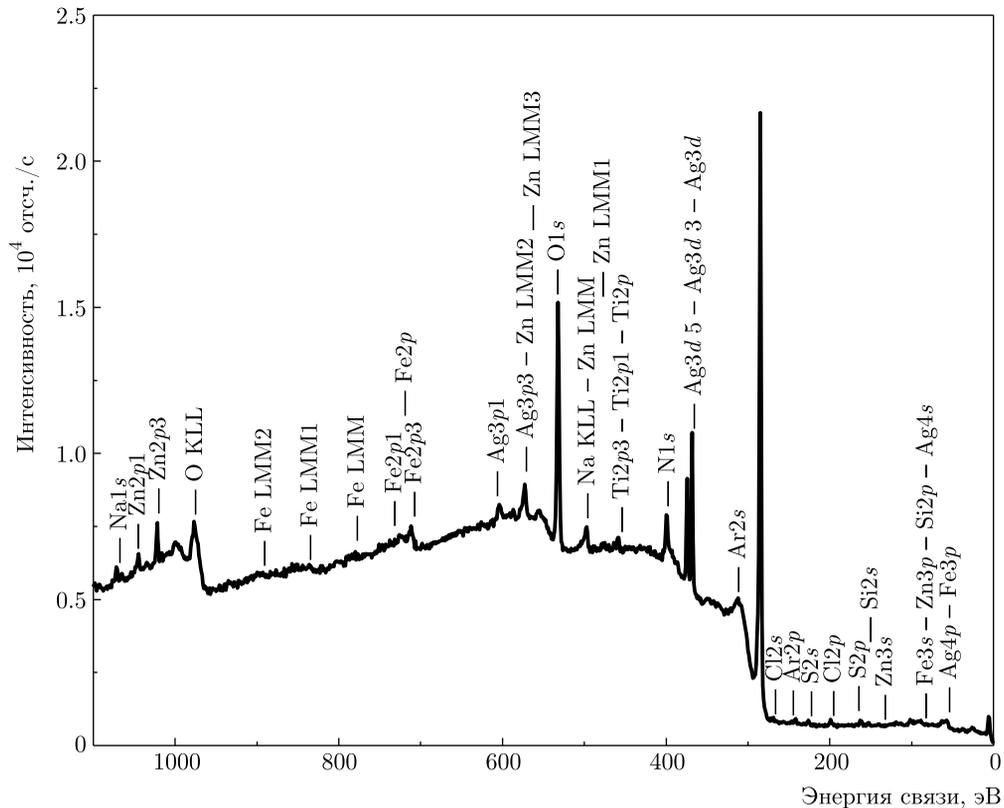


Рис. 3. Характерный обзорный РФЭС-спектр

Таблица. Элементный состав образцов, полученных при различных энергиях и токах ионной стимуляции

Энергия ионов, эВ	Ток ионов, мА	C, ат. %	Ag, ат. %	O, ат. %	N, ат. %	Другое, ат. %
100	5	75.7	0.5	16.6	3.8	3.4
100	20	76.8	1.1	15.1	3.8	3.2
100	40	75.3	1.0	16.0	4.0	3.7
400	5	70.3	1.0	20.4	3.1	5.2
600	5	84.2	1.6	8.9	2.7	2.6

(285 эВ) [31, 32], C–O, C–N (286.5 эВ) [33], а также C=O, O–C–O, N–C=N (288.2 эВ) [34, 35]. Существенная ширина пика при 288.2 эВ типична для структур на основе разупорядоченного углерода. По-видимому, она обусловлена тем, что для различных структурных фрагментов, содержащих связь C=O, положение РФЭС-линии может варьироваться от 287.5 эВ (–C=O) до 289.2 эВ (–COOH) [36, 37].

На рис. 5 представлен спектр линии Ag3d. В силу спин-орбитального расщепления в данном спектре присутствуют два пика, отвечающие выходу элект-

ронов с уровней Ag3d_{5/2} и Ag3d_{3/2}. Их максимумы расположены соответственно при 368.4 и 374.4 эВ. Такое положение свидетельствует о преимущественно металлическом состоянии серебра Ag⁰ [38]. Однако положения линий, отвечающих металлическому и окисированному серебру, отличаются на доли электронвольт, что затрудняет анализ химических связей атомов серебра по данным линиям [39].

Разложение спектра O1s (рис. 6) позволяет выделить три гауссовы составляющие. Первый пик, максимум которого расположен при 530.7 эВ, отвечает

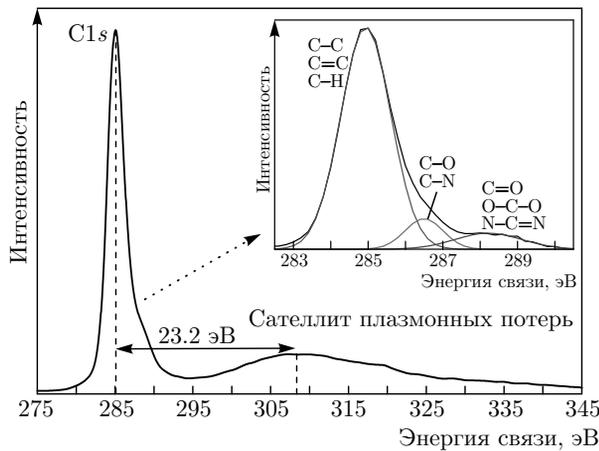


Рис. 4. Характерный спектр C1s-линии углерода и ее сателлита неупругих потерь. На вставке представлено разложение C1s-линии

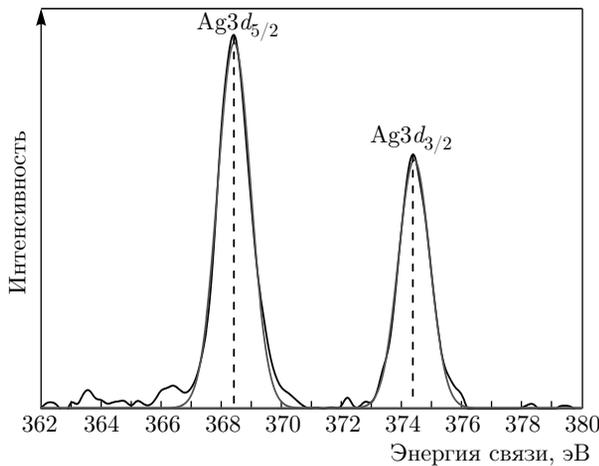


Рис. 5. Характерный РФЭС-спектр линии Ag3d

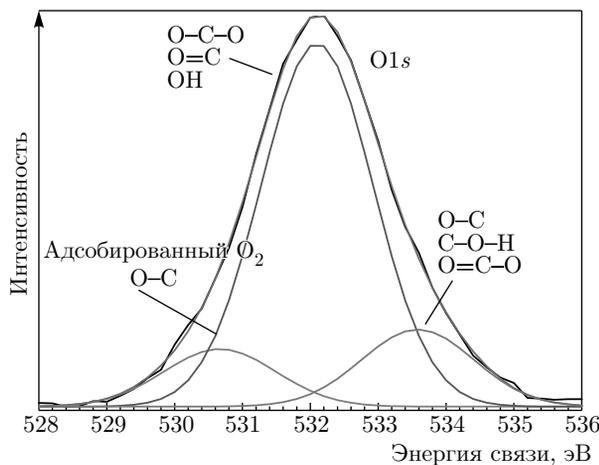


Рис. 6. Спектр линии O1s и его разложение на пики, отвечающие различным химическим связям

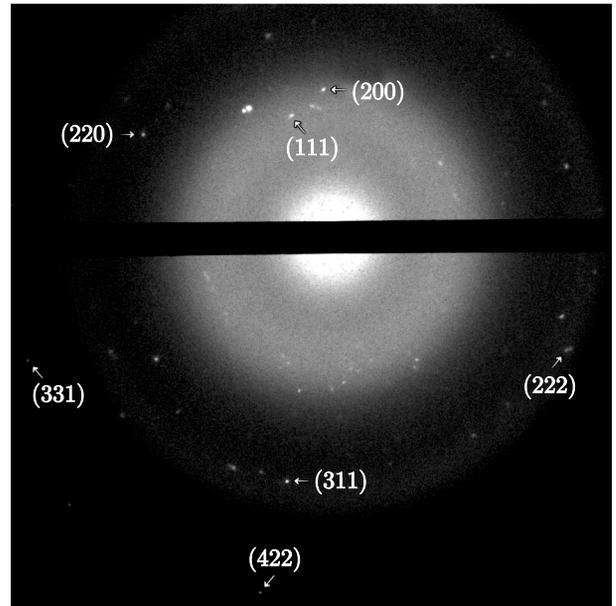


Рис. 7. Типичная картина электронной дифракции образцов. Стрелками отмечены рефлексы серебра и отвечающие им кристаллографические индексы

физически адсорбированному кислороду или связям O-C [40,41]. Наиболее интенсивная центральная линия при 532.1 эВ отвечает связям O-C-O, O=C или гидроксильным группам [42-44]. Третий максимум, расположенный при 533.6 эВ, может отвечать связям O-C [45]. Также его можно отнести к группам C-O-H и O=C-O [46,47]. Стоит отметить, что линия, отвечающая связям O-Ag, должна быть расположена значительно ниже по энергиям (528.7 эВ) [48]. Ее отсутствие в исследуемых спектрах наряду с данными разложения спектра Ag3d свидетельствует об отсутствии оксидированного серебра. По-видимому, это связано с малыми концентрациями серебра в приповерхностных слоях, свидетельствующими о распылении серебра с поверхности ассистирующим пучком в процессе осаждения.

Наличие в приповерхностных слоях большого числа различных соединений углерода с кислородом, азотом и водородом свидетельствует о том, что в синтезированной структуре содержится большое число оборванных связей, которые насыщаются при контакте поверхности и воздуха. По-видимому, формирование таких связей связано с внедрением в структуру пленки серебра, не образующего связей с углеродом, но при этом приводящего к разупорядочению углеродной матрицы [9].

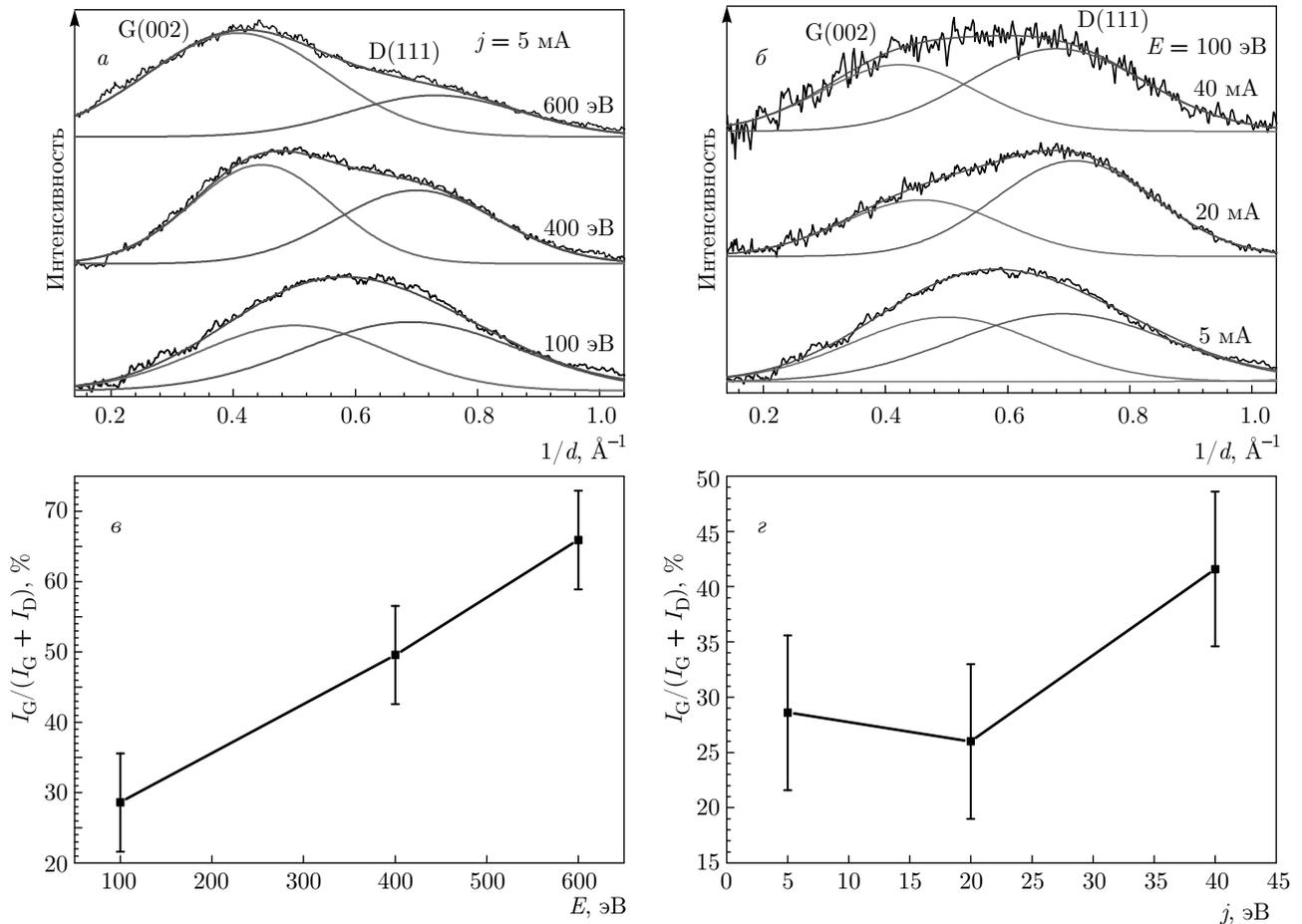


Рис. 8. Разложения профилограмм дифракционных линий, отвечающих аморфной субструктуре, для образцов, полученных при разных энергиях (*a*) и токах (*б*) стимуляции, а также отношения интенсивности дифракционной линии графитовой компоненты к интенсивности совокупной линии для структур, полученных при разных энергиях (*в*) и токах (*г*) стимуляции

3.3. Электронная дифракция

На рис. 7 приведена картина электронной дифракции полученных пленок при энергии стимуляции 100 эВ и токе 5 мА. Данная картина является типичной для всех полученных образцов. На ней можно видеть широкие гало, типичные для аморфных структур, а также яркие точечные рефлексы от отдельно стоящих кристаллитов, положения которых отвечают межплоскостным расстояниям серебра.

На рис. 8 представлены результаты фотометрирования дифракционной картины в окрестности линии, соответствующей межплоскостному расстоянию $d = 2\text{--}5 \text{ \AA}$, которое отвечает аморфному углероду. В данной линии можно выделить две составляющие: пик G(002) графитовой и пик D(111) алмазной структур с межплоскостными расстояния-

ми соответственно 3.4 и 2.1 \AA [49]. Для выявления вклада данных составляющих было проведено разложение линий на гауссовы компоненты. Стоит отметить, что положение пиков отличается от случая идеальной структуры и составляет $2.1\text{--}2.3 \text{ \AA}$ для алмазной компоненты (D(111) на рис. 8), и $3.1\text{--}3.2 \text{ \AA}$ — для графитовой (G(002) на рис. 8). На рис. 8*в,г* показаны отношения интенсивности линии с пиком на $3.1\text{--}3.2 \text{ \AA}$, приписываемой графитовой компоненте, к интенсивности совокупного пика в диапазоне $2\text{--}5 \text{ \AA}$.

Стоит отметить, что данное отношение лишь приблизительно позволяет судить о доле атомов различной гибридизации. Так, в дифракцию дают вклад лишь те кластеры, размер которых больше или равен области когерентного рассеяния. Согласно работе [50], дифракция становится различима для кластеров графита, количество атомов в кото-

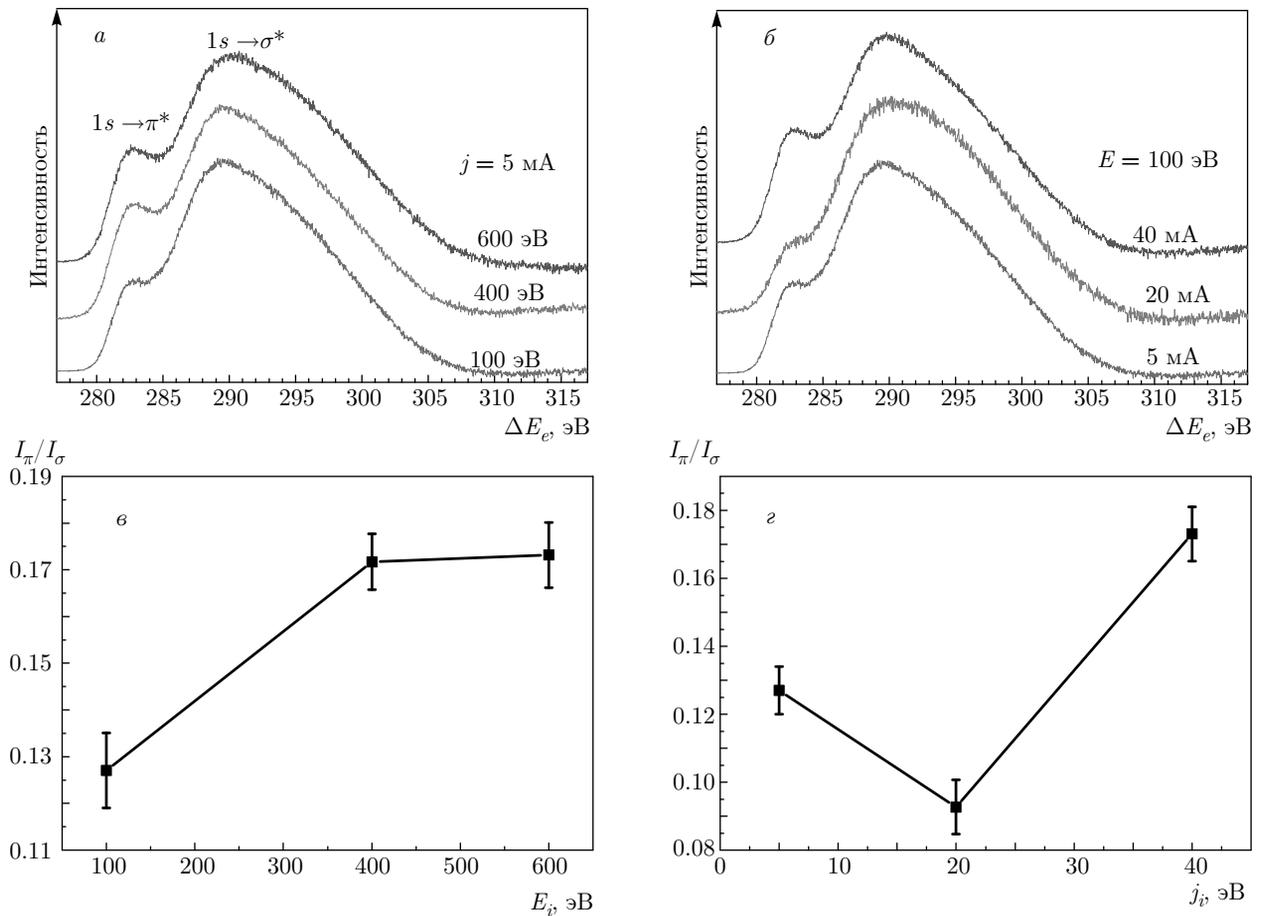


Рис. 9. Спектры характеристических потерь энергии электронов для структур, нанесенных при различных энергиях (а) и токах (б) ионной стимуляции, а также отношения интенсивностей линий, отвечающих переходам $1s \rightarrow \pi^*$ и $1s \rightarrow \sigma^*$, для структур, нанесенных при различных энергиях (в) и токах (г) ионной стимуляции

рых превышает 30. В то же время существенные изменения дифракционных картин подразумевают необходимость проведения дополнительного структурного анализа образцов, который в нашем случае был осуществлен с помощью метода СХПЭЭ.

3.4. СХПЭЭ

На рис. 9а,б представлены спектры СХПЭЭ в диапазоне, отвечающем потерям энергии электронов на межзонный переход с основного уровня $1s$ атома углерода в π^* - и σ^* -подзоны. Фон линий вычитался методом Тугарда, спектры были нормированы по интенсивности и приведены на графике с вертикальным сдвигом. На рис. 9в,г можно видеть отношения интенсивностей пиков, отвечающих структурам, нанесенным при различных энергиях и токах ионной стимуляции. Оценка данного отношения была проведена при помощи двухконного метода. Ширина окон, отвечающих переходам $1s \rightarrow \pi^*$

и $1s \rightarrow \sigma^*$, была выбрана соответственно равной 3 и 10 эВ [51].

Наличие σ^* -подзоны характерно для атомов углерода с любой гибридизацией, в то время как π^* -подзона не наблюдается в зонной структуре sp^3 -гибридизованного углерода. Таким образом, отношение интенсивностей линий, отвечающих межзонным переходам $1s \rightarrow \pi^*$ и $1s \rightarrow \sigma^*$, позволяет качественно оценить изменение sp^2 - и sp^3 -компонент по соотношению пиков. Однако количественные оценки не представляются возможными в силу того, что наличие углерод-водородных связей оказывает влияние на СХПЭЭ. Вклад связанных с С-Н-связью межзонных переходов лежит между переходами $1s \rightarrow \pi^*$ и $1s \rightarrow \sigma^*$, что осложняет оценки [51].

Можно видеть, что тенденция изменений СХПЭЭ, представленная на рис. 9в,г, достаточно хорошо коррелирует с данными, полученными

путем фотометрирования картин электронной дифракции (см. рис. 8в,г). Различие в поведении данных зависимостей при изменении энергии стимуляции от 400 до 600 эВ, возможно, связано с тем, что при увеличении энергии стимуляции в фазовом составе покрытия становится меньше кластеров с размером меньше области когерентного рассеяния, при этом соотношение sp^2 - и sp^3 -гибридизованного углерода изменяется незначительно.

Стоит отметить, что изменение тока и энергии стимуляции влияет на соотношение sp^2 - и sp^3 -компонент различным образом: увеличение энергии стимуляции приводит к увеличению доли sp^2 -гибридизованного углерода, в то время как увеличение тока показывает минимум доли sp^2 -углерода при значении тока 20 мА и ее возрастание при увеличении энергии до 40 мА. Для интерпретации полученных результатов стоит принять во внимание, что при образовании аморфных углеродных структур гибридизация атомов зависит от их координационного числа. При теоретическом рассмотрении часто полагают, что условием формирования sp -, sp^2 - и sp^3 -гибридизованных состояний атомов является наличие соответственно 2, 3 и 4 атомов на расстоянии не более 1.8–1.9 Å от частицы [52].

В свою очередь, ионная стимуляция может приводить как к уменьшению координационного числа атомов путем разупорядочения, так и к его увеличению вследствие увеличения поверхностной диффузии атомов и отжига дефектов [19, 26, 27]. Как показали результаты ПЭМ, для исследуемых образцов возрастание тока ионного облучения привело к большему увеличению подвижности серебряных частиц, нежели рост энергии стимуляции. По-видимому, диффузия углерода также более эффективно стимулируется увеличением тока ассистирования. Таким образом, изменение тока стимуляции от 5 до 20 мА, по-видимому, приводит к отжигу дефектов, а также способствует тому, что конденсирующиеся атомы более эффективно находят «соседей», вследствие чего происходит формирование sp^3 -гибридизованных кластеров. Дальнейшее увеличение тока стимуляции до 40 мА ведет к тому, что дефектообразование и разупорядочение, индуцированные ионным пучком, способствуют образованию ненасыщенных связей.

В свою очередь, увеличение энергии в меньшей степени способствует росту поверхностной диффузии, но увеличивает число формируемых дефектов [19]. Вследствие этого рост энергии пучка не приводит к возрастанию координационно-

го числа атомов углерода и способствует созданию sp^2 -гибридизованной компоненты. Полученные данные согласуются с результатами, свидетельствующими, что стимуляция ионами аргона с энергией 100 эВ является оптимальной для создания аморфных углеродных структур с высокой долей sp^3 -гибридизованных атомов, в то время как большая энергия приводит к разупорядочению материала [53].

3.5. Спектры поглощения в УФ и видимой областях спектра

На рис. 10 представлены спектры поглощения в УФ и видимой областях спектра для покрытий а-СН:Ag, изготовленных при различных энергиях и токах ионной стимуляции. Пик поверхностного плазмонного резонанса на 380–580 нм [9, 12] наблюдается только для покрытий, нанесенных при энергии стимуляции 400 и 600 эВ. По-видимому, его ширина обусловлена существенным разбросом размеров серебряных наночастиц, а рост интенсивности данной линии с увеличением энергии ассистирования связан с формированием огранки серебряных наночастиц [12]. Данное предположение подтверждается отсутствием такого пика для образцов, полученных при различных токах стимуляции (рис. 10б) и имеющих схожий элементный состав, но без огранки.

Пик на 320–330 нм, характерный для всех исследуемых структур, может быть отнесен к межорбитальному $\pi \rightarrow \pi^*$ -переходу, характерному для sp^2 -гибридизованного углерода [54]. В то же время пики поглощения в случае аморфного графитоподобного углерода существенно шире, чем наблюдаемая в наших спектрах линия [9]. По нашему предположению, присутствие линии на 330–340 нм в спектрах связано с формированием цепочек на основе сопряженных полимеров, для которых положение линии варьируется от 300 до 330 нм в зависимости от длины цепочки [55].

Появление полимерной субструктуры в углеродных покрытиях нередко наблюдается экспериментально. Наиболее известным примером подобного эффекта является формирование транс-полиацетилена на границе раздела зерен CVD-алмаза [56] и в углерод-серебряных покрытиях [57]. Возможно также образование более сложных соединений, таких как поли-*p*-фениленвинилен [58] и гексабензокоронен [59]. По-видимому, в нашем случае на поверхности растущей пленки под действием ионного облучения происходит разложение остаточного водорода, которое в ходе взаимодействия с потоком

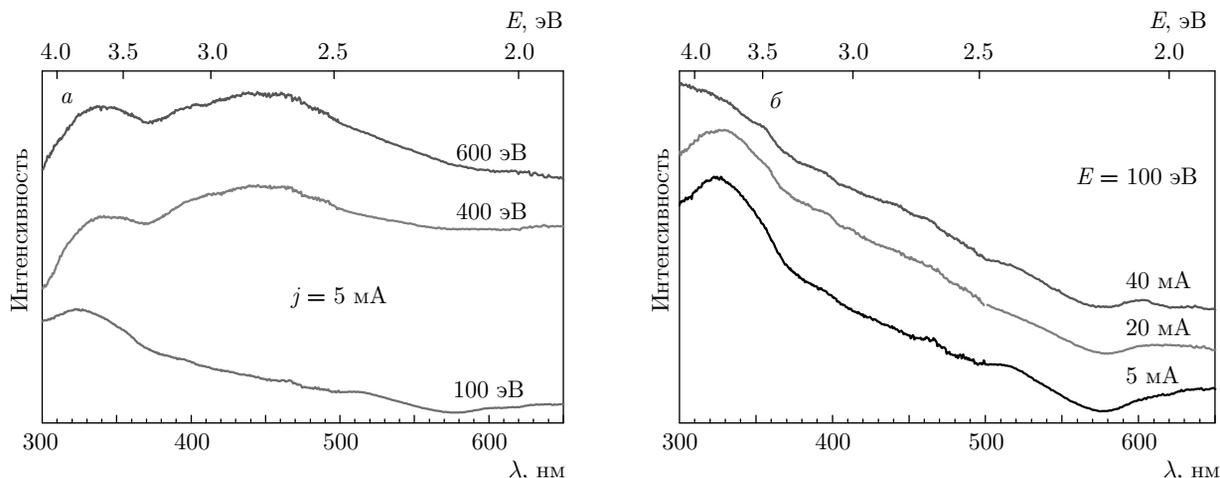


Рис. 10. Спектры поглощения в УФ и видимой областях спектра для структур а-Si:Ag, полученных при различных энергиях (а) и токах (б) стимуляции. Верхние шкалы отвечают энергии, соответствующей указанной на нижней шкале длине волны фотона

ионов углерода приводит к формированию полимерной субструктуры. Стоит отметить, что этот вывод подтверждается положением плазмонного сателлита S_{1s} РФЭС-линии, которое свидетельствует о гидрировании углеродной матрицы.

Можно заметить, что при токе ассистирования 40 мА интенсивность линии, отвечающей полимерной фазе, снижается. Это может свидетельствовать как об уменьшении доли полимерной фазы в структуре пленки, так и о перестройке структуры полимера из полиацетиленовой $(=CH-)_n$ в полиэтиленовую $(-CH_2-)_n$. При такой структурной перестройке уменьшится пик, отвечающий межорбитальному $\pi \rightarrow \pi^*$ -переходу.

Возможность ионно-индуцированного формирования огранки серебряных наночастиц, усиливающих их плазмонные свойства, может послужить основой для модификации углерод-серебряных структур, направленной на создание на их основе высокостабильных SERS-подложек. Помимо этого, форма и размер серебряных частиц оказывает существенное влияние на антибактериальные свойства материала на их основе, вследствие чего возможность их изменения при помощи ионного ассистирования может найти применение при создании биосовместимых углерод-серебряных покрытий с контролируемой биоактивностью. В то же время для создания эффективных функциональных материалов при помощи предложенного метода необходимо, чтобы эффекты распыления серебра вследствие поверхностной сегрегации и образования оптически-активной полимерной субструктуры были бы сведены к минимуму.

3.6. Выводы

В настоящей работе проанализировано влияние стимуляции ионами аргона с энергиями 100–600 эВ и токами 5–40 мА (плотности тока 15–31 мкА/см²) на структуру покрытий а-Si:Ag, синтезируемых методом импульсно-плазменного осаждения. Показано, что рост энергии ионной стимуляции приводит к формированию огранки серебряных наночастиц. Увеличение как энергии, так и тока ассистирующих ионов приводит к разделению серебряных включений по размерам на частицы диаметром около 5 нм и более 20 нм, что вызвано влиянием совокупности эффектов: селективного распыления серебра, поверхностной диффузии и дефектообразования. При этом увеличение энергии в большей степени способствует дефектообразованию, приводящему к формированию мелких частиц, в то время как увеличение тока способствует укрупнению серебряных включений, вызванному усилением поверхностной диффузии. Также выявлен эффект распыления серебряных наночастиц ассистирующим ионным пучком, проявляющийся вследствие поверхностной сегрегации. Установлено, что на спектры поглощения в УФ и видимой областях спектра структур а-Si:Ag оказывает влияние огранка серебряных наночастиц, а также присутствие в структуре пленки полимерной компоненты, вызванное разложением остаточного водорода на поверхности растущей пленки.

Благодарности. Один из авторов (И. А. З.) является стипендиатом Фонда развития теоретичес-

кой физики и математики «БАЗИС». Авторы благодарят С. С. Абрамчука за помощь в проведении исследований просвечивающей электронной микроскопии.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-32-90077.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Guo, X. Li, L. Sun et al., *Thin Solid Films* **640**, 45 (2017).
2. I. A. Zavidovskiy, O. A. Streletskiy, O. Yu. Nishchak et al., *Thin Solid Films* **738**, 138966 (2021).
3. L. J. Wang, F. Zhang, A. Fong et al., *Thin Solid Films* **650**, 58 (2018).
4. Š. Meškiniš, T. Tamulevičius, G. Niaura et al., *J. Nanosci. Nanotechnol.* **16**, 10143 (2016).
5. W.-C. Lan, S.-F. Ou, M.-H. Lin et al., *Ceramics Internat.* **39**, 4099 (2013).
6. H.-J. Seok, J.-K. Kim, and H.-K. Kim, *Sci. Rep.* **8**, 13521 (2018).
7. I. Yaremchuk, A. Tamulevičienė, T. Tamulevičius et al., *Phys. Stat. Sol. (a)* **211**, 329 (2014).
8. A. Ilie, C. Durkan, W. I. Milne et al., *Phys. Rev. B* **66**, 045412 (2002).
9. H. Zoubos, L. E. Koutsokeras, D. F. Anagnostopoulos et al., *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **117**, 350 (2013).
10. И. А. Завидовский, О. А. Стрелецкий, О. Ю. Нищак и др., *ЖТФ* **90**, 489 (2020).
11. O. A. Streletskiy, I. A. Zavidovskiy, O. Yu. Nishchak et al., *Thin Solid Films* **671**, 31 (2019).
12. O. A. Streletskiy, I. A. Zavidovskiy, O. Yu. Nishchak et al., *Vacuum* **175**, 109286 (2020).
13. M. A. Grushin, E. A. Kral'kina, P. A. Neklyudova et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **1328**, 012029 (2019).
14. V. V. Uglova, V. M. Anishchik, Y. Pauleau et al., *Vacuum* **70**, 181 (2003).
15. O. A. Streletskiy, I. A. Zavidovskiy, O. Yu. Nishchak et al., *Thin Solid Films* **701**, 137948 (2020).
16. M. B. Guseva, N. F. Savchenko, and V. G. Babaev, *Radiat. Eff.* **87**, 215 (1986).
17. Yu. P. Kudryavtsev, R. B. Heimann, and S. E. Evsyukov, *J. Mater. Sci.* **31**, 5557 (1996).
18. L. Simonot, F. Chabanais, S. Rousselet et al., *Appl. Surf. Sci.* **544**, 148672 (2021).
19. W. Ensinger, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **127–128**, 796 (1997).
20. T. Škereň, K. Temst, W. Vandervorst et al., *New J. Phys.* **15**, 093047 (2013).
21. И. Н. Карькин, Ю. Н. Горностырев, Л. Е. Карькина, *ФТТ* **52**, 2 (2010).
22. A. Kolpakov, A. Poplavsky, M. Yaprlyntsev et al., *East Eur. J. Phys.* **3**, 124 (2021).
23. V. O. Babaev, Ju V. Bykov, and M. B. Guseva, *Thin Solid Films* **38**, 1 (1976).
24. J. L. Endrino, R. Escobar Galindo, H.-S. Zhang et al., *Surf. Coat.* **202**, 3675 (2008).
25. N. Laegreid and G. K. Wehner, *J. Appl. Phys.* **32**, 365 (1961).
26. K.-H. Müller, *Phys. Rev. B* **35**, 7906 (1987).
27. J. S. Colligon, *J. Vac. Sci. Technol. A* **13**, 1649 (1995).
28. M. P. Seah, *Vacuum* **34**, 463 (1984).
29. H. Yamazaki and A. Uchiyama, *Surf. Sci.* **287–288**, 308 (1993).
30. J. Schäfer, J. Ristein, and L. Ley, *J. Non-Cryst. Solids* **164–166**, 1123 (1993).
31. A. Qureshi, S. Shah, S. Pelagade et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **208**, 012108 (2010).
32. K. Nagakane, Y. Yoshida, I. Hirata et al., *Dent. Mater. J.* **25**, 645 (2006).
33. О. А. Стрелецкий, И. А. Завидовский, О. Ю. Нищак и др., *ФТТ* **62**, 1936 (2020).
34. A. Tóth, O. Faix, G. Rachor et al., *Appl. Surf. Sci.* **72**, 209 (1993).
35. D. Gao, Q. Xu, J. Zhang et al., *Nanoscale* **6**, 2577 (2014).
36. W. Guo, X. Li, J. Xu et al., *Electrochim. Acta* **188**, 414 (2016).
37. L. Cao, Z. Lin, J. Huang et al., *Int. J. Hydrog. Energy* **42**, 876 (2017).
38. J. Zhang, X. Liu, X. Suo et al., *Mater. Lett.* **198**, 164 (2017).
39. M. Cloutier, S. Turgeon, Y. Busby et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8**, 21020 (2016).

40. V. Datsyuk, M. Kalyva, K. Papagelis et al., *Carbon* **46**, 833 (2008).
41. Y. Jing, H. Wang, J. Zhao et al., *Appl. Surf. Sci.* **347**, 499 (2015).
42. Q. Jiang, Y. Jing, Y. Ni et al., *Microchem. J.* **157**, 105111 (2020).
43. N. Frese, S. Taylor Mitchell, A. Bowers et al., *C–J. Carbon Res.* **3**, 23 (2017).
44. P. Stefanov, M. Shipochka, P. Stefchev et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **100**, 012039 (2008).
45. F. Mendes, A. de Siervo, W. Reis de Araujo et al., *Carbon* **159**, 110 (2020).
46. H. Derouiche, *Dyes Pigm.* **63**, 277 (2004).
47. J. Y. Liu, Z. Wang, J Y. Chen et al., *J. Nano Res.* **30**, 50 (2015).
48. A. I. Boronin, S. V. Koscheev, and G. M. Zhidomirov, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **96**, 43 (1998).
49. P. S. DeCarli and J. C. Jamieson, *Science* **133**, 1821 (1961).
50. Z. Czigány and L. Hultman, *Ultramicroscopy* **110**, 815 (2010).
51. J. Bruley, D. B. Williams, J. J. Cuomo et al., *J. Microscopy* **180**, 22 (1995).
52. M. A. Caro, G. Csányi, T. Laurila et al., *Phys. Rev. B* **102**, 174201 (2020).
53. J. Schwan, S. Ulrich, H. Roth et al., *J. Appl. Phys.* **79**, 1416 (1996).
54. S. A. R. Shahamirifard, M. Ghaedi, M. Montazerzohori et al., *Photochem. Photobiol. Sci.* **17**, 245 (2018).
55. K. Akagi and H. Shirakawa, *Macromol. Symp.* **104**, 137 (1996).
56. A. C. Ferrari and J. Robertson, *Phys. Rev. B* **63**, 121405 (2001).
57. A. Jurkevičiūtė, G. Klimaitė, T. Tamulevičius et al., *Adv. Eng. Mater.* **22**, 1900951 (2020).
58. M. Rybachuk and J. M. Bell, *Carbon* **47**, 2481 (2009).
59. A. Habibi, S. M. Mousavi Khoie, F. Mahboubi et al., *Surf. Coat.* **309**, 945 (2017).

ФРУСТРИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 4$ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*М. К. Рамазанов**, *А. К. Муртазаев*, *М. А. Магомедов*

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367015, Магачкала, Россия*

*Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
367000, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 6 декабря 2021 г.,
после переработки 16 декабря 2021 г.
Принята к публикации 16 декабря 2021 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования магнитных структур основного состояния, фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей во внешнем магнитном поле. Исследования проведены в интервале величины магнитного поля $0 \leq h \leq 7.0$ с шагом 0.5. Построены магнитные структуры основного состояния. Установлено, что в интервалах значений магнитного поля $0 < h < 1.0$ и $2.0 \leq h \leq 3.5$ наблюдается фазовый переход первого рода, а при значении поля $h = 1.5$ — фазовый переход второго рода. Показано, что в интервале $4.0 \leq h \leq 7.0$ магнитное поле снимает вырождение основного состояния, и фазовый переход размывается.

DOI: 10.31857/S0044451022060049

EDN: DUHOLM

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение последних десятилетий наблюдается повышенный интерес к изучению эффектов фрустрации в спиновых решеточных моделях. Конкуренция обменных взаимодействий может привести к возникновению фрустраций в магнитных спиновых системах, которые не позволяют системе одновременно минимизировать все ее локальные взаимодействия, что приводит к бесконечно вырожденному основному состоянию [1–3]. Спиновые системы с фрустрациями обладают богатой природой фазовых переходов (ФП) и имеют особенности магнитного, термодинамического и критического поведения. Особый интерес имеет изучение влияния возмущений различной природы, таких как внешнее магнитное поле, взаимодействие вторых ближайших соседей, немагнитные примеси, тепловые и квантовые флуктуации и др., на физические свойства магнитных спиновых систем с фрустрациями. Включение этих возмущающих факторов может привести к совершенно новому физическому поведению таких си-

стем [4–10]. Причина такого поведения заключается в высокой чувствительности фрустрированных систем к внешним возмущающим факторам. В данном исследовании нами изучается влияние внешнего магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства двумерной модели Поттса с фрустрациями. При решении такого рода задач до сих пор ограничивались моделями Изинга и Гейзенберга. В настоящее время влияние внешних возмущающих факторов, в том числе и магнитного поля в модели Изинга и Гейзенберга, достаточно хорошо изучено [11–16]. Для фрустрированной модели Поттса существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$ и $q = 3$ [17–23]. Эта модель изучена достаточно хорошо и получены интересные результаты. Модель Поттса демонстрирует температурный ФП первого или второго порядка в зависимости от числа состояний спина q , пространственной размерности и геометрии решетки. Критические свойства ферромагнитной модели Поттса известны лишь в двумерном случае [23, 24]. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ довольно уникальна и до сих пор мало

* E-mail: sheikh77@mail.ru

изучена. Данная модель интересна и тем, что значение $q = 4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается ФП второго рода, и области значений $q > 4$, в которой ФП происходит как переход первого рода [24]. Результаты исследований двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной [25], гексагональной [26, 27] решетках и на решетке КагOME [28], полученные методом Монте-Карло (МК), показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Интерес к модели Поттса обусловлен еще и тем, что эта модель служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся некоторые классы адсорбированных газов на графите, сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси [29]. На основе модели Поттса с различным числом состояний спина могут быть описаны структурные ФП во многих материалах [16]. Работ, посвященных изучению влияния внешнего магнитного поля как возмущающего фактора на ФП, магнитные и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$, практически нет, и этот вопрос все еще остается открытым и малоизученным. В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе метода МК изучить влияние внешнего магнитного поля на ФП, магнитные и термодинамические свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЙ

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H = & -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k - h \times \\
 & \times \sum_{\langle i,j \rangle} S_i = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - \\
 & - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i \rangle} S_i, \quad (1)
 \end{aligned}$$

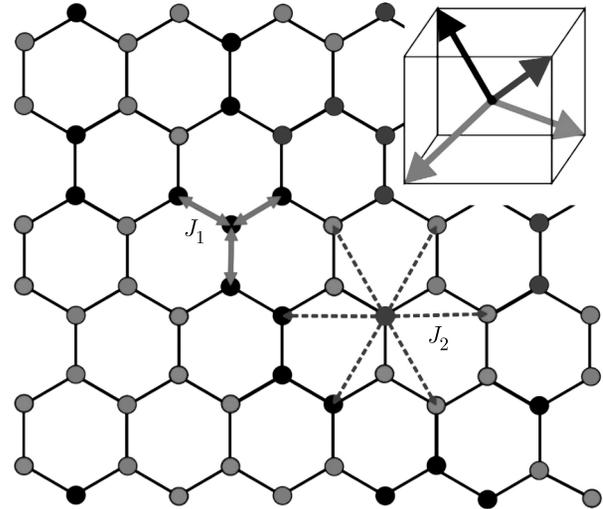


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке. Кружками одного и того же цвета обозначены спины, имеющие одинаковое направление. На вставке для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление

где J_1 и J_2 — параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействий соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}, \theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, h — величина магнитного поля (h приводится в единицах J_1). В данном исследовании рассматривается случай, когда $|J_1| = |J_2| = 1$. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0 \leq h \leq 7.0$ с шагом 0.5. Магнитное поле направлено вдоль одного из направлений спина.

Схематическое и цветовое представление модели представлено на рис. 1. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На вставке приведены направления спинов для каждого из четырех значений спина и соответствующее цветовое представление. На рисунке также представлены взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями. Как видно на рисунке, у каждого спина есть три ближайших (сплошные жирные линии красного цвета) и шесть следующих ближайших (пунктирные линии синего цвета) соседей. Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\begin{aligned}
 \theta_{i,j} = & \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j, \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases} \\
 \text{или} \\
 \cos \theta_{i,j} = & \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases} \quad (2)
 \end{aligned}$$

Согласно уравнению (2) для двух спинов S_i и S_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J_1$, если $S_i = S_j$. В случае когда $S_i \neq S_j$, энергия $E_{i,j} = J_1/3$. Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении и принимает другое значение при не совпадении направлений спинов. Для модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов, как показано на рис. 1.

В настоящее время спиновые системы с фрустрациями на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [9, 10, 30–37]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [38]. Поэтому в данном исследовании мы использовали этот алгоритм.

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются N реплик X_1, X_2, \dots, X_N с температурами T_1, T_2, \dots, T_N .

2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик проводится обмен данными между парой соседних реплик X_i и X_{i+1} в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{если } \Delta \leq 0; \\ \exp(-\Delta), & \text{если } \Delta > 0. \end{cases}$$

где

$$\Delta = -(U_i - U_{i+1})(1/T_i - 1/T_{i+1}),$$

U_i и U_{i+1} — внутренние энергии реплик.

Главное преимущество этого алгоритма перед другими репличными алгоритмами в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности — процедура достаточно длительная и отнимает много времени. В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по «температурному интервалу», которая, в свою очередь, стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, которая характерна для спиновых систем с фрустрациями. Для повышения эффективности этого метода необходимо увеличение числа реплик, что требует серьезного роста компьютерных мощностей. Современные компьютеры обладают достаточной

мощностью, что позволяет моделировать необходимое количество реплик и получать результаты с высокой точностью.

Для анализа природы и характера ФП использовался гистограммный метод анализа данных. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин. Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12-60$, где L — линейный размер решетки, N — количество спинов в системе.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 представлены магнитные структуры основного состояния при разных значениях магнитного поля. На этом рисунке спины, имеющие одинаковое направление, обозначены кружками одного и того же цвета. Магнитное поле направлено вдоль спина, обозначенного черным цветом. На рисунке видно, что при отсутствии внешнего магнитного поля ($h = 0$) в данной модели в основном состоянии реализуется димерная структура, т. е. наблюдается магнитное состояние, при котором спины упорядочиваются попарно. Более подробно магнитные

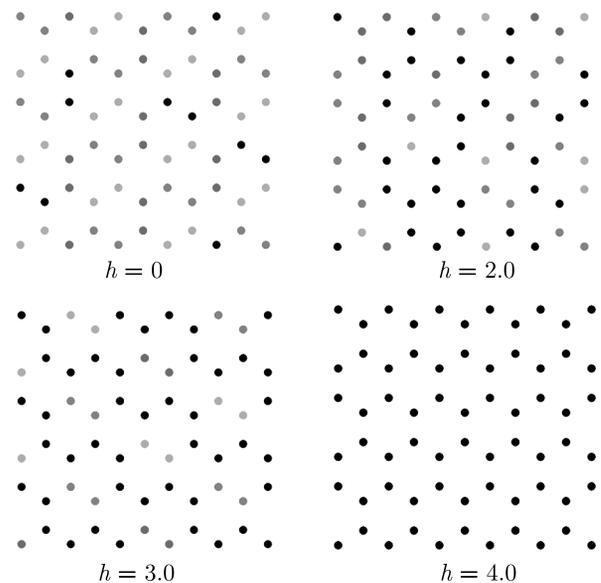


Рис. 2. Магнитные структуры основного состояния. Кружками одного и того же цвета обозначены спины, имеющие одинаковое направление

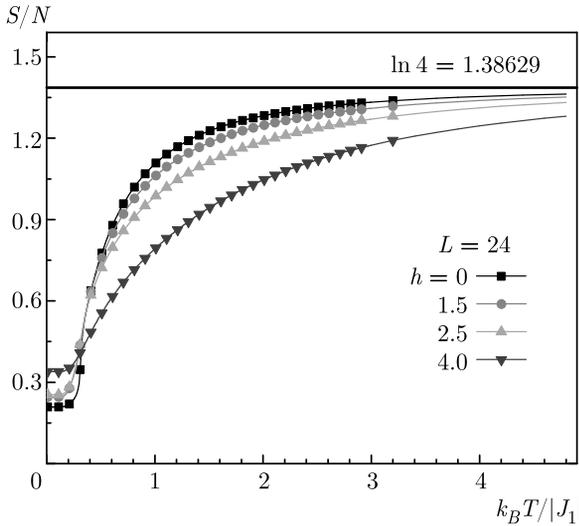


Рис. 3. Температурные зависимости энтропии S

структуры, полученные для данной модели без поля, описаны в работах [39, 40]. Магнитные структуры в слабых магнитных полях ($h \leq 3.5$) представлены в работе [41]. Для поля $h = 2.0$ наблюдается увеличение числа кружков черного цвета. Это связано с увеличением числа спинов, ориентированных вдоль внешнего поля. При этом на рисунке появляются области с частичным упорядочением спинов. При значении поля $h = 3.0$ в системе наблюдается страйповое упорядочение. Наблюдается магнитное состояние, при котором спины выстраиваются в полосовую структуру. Включение сильных полей ($h \geq 4.0$) приводит к упорядочению всех спинов в системе вдоль внешнего магнитного поля. Это свидетельствует о том, что внешнее магнитное поле приводит к изменению структуры магнитного упорядочения.

На рис. 3 приведены температурные зависимости энтропии S для различных значений магнитного поля при $L = 24$ (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). На рисунке видно, что с увеличением температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия стремится к ненулевому значению для всех значений поля. Ненулевая остаточная энтропия является следствием вырождения основного состояния. Такое поведение энтропии свидетельствует о возникновении в системе фрустраций.

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости C мы использовали выражение [42]

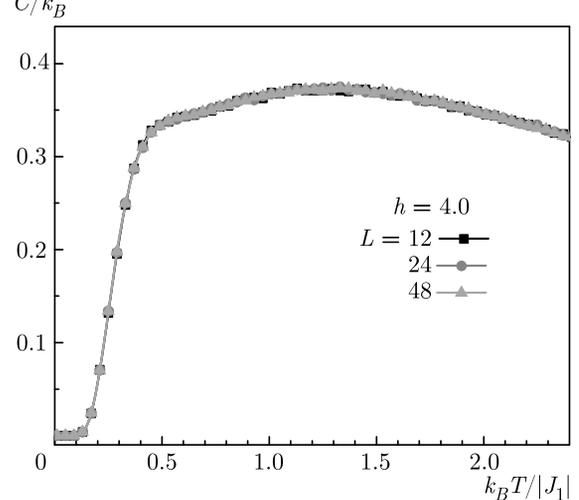
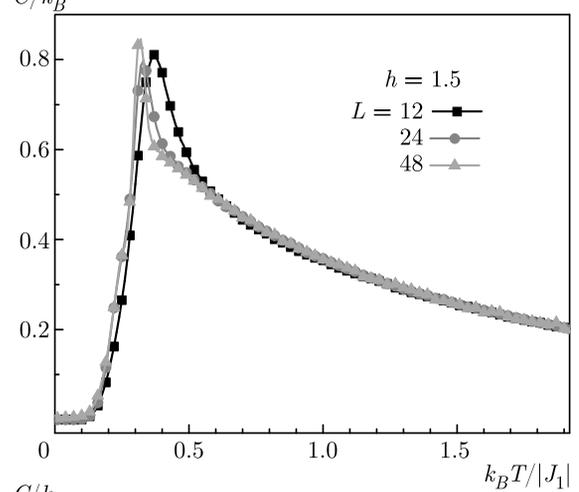
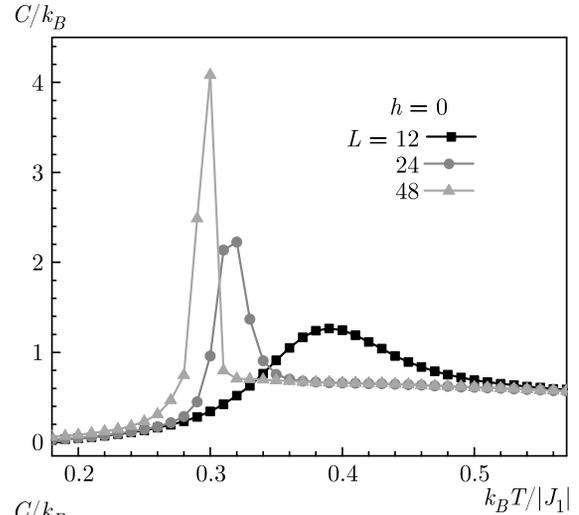


Рис. 4. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B для систем с различными линейными размерами

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

где $K = |J_1|/k_B T$, U — внутренняя энергия.

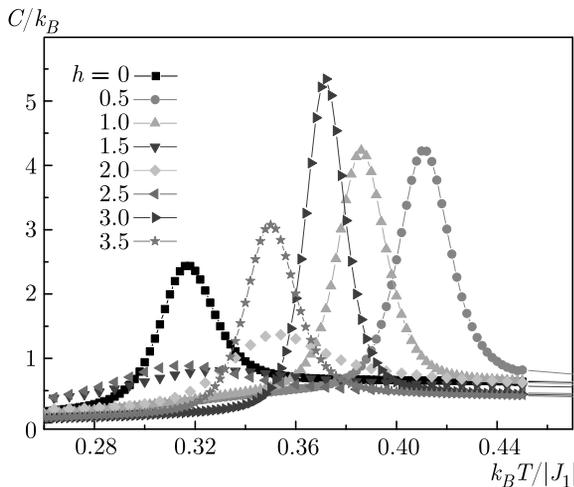


Рис. 5. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B в интервале поля $0 \leq h \leq 3.5$

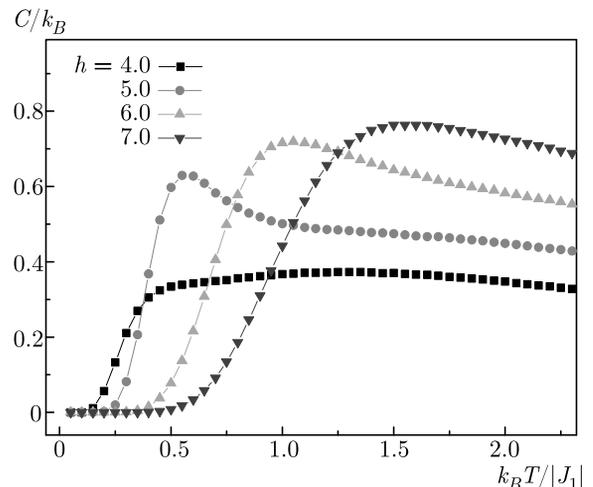


Рис. 6. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B для поля $h \leq 4.0$

На рис. 4 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для систем с линейными размерами $L = 12; 24$ и 48 для различных значений магнитного поля. Отметим, что для поля $h = 0$ на зависимости теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы с ростом L смещаются в сторону низких температур. Для поля $h = 1.5$ максимумы теплоемкости не меняются с ростом L и в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру. Такая же картина наблюдается для поля $h = 4.0$. На этом рисунке видно, что температурные зависимости теплоемкости не зависят от линейных размеров системы. Такая картина температурной зависимости теплоемкости обычно наблюдается для фрустрированных спиновых систем.

На рис. 5 и 6 представлены температурные зависимости теплоемкости C для различных значений магнитного поля при $L = 24$. На рис. 5 видно, что в интервале $0 \leq h \leq 3.5$ вблизи критической области наблюдаются хорошо выраженные максимумы теплоемкости, кроме значений поля $h = 1.5$ и $h = 2.5$. Отметим, что при значении поля $h = 1.5$ и $h = 2.5$ для теплоемкости наблюдается необычное поведение, которое характеризуется отсутствием ярко выраженного пика. Максимумы теплоемкости в данном случае вместо острых пиков имеют сглаженные пики. Для значения поля $h = 2.0$ максимум теплоемкости становится более плавными. Можно предположить, что такое поведение теплоемкости связано

с изменением структуры магнитного упорядочения. При включении слабого магнитного поля ($h = 0.5$) максимум теплоемкости смещается в сторону высоких температур. Дальнейший рост поля приводит к сдвигу максимума теплоемкости в сторону низких температур. Такое поведение теплоемкости объясняется тем, что увеличение величины магнитного поля приводит к быстрому упорядочению системы, уменьшению флуктуаций и соответственно уменьшению температуры ФП. На рис. 6 видно, что при значениях магнитного поля $h \geq 4.0$ характерные пики теплоемкости не наблюдаются. Это говорит о том, что дальнейшее увеличение величины магнитного поля приводит к подавлению ФП в системе.

Параметр порядка системы m вычислялся по формуле

$$m = \frac{1}{N} \frac{4N_{max} - N_1 - N_2 - N_3 - N_4}{3}, \quad (4)$$

где N_1, N_2, N_3, N_4 — число спинов, соответствующих одному из четырех направлений спина.

На рис. 7 и 8 представлены графики зависимости параметра порядка m от температуры для разных значений магнитного поля. При отсутствии внешнего магнитного поля в системе отсутствует порядок и значение параметра порядка близко к нулю. При включении поля в системе наблюдается частичное упорядочение и параметр порядка в низкотемпературной области имеет отличные от нуля значения. Это объясняется тем, что магнитное поле выстраивает спины вдоль своего направления и в системе возникает частичный порядок. С ростом величины магнитного поля увеличивается число спинов, которые выстраиваются вдоль внешнего поля. Этим

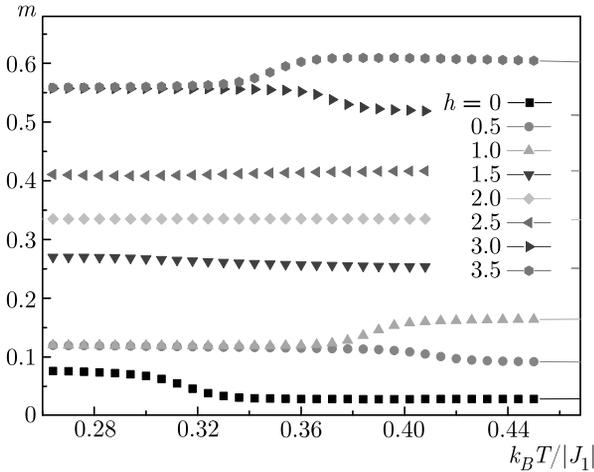


Рис. 7. Температурные зависимости параметра порядка в интервале поля $0 \leq h \leq 3.5$

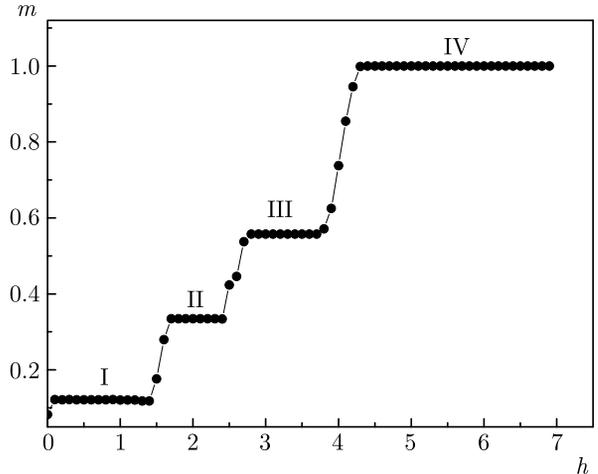


Рис. 9. Фазовая диаграмма зависимости параметра порядка от магнитного поля. Магнитное поле h приводится в единицах J_1

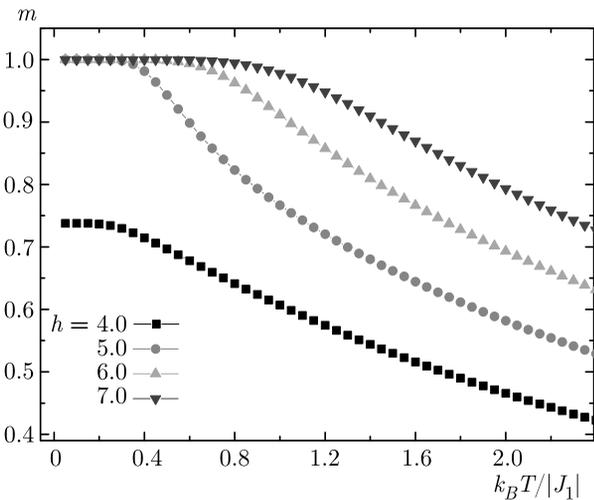


Рис. 8. Температурные зависимости параметра порядка для поля $h \geq 4.0$

обусловлено то, что параметр порядка в низкотемпературной области растет с увеличением поля. При значениях поля $h \geq 5.0$ в низкотемпературной области параметр порядка $m = 1.0$. Это свидетельствует, о том, что при высоких значениях поля все спины в системе упорядочены вдоль внешнего поля.

На рис. 9 приведен график зависимости параметра порядка m от величины магнитного поля h в низкотемпературной области. На рисунке мы наблюдаем ступенчатую зависимость параметра порядка. Наблюдаются четыре ступеньки: I, II, III и IV. Ступенька I соответствует магнитному упорядочению, при котором только одно состояние спина (черный цвет) совпадает с направлением внешнего поля, а остальные три состояния спина направлены так,

как изображено на рис. 1. При увеличении внешнего магнитного поля ($h = 1.5$) еще одно состояние спина (второе) выстраивается вдоль внешнего поля. В системе возникает частичный порядок. Это приводит к возникновению ступеньки II на графике. При дальнейшем увеличении поля ($h = 3.0$) вдоль внешнего поля выстраивается еще одно состояние спина (третье). Этим обусловлено возникновение ступеньки III на графике. При значении поля $h = 4.5$ вдоль внешнего поля выстраивается следующее состояние спина (четвертое). С этим связано возникновение ступеньки IV на графике. Анализируя рис. 9, можно предположить, что поля $h = 1.5, 2.5$ и 4.0 являются для данной модели фрустрирующими полями. Это также подтверждается поведением температурной зависимости теплоемкости (рис. 5 и 6). Видно, что теплоемкость в этих полях пологая и значительно ниже, чем в остальных (нефрустрирующих) полях.

Для определения критической температуры T_C мы использовали метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [43]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \tag{5}$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \tag{6}$$

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Выражения (5) и (6) позволяют определить критическую температуру T_C с большой точностью для

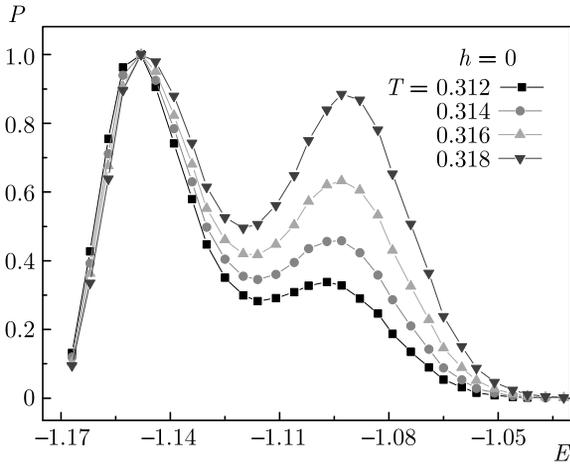


Рис. 10. Гистограммы распределения энергии для поля $h = 0$. Здесь и далее энергия E приведена в единицах J_1

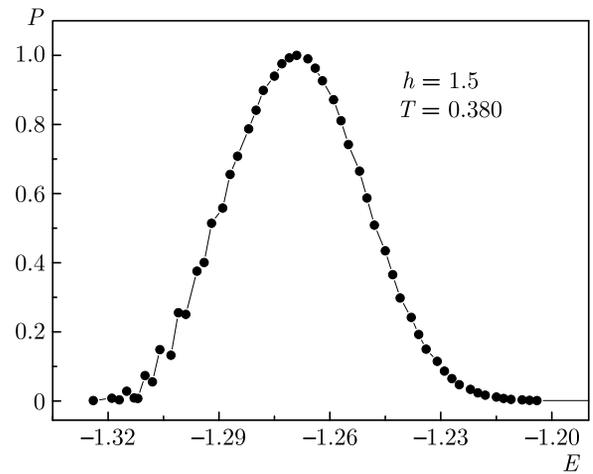


Рис. 12. Гистограммы распределения энергии для поля $h = 1.5$

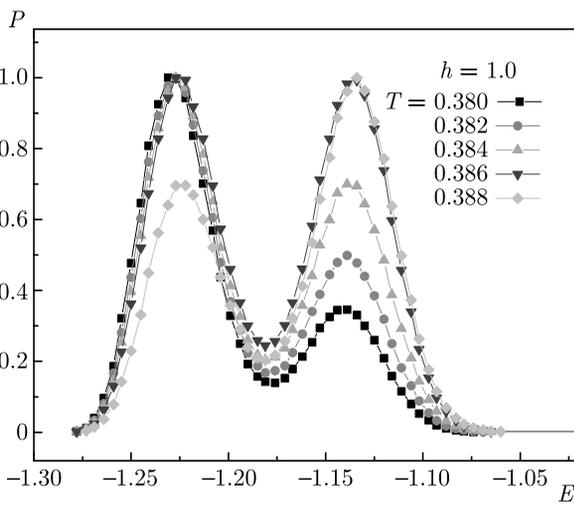


Рис. 11. Гистограммы распределения энергии для поля $h = 1.0$

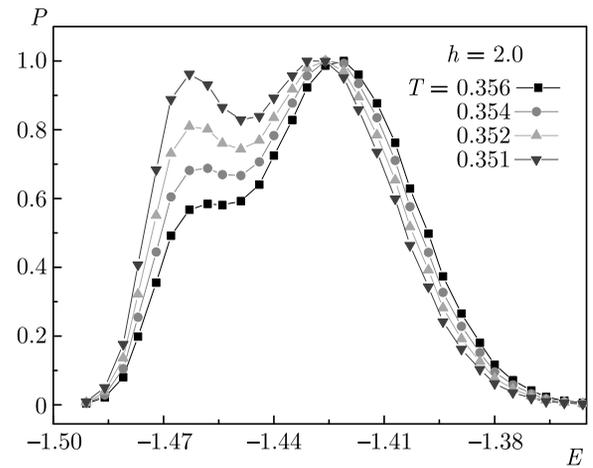


Рис. 13. Гистограммы распределения энергии для поля $h = 2.0$

ФП соответственно первого и второго родов. Применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. Однако результаты, полученные в работе [44], показывают, что для данной модели этим методом не удастся однозначно определить тип ФП. Поэтому в данном исследовании для анализа рода ФП мы использовали гистограммный анализ данных метода МК [45, 46]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [30].

Результаты, полученные на основе гистограммного анализа данных, показывают, что в данной модели для значений поля в диапазоне $0 \leq h \leq 3.5$ кроме значения поля $h = 1.5$ наблюдается ФП перво-

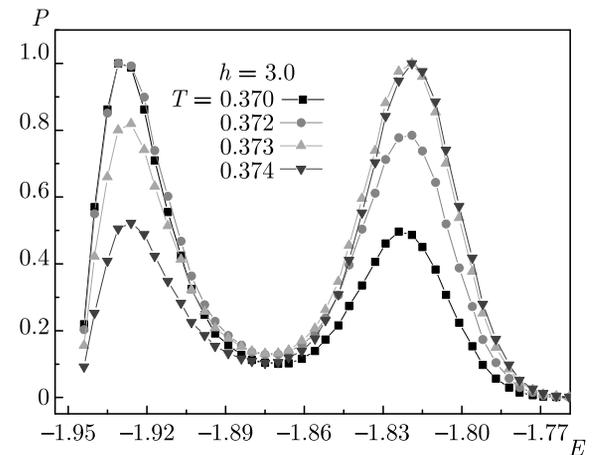


Рис. 14. Гистограммы распределения энергии для поля $h = 3.0$

го рода. Это продемонстрировано на рис. 10–14. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ для значений поля $h = 0, 1.0, 1.5, 2.0$ и 3.0 . Графики построены при различных температурах близких критической температуре. На рис. 10–14 видно, что в зависимости вероятности P от энергии E для значений поля $h = 0, 1.0, 2.0$ и 3.0 наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствуют о ФП первого рода. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Двойные пики на гистограммах распределения для исследуемой модели наблюдаются для значений поля в интервале $0 \leq h \leq 3.5$, кроме значения поля $h = 1.5$. Это позволяет нам утверждать о том, что в рассмотренном интервале значений поля наблюдаются ФП первого рода. На рис. 12 видно, что для значения поля $h = 1.5$ наблюдается один максимум. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии свидетельствует в пользу ФП второго рода. Можно предположить, что смена типа ФП связана с изменением магнитной структуры основного состояния под влиянием внешнего магнитного поля. Для значений поля $h \geq 4.0$ магнитное поле снимает вырождение основного состояния и ФП размывается.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование влияния магнитного поля на фазовые переходы, магнитные структуры основного состояния и термодинамические свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей выполнено с использованием репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений поля. Построена фазовая диаграмма зависимости параметра порядка от величины магнитного поля. Показано, что в интервале значений магнитного поля $0 \leq h \leq 3.5$, кроме значения $h = 1.5$, наблюдается фазовый переход первого рода. Для поля $h = 1.5$ наблюдается фазовый переход второго рода. Обнаружено, что при сильных полях $h \geq 4.0$ магнитное поле снимает вырождение основного состояния и фазовый переход в системе размывается.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Toulouse, Commun. Phys. **2**, 115 (1977).
2. J. Villain, J. Phys. **46**, 1840 (1985).
3. Н. Т. Диеп, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publ. Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
4. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
5. A. Malakis, P. Kalozoumis, and N. Tyraskis, Eur. Phys. J. B **50**, 63 (2006).
6. С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, УФН **175**, 92 (2005).
7. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова и др., Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
8. M. Kazuaki and O. Yukiyasu, Phys. Rev. B **101**, 184427 (2020).
9. R. Masrour and A. Jabar, Physica A **541**, 123377 (2020).
10. R. Masrour and A. Jabar, Physica A **491**, 926 (2018).
11. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn **61**, 1299 (1992).
12. M. Gvozdkova, P. Melchy, and M. Zhitomirsky, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 164209 (2011).
13. A. Chubokov and D. Golosov, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 69 (1991).
14. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
15. А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **107**, 265 (2018).
16. H. Kawamura, A. Yamamoto, and T. Okubo, J. Phys. Soc. Jpn. **97**, 043301 (2018).
17. N. Schreiber, R. Cohen, and S. Haber, Phys. Rev. E **97**, 032106 (2018).
18. D. P. Foster and C. Gérard, Phys. Rev. B **70**, 014411 (2004).
19. I. Puha and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **87**, 5905 (2000).
20. M. Nauenberg and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
21. J. L. Cardy, M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
22. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, и М. А. Магомедов, Physica A **521**, 543 (2019).

23. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
24. R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6**, 445 (1973).
25. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, *ФТТ* **61**, 2195 (2019).
26. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, *ЖЭТФ* **156**, 502 (2019).
27. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, *ФТТ* **62**, 442 (2020).
28. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, T. R. Rizvanova, and A. A. Murtazaeva, *Low Temp. Phys.* **47**, 396 (2021).
29. E. Domany, M. Schick, and J. S. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1148 (1977).
30. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 610 (2019).
31. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, D. R. Kurbanova, M. A. Magomedov, and K. Sh. Murtazaev, *Mat. Lett.* **236**, 669 (2019).
32. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, *ЖЭТФ* **156**, 980 (2019).
33. A. K. Murtazaev, M. K. Badiev, M. K. Ramazanov, and M. A. Magomedov, *Physica A* **555**, 124530 (2020).
34. R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef, and M. Hamedoun, *J. Magn. Magn. Mater.* **401**, 695 (2016).
35. A. A. Gangat and Y.-J. Kao, *Phys. Rev. B* **100**, 094430 (2019).
36. V. T. Ngo, D. T. Hoang, and H. T. Diep, *J. Phys.: Cond. Matt.* **23**, 226002 (2011).
37. А. О. Сорокин, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 34 (2020).
38. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, *Biopolymers (Peptide Science)* **60**, 96 (2001).
39. А. К. Муртазаев, М. К. Мазагаева, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, А. А. Муртазаева, *ФТТ* **63**, 622 (2021).
40. А. К. Муртазаев, М. К. Мазагаева, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, *ФММ* **122**, 460 (2021).
41. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 762 (2021).
42. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
43. K. Binder, D. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*, Springer, Berlin, Heidelberg (2010).
44. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, М. Р. Джамалудинов, *ФТТ* **64**, 237 (2022).
45. F. Wang and D. P. Landau. *Phys. Rev. E* **64**, 0561011–1 (2001).
46. F. Wang and D. P. Landau. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).

ВЛИЯНИЕ МАЛЫХ ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ И НАЧАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СОПРОТИВЛЕНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОМУ ДЕФОРМИРОВАНИЮ АРМКО-ЖЕЛЕЗА В УДАРНЫХ ВОЛНАХ И ВОЛНАХ РАЗРЕЖЕНИЯ

*А. С. Савиных**, *Г. В. Гаркушин*, *С. В. Разоренов*

*Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 6 декабря 2021 г.,
после переработки 19 января 2022 г.
Принята к публикации 19 января 2022 г.

Проведены измерения эволюции упруго-пластических волн ударного сжатия и разгрузки в Армко-железе в отожженном состоянии и после предварительной деформации сжатием на 0.6 % и 5.5 % и его откольной прочности в диапазоне давлений 2–9 ГПа при комнатной и повышенной до 600 °С температуре. Показано, что предварительная деформация 0.6 % и 5.5 % приводит к существенному уменьшению динамического предела текучести и незначительному увеличению откольной прочности. Получены зависимости скорости деформирования в пластической ударной волне и откольной прочности от скорости деформирования в волне разрежения для всех исследованных состояний Армко-железа.

DOI: 10.31857/S0044451022060050
EDN: DUKXEI

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокоскоростное пластическое деформирование твердых тел при длительностях нагрузки порядка микросекунды или менее осуществляется ударом пластины, взрывом, или воздействием мощного импульсного лазера [1–3]. Для анализа импульсов одномерного сжатия, генерируемых в образце исследуемого материала, проводится регистрация профилей массовой скорости $u(t)$ или скорости свободной поверхности $u_{fs}(t)$ от времени t . Как правило, при ударном нагружении упруго-пластического материала происходит расщепление волны сжатия с выделением упругого предвестника. Максимальное напряжение в упругой волне сжатия — упругом предвестнике пропорционально величине предела текучести материала при соответствующей скорости деформации. Формирование упругого пред-

вестника наблюдается также в волне разгрузки из ударно-сжатого состояния материала после некоторой предшествующей деформации в пластической волне сжатия. В работе [4] предложен способ оценки предела текучести ударно-сжатого материала по измеренному единичному профилю скорости свободной поверхности. В работах [5–7] способ оценки предела текучести ударно-сжатого материала апробирован на алюминии, меди и титане при комнатной и повышенной температурах.

В ударно-волновых экспериментах с железом, имеющим ОЦК-структуру, с ростом начальной температуры образцов регистрируется падение динамического предела текучести [8–11] в отличие от металлов со структурой ГЦК [12–15] и ГПУ [16, 17], у которых обнаружено его аномальное возрастание. Аномальное поведение при росте начальной температуры металлов со структурой ГЦК и ГПУ также проявляется в увеличении времени возрастания скорости свободной поверхности в пластической ударной волне, т. е. времени релаксации напряжений или характерной вязкости материала. Кроме того, на вели-

* E-mail: savas@icp.ac.ru

чину динамического предела текучести влияет увеличение плотности дислокаций, связанное, например, с пластической деформацией материала. Так, в работе [18] предварительная пластическая деформация титана ВТ1-0 0.6 % радикально изменила кинетику деформирования и понизила величину динамического предела текучести. В работе [19] показано, что предел текучести алюминия в зависимости от увеличения плотности дислокаций увеличивается на полтора порядка. Эксперименты с медью М1 и аустенитной нержавеющей сталью [20] показали рост динамического предела текучести и откольной прочности с увеличением плотности дислокаций при ударно-волновом нагружении.

Откольная прочность железа и стали при повышенных начальных температурах до 1000 К измерялась в работах [21, 22], где было показано, что с ростом температуры откольная прочность убывает.

С целью изучения влияния предварительной деформации и связанное с ней увеличение плотности дислокаций проведены измерения откольной прочности, напряжений пластического течения в процессе ударного сжатия и при разгрузке из ударно-сжатого состояния Армко-железа при комнатной и повышенной температурах, а также в отожженном состоянии и в состоянии после предварительной деформации сжатия. Данная информация будет полезной для построения детальных физических моделей и определяющих соотношений о поведении материалов при сжатии и разгрузке из ударно-сжатого состояния [23, 24].

2. МАТЕРИАЛ И ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Эксперименты проведены с образцами Армко-железа толщиной 2 ± 0.01 мм, имеющими форму прямоугольных плоскопараллельных пластин размером 13×22 мм². Для снятия деформационного упрочнения заготовки образцы диаметром 100 мм предварительно отжигались в вакууме при температуре 700 °С в течение двух часов. После отжига материал остывал вместе с печью. Кроме того, отжиг проводился для того, чтобы материал имел одну и ту же структуру в экспериментах при комнатной и повышенной до 600 °С температурах. После отжига из одной заготовки с помощью электроэрозионного метода вырезались образцы, две другие до изготовления образцов предварительно подвергались деформационной осадке на 0.6 % и 5.5 %. Образцы шлифовались и

полировались для обеспечения необходимой отражательной способности в экспериментах с лазерным интерферометром. Плотность образцов, измеренная методом гидростатического взвешивания, составила $\rho_0 = 7.880$ г/см³. Измеренная продольная скорость звука c_l для образцов после отжига составила 5883 ± 10 м/с, после деформационной осадки 0.6 % и 5.5 % соответственно 5772 ± 10 м/с и 5675 ± 10 м/с. Эти измерения косвенно указывают на увеличение концентрации деформационных дефектов в объеме деформированного материала. Для обработки экспериментальных данных при комнатной температуре использовалась ударная адиабата Армко-железа в виде $U_S = 4.63 + 1.33u_p$. Эксперименты при повышенной до 600 °С температуре проводились только с недеформированными образцами. При их обработке использовалась ударная адиабата в виде $U_S = 4.314 + 1.33u_p$. Значения объемной скорости звука c_b при температуре 600 °С (первый член ударной адиабаты), плотности $\rho_0 = 7.68$ г/см³ и продольной скорости звука $c_l = 5441$ м/с получены с использованием данных [25].

Эксперименты по ударно-волновому нагружению образцов проводились с использованием пневматической пушки калибром 50 мм. Скорость ударников измерялась электроконтактными датчиками и составила 155 ± 10 м/с, 244 ± 10 м/с, 335 ± 10 м/с и 490 ± 10 м/с. Для предотвращения прогиба в процессе разгона ударники, изготовленные из меди толщиной 0.47 мм и диаметром 48 мм, наклеивались на диск из полиметилметакрилата толщиной 5 мм, располагаемый на торце метаемого алюминиевого цилиндрического снаряда. Предварительный нагрев образцов примерно до 600 °С осуществлялся с помощью резистивных нагревателей, размещенных у тыльной стороны образца. Контроль температуры осуществлялся с помощью двух хромель-алюмелевых термопар, установленных на торцевых поверхностях образца. Скорость нагрева составляла около 1 °С/с, разница показаний термопар не превышала 2–3 °С. Максимальное давление ударного сжатия в железе при комнатной температуре и скорости ударника 490 ± 10 м/с не превышало 9.2 ГПа, что ниже α - ϵ -фазового превращения, наблюдающегося примерно при 13 ГПа [10, 26, 27]. При начальной температуре образца 600 °С и скорости ударника 335 ± 10 м/с максимальное давление сжатия составило 5.9 ГПа, что ниже α - ϵ -фазового превращения, проходящего при температуре 630 °С при давлении 8 ГПа [9].

Информацию о сопротивлении образцов Армко-железа высокоскоростному деформированию и

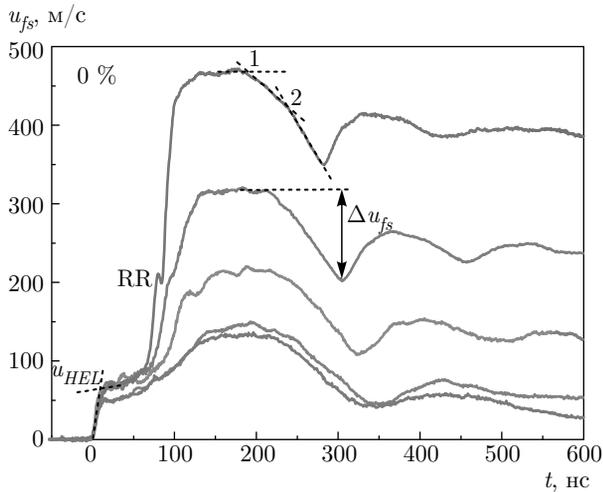


Рис. 1. Профили скорости свободной поверхности образцов Армко-железа толщиной 2 мм после отжига при нагружении медным ударником толщиной 0.47 мм со скоростями (снизу вверх) 155 ± 10 м/с, 244 ± 10 м/с, 335 ± 10 м/с и 490 ± 10 м/с

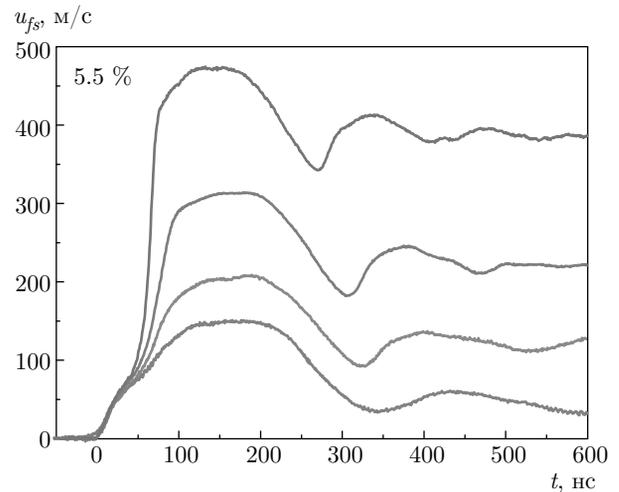


Рис. 3. Профили скорости свободной поверхности образцов Армко-железа толщиной 2 мм после деформационной осадки 5.5% при нагружении медным ударником толщиной 0.47 мм со скоростями (снизу вверх) 155 ± 10 м/с, 244 ± 10 м/с, 335 ± 10 м/с и 490 ± 10 м/с

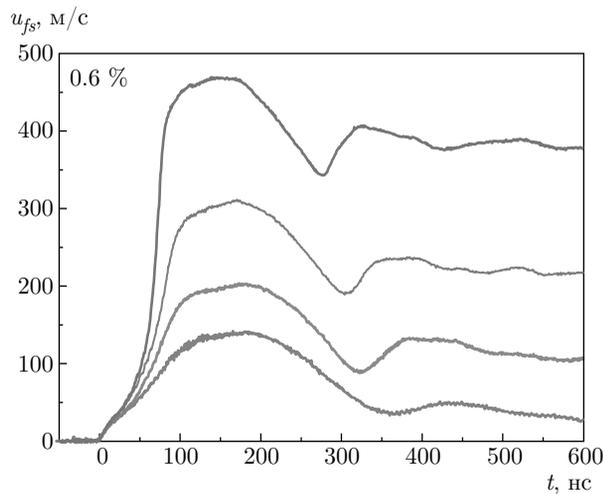


Рис. 2. Профили скорости свободной поверхности образцов Армко-железа толщиной 2 мм после деформационной осадки 0.6% при нагружении медным ударником толщиной 0.47 мм со скоростями (снизу вверх) 155 ± 10 м/с, 244 ± 10 м/с, 335 ± 10 м/с и 490 ± 10 м/с

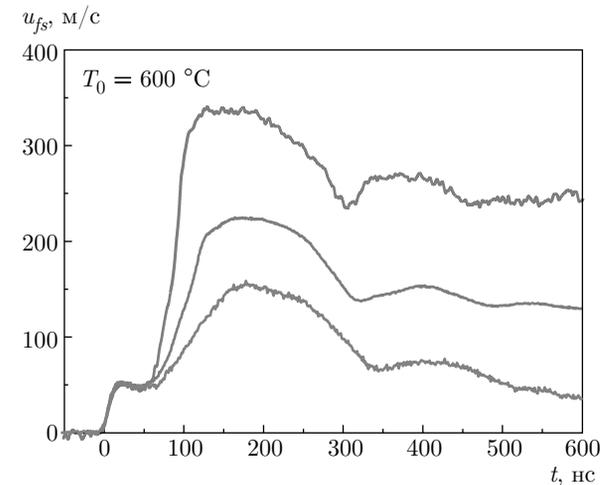


Рис. 4. Профили скорости свободной поверхности образцов Армко-железа толщиной 2 мм при температуре 600°C при нагружении медным ударником толщиной 0.47 мм со скоростями (снизу вверх) 155 ± 10 м/с, 244 ± 10 м/с и 335 ± 10 м/с

разрушению получали из регистрации и анализа эволюции (формоизменения) волны сжатия при ее распространении по образцу. Во всех экспериментах регистрировалась скорость свободной поверхности образца как функция времени $u_{fs}(t)$ в процессе выхода на поверхность волн сжатия. Измерения проводились с использованием лазерного доплеровского интерферометрического измерителя ско-

рости VISAR [28] с временным разрешением примерно 1–1.5 нс.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

На рис. 1–4 представлены профили скорости свободной поверхности образцов Армко-железа после отжига, предварительной деформационной осадки

0.6 % и 5.5 % и при температуре 600 °С. На всех профилях фиксируется выход на поверхность упругого предвестника с амплитудой u_{HEL} и затем пластической волны сжатия. После достижения максимальных значений скорости свободной поверхности регистрируется выход на поверхность волны разрежения и процессы, связанные с откольным разрушением образца. Поскольку соотношение толщины ударника и образца в этих экспериментах составляло около 1/4, затухание ударной волны на этих толщинах образцов не происходит, волна имеет трапециевидную форму с плато при максимальной скорости, а регистрируемое время между выходом на поверхность пластической волны и выходом волны разгрузки от тыльной стороны ударника составляет примерно 100 нс. На рис. 1 видно, что в пластической волне сжатия фиксируется небольшой скачок скорости в виде ступеньки RR, которая является следствием отражения упругого предвестника от свободной поверхности и взаимодействия образовавшейся отраженной упругой волны разгрузки с пластической ударной волной. Такое формирование переотраженной упругой волны наблюдается не у всех материалов и связано с релаксационными свойствами материала в состоянии перед пластической ударной волной, более детальный анализ этого явления можно найти в работе [29]. В экспериментах с деформированными образцами и при начальной температуре образцов 600 °С выход на свободную поверхность переотраженной упругой волны не регистрируется.

Сравнение волновых профилей показывает, что с увеличением предварительной деформационной осадки и повышением начальной температуры форма и амплитуда упругого предвестника (см. рис. 1–4) значительно изменяются. В экспериментах при комнатной температуре с образцами после отжига регистрируется отчетливо выраженная упругая волна сжатия с волновым фронтом 8–10 нс. Амплитуда упругого предвестника составляет $u_{HEL} = 67$ м/с за исключением экспериментов со скоростью удара 155 ± 10 м/с, когда ее величина была несколько ниже — $u_{HEL} = 49$ м/с. В экспериментах с другими исходными состояниями Армко-железа зависимости амплитуды упругого предвестника от давления ударного сжатия не выявлено. В опытах с образцами после деформационной осадки на 0.6 % наблюдается уменьшение амплитуды упругого предвестника до $u_{HEL} = 29$ м/с и значительное увеличение времени нарастания параметров в упругой волне. Деформационная осадка 5.5 % приводит к росту амплитуды упругого пред-

Таблица. Динамический предел упругости и динамический предел текучести Армко-железа в различных состояниях

Состояние материала	σ_{HEL} , ГПа	σ_T , ГПа
Отжиг	1.54	0.88
Отжиг, 600 °С	0.99	0.55
Осадка 0.6 %	0.65	0.35
Осадка 5.5 %	1.17	0.59

вестника в сравнении с образцами, подвергнутыми деформационной осадке 0.6 %, до $u_{HEL} = 52$ м/с. Нагрев образцов до 600 °С уменьшает амплитуду упругого предвестника до 48 м/с.

По измеренной амплитуде упругого предвестника определяется динамический предел упругости материала HEL (Hugoniot elastic limit): $\sigma_{HEL} = 0.5u_{HEL}\rho_0c_l$, который связан при этих условиях нагружения с динамическим пределом текучести соотношением

$$\sigma_T = \frac{3}{2} \sigma_{HEL} \left(1 - \frac{c_b^2}{c_l^2} \right). \quad (1)$$

Рассчитанные таким образом параметры упруго-пластического перехода в Армко-железе представлены в таблице. В таблице представлены средние значения по трем или четырем экспериментам, проведенным при различных давлениях. Наибольшие значения динамического предела текучести у отожженного Армко-железа можно объяснить наименьшим значением плотности дислокаций. Предварительная деформация до 0.6 % увеличивает плотность подвижных дислокаций и приводит к значительному уменьшению регистрируемого динамического предела текучести. Увеличение предварительной деформации образцов до 5.5 % приводит к еще большей плотности дислокаций, когда подвижные дислокации начинают блокировать друг друга, что проявляется в увеличении регистрируемого предела текучести по сравнению с образцами после предварительной деформации 0.6 %.

На профилях скорости свободной поверхности, представленных на рис. 1–4, не наблюдается четкого выделения упругого предвестника конечной амплитуды при разгрузке. Вместо этого регистрируется квазиупругая волна разгрузки, в которой скорость распространения возмущения плавно уменьшается от продольной скорости звука c_l до скорости звука c_b , соответствующей объемной сжимаемости ма-

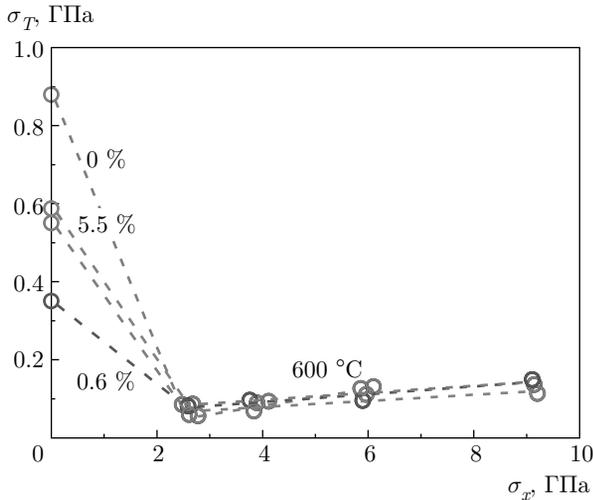


Рис. 5. Результаты расчета предела текучести Армко-железа в упругом предвестнике и в ударно-сжатом состоянии в волне разгрузки после отжига после предварительной деформации 0.6 % и 5.5 % и при повышенной температуре

териала. В работах [4, 5] предложен и реализован упрощенный способ оценки напряжения пластического течения при разгрузке. Данный способ оценки основан на приближении простой волны и включает аппроксимацию квазиупругой части волны прямой линией 1–2, как показано на рис. 1, предположение о постоянстве коэффициента Пуассона и линейное соотношение между скоростью звука в лагранжевых координатах и массовой скоростью. Разность в величинах сдвиговых напряжений, соответствующих значениям массовой скорости на фронте квазиупругой волны разгрузки u_{p1} (точка 1 на рис. 1) и в ее конце u_{p2} (точка 2) в приближении простой волны описывается соотношением [30]

$$\begin{aligned} \tau(u_{p1}) - \tau(u_{p2}) &= \\ &= \frac{3}{4} \rho_0 \int_{u_{p2}}^{u_{p1}} [a^2(u_p) - a_b^2(u_p)] \frac{du_p}{a(u_p)}, \quad (2) \end{aligned}$$

где a — скорость распространения возмущений в квазиупругой волне в координатах Лагранжа (т. е. отнесена к начальной плотности материала ρ_0), a_b — объемная скорость звука.

Соотношение (2) фактически определяет предел текучести ударно-сжатого материала, так как при разгрузке из ударно-сжатого состояния сдвиговое напряжение переходит через нуль и выходит на напряжение пластического течения с обратным знаком. На рис. 5 значение пределов текучести в упругом предвестнике, рассчитанные с помощью соотно-

шения (1), сопоставлены со значениями напряжения пластического течения в волне разгрузки, полученными из анализа ее квазиупругой части. На рисунке видно, что наблюдается резкое уменьшение предела текучести непосредственно за ударной волной для всех исследованных состояний, включая эксперименты при температуре 600 °C. Причиной такого падения предела текучести Армко-железа за ударной волной является пластическая деформация при сжатии в ударной волне. Полученные значения напряжения пластического течения за ударной волной практически не зависят от исходного состояния материала и находятся в диапазоне 50–80 МПа при 2.5 ГПа. Подобное падение предела текучести было зарегистрировано для титанового сплава ВТ1-0 в работе [7]. В данной работе получено десятикратное уменьшение предела текучести ударно-сжатого отожженного и предварительно деформированного до 5.5 % Армко-железа. В экспериментах с предварительной деформацией 0.6 % и начальной температурой 600 °C наблюдалось уменьшение предела текучести в ударно-сжатом состоянии соответственно в 4 и 8 раза. С ростом давления имеет место возрастание предела текучести ударно-сжатого Армко-железа во всех исследованных состояниях. Возрастание предела текучести как отожженных, так и предварительно деформированных образцов и образцов Армко-железа при температуре 600 °C приблизительно одинаково и объясняется как непосредственно действием давления, так и деформационным упрочнением.

По измеренным профилям скорости свободной поверхности, представленных на рис. 1–4, определялись максимальные скорости сжатия в пластических ударных волнах. На рис. 6 показаны результаты оценки скорости сжатия в зависимости от максимального напряжения сжатия σ_x на «плато» за пластической ударной волной для Армко-железа в отожженном и предварительно деформируемом до 0.6 % и 5.5 % состояниях и при повышенной до 600 °C температуре. Скорость сжатия определялась как $\dot{\epsilon}_x = \dot{u}_{fs}/2U_S$, где \dot{u}_{fs} — максимальное ускорение поверхности в пластической ударной волне, U_S — скорость распространения пластической ударной волны. Предполагалось, что пластическая ударная волна стационарна или близка к стационарности. Как видно на рисунке, с ростом давления ударного сжатия в пластической волне для всех исследованных состояний Армко-железа скорость сжатия изменяется подобным образом и может быть описана степенной зависимостью от давления $\dot{\epsilon}_x = A(\sigma_{peak}/\sigma_0)^\beta$ ($\sigma_0 = 1$ ГПа). Для Армко-же-

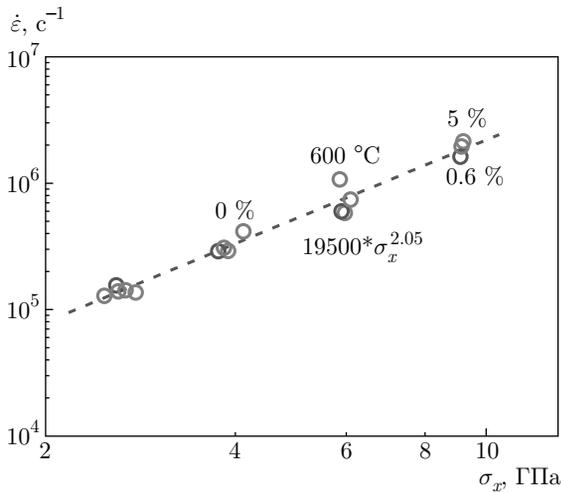


Рис. 6. Зависимость скорости сжатия Армко-железа в пластической ударной волне от конечного напряжения сжатия за волной. Представлены данные для отожженного, предварительно деформированного до 0.6 % и 5.5 % и при начальной температуре 600 °С. Аппроксимационная прямая построена для Армко-железа после отжига

леза после отжига в диапазоне давлений 2–9 ГПа коэффициент $\beta = 2.05$, а $A = 19500$. Для предварительно деформированных состояний и при повышенных температурах коэффициенты β и A изменяются незначительно.

После отражения импульса сжатия от свободной поверхности внутри образца генерируются растягивающие напряжения, в результате чего инициируется его разрушение — откол. Декремент скорости поверхности Δu_{fs} (рис. 1) при ее убывании от максимума до значения перед фронтом откольного импульса пропорционален величине разрушающего напряжения — откольной прочности материала. В линейном (акустическом) приближении откольная прочность материала рассчитывается как

$$\sigma_{sp} = \frac{1}{2} \rho_0 c_b (\Delta u_{fs} + \delta), \quad (3)$$

где δ — поправка на искажение профиля скорости вследствие различия скоростей упругого фронта откольного импульса и скорости пластической части падающей волны разгрузки перед ним [31].

На рис. 7 представлены зависимости откольной прочности Армко-железа от скорости деформирования в различных начальных состояниях. Расчет откольной прочности осуществлялся с помощью соотношения (3). Скорость деформирования в волне разрежения рассчитывалась как $\dot{V}/V_0 = \dot{u}_{fsr}/2c_b$ [3], где \dot{u}_{fsr} — измеренная скорость уменьшения скорости свободной поверхности испытуемого образца

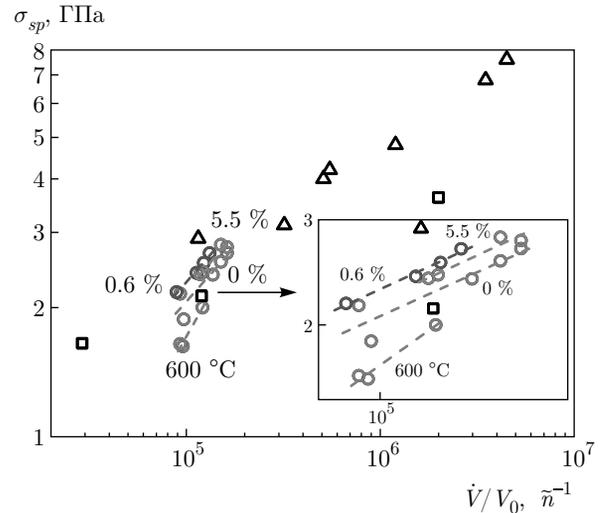


Рис. 7. Зависимость откольной прочности Армко-железа после отжига, после деформационной осадки 0.6 % и 5.5 % и при начальной температуре 600 °С от скорости деформирования в волне разрежения падающего импульса сжатия. На рисунке представлены данные [32] для монокристаллического железа (треугольники) и Армко-железа в состоянии поставки (квадраты)

в разгрузочной части импульса ударного сжатия. На рис. 7 видно, что полученные данные согласуются с ранними измерениями откольной прочности монокристаллов железа и Армко-железа в состоянии поставки при давлениях не превышающих давление фазового превращения α – ϵ [32]. Представленные значения откольной прочности монокристаллов железа лежат выше, чем измеренные для поликристаллов в данной работе, что объясняется практически бездефектной структурой монокристалла. В работе [32] варьирование скорости деформирования проводилось изменением толщины образца и ударника, но при одном давлении. В данной работе толщина образцов и ударников не менялась, изменялось только максимальное давление. С ростом максимального давления увеличивалась скорость деформирования в волне разгрузки. Судя по наклону зависимостей откольной прочности от скорости деформирования отожженного и деформированного Армко-железа в сравнении с Армко-железом в состоянии поставки [32] и монокристаллическим железом [32], в скорость роста откольной прочности от скорости деформирования вносит существенный вклад увеличение давления. Подобные измерения откольной прочности от давления проводились для титанового сплава [33] и стали [34], где были выявлены более крутые зависимости откольной прочности от скорости деформирования от давления в

сравнении с зависимостью откольной прочности от скорости деформирования при одном давлении.

На вставке рис. 7 видно, что наименьшие значения откольной прочности реализуются у образцов Армко-железа после отжига. Максимальные значения откольной прочности среди исследованных состояний регистрируются у образцов после предварительной деформации 0.6 %. Рост значений откольной прочности в сравнении с отожженным материалом при тех же скоростях деформирования составил примерно 10 %. Значения откольной прочности после предварительного деформирования 5.5 % расположены между отожженным материалом и после предварительной деформации 0.6 %. Поскольку механизмом откольного разрушения пластического материала является зарождение и рост микротрещин или пор [35], то возможно, что при повышенной плотности дислокаций, наведенных в результате предварительной деформации, они начинают блокировать друг друга, тем самым образование пор в плоскости откола инициируется при более высоких растягивающих напряжениях.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены измерения эволюции упруго-пластических волн ударного сжатия и разгрузки Армко-железа в отожженном и предварительно деформированном до 0.6 % и 5.5 % состояниях в диапазоне давлений 2–9 ГПа. Показано, что предварительная пластическая деформация 0.6 % значительно понижает величину динамического предела текучести и в то же время незначительно увеличивает откольную прочность Армко-железа. При росте предварительной деформации до 5.5 % образцы демонстрируют промежуточные значения динамического предела текучести и откольной прочности между отожженным состоянием и после предварительной деформации 0.6 %. Изменение начальной плотности дислокаций практически не повлияло на скорость сжатия в пластической ударной волне и на предел текучести ударно-сжатого материала. При разгрузке от 2.5 ГПа как в отожженном состоянии, так и после предварительной пластической деформации 0.6 % и 5.5 % наблюдалось резкое падение динамического предела текучести до значений примерно 70 МПа. При дальнейшем росте давления до 9 ГПа регистрировалось незначительное увеличение динамического предела текучести ударно-сжатого Армко-железа, которое можно связать с деформационным упрочне-

нием и действием давления. Увеличение начальной температуры образцов Армко-железа до температуры 600 °С ожидаемо привело к уменьшению его динамического предела текучести и откольной прочности. Динамический предел текучести ударно-сжатого Армко-железа при температуре 600 °С с ростом давления меняется так же, как и в отожженном материале при комнатной температуре. Не выявлено влияние амплитуды ударного сжатия на динамический предел упругости и текучести во всех исследованных состояниях Армко-железа, за исключением экспериментов с отожженным материалом при наименьшем давлении. Регистрируется незначительный рост откольной прочности с увеличением давления во всех исследованных начальных состояниях Армко-железа. Наибольшие значения откольной прочности получены у образцов после предварительной деформации 0.6 %.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00416А), а также в рамках Госзадания, номер госрегистрации ААА-А19-119071190040-5. Эксперименты проведены с использованием оборудования Московского регионального взрывного центра коллективного пользования Российской академии наук.

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
2. Г. И. Канель, Е. Б. Зарецкий, С. В. Разоренов и др., *УФН* **187**, 525 (2017).
3. Г. И. Канель, *Ударные волны в физике твердого тела*, Физматлит, Москва (2018).
4. Г. И. Канель, А. С. Савиных, *Доклады РАН. Физика, технические науки* **490**, 29 (2020).
5. G. I. Kanel, A. S. Savinykh, G. V. Garkushin et al., *J. Appl. Phys.* **127**, 035901 (2020).
6. G. I. Kanel, A. S. Savinykh, G. V. Garkushin et al., *J. Appl. Phys.* **128**, 115901 (2020).
7. Г. И. Канель, А. С. Савиных, Г. В. Гаркушин и др., *ЖЭТФ* **159**, 524 (2021).
8. B. Gurrutxaga-Lerma, M. A. Shehadeh, D. S. Balint et al., *Int. J. Plasticity* **96**, 135 (2017).

9. E. B. Zaretsky and G. I. Kanel, *J. Appl. Phys.* **117**, 195901 (2015).
10. E. B. Zaretsky, *J. Appl. Phys.* **106**, 023510 (2009).
11. P. L. Hereil, *J. Phys. Colloques* **49**, C3-77 (1988).
12. E. B. Zaretsky and G. I. Kanel, *J. Appl. Phys.* **114**, 083511 (2013).
13. E. B. Zaretsky and G. I. Kanel, *J. Appl. Phys.* **110**, 073502 (2011).
14. H. Shu, S. Fu, X. Huang et al., *J. Appl. Phys.* **116**, 033506 (2014).
15. B. Zuanetti, S. D. McGrane, C. A. Bolme et al., *J. Appl. Phys.* **123**, 195104 (2018).
16. G. I. Kanel, G. V. Garkushin, A. S. Savinykh et al., *J. Appl. Phys.* **116**, 143504 (2014).
17. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, and G. V. Garkushin, *J. Appl. Phys.* **119**, 185903 (2016).
18. Г. И. Канель, Г. В. Гаркушин, А. С. Савиных и др., *ЖЭТФ* **154**, 392 (2018).
19. М. А. Мейерс, Л. Е. Мурр, *Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов*, Металлургия, Москва (1984).
20. С. В. Разоренов, Г. В. Гаркушин, Е. Г. Астафурова и др., *Физическая мезомеханика* **20**, 43 (2017).
21. T. de Resseguier, E. Lescoute, and D. Loison, *Phys. Rev. B* **86**, 214102 (2012).
22. Zhuowei Gu, Xiaogang Jin, and Guoqing Gao, *J. Mater. Sci.* **35**, 2347 (2000).
23. A. E. Mayer, K. V. Khishchenko, P. R. Levashov et al., *J. Appl. Phys.* **113**, 193508 (2013).
24. Songlin Yao, Xiaoyang Pei, Zhanli Liu et al., *Mech. Mater.* **140**, 103211 (2020).
25. M. W. Guinnan and D. J. Steinberg, *J. Phys. Chem. Sol.* **35**, 1501 (1974).
26. D. Bancroft, E. L. Peterson, and S. Minshall, *J. Appl. Phys.* **27**, 291 (1956).
27. L. M. Barker and R. E. Hollenbach, *J. Appl. Phys.* **45**, 4872 (1974).
28. L. M. Barker and R. E. Hollenbach, *J. Appl. Phys.* **43**, 4669 (1972).
29. Г. И. Канель, А. С. Савиных, Г. В. Гаркушин и др., *Доклады РАН. Физика, технические науки* **496**, 5 (2021).
30. J. L. Brown, C. S. Alexander, J. R. Asay et al., *J. Appl. Phys.* **114**, 223518 (2013).
31. Г. И. Канель, *ПМТФ* **42**, 194 (2001).
32. S. V. Razorenov, G. I. Kanel, A. S. Savinykh et al., in *Shock Compression of Condensed Matter — 2005*, ed. by M. D. Furnish, M. Elert, T. P. Russell et al., AIP CP 845, 650 (2006).
33. R. L. Whelchel, D. S. Mehoke, K. A. Iyer et al., *J. Appl. Phys.* **119**, 115901 (2016).
34. C. Li, B. Li, J. Y. Huang et al., *Mater. Sci. Eng. A* **660**, 139 (2016).
35. M. A. Meyers and C. T. Aimone, *Prog. Mater. Sci.* **28**, 1 (1983).

АНИЗОТРОПНАЯ НАМАГНИЧЕННОСТЬ ПЛЕНКИ NbN

Д. М. Гохфельд^{a,b}, Н. Е. Савицкая^c, С. И. Попков^d,
Н. Д. Кузьмичев^e, М. А. Васютин^e, Д. А. Балаев^{a,b}*

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

^b *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

^c *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

^d *Красноярский электровагоноремонтный завод
660021, Красноярск, Россия*

^e *Мордовский государственный университет
430000, Саранск, Россия*

Поступила в редакцию 7 декабря 2021 г.,
после переработки 1 февраля 2022 г.
Принята к публикации 1 февраля 2022 г.

Проведено исследование структурных и магнитных свойств пленки нитрида ниобия (NbN), изготовленной методом реактивного распыления на кварцевую подложку. Методом сканирующей электронной микроскопии показано, что пленка имеет столбчатую структуру с диаметром кристаллитных столбцов около 50 нм. Измерены петли намагниченности пленки для ориентации поля параллельно и перпендикулярно ее поверхности. На основе полученных данных сделана оценка величин плотности критического тока пленки для обоих случаев. Для случая поля, параллельного поверхности пленки, оценка дает величину $6.5 \cdot 10^4$ А/см² при температуре жидкого гелия. Для случая поля, перпендикулярного поверхности пленки, плотность критического тока близка к величине плотности тока распаривания 10^7 А/см². Анализ полученных результатов с применением различных моделей пиннинга магнитных вихрей в сверхпроводниках показывает, что в первом случае пиннинг происходит на границах столбцов в объеме образца, а во втором случае он обусловлен влиянием поверхностного барьера.

DOI: 10.31857/S0044451022060062
EDN: DULCVQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Благодаря своим физическим свойствам, таким как относительно высокая критическая температура и значительная величина верхнего критического поля, а также высокая устойчивость к химическим и радиационным воздействиям, нитрид ниобия (NbN) является важным представителем технологических сверхпроводников, применяемых в устройствах микроэлектроники и измерительных датчи-

ках. В настоящее время наиболее развиты технологии создания пленок NbN. Магнитные и транспортные свойства получаемых пленок определяются их морфологией [1]. В частности, неоднократно показано, что именно специфика строения пленок отвечает за анизотропию величин критического тока и верхнего критического поля, причем величина анизотропии различается для пленок, полученных различными методами [2–4]. Благодаря этой практически важной особенности, свойства пленок NbN можно менять в широких пределах, управляя структурой пленок при синтезе, например, при помощи выбора материала или регулировки температуры подложки [5–7].

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

Несмотря на то, что пленки NbN используются давно и их свойства подробно исследованы, до сих пор нет однозначного ответа на вопрос, как именно структура пленки влияет на механизмы пиннинга магнитного потока, которые отвечают за возникновение анизотропии критических величин в ней. Для изучения данного вопроса в настоящей работе были проведены измерения петель гистерезиса намагниченности пленок NbN для случаев, когда внешнее магнитное поле \mathbf{H} приложено перпендикулярно ($\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$) и параллельно ($\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$) плоскости пленки (\mathbf{e}_x и \mathbf{e}_z — орты осей x и z). Проведенный анализ позволил получить оценки значений критического тока для указанных случаев и установить физические причины наблюдаемой анизотропии критического тока.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Пленка NbN получена методом реактивного катодного распыления на кварцевую подложку [8, 9]. Толщина подложки 1.58 мм, толщина напыленной пленки около 687 нм (по данным сканирующей электронной микроскопии).

Изображения сканирующей электронной микроскопии получены на микроскопе Hitachi TM 3000. Магнитные измерения проводились на вибрационном магнетометре Quantum Design PPMS-9T для двух ориентаций пленки относительно внешнего магнитного поля (см. вставку на рис. 1): 1) $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$, поле \mathbf{H} направлено перпендикулярно плоскости пленки; 2) $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$, поле \mathbf{H} направлено параллель-

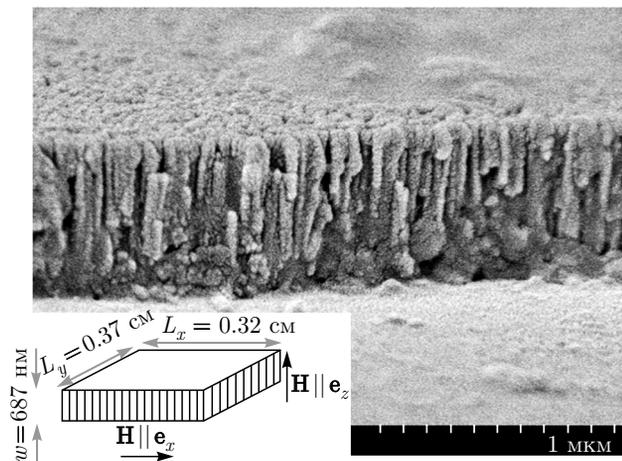


Рис. 1. Типичная микрофотография пленки NbN, полученная методом сканирующей электронной микроскопии. На вставке показана схема измерений намагниченности

но плоскости пленки. Совпадение результатов разных измерений служило критерием точности ориентации осей образца относительно внешнего поля. Петли гистерезиса намагниченности образцов с разной площадью совпадают для одинаковых ориентаций. В работе приведены результаты, полученные на образце площадью $0.32 \times 0.37 \text{ см}^2$.

Для того чтобы убрать магнитный вклад от подложки, из петель гистерезиса намагниченности пленки, измеренных при $T = 4.2 \text{ К}$ и $T = 10 \text{ К}$, вычиталась зависимость намагниченности этой же пленки, измеренная для соответствующей ориентации $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ или $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ при $T = 20 \text{ К}$, т. е. заведомо выше критической температуры T_c .

Температурные зависимости магнитного момента измерялись в режиме ZFC (образец охлаждался без поля, затем включалось внешнее поле 0.01 Тл и проводились измерения намагниченности) и FC (образец охлаждался в поле 0.01 Тл, затем проводились измерения намагниченности).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

На рис. 1 показана микрофотография пленки NbN. Определенная из микрофотографий толщина пленки равна $687 \pm 22 \text{ нм}$. Микрофотографии показывают столбчатую структуру пленки. Столбчатые кристаллиты ориентированы перпендикулярно плоскости пленки, их диаметр около 50 нм.

На рис. 2 показаны температурные зависимости магнитного момента пленки, измеренные в поле 0.01 Тл. В режиме ZFC магнитный момент m увеличивается от $-4.2 \cdot 10^{-7} \text{ А} \cdot \text{м}^2$ при 4.2 К до $-0.06 \cdot 10^{-7} \text{ А} \cdot \text{м}^2$ при 15.2 К для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$

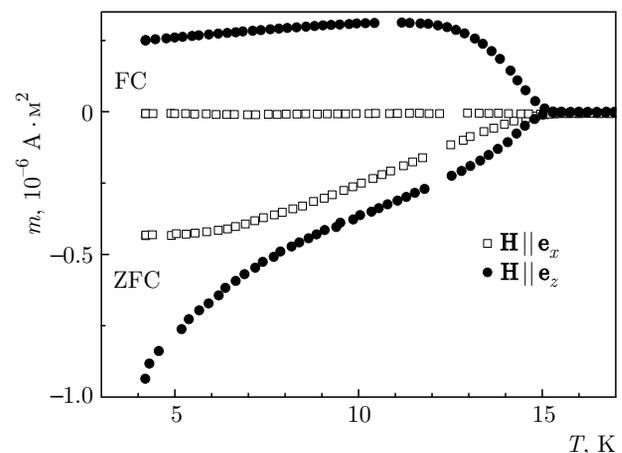


Рис. 2. Температурные зависимости магнитного момента

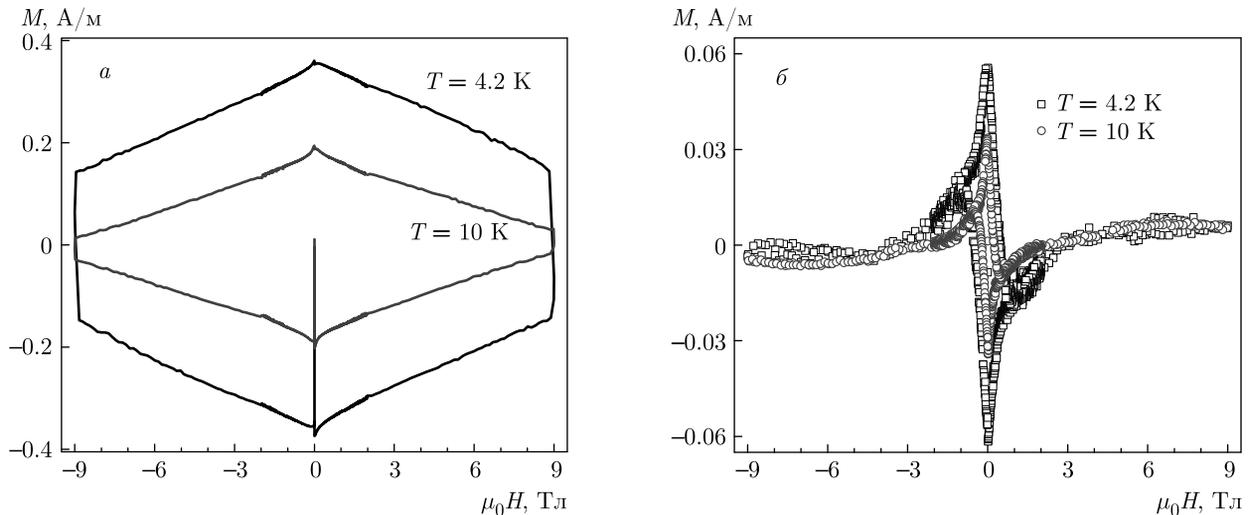


Рис. 3. (В цвете онлайн) Магнитные петли гистерезиса для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ (а) и $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ (б)

и от $-9.5 \cdot 10^{-7} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ до $-0.03 \cdot 10^{-7} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$. Температура 15.2 К, при которой намагниченность перестает увеличиваться, соответствует температуре сверхпроводящего перехода T_c для NbN. В режиме FC намагниченность отрицательная ($m = -0.1 \cdot 10^{-7} \text{ A} \cdot \text{m}^2$) для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ и положительная (до $3 \cdot 10^{-7} \text{ A} \cdot \text{m}^2$) для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$.

Магнитные петли гистерезиса при 4.2 и 10 К приведены на рис. 3. Для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ петли симметричны относительно оси $M = 0$. Для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ наблюдается отчетливая асимметрия петель относительно оси $M = 0$.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Зависимости магнитного момента от температуры в ZFC-режиме свидетельствуют о проникновении магнитного потока в пленку при увеличении температуры (см. рис. 2). Различия в значениях магнитного момента связаны с тем, что размагничивающий фактор пленки для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ больше, чем для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$. Значение магнитного поля у краев пленки из-за размагничивающего фактора значительно превышает величину приложенного поля 0.01 Тл. Положительная намагниченность в режиме FC для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ наблюдалась ранее для такой же геометрии измерений на пленках из Nb, NbN и высокотемпературных сверхпроводников [10]. Такой парамагнитный эффект Мейснера может быть вызван сжатием магнитного потока на неоднородностях [10–12].

Мы ожидали, что гранулярная структура пленки приведет к заметному равновесному вкладу в поле-

вую зависимость намагниченности, как это происходит для гранулярных высокотемпературных сверхпроводников [13, 14]. Это привело бы, во-первых, к заметной асимметрии петли относительно оси $M = 0$ [15], а также к смещению максимума петли гистерезиса из $H = 0$ в область $H > 0$ для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ [16]. Однако экспериментальные петли гистерезиса намагниченности для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ (рис. 3а) имеют максимум при $H = 0$ и незначительную асимметрию относительно оси $M = 0$. Это говорит о том, что токи, определяющие намагниченность, циркулируют в пленке между столбчатыми кристаллитами, а не внутри этих кристаллитов. Масштаб циркуляции токов совпадает с размером пленки в плоскости xy [15]. Используем формулу Бина из модели критического состояния [17] для оценки критической плотности тока пластины,

$$j_c = \frac{2\Delta M}{L_x(1 - L_x/3L_y)},$$

где L_x и L_y — размеры пленки по осям x и y (см. вставку на рис. 1). Из петли гистерезиса для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ при $T = 4.2 \text{ K}$ получаем значения $j_c = 6.5 \cdot 10^4 \text{ A/cm}^2$ в нулевом поле и $j_c = 4.4 \cdot 10^4 \text{ A/cm}^2$ в поле 5 Тл, а при $T = 10 \text{ K}$ — значения $j_c = 3.4 \cdot 10^4 \text{ A/cm}^2$ в нулевом поле и $j_c = 1.6 \cdot 10^4 \text{ A/cm}^2$ в поле 5 Тл. Транспортные измерения, проведенные на аналогичной пленке NbN при $T = 13.6 \text{ K}$ [18], дают достаточно близкую к полученным нами оценкам величину $j_c \approx 1.7 \cdot 10^4 \text{ A/cm}^2$ в поле 5 Тл.

Значение критического тока образца определяется его способностью удерживать магнитный поток.

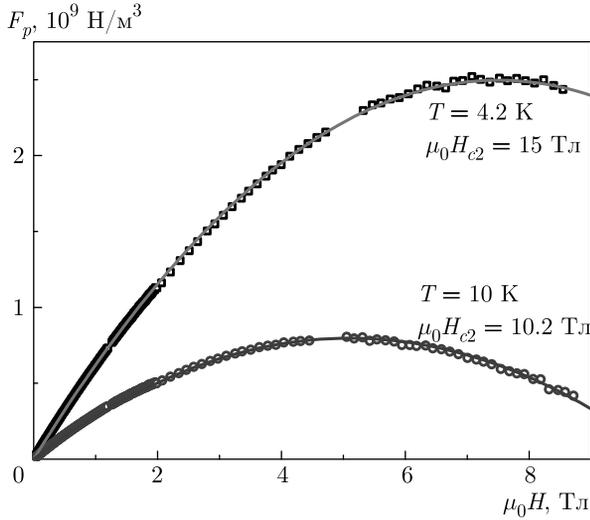


Рис. 4. Полевые зависимости силы пиннинга для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$

Таким образом, из полученных петель намагниченности мы можем также получить полевую зависимость силы пиннинга для нашей пленки. Плотность силы пиннинга F_p определяется, как $F_p = \mu_0 j_c H$. Полученные значения F_p при температурах 4.2 и 10 К для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ приведены на рис. 4.

Для того чтобы определить, какие именно механизмы отвечают за пиннинг магнитных вихрей в рассмотренном случае, мы используем скейлинговое соотношение Дью-Хьюджа [19]:

$$f_p(h) = \frac{h^p(1-h)^q}{h_0^p(1-h_0)^q},$$

где

$$f_p = \frac{F_p(H, T)}{F_{max}(T)}, \quad h = \frac{H}{H_{c2}(T)}, \quad h_0 = \frac{p}{p+q},$$

F_{max} — максимум зависимости $F_p(H, T)$, H_{c2} — второе критическое поле. На рис. 4 показано, что полученные из петель гистерезиса намагниченности зависимости $F_p(H)$ успешно описываются скейлинговой формулой (сплошные линии) при $H_{c2} = 1.2 \cdot 10^7$ А/м для $T = 4.2$ К, $H_{c2} = 8.1 \cdot 10^6$ А/м для $T = 10$ К и с коэффициентами $p = 1$, $q = 1$. Используемые значения скейлинговых коэффициентов характерны для пиннинга на объемных дефектах с пространственным изменением длины свободного пробега нормальных электронов [19, 20]. Такой тип пиннинга называется δl -пиннингом [21]; также используется обозначение ΔK -пиннинг [20]. Мы полагаем, что в качестве δl -центров пиннинга выступают границы между столбцами-кристаллитами NbN в пленке.

Далее рассмотрим магнитный гистерезис пленки для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ (см. рис. 3б). Ширина намагниченности ΔM петли гистерезиса для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ уменьшается с ростом внешнего поля быстрее, чем для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$. Для данной ориентации достигнуто поле необратимости H_{irr} , т. е. значение внешнего поля, при котором ширина намагниченности ΔM становится равной 0 или сравнимой с уровнем шума, $\mu_0 H_{irr} = 0.9 \pm 0.1$ Тл при 4.2 К и $\mu_0 H_{irr} = 0.51 \pm 0.04$ Тл при 10 К. Отсутствие заметного вклада от перпендикулярной компоненты намагниченности при $H > H_{irr}$ является подтверждением достаточно точной ориентации пленки относительно внешнего поля.

Асимметрия петель гистерезиса для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ и малая величина поля необратимости $H_{irr} \ll H_{c2}$ свидетельствует о заметном равновесном вкладе в намагниченность [13]. Такой равновесный вклад связан с приповерхностными областями пленки, в которых циркулирует мейснеровский ток. Из-за малой толщины пленки их влияние оказывается значительным.

Используя для оценки плотности критического тока при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ формулу Бина из модели критического состояния для соответствующей геометрии, при $T = 4.2$ К получим

$$j_c = \frac{2\Delta M}{w(1-w/3L_y)} = 4.0 \cdot 10^7 \frac{\text{А}}{\text{см}^2},$$

где w — толщина пленки (см. вставку на рис. 1). Это значение критического тока в 513 раз больше, чем значение j_c для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$. Сравним полученное значение j_c с плотностью тока распаривания j_d для исследуемого материала. Плотность тока распаривания определяется выражением [22, 23]

$$j_d = \frac{\Phi_0}{3\sqrt{3}\pi\mu_0\lambda^2\xi},$$

где Φ_0 — квант магнитного потока. Для пленок NbN, полученных реактивным распылением, глубина проникновения $\lambda \sim 300\text{--}600$ нм [24], длина когерентности $\xi \approx 5$ нм [25, 26], что дает

$$j_d = 5.6 \cdot 10^6\text{--}2.2 \cdot 10^7 \text{ А/см}^2.$$

Ток распаривания является верхним пределом для тока сверхпроводников, выше значения которого происходит разрушение куперовских пар. Таким образом, оцененное значение j_c для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ превышает плотность тока распаривания NbN. Этот парадоксальный результат говорит о том, что в данном случае некорректно использование формулы Бина и необходим иной подход.

Особенности критического состояния в сверхпроводящих пленках, толщина которых сравнима с лондоновской глубиной проникновения, в случае, когда внешнее поле направлено вдоль поверхности пленки, были рассмотрены в работе [27]. Предположение, положенное в основу расчетов [27], состоит в том, что в рассматриваемом случае основную роль в пиннинге вихрей играет поверхностный барьер. В такой ситуации распределение вихрей внутри пленки определяется из условия равновесия действующих на них сил: силы притяжения «образца» вихря к границе образца и действия мейснеровских токов, способствующих проталкиванию вихря в объем образца. В результате энергетически выгодным становится выстраивание вихрей в цепочки, параллельные поверхности образца. Количество вихревых цепочек, находящихся в равновесии в образце, определяется величинами внешнего магнитного поля и транспортного тока, а также физическими свойствами образца, такими как лондоновская глубина проникновения λ и длина когерентности ξ , и его геометрическими характеристиками L_x, L_y, w . Исходя из этих предположений, в работе [27] показано, что критическая плотность тока в малых магнитных полях близка к величине тока распаривания, что соответствует экспериментальным наблюдениям [28, 29].

Проведем оценку плотности критического тока нашей пленки для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$, основываясь на подходе работы [27]. Значение остаточной намагниченности M_{rem} , определенное из петли гистерезиса при 4.2 К, равно $5.6 \cdot 10^4$ А/м. Это значение соответствует захваченному полю $B = 0.07$ Тл и захваченному потоку $\Phi = 1.5 \cdot 10^{-10}$ Вб. Отсюда оцениваем число захваченных в образце вихрей $N = \Phi/\Phi_0 \approx 7.5 \cdot 10^4$ квантов. Допустим, что вихри выстраиваются в цепочку вдоль образца. Тогда расстояние между соседними вихрями можно оценить как $\Delta l_y = L_y/N \approx 49$ нм. Заметим, что это расстояние соответствует диаметру столбцов, т.е. мы получаем картину, когда несверхпроводящие сердцевинки вихрей располагаются на границах между столбцами.

Величину максимального протекающего тока можно найти из условия потери равновесия образовавшейся цепочки вихрей (формула (19) работы [27]):

$$j_t = \frac{w}{2\mu_0\lambda^2} \left(\mu_0 H - \frac{\Phi_0}{\Delta l_y w} \right) \left(\frac{2\Delta l_z}{w} - 1 \right),$$

где j_t — плотность протекающего тока, Δl_z — расстояние цепочки вихрей от границы пленки в направлении оси z . Приняв, что внешнее магнитное поле уменьшено до нуля, а выведенная из равнове-

сия цепочка вихрей сдвигается к границе образца, получаем соответствующую плотность критического тока

$$j_c \approx \frac{\Phi_0}{2\mu_0\lambda^2\Delta l_y} = \frac{1.5\sqrt{3}\pi\xi}{\Delta l_y} j_d.$$

Для рассматриваемой пленки NbN оцениваем $j_c \approx 0.83j_d \approx 4.7 \cdot 10^6 - 1.9 \cdot 10^7$ А/см². Эта оценка является верхней границей плотности критического тока для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$.

Однако для пленки с $w \gg \Delta l_y$ одна цепочка вихрей неустойчива [30, 31]. Рассмотрим ситуацию, когда в рассматриваемой пленке при уменьшении внешнего поля до нуля вихри выстраиваются в две цепочки. Расстояние между вихрями в цепочке в этом случае

$$\Delta l_{y2} = \frac{L_y}{N/2} \approx 98 \text{ нм.}$$

Критический ток для такой конфигурации можно записать в виде

$$j_c = \frac{Bw}{2\mu_0\lambda^2} \left(1 - \frac{2\Delta l_z}{w} \right)^2$$

(формулы (37) и (41) в [27]), где Δl_z — расстояние между цепочками вихрей в направлении оси z . Приравняем поле B к захваченному полю,

$$B = \frac{2L_y}{\Delta l_{y2}} \frac{\Phi_0}{wL_y} = \frac{2\Phi_0}{w\Delta l_{y2}},$$

и получим

$$j_c = \frac{\Phi_0}{\mu_0\lambda^2\Delta l_{y2}} \left(1 - \frac{2\Delta l_z}{w} \right)^2 = \frac{3\sqrt{3}\pi\xi}{\Delta l_{y2}} \left(1 - \frac{2\Delta l_z}{w} \right)^2 j_d.$$

Для равновесия двух цепочек вихрей требуется $\Delta l_z \approx 0.33w$ (формула (44) в [27]), следовательно для пленки с двумя цепочками имеем

$$j_c \approx \frac{3\pi\xi}{\Delta l_{y2}} j_d.$$

Для рассматриваемого образца оцениваем

$$j_c \approx 0.48j_d \approx 2.7 \cdot 10^6 - 1.1 \cdot 10^7 \text{ А/см}^2.$$

Существование трех цепочек вихрей в исследуемой пленке при уменьшении внешнего поля до нуля маловероятно, так как в этом случае $\Delta l_{y3} \approx \Delta l_z$.

Таким образом, значительное различие критических значений плотности тока для случаев $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ и $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ объясняется, в первую очередь, различными механизмами пиннинга магнитного потока для

разных ориентаций поля. Кроме того, можно предположить, что свой вклад вносит и анизотропия, связанная с ориентацией столбчатых кристаллитов. Для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ сердцевин вихрей, по всей видимости, располагаются в границах между столбцами, а вихревые линии параллельны столбцам. Для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ сердцевин вихрей также располагаются в границах между столбцами, но вихревые линии вынуждены огибать множество столбцов. Такая конфигурация вихревых линий также приводит к усилению пиннинга и, соответственно, к увеличению плотности критического тока для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ по сравнению со случаем, когда $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование намагниченности пленки NbN для ориентации внешнего поля вдоль и перпендикулярно плоскости пленки. В слабых полях, сравнимых с первым критическим полем H_{c1} пленки NbN, намагниченность определяется размагничивающим фактором образца. Для гистерезисных петель намагниченности, измеренных до $H \gg H_{c1}$, анизотропия намагниченности вызвана не только геометрией пленки, но и разными механизмами пиннинга магнитного потока.

Для $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_z$ критическое значение плотности тока, полученное из данных по намагниченности на основе модели критического состояния по формуле Бина, совпадает с результатами измерений данной величины в экспериментах с транспортным током [18] и дает величину до $6.5 \cdot 10^4$ А/см². Это говорит о том, что в данном случае пиннинг магнитного потока происходит на дефектах в объеме образца, по-видимому, на межгранульных границах. Для случая $\mathbf{H} \parallel \mathbf{e}_x$ такая оценка не состоятельна, но критическая плотность тока адекватно оценивается в предположении, что пиннинг магнитного потока обусловлен поверхностным барьером. Тогда полученная оценка для критической плотности тока дает величину 10^7 А/см², близкую к току распаривания для NbN, что также согласуется с экспериментальными данными для тонких пленок [28, 29].

Благодарности. Мы благодарны И. В. Немцеву за измерения на сканирующем электронном микроскопе, С. А. Скоробогатову за помощь в проведении магнитных измерений (сканирующая электронная микроскопия и магнитные измерения выполнялись в Красноярском региональном центре коллективного пользования ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Hazra, N. Tsavdaris, S. Jebari, A. Grimm, F. Blanchet, F. Mercier, E. Blanquet, C. Chapelier, and M. Hofheinz, *Supercond. Sci. Technol.* **29**, 105011 (2016).
2. Y. Saito and T. Anayama, *J. Appl. Phys.* **44**, 5111 (1973).
3. J. R. Gavaler, A. T. Santhanam, A. I. Bragmski, M. Ashkin, and M. A. Janocko, *IEEE Trans. Magn.* **17**, 573 (1981).
4. D. Rudman, J. Juang, R. van Dover, S. Nakahara, S. Capone, and J. Talvacchio, *IEEE Trans. Magn.* **87**, 831 (1987).
5. Н. К. Кунду, К. Р. Амин, J. Jesudasan, P. Raychaudhuri, S. Mukerjee, and A. Bid, *Phys. Rev. B* **100**, 174501 (2019).
6. Б. А. Гурович, Б. В. Гончаров, К. Е. Приходько, Л. В. Кутузов, Л. В. Столяров, Е. М. Малиева, *ФТТ* **63**, 1238 (2021).
7. N. V. Porokhov, A. P. Sirotina, E. A. Pershina, M. V. Shibalov, G. D. Diudbin, A. M. Mumlyakov, E. R. Timofeeva, I. V. Trofimov, A. M. Tagachenkov, Y. V. Anufriev, E. V. Zenova, and M. A. Tarkhov, *Supercond. Sci. Technol.* **21**, 115016 (2021).
8. Н. Д. Кузьмичев, Г. П. Мотулевич, *ЖЭТФ* **84**, 2316 (1983).
9. Д. Р. Джураев, Г. П. Мотулевич, *ФТТ* **27**, 2640 (1985).
10. M. S. Li, *Phys. Rep.* **376**, 133 (2003).
11. W. A. Ortiz, P. N. Lisboa-Filho, W. A. C. Passos, and F. M. Araújo-Moreira, *Physica C* **361**, 267 (2001).
12. G. F. Zharkov, *Phys. Rev. B* **63**, 214502 (2001).
13. Д. М. Гохфельд, *ФТТ* **56**, 2298 (2014).
14. Д. М. Гохфельд, Д. А. Балаев, *ФТТ* **62**, 1017 (2020).
15. Д. М. Гохфельд, *Письма в ЖТФ* **45**, 3 (2019).
16. D. V. Shantsev, M. R. Koblishka, Y. M. Galperin, T. H. Johansen, L. Pust, and M. Jirsa, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2947 (1999).
17. C. P. Bean, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 31 (1964).
18. М. А. Васютин, Н. Д. Кузьмичев, Д. А. Шилкин, *ФММ* **121**, 1045 (2020).
19. D. Dew-Hughes, *Phil. Mag.* **30**, 293 (1974).

20. D. Dew-Hughes, *Low Temp. Phys.* **27**, 713 (2001).
21. R. Griessen, W. Wen Hai-hu, A. J. J. van Dalen, B. Dam, J. Rector, H. G. Schnack, S. Libbrecht, E. Osquiguil, and Y. Bruynseraede, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1910 (1994).
22. В. Л. Гинзбург, *ДАН СССР* **118**, 464 (1958).
23. J. Bardeen, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 667 (1962).
24. S. Kubo, M. Asahi, M. Hikita, and M. Igarashi, *Appl. Phys. Lett.* **44**, 258 (1998).
25. S. P. Chockalingam, M. Chand, J. Jesudasan, V. Tripathi, and P. Raychaudhuri, *Phys. Rev. B* **77**, 214503 (2008).
26. М. А. Васютин, Н. Д. Кузьмичев, Д. А. Шилкин, *ФТТ* **58**, 231 (2016).
27. Y. Mawatari and K. Yamafuji, *Physica C* **228**, 336 (1994).
28. J. M. Murduck, D. W. Capone, I. K. Schuller, S. Foner, and J. B. Ketterson, *Appl. Phys. Lett.* **52**, 504 (1998).
29. G. Stejic, A. Gurevich, E. Kadyrov, D. Christen, R. Joynt, and D. C. Larbalestier, *Phys. Rev. B* **49**, 1274 (1994).
30. J. Guimpel, L. Civale, F. De La Cruz, J. M. Murduck, and I. K. Schuller, *Phys. Rev. B* **38**, 2342 (1988).
31. S. H. Brongersma, E. Verweij, N. J. Koeman, D. G. De Groot, R. Griessen, and B. I. Ivlev, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2319 (1993).

ФРУСТРАЦИИ В РАЗБАВЛЕННОМ ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ

С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, В. С. Тарасов*

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
690014, Владивосток, Россия

Поступила в редакцию 24 января 2022 г.,
после переработки 24 января 2022 г.
Принята к публикации 28 февраля 2022 г.

Рассмотрено нахождение энтропии изинговского ферромагнетика с немагнитными примесями, случайно расположенными по узлам или связям решетки. Рассмотрен изинговский магнетик на решетке Бете. На такой решетке не различаются ситуации случайного немагнитного разбавления по узлам и связям. Для вычисления энтропии используется намагнитченность, найденная в псевдохаотическом приближении. В этом приближении получено значение энтропии как функции температуры, концентрации магнитных атомов и внешнего магнитного поля. Обнаружено, что при нулевом внешнем поле система фрустрирована в том смысле, что энтропия основного состояния не равна нулю. Найдена величина этой энтропии при концентрациях магнитных атомов как ниже, так и выше перколяционного порога.

DOI: 10.31857/S0044451022060074
EDN: DULWYZ

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена вычислению свободной энергии и энтропии разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете. Решетка Бете представляет собой бесконечный граф без замкнутых путей, в котором каждый узел связан с координационным числом q другими узлами [1]. На такой решетке можно задать модель Изинга, поместив в каждый узел изинговский «спин», принимающий значения $+1$ и -1 . С каждой парой соседних спинов σ_i и σ_j связано слагаемое в гамильтониана $J_{ij}\sigma_i\sigma_j$, моделирующее обменное взаимодействие, J_{ij} — заданные константы. В случае, когда все J_{ij} одинаковы и положительны, можно построить точное решение для произвольного q [1].

Если теперь заменить некоторые из спинов немагнитными атомами, располагая их в решетке случайно и без корреляции, получим модель разбавленного по узлам магнетика, если же немагнитные примеси располагаются на связях решетки, блокируя обменное взаимодействие на этой связи, получим модель разбавленного по связям магнетика [2, 3]. Для решетки Бете модели с разбавлением

по узлам и связям формально не различаются [4]. Можно получить точное решение для модели Изинга с разбавлением для $q = 2$ (одномерная цепочка) [5], однако для произвольного q точного решения этой задачи нет.

В наших работах [4, 6, 7] предлагается подход к анализу свойств разбавленных магнетиков с немагнитными примесями, основанный на следующих соображениях. Вместо того, чтобы с самого начала полагать, что примеси распределены в решетке случайно, рассмотрим магнетик, в котором магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться и находятся в термодинамическом равновесии. Энергия такой системы определяется не только ориентацией магнитных моментов, но и расположением атомов примеси по узлам решетки. Таким образом, гамильтониан той или иной модели магнетика с подвижными примесями будет состоять из слагаемых, связанных с обменным взаимодействием магнитных атомов и слагаемых, связанных с межатомным взаимодействием в кристаллической решетке, причем равновесное распределение атомов примеси зависит от параметров, характеризующих оба этих взаимодействия. Тогда для каждого значения температуры, внешнего магнитного поля и концентрации (доли) магнитных атомов b в системе можно подобрать значения параметров межатомного взаимодействия с таким расчетом, чтобы равновесное распределение

* E-mail: vals.tarasov@gmail.com

атомов примеси было бы как можно ближе к случайному [4, 6, 7]. В качестве условия близости распределения атомов примеси к случайному можно, например, использовать равенство нулю корреляции в расположении атомов примеси для двух ближайших узлов, что и является основой псевдохаотического приближения, использованного в настоящей работе. В этом приближении мы вычисляем свободную энергию и энтропию разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете и делаем выводы относительно возможных фрустрированных состояний в этой системе.

2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И ЭНТРОПИЯ РАЗБАВЛЕННОГО ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА

В соответствии с принципами статистической физики и термодинамики полная свободная энергия термодинамической системы [1, 8]

$$F = -kT \ln Z, \quad (1)$$

где k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, Z — статистическая сумма системы. Зная свободную энергию как функцию температуры, можно выразить внутреннюю энергию U и энтропию S следующим образом [8]:

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right), \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}. \quad (2)$$

Простой и часто встречающейся моделью магнитной системы является модель Изинга [1]. В этой модели магнитный атом представлен локализованной в месте расположения этого атома (в узле решетки) переменной σ , принимающей значения $+1$ и -1 (так называемый «изинговский спин»). Для модели Изинга на произвольной решетке

$$Z = \sum_{\Omega} \exp \left(-\frac{1}{kT} \mathcal{H}(\Omega, H) \right). \quad (3)$$

Гамильтониан системы $\mathcal{H}(\Omega, H)$ зависит от внешнего поля H и конфигурации изинговских спинов Ω , а суммирование в (3) проводится по всем таким конфигурациям. Для моделей с парным взаимодействием

$$\mathcal{H}(\Omega, H) = \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i. \quad (4)$$

Первое суммирование в этом выражении проводится по всем упорядоченным парам спинов, а вто-

рое — по всем спином решетки, J_{ij} — энергия обменного взаимодействия i -го и j -го спинов. Для гамильтониана такого вида полная намагниченность системы

$$\sum_i M_i = -\frac{\partial F}{\partial H}, \quad (5)$$

где $M_i = \langle \sigma_i \rangle$ — термодинамическое среднее i -го спина, т. е. локальная намагниченность узла i . Вычислим свободную энергию системы с помощью рассуждения, аналогичного приведенному в [1]. При очень большом внешнем поле, т. е. при $H \rightarrow \infty$, наибольший вклад в сумму (3) вносит слагаемое, в котором все спины $\sigma_i = +1$. В этом пределе

$$F = -\sum_{(i,j)} J_{ij} - HN. \quad (6)$$

Здесь N — число узлов решетки. Учитывая асимптотическое равенство (6) и полагая, что все $M_i \rightarrow 1$ при $H \rightarrow \infty$, получим, интегрируя (5),

$$F(H_0, T) = -\sum_{(i,j)} J_{ij} - H_0 N + \int_{H_0}^{\infty} \left(\sum_i M_i - N \right) dH. \quad (7)$$

Дифференцируя это выражение по T получим, согласно (2), энтропию системы

$$S(H_0, T) = -\sum_i \int_{H_0}^{\infty} \frac{\partial M_i(H, T)}{\partial T} dH. \quad (8)$$

Будем считать, что взаимодействуют только спины ближайших узлов, причем константы обменного взаимодействия $J_{ij} = J$ для ближайших соседей и равны нулю во всех остальных случаях. Тогда

$$\sum_{(i,j)} J_{ij} = J \bar{q} \frac{N}{2},$$

где \bar{q} — среднее по решетке координационное число. Для простой решетки с координационным числом q очевидно $\bar{q} = q$ для чистого магнетика. В случае некоррелированного немагнитного разбавления по узлам или связям $\bar{q} = qb$, где b — концентрация магнитных атомов или связей [4].

Разделив теперь (7) и (8) на NkT и вводя удельные (на магнитный атом) свободную энергию $f = F/N$, энтропию $s = S/N$ и намагниченность

$$M = \frac{\sum_i M_i}{N}$$

получим

$$\frac{f(h_0, K)}{kT} = -\frac{1}{2}qK - h_0 + \int_{h_0}^{\infty} (M(h) - 1) dh, \quad (9)$$

$$\frac{s(h_0, K)}{kT} = - \int_{h_0}^{\infty} \frac{\partial M(h)}{\partial T} dh. \quad (10)$$

Здесь $K = J/kT$ и $h = H/kT$.

Из формул (9) и (10) следует, что если известна средняя намагниченность M как функция температуры, внешнего магнитного поля и концентрации магнитных атомов или связей, можно найти свободную энергию и энтропию.

3. РЕШЕТКА БЕТЕ И ПСЕВДОХАОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В наших работах [4, 6, 7] показано, что приближенное значение намагниченности разбавленного изинговского магнетика на решетке с координационным числом q может быть найдено так:

$$M = \text{th}(Kq\mu + h), \quad (11)$$

где μ определяется из уравнения

$$\text{th}(Kq\mu + h) = (1 - b) \text{th}(K(q - 1)\mu + h) + b \frac{\text{sh}(2K(q - 1)\mu + 2h)}{\text{ch}(2K(q - 1)\mu + 2h) + e^{-2K}}. \quad (12)$$

Оказывается [4], что приближение (11) для чистого магнетика ($b = 1$) является точным решением для модели Изинга на решетке Бете, а при $b < 1$ его можно рассматривать как «псевдохаотическое» приближение для модели Изинга с немагнитным разбавлением на решетке Бете [4]. Псевдохаотическое приближение получается из решения задачи с подвижными немагнитными примесями при наложении дополнительного условия равенства нулю корреляции в расположении примесей в соседних узлах решетки [6]. Ситуации разбавления по узлам и связям на решетке Бете не различаются, поэтому b можно понимать и как концентрацию магнитных атомов, и как вероятность того, что связь с соседними узлами будет не разорванной.

В (11) и (12) введем обозначения

$$z = Kq\mu + h, \quad w = K(q - 1)\mu + h, \quad \eta = e^{-2K},$$

$$\beta = \frac{q - 1}{q}, \quad x = h/q.$$

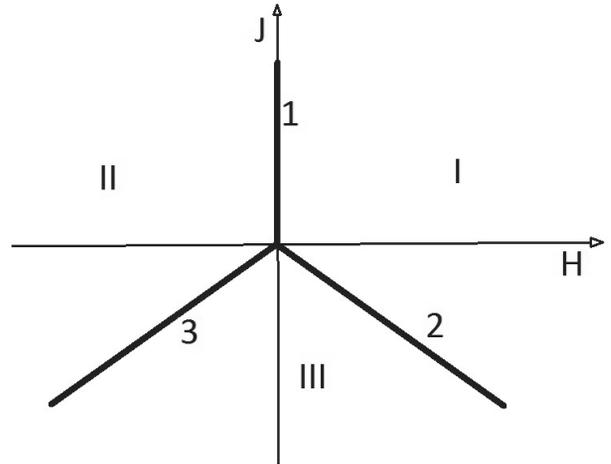


Рис. 1. Диаграмма состояний разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете

Тогда (11) и (12) примет вид

$$M = \text{th}(z),$$

$$M = (1 - b) \text{th}(w) + b \frac{\text{sh}(2w)}{\text{ch}(2w) + \eta}, \quad (13)$$

$$w = \beta z + x$$

или $M = \partial\psi/\partial w$, где

$$\psi(w) = (1 - b) \ln(\text{ch}(w)) + \frac{b}{2} \ln(\text{ch}(2w) + \eta).$$

Уравнения (13) можно записать в виде одного уравнения относительно намагниченности M

$$M = (1 - b) \frac{(1 + M)^\beta - \xi(1 - M)^\beta}{(1 + M)^\beta + \xi(1 - M)^\beta} + b \frac{(1 + M)^{2\beta} - \xi^2(1 - M)^{2\beta}}{(1 + M)^{2\beta} + \xi^2(1 - M)^{2\beta} + 2\xi\eta(1 - M^2)^\beta}, \quad (14)$$

где $\xi = e^{-2x}$.

При выводе уравнений (13) или (14) предполагается, что среднее значение спина (локальная намагниченность) одинаково для всех внутренних узлов решетки и равна M в термодинамическом пределе. Иными словами, в системе не образуется магнитных подрешеток. Это предполагает, что либо в системе ферромагнитное обменное взаимодействие, т.е. $K > 0$, либо $K < 0$, но внешнее поле H достаточно велико, для того чтобы препятствовать образованию подрешеток при любой температуре.

Для того чтобы конкретизировать область применимости уравнения (14), рассмотрим фазовую диаграмму основного состояния ($T = 0$) разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете с координационным числом q (рис. 1).

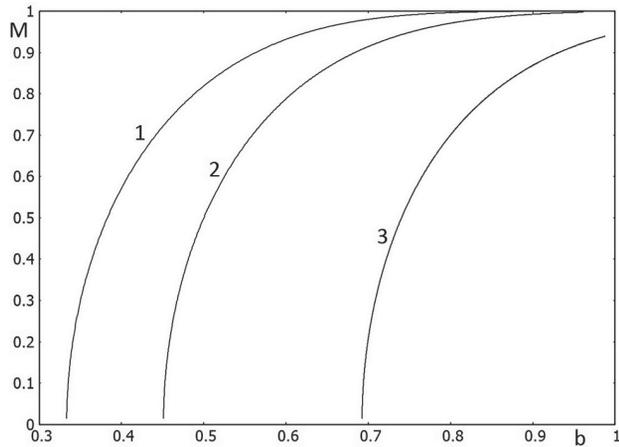


Рис. 2. Спонтанная намагниченность разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = 0$, кривая 2 — $\eta = 0.15$ и кривая 3 — $\eta = 0.35$ ($\eta = \exp(-2K)$)

Переходя в (14) к пределу $T \rightarrow 0$, получим, что при условии $H > 0$ и $J > -H/q$ (область I на рис. 1) $M \rightarrow 1$, а при $H < 0$ и $J > H/q$ (область II на рис. 1) $M \rightarrow 1$. Таким образом, в областях I и II основное состояние системы ферромагнитное. Граница этих областей (линия 1 на рис. 1) — зона, в которой происходят ферромагнитные фазовые переходы. Как показывает анализ уравнений (13) [4], при $T \rightarrow 1$ и $b < b_c = 1/(q - 1)$ на линии 1 $M = 0$. При $b > b_c$, т.е. при концентрации магнитных атомов, превышающей порог протекания решетки Бете, в системе возникает спонтанная намагниченность M_0 , которую можно найти из уравнения

$$M_0 = (1 - b) \frac{(1 + M_0)^\beta - (1 - M_0)^\beta}{(1 + M_0)^\beta + (1 - M_0)^\beta} + b \frac{(1 + M_0)^{2\beta} - (1 - M_0)^{2\beta}}{(1 + M_0)^{2\beta} + (1 - M_0)^{2\beta}}. \quad (15)$$

График функции $M_0(b)$ приведен на рис. 2 (кривая 1). При $T > 0$ спонтанная намагниченность возникает при концентрации, превышающей значение $b_K = b_c(1 + \eta)/(1 - \eta) = b_c \operatorname{cth}(K)$ [4] (рис. 2 кривые 2 и 3).

В области III на рис. 1 основное состояние системы не является ферромагнитным, что, как уже было сказано, делает невозможным применение уравнений (13) или (14) в этой области. На границе об-

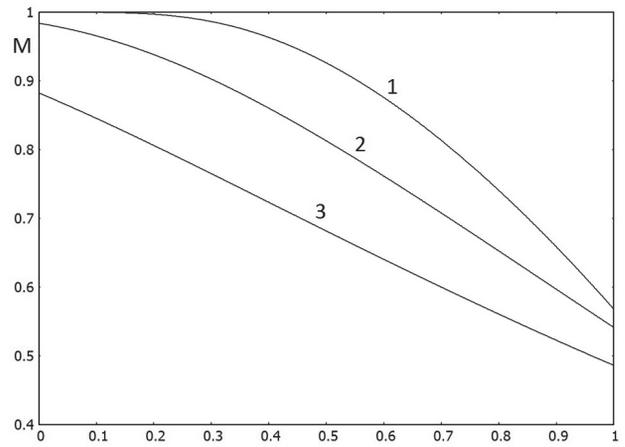


Рис. 3. Намагниченность разбавленного изинговского антиферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) во внешнем поле $H = -qJ$ как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = \infty$, кривая 2 — $\eta = 10/3$ и кривая 3 — $\eta = 2$ ($\eta = \exp(-2K)$)

ластей I и III (линия 2 на рис. 1) при $T \rightarrow 0$ намагниченность M стремится к значению

$$\widetilde{M}_0 = \frac{1 - y^q}{1 + y^q},$$

где y определяется из уравнения

$$(2 - b)y^q + y - b = 0. \quad (16)$$

График функции $\widetilde{M}_0(b)$ приведен на рис. 3 (кривая 1). При $q = 2$ и $b = 1$, т.е. для одномерной изинговской цепочки без немагнитного разбавления, из (16) получается результат, совпадающий с полученным в работе [9]. При $T > 0$ намагниченность на линии 2 диаграммы рис. 1 монотонно падает с ростом концентрации b , так и температуры T (кривые 2 и 3 на рис. 3), т.е. в этой области не происходит ни концентрационных, ни температурных фазовых переходов.

4. РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА

Проведем теперь, основываясь на выражениях (9) и (10), расчет свободной энергии и энтропии разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете в псевдохаотическом приближении. Перейдем в (9) к переменной x :

$$\frac{f(x_0, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}bK - x_0 + \int_{x_0}^{\infty} (M(x) - 1) dx \quad (17)$$

и, используя $dx = dw - \beta dz = dw - \beta(\operatorname{arcth}(M))'dM$, получим

$$\frac{f(x_0, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}bK - x_0 + \int_{w_0}^{\infty} (M(w) - 1) dw - \beta \int_{M_0}^1 (M - 1)(\operatorname{arcth}(M))'dM$$

или (отбрасывая после интегрирования индекс «0»)

$$\frac{f(w, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}Kb - x + w - \psi(w) - \beta \ln(1 + M) - \left(1 - \frac{b}{2} - \beta\right) \ln 2.$$

Используя равенство $w - x = \beta \operatorname{arcth}(M)$, окончательно запишем

$$\frac{f(w, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}Kb - \psi(2) - \frac{\beta}{2} \ln(1 - M^2) - \left(1 - \frac{b}{2} - \beta\right) \ln 2. \quad (18)$$

При $b = 1$ (18) приводится к виду

$$\frac{f(w, K)}{kT} = -\frac{qK}{2} + \frac{1}{2}(q - 2) \ln(2 \operatorname{ch}(2w) + 2\eta) - \frac{1}{2}(q - 1) \ln(1 + 2\eta \operatorname{ch}(2w) + \eta^2),$$

что совпадает (после перехода к соответствующим переменным) с результатом, полученным в [1] для чистого магнетика на решетке Бете. Поскольку при $T \rightarrow 0$ удельная свободная энергия f совпадает с удельной энергией основного состояния u_0 , из (18) получим

$$u_0 = \frac{1}{2}bqJ - \lim_{T \rightarrow 0} \left(qkT\psi(w) + \frac{\beta}{2}qkT \ln(1 - M^2) \right). \quad (19)$$

Вычисляя входящий в (19) предел, можно показать, что в областях I и II (рис. 1) и на их границе 1

$$u_0 = -\frac{1}{2}bqJ - |H|,$$

т.е. энергия основного состояния совпадает с минимально возможной энергией на один атом u_{min} . В работе [10] используется количественная мера фрустрации, равная

$$p_f = \frac{u_0 - u_{min}}{u_{max} - u_{min}}, \quad (20)$$

где $u_{max} = -u_{min}$. Таким образом, во всех внутренних точках областей I и II и линии 1 на фазовой диаграмме (рис. 1) мера (20) равна нулю. Однако, как будет показано ниже, энтропия на линии 1 не равна нулю при $T \rightarrow 0$, если $b \neq 1$. На линиях 2 и 3 диаграммы и (19) получим

$$u_0 = qJ \left(1 - \frac{b}{2}\right), \\ u_{min} = qJ \left(1 + \frac{b}{2}\right),$$

что в соответствии с (20) приводит к

$$p_f = \frac{b}{b + 2}. \quad (21)$$

Таким образом, в соответствии с критерием (21) на границах 2 и 3 диаграммы рис. 1 система называется фрустрированной, причем максимальное значение, равное 1/3 (21), принимает для чистого магнетика $b = 1$.

Энтропию разбавленного магнетика можно теперь получить, дифференцируя свободную энергию (19) по температуре или непосредственно по формуле (8):

$$s(H_0, T) = - \int_{H_0}^{\infty} \frac{\partial M(H, T)}{\partial T} \partial H.$$

Переходя к переменным x и K и учитывая, что

$$\frac{\partial x}{\partial T} = -\frac{x}{T}, \quad \frac{\partial K}{\partial T} = -\frac{K}{T},$$

получим

$$\frac{s(x_0, K)}{qk} = \int_{x_0}^{\infty} \left(X \frac{\partial M}{\partial x} + K \frac{\partial M}{\partial K} \right) dx = (I_1 + I_2)|_{x_0}^{\infty}, \quad (22)$$

$$I_1 = \int X \frac{\partial M}{\partial x} dx, \quad I_2 = \int K \frac{\partial M}{\partial K} dx;$$

$$I_1 = \int W \frac{\partial M}{\partial x} dx - \beta \int \operatorname{arcth}(M) \frac{\partial M}{\partial x} dx$$

или

$$I_1 = (1 - b)w \operatorname{th}(w) + \frac{bw \operatorname{sh}(2w)}{\operatorname{ch}(2w) + \eta} - \psi(w) - \frac{\beta}{2}((1 + M) \ln(1 + M) + (1 - M) \ln(1 - M)).$$

Для вычисления I_2 перейдем в этом интеграле к переменной w . Тогда

$$I_2 = K \int \frac{\partial M}{\partial K} dw = -\frac{bK\eta}{\text{ch}(2w) + \eta}.$$

Таким образом, удельная энтропия разбавленного магнетика вычисляется так:

$$\frac{s(x, K)}{qk} = \left(1 - \frac{b}{2} - \beta\right) \ln(2) - I, \quad (23)$$

где

$$I = (1 - b)w \text{th}(w) + \frac{b(w \text{sh}(2w) - K\eta)}{\text{ch}(2w) + \eta} - \psi(w) - \frac{\beta}{2}((1 + M) \ln(1 + M) + (1 - M) \ln(1 - M)).$$

Из (23) следует, что во всех внутренних точках областей I и II на фазовой диаграмме (рис. 1) энтропия при $T = 0$ обращается в нуль.

При $H = 0$ ($x = 0$) параметр w равен нулю, если

$$b < b_K = b_c \frac{(1 + \eta)}{(1 - \eta)}.$$

В этом случае энтропия

$$\frac{s(0, K)}{k} = \left(1 - \frac{qb}{2}\right) \ln(2) + \frac{qb}{2} \left(\ln(1 + \eta) - \frac{\eta \ln(\eta)}{1 + \eta}\right).$$

Если же $b > b_K$, то энтропия как функция концентрации магнитных атомов может быть вычислена из выражений (13) и (23) следующим образом:

$$\frac{s(0, K)}{k} = \left(1 - \frac{qb(w)}{2}\right) \ln(2) - qI(w),$$

$$b(w) = \frac{\text{sh}(b_c w)}{\text{sh}(w)} \frac{\text{ch}(2w) + \eta}{(1 - \eta) \text{ch}((1 + b_c)w)},$$

$$M(w) = \text{th}((1 + b_c)w).$$

На рис. 4 показаны графики удельной энтропии (в единицах k) в зависимости от концентрации магнитных атомов (связей) при различных температурах. Кривая 1 — энтропия основного состояния ($T = 0$). Кривые 2 и 3 — энтропии при значениях температурного параметра $\eta = \exp(-2J/kT)$ равного соответственно 0.15 и 0.35. При $b = 0$, когда система представляет собой парамагнетик в нулевом внешнем поле, энтропия при любой температуре равна $\ln(2)$, а при $b > 0$ монотонно падает с ростом b . При $T > 0$ энтропия как функция концентрации b

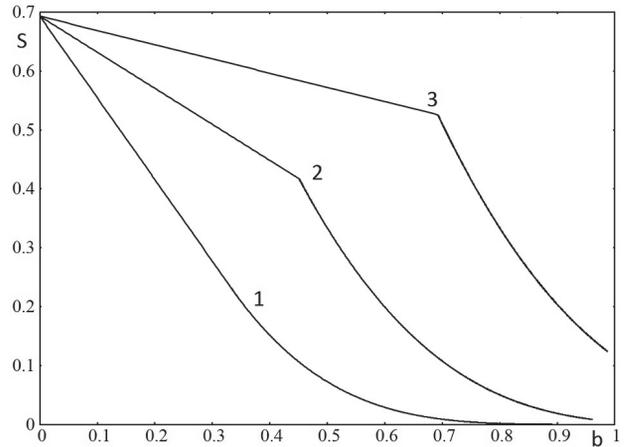


Рис. 4. Энтропия разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) в нулевом внешнем поле как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = 0$, кривая 2 — $\eta = 0.15$ и кривая 3 — $\eta = 0.35$ ($\eta = \exp(-2K)$)

имеет, как видно на рис. 4, разрыв первой производной при $b = b_K$ (кривые 2 и 3 на рис. 4). При $T = 0$ такого разрыва нет (кривая 1 на рис. 4).

В соответствии с критерием (20) на линии I диаграммы состояния (рис. 1) система не является фрустрированной. Однако авторы работы [11] полагают, что фрустрированным можно считать состояние, в котором энтропия при $T = 0$ не равна нулю. Если следовать этому критерию, то система на линии 1 (рис. 1) будет фрустрированной при $b < 1$.

Рассмотрим энтропию на линиях 2 и 3 диаграммы рис. 1. На линии 2 выполняется условие $K + x = 0$. Учитывая это условие, найдем предел (23) при $T \rightarrow 0$, который после некоторых преобразований, можно представить в виде

$$\tilde{S}_0 = \frac{bq}{2} \ln \frac{b}{y} + \left(1 - \frac{2 - b}{2} q\right) \ln \frac{2 - y}{2 - b}, \quad (24)$$

где y определяется из уравнения (16). График $\tilde{S}_0(b)$ приведен на рис. 5 (кривая 1).

При $b = 1$ и $q = 2$

$$\tilde{S}_0 = \ln \frac{\sqrt{5} + 1}{2},$$

что совпадает с расчетом, проведенным в работе [9], авторы которой используют метод трансфер-матрицы для одномерной цепочки спинов. На этом же рисунке приведены графики концентрационной зависимости энтропии при ненулевых значениях температуры (кривые 2 и 3, рис. 5).

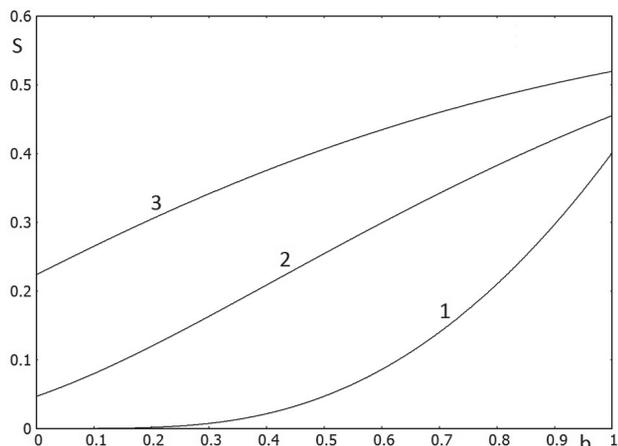


Рис. 5. Энтропия разбавленного изинговского антиферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) во внешнем поле $H = -qJ$ как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = \infty$, кривая 2 — $\eta = 10/3$ и кривая 3 — $\eta = 2$ ($\eta = \exp(-2K)$)

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, учет немагнитного разбавления в псевдохаотическом приближении [4] позволяет рассчитать не только концентрационную зависимость намагниченности (рис. 2 и 3), но и энтропию (рис. 4 и 5) и свободную энергию разбавленного магнетика на произвольной решетке Бете. Анализ концентрационной зависимости энтропии показывает, что при $J > 0$ и $H = 0$ (линия 1 на диаграмме рис. 1) и нулевой температуре энтропия не равна нулю, убывает с ростом b и не имеет разрыва первой производной по b (кривая 1 на рис. 4) во всем интервале концентраций. Но при ненулевой температуре имеется разрыв первой производной при $b = b_K$, т. е. при значении b , соответствующем возникновению спонтанной намагниченности.

Наш расчет показывает (рис. 4) что даже при $T = 0$ (кривая 1) энтропия линии 1 не обращается в нуль, что по мнению некоторых авторов [9,11] может считаться критерием фрустрированности системы. Впрочем следует отметить, что отличие энтропии основного состояния от нуля в нулевом внешнем поле имеет в данном случае «парамагнитную» природу — при немагнитном разбавлении в системе

возникают изолированные «островки» спинов, которые могут менять свою спонтанную намагниченность без изменения энергии. Согласно критерию фрустрированности (20) [10], который на линии 1 равен нулю при любом b , состояние системы в этой области нельзя считать фрустрированным.

Если $J < 0$ (антиферромагнитное обменное взаимодействие), но внешнее поле $H = -qJ$ (линия 2 на диаграмме рис. 1), система оказывается фрустрированной и в смысле неравенства нулю остаточной энтропии (рис. 5, кривая 1) и в смысле критерия (20). В этой области нет ни концентрационных, ни температурных фазовых переходов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
3. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФТТ **50**, 703 (2008).
4. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, *Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков*, ВГУЭС, Владивосток (2019).
5. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, Е. Г. Гусев, ТМФ **201**, 280 (2019).
6. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, ФТТ **57**, 926 (2015).
7. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, ЖЭТФ **148**, 729 (2015).
8. И. А. Квасников, *Термодинамика и статистическая физика: Теория равновесных систем*, Едиториал УРСС, Москва (2002).
9. Е. С. Цуварев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, ЖЭТФ **158**, 504 (2020).
10. Y. Shevchenko, A. Makarov, and K. Nefedev, Phys. Lett. A **381**, 428 (2017).
11. А. В. Зарубин, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин и др., ЖЭТФ **155**, 914 (2019).

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДВУМЕРНЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А. К. Муртазаев^а, А. Б. Бабаев^{а,б*}

^а *Институт физики им. Х. И. Амирханова
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367003, Магачкала, Россия*

^б *Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
367000, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 31 января 2022 г.,
после переработки 5 февраля 2022 г.
Принята к публикации 7 февраля 2022 г.

Методом компьютерного моделирования проведены исследования фазовых переходов в двумерных моделях Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами L , где $L = 21$ –180. Полученные численные данные свидетельствуют о том, что в двумерной модели Поттса на гексагональной решетке наблюдается фазовый переход первого рода для числа состояний спина $q = 5$ и фазовый переход второго рода при $q = 4$.

DOI: 10.31857/S0044451022060086

EDN: DUMNTF

1. ВВЕДЕНИЕ

Фазовые переходы (ФП) и связанные с ними критические явления чрезвычайно широко распространены в конденсированных средах. При определенных условиях во всех конденсированных средах происходят один или несколько фазовых переходов. На разработку эффективной теории фазовых переходов и критических явлений были затрачены колоссальные усилия, и к настоящему моменту времени в этом направлении достигнут существенный прогресс [1]. Флуктуационная теория фазовых переходов, а также идеи, заложенные в гипотезах скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы лежат в основе современного понимания физики этих явлений [2, 3].

Следует отметить, что большой успех в теоретическом исследовании ФП имеет изучение точно решаемых моделей, которые обладают нетривиальным поведением, претерпевая ФП первого или второго рода, и в то же время позволяют получить точную статистическую сумму. Такие модели обычно не допускают непосредственного сравнения с экспериментом, но полезны для понимания физики фазо-

вого перехода [4]. К настоящему времени получено несколько точно решаемых моделей, среди которых двумерная модель Изинга на квадратной [5], треугольной и гексагональной [6] решетках и на решетке кагоме [7]. В то же время, несмотря на огромные усилия, затраченные в этой области, для моделей Поттса до сегодняшнего дня не имеется ни одного точного решения. Изучение магнитных и тепловых свойств этих моделей на различных двумерных решетках имеет важное фундаментальное и прикладное значение. Это связано с тем, что многие объекты и явления, наблюдаемые в физике конденсированных сред, в частности, интеркаляция атомов щелочных металлов в решетку графита, описываются моделью Поттса с числом состояний спина $q = 4$, а адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита достаточно хорошо описывается низкоразмерными моделями Поттса с $q = 4$ и $q = 5$ на треугольной и гексагональной решетках [8, 9], и их исследование к настоящему времени является своевременным. Модель Поттса на квадратной решетке эквивалентна модели типа льда на линии ФП, и для нее в работе [10] вычислена свободная энергия. Кроме того, для модели Поттса на квадратной, треугольной и гексагональной решетках, исходя из аргумента дуальности, получены полиномиальные выражения, позволяющие получить значения критических

* E-mail: b_albert78@mail.ru

точек [11, 12]. Отдельно модель Поттса с $q = 4$ интересна тем, что значение $q = 4$ является граничным, выше которого должен наблюдаться ФП первого рода. Однако к настоящему моменту при изучении этой модели внимание в основном уделялось системам на квадратной и треугольной решетках, и особенности критического и термодинамического поведения этой модели на гексагональной решетке практически не изучались.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

При построении модели Поттса, в частности с числом состояний спина $q = 4$, необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах гексагональной решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в четырех симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности $q - 1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис. 1); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) и равна J , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же все равно, в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [9]

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \delta(S_i S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4, 5, \quad (1)$$

где

$$\delta(S_{i,j}) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

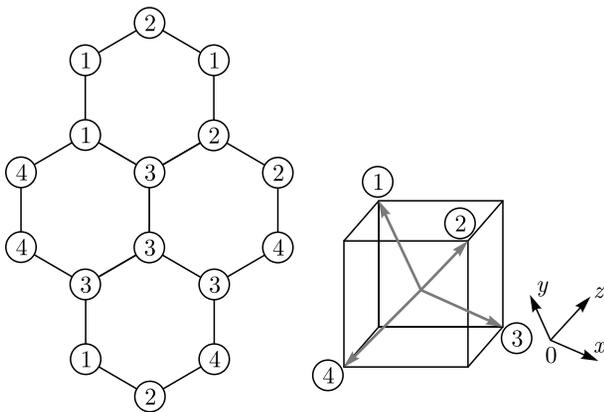


Рис. 1. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [13]. Методика реализации этого алгоритма приведена в работе [14]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями для систем с линейными размерами $L = 10-180$ и числом узлов $N = 2 \times p \times L \times L/3$. Изначально конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль одной из осей X, Y или Z . Усреднение термодинамических параметров осуществлялось по трем независимым марковским цепям, каждая из которых стартует из разных случайных начальных конфигураций. Причем для контроля точности вычислений число случайных начальных конфигураций доводилось и до десяти. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывался. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 160\tau_0$. Для самой большой системы $L = 180$, $\tau_0 = 2 \cdot 10^3$ МК шагов/спин. В конце полученные данные по независимым марковским цепям усреднялись и между собой.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Наблюдение за температурным ходом энергии U , намагниченности m_F , теплоемкости C и восприимчивости χ осуществлялось с использованием следующих выражений [15, 16]:

$$U = \frac{1}{N} \langle [U] \rangle, \quad (2)$$

$$m_F = \frac{q(N_{max}/N) - 1}{q - 1}, \quad (3)$$

$$C(T) = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (4)$$

$$\chi = (NK) (\langle m_F^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2), \quad (5)$$

где $K = |J|/k_B T$, $N_{max} = \max[N_1, N_2, N_3, N_4, N_5]$, N_i — число спинов в состоянии с $q = i$, N — число узлов решетки, угловые скобки обозначают термодинамическое усреднение.

На рис. 2 представлены температурные зависимости энергии U для моделей Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и $q = 5$ для спиновых систем с линейными размерами $L = 45$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает

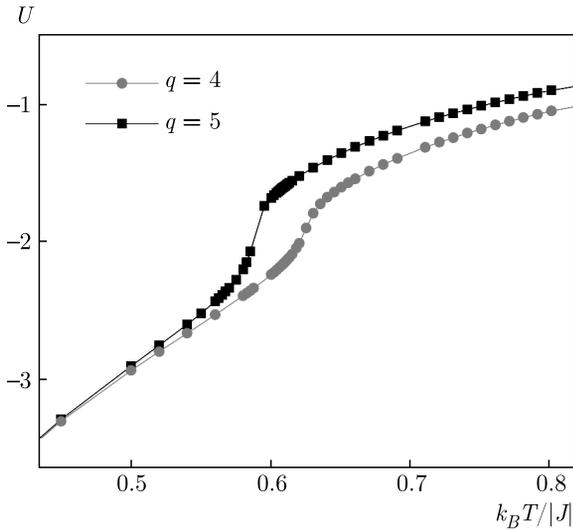


Рис. 2. Температурная зависимость энергии U для двумерных моделей Поттса

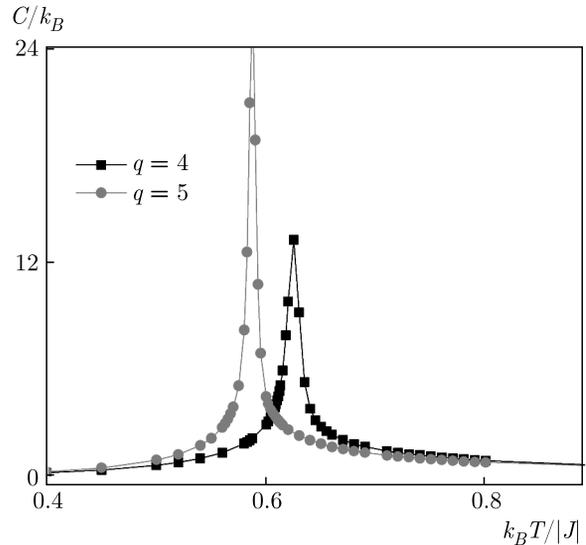


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости C для двумерных моделей Поттса

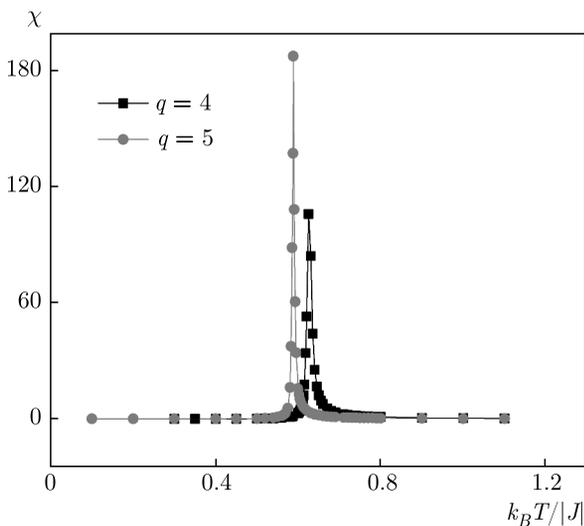


Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости χ для двумерных моделей Поттса

размеров символов, используемых для обозначения зависимости. Как видно на рис. 2, температурные зависимости энергии для модели Поттса с $q = 5$ демонстрируют поведение, характерное для фазового перехода первого рода (в точке фазового перехода T_l проявляется отчетливый скачок энергии), в то время как для модели Поттса с $q = 4$ такого скачка не проявляется. На рис. 3 и 4 представлены характерные температурные зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C для спиновых систем, описываемых двумерными моделями Поттса с $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. Как видно на рис. 3 и 4,

в зависимостях восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры T для двумерной модели Поттса с $q = 5$ в точке фазового перехода проявляются «всплески», которые характерны для фазового перехода первого рода. В случае модели Поттса с $q = 4$ такие резкие «всплески» не наблюдаются. При компьютерном моделировании ФП для определения температуры фазового перехода T_l часто используют метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [17, 18]:

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (6)$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m_F^4 \rangle}{3 \langle m_F^2 \rangle_L^2}, \quad (7)$$

где E — энергия, и m_F — намагниченность системы с линейным размером L . Выражения (6) и (7) позволяют определить температуру фазового перехода $T_l(p)$ с большой точностью соответственно в фазовых переходах первого и второго рода. Так же данный метод хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП. Анализ численных данных с применением этого метода представлен в работах [19–22]. Отличительные черты, характерные для ФП [23]: для ФП первого рода характерно то, что усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V_L(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (8)$$

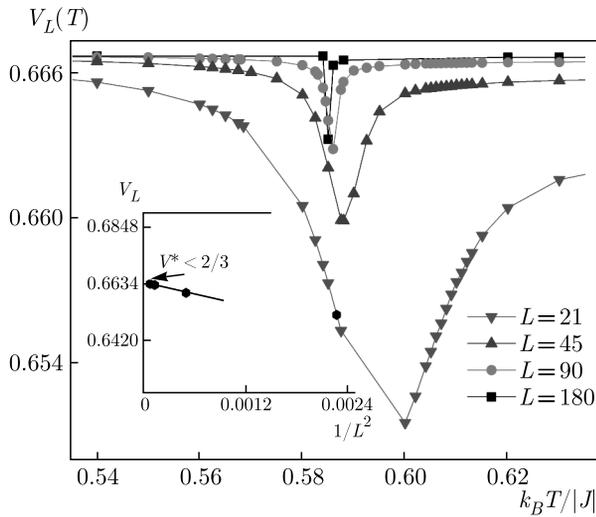


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке

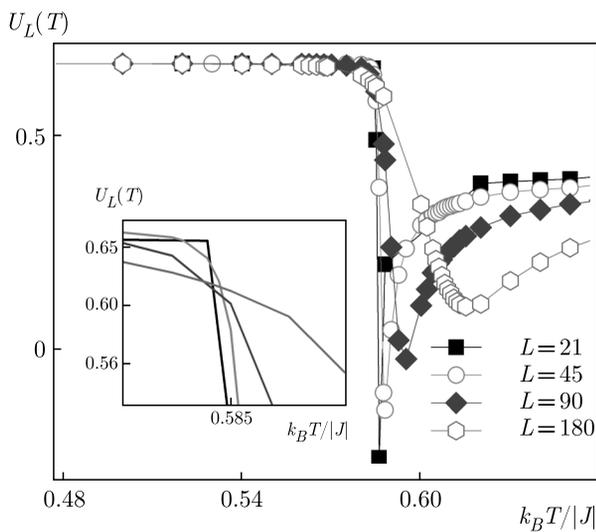


Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, где $V^* \neq 2/3$, что и продемонстрировано на рис. 5 (см. вставку) для модели Поттса с $q = 5$. Характерные зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ от температуры для систем с разными линейными размерами L приведены на рис. 6. Как видно на рис. 6, кумулянты Биндера не имеют ярко выраженной точки пересечений в области фазового перехода, что является характерным признаком ФП первого рода. В то же время для модели Поттса с $q = 4$ наблюдается противоположная

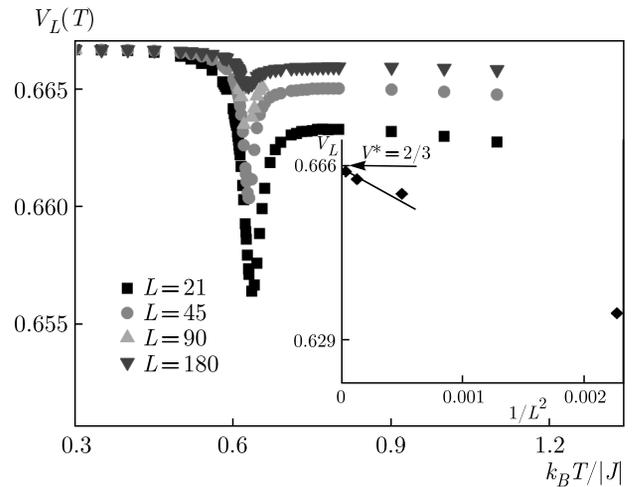


Рис. 7. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

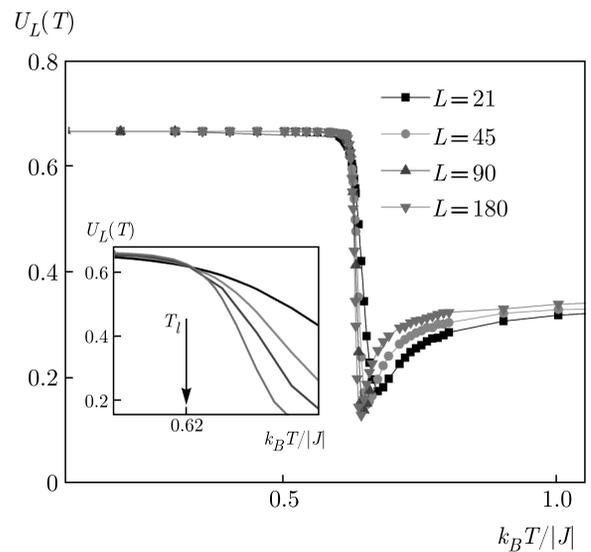


Рис. 8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

картина: усредненная величина кумулянта Биндера $V_L(T)$ (см. рис. 7) при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, V^* стремится к $2/3$, что характерно для ФП второго рода, а температурные зависимости $U_L(T)$ в критической области пересекаются в одной точке T_l , что также закономерно для ФП второго рода (см. рис. 8). Как видно на рис. 8, температура ФП $T_l = 0.620$ в единицах J/k_B и достаточно хорошо согласуется с аналитическим значением $T_l = 1/\ln(5) \approx 0.6213$, полученным по формуле $T_l = 1/\ln(1+v)$, в которой $v = 4$ согласно полиномиальному выражению $q^2 +$

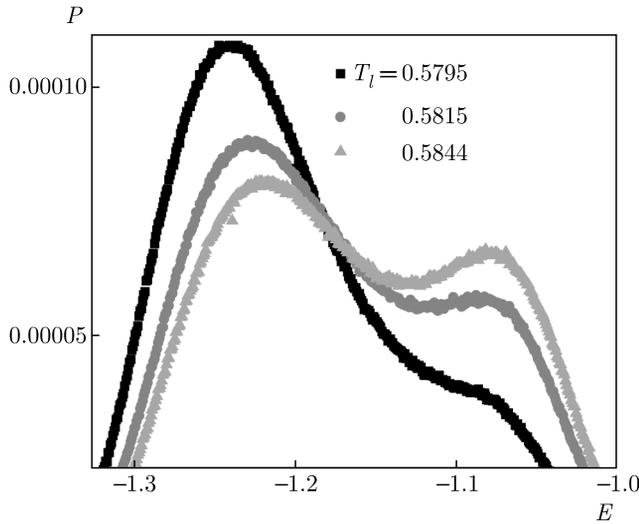


Рис. 9. Гистограмма распределения энергии двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке при $T = T_l$

+ $3qv = v^3$, выведенному из соображений дуальности гексагональной решетки [12].

Отдельно нами проводился гистограммный анализ данных для моделей Поттса с $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m_F определяется выражением [24]

$$\overline{P(U, m_F)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m_F) \exp[KU], \quad (9)$$

где $W(U, m_F)$ — число конфигураций с энергией U и параметром порядка m_F , $Z(K)$ — функция распределения энергии всей системы, а K — обратная температура.

Гистограммный анализ данных, проведенный нами для двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке, также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 9 для спиновой системы с линейным размером $L = 120$. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для трех различных значений температуры вблизи T_l . Как видно на рисунке, на зависимости вероятности P от энергии системы U наблюдаются два хорошо выраженных максимума для всех рассмотренных значений температур. Наличие бимодальности в распределении энергии является достаточным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 4$ на гексагональной решетке вблизи

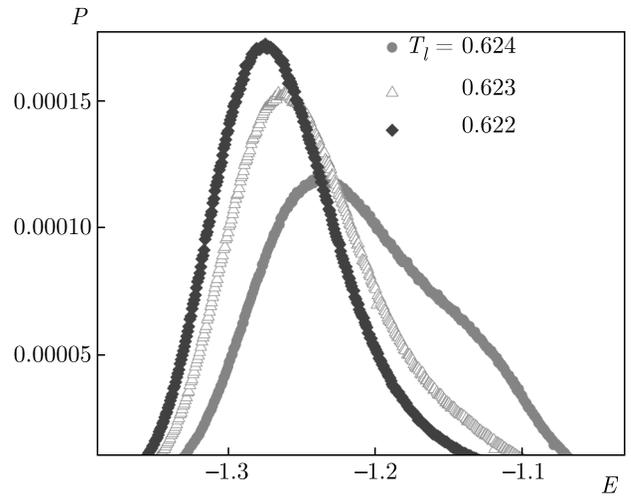


Рис. 10. Гистограмма распределения энергии для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке при $T = T_l$

точки фазового перехода T_l , но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности P от энергии системы U с достаточно большим линейным размером L для трех различных значений температуры вблизи T_l наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 10), что характерно для ФП второго рода.

Таким образом, наши данные, полученные на основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и методом гистограммного анализа данных, свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ наблюдается ФП первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [9, 12], в то время как в случае модели Поттса с $q = 4$ — ФП второго рода. Выяснение рода ФП в рассмотренных нами моделях Поттса в зависимости от немагнитного беспорядка — предмет отдельного исследования.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики на основе метода Монте-Карло рассмотрены фазовые переходы в двумерных ферромагнитных моделях Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. Полученные данные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что в двумерной модели Поттса с $q = 5$ на гексагональной решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [9], а в модели Поттса с $q = 4$ — ФП второго рода.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-02-00153.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления*, Мир, Москва (1973).
2. А. З. Паташинский, В. А. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
3. Вик. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
4. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
5. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
6. R. M. F. Houtappel, Physica **16**, 425 (1950).
7. К. Канô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
8. Г. В. Уймин, Письма в ЖЭТФ **35**, 473 (1982).
9. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
10. R. J. Baxter, J. Phys. C: Solid. State Phys. **6**, L445 (1973).
11. R. J. Baxter, H. N. V. Temperley, and S. E. Ashley, Proc. Roy. Soc. A **358**, 535 (1978).
12. F. Y. Wu, *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*, World Scientific, London (2009).
13. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
14. A. B. Babaev and A. K. Murtazaev, Mathematical Models and Computer Simulations **11**, 575 (2019).
15. Р. Бекстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
16. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
17. D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2014).
18. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
19. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **159**, 1041 (2021).
20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ФТТ **63**, 1644 (2021).
21. А. К. Муртазаев and А. В. Бабаев, Mater. Lett. **258**, 126771 (2020).
22. А. К. Муртазаев and А. В. Бабаев, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 101 (2017).
23. D. Loison and K. D. Schotte, Euro. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
24. N. A. Alves, B. A. Berg and R. Villanova, Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).

МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ НАНОГРАНУЛЯРНЫХ КОМПОЗИТАХ С ПАРАМАГНИТНЫМИ ИОНАМИ В ИЗОЛИРУЮЩЕЙ МАТРИЦЕ

А. Б. Дровосеков^{a*}, *Н. М. Крейнес*^a, *О. А. Ковалев*^{a,b},

А. В. Ситников^{c,d}, *С. Н. Николаев*^d, *В. В. Рыльков*^{d,e}

^a *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
101000, Москва, Россия*

^c *Воронежский государственный технический университет
394026, Воронеж, Россия*

^d *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

^e *Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова
Российской академии наук
141190, Фрязино, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 9 марта 2022 г.,
после переработки 9 марта 2022 г.
Принята к публикации 10 марта 2022 г.

Методом магнитного резонанса при комнатной температуре исследованы спектры пленок металл-диэлектрических наногранулярных композитов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ и $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ с различным содержанием ферромагнитной металлической фазы x вблизи порога перколяции. Особенностью изучаемых систем является высокая концентрация парамагнитных ионов, диспергированных в матрице изолятора между ферромагнитными гранулами. Обнаружено, что в таких пленках помимо обычного сигнала ферромагнитного резонанса, в более слабых полях наблюдается дополнительный пик поглощения. В отличие от обычного ферромагнитного резонанса, возбуждаемого поперечным высокочастотным магнитным полем, дополнительный пик демонстрирует слабую зависимость амплитуды от геометрии возбуждения резонанса. Положение этого пика зависит от состава нанокompозита, а также от частоты возбуждения резонанса ($f = 7\text{--}38$ ГГц) и ориентации магнитного поля относительно плоскости пленки. Наблюдаемая особенность связывается с парамагнитным резонансом ионов Fe^{3+} , присутствующих в матрице изолятора и взаимодействующих с ферромагнитными гранулами.

DOI: 10.31857/S0044451022060098

EDN: DUMVIC

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитные металл-диэлектрические нанокompозиты (НК) M_xD_{100-x} представляют собой массив ферромагнитных (ФМ) наногранул, хаотически расположенных в диэлектрической матрице. Такие системы интересны возможностью реализации в них

различных типов магнитного упорядочения в зависимости от содержания ФМ-фазы x . Так, выше порога перколяции, $x > x_p$, сильное обменное взаимодействие между гранулами приводит к ФМ-упорядочению НК. Ниже порога перколяции, $x < x_p$, межгранулярный обмен, как правило, резко падает и НК начинает проявлять суперпарамагнитные свойства. При этом наличие беспорядочных магнитодипольных взаимодействий между гранулами может приводить к возникновению эффектов спинового стекла в области низких температур [1].

* E-mail: drovosekov@kapitza.ras.ru

Особый интерес представляют НК, для которых существенная часть металлической фазы оказывается «растворенной» в виде отдельных атомов в изолирующем пространстве между ФМ-гранулами. Наличие таких диспергированных атомов может приводить к существенному усилению электронного туннелирования между гранулами ниже порога перколяции x_p . В этой ситуации можно ожидать роста межгранульных обменных взаимодействий, проявления эффектов суперферромагнитного упорядочения и сдвига перехода к суперпарамагнитному поведению гранулированной системы в область более низких содержаний металла, $x < x_p$ [1, 2].

Примером подобных систем являются наногранулярные композиты $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ и $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$, свойства которых изучались нами в последние несколько лет [2] (здесь и далее сокращение CoFeB обозначает ФМ-сплав $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$). Наличие высокой концентрации парамагнитных (ПМ) ионов в тонких пленках таких НК подтверждалось резким ростом их магнитной восприимчивости в области низких температур. Исследования электропроводности пленок показали, что с увеличением содержания в них металлической ФМ-фазы x переход изолятор–металл происходит при концентрациях x_c заметно ниже порога перколяции x_p . При этом в области концентраций $x_c < x < x_p$ НК демонстрируют необычную логарифмическую температурную зависимость проводимости, $\sigma \propto \ln T$, что можно объяснить в рамках модели [3] наличием сильной туннельной связи между гранулами. Для системы $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ такое поведение наблюдалось при концентрациях $x \approx 43$ –48 ат. %, а для системы $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ — при $x \approx 49$ –56 ат. %.

В работе [4] методом ферромагнитного резонанса (ФМР) при комнатной температуре исследовались свойства пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с различной концентрацией x . Оказалось, что существенное изменение формы линии ФМР пленок происходит при переходе через границу $x_c \approx 43$ ат. %, которая соответствует переходу изолятор–металл в изучаемой системе. Было показано, что при $x < x_c$ форма линии ФМР определяется неоднородностью пленок из-за разброса магнитной анизотропии гранул. При $x > x_c$ поведение ширины линии ФМР описывалось в рамках модели двухмагнетонного рассеяния, свидетельствуя о формировании магнитно-однородной пленки.

Наблюдаемые особенности можно объяснить высокой концентрацией ионов Fe и Co, диспергированных в матрице LiNbO_3 . Наличие таких ионов при-

водит к существенному усилению межгранульного туннелирования выше $x_c \approx 43$ ат. %, что сопровождается также значительным ростом обменных взаимодействий между гранулами и изменением механизмов магнитной релаксации НК при переходе через границу $x_c \approx 43$ ат. %.

Косвенное подтверждение наличия ПМ-ионов, диспергированных в матрице диэлектрика и обменно-связанных с ФМ-подсистемой, было также обнаружено в работе [5] при исследовании температурной зависимости ФМР пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$. В области низких температур пик ФМР демонстрировал особенности поведения, характерные для так называемого эффекта медленной ионной релаксации, проявляющегося при наличии в системе взаимодействующих ФМ- и ПМ-подсистем.

В настоящей работе проводятся детальные исследования магнитного резонанса при комнатной температуре для НК-систем $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ и $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$. Помимо обычного сигнала ФМР мы сообщаем о наблюдении дополнительного более слабого резонансного пика, который может являться прямым свидетельством наличия ПМ-ионов в матрице изолятора и их обменного взаимодействия с ФМ-гранулами.

2. ОБРАЗЦЫ

Пленки НК M_xD_{100-x} толщиной около 1 мкм синтезированы методом ионно-лучевого распыления на ситалловых подложках с использованием составных мишеней из литых пластин сплава $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ и оксидов Al_2O_3 , либо LiNbO_3 (подробности см. в [2, 6]).

Структурные исследования пленок, выполненные методами электронной микроскопии, показали, что НК представляет собой ансамбль кристаллических наногранул сплава CoFe с ОЦК-структурой, находящихся в аморфной оксидной матрице [7, 8]. В случае НК $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ гранулы имеют округлую форму с диаметром 2–4 нм, тогда как в НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ гранулы оказываются вытянутыми в направлении роста НК до 10–15 нм при поперечных размерах 2–4 нм.

Отметим, что согласно результатам [7, 8] значительная часть Co, Fe и B присутствует в диэлектрической матрице в виде отдельных атомов. В этой ситуации используемое значение x для концентрации ФМ-фазы CoFeB лишь отражает номинальный ато-

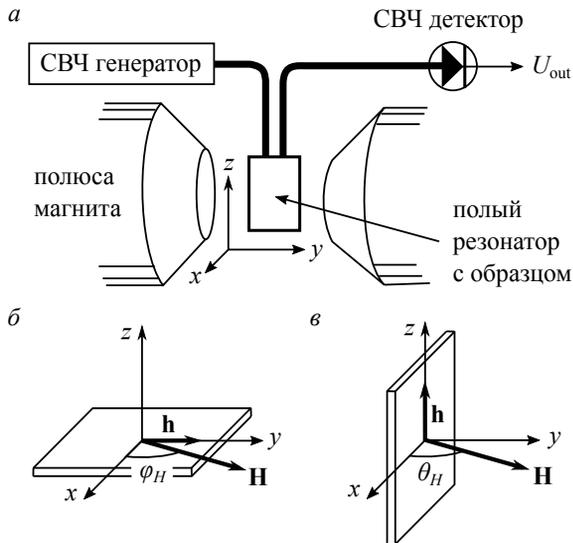


Рис. 1. Схема измерения (а) и два вида используемой геометрии возбуждения резонанса в пленке (б, в)

марный состав НК. При этом количество изолированных магнитных ионов, находящихся вне ФМ-гранул, сопоставимо с числом таких ионов в самих гранулах.

Магнитный резонанс НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ изучался в диапазоне концентраций ФМ-фазы $x = 32\text{--}48$ ат.%, а для НК $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ — в диапазоне концентраций $x = 47\text{--}56$ ат.%. Исследуемые образцы пленок имели прямоугольную форму размером около 5×5 мм², либо форму двойного холловского креста на подложках размером около 4×6 мм² [6].

3. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Магнитный резонанс исследовался при комнатной температуре в диапазоне частот 7–38 ГГц на лабораторном спектрометре проходного типа (рис. 1а). Образец размещался внутри полого резонатора между полюсами электромагнита, создающего горизонтальное магнитное поле до 17 кЭ. При этом поворотом магнита вокруг вертикальной оси можно было менять направление поля в горизонтальной плоскости (xy).

В качестве резонансной полости в области низких частот до 15 ГГц использовался прямоугольный резонатор, в котором возбуждалась одна из собственных мод E_{011} , E_{012} , E_{013} с частотами соответственно 7.65, 10.2 и 13.5 ГГц. На более высоких частотах применялся перестраиваемый цилиндрический резонатор, позволяющий непрерывно менять

собственную частоту от 15 ГГц. При этом в диапазоне частот 15–27 ГГц в резонаторе возбуждалась одна из собственных мод H_{01n} ($n = 1\text{--}4$). На более высоких частотах ($f > 27$ ГГц) использовались высшие моды колебаний, идентификация которых была затруднена.

При указанных условиях имелась возможность проводить эксперименты в двух геометриях (рис. 1б, в). В первом случае (рис. 1б) образец размещался в горизонтальной плоскости на дне резонатора вблизи пучности магнитного СВЧ-поля \mathbf{h} . При этом внешнее поле \mathbf{H} лежало в плоскости пленки, и поворотом магнита можно было изменять его ориентацию относительно \mathbf{h} , т.е. непрерывно менять геометрию возбуждения резонанса от $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$ (при $\varphi_H = 0$) до $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ (при $\varphi_H = 90^\circ$).

Во втором случае (рис. 1в) образец размещался в вертикальной плоскости на боковой стенке прямоугольного резонатора, либо вблизи оси симметрии цилиндрического резонатора. В этой ситуации СВЧ-поле \mathbf{h} ориентировано вертикально, а поворотом магнита можно изменять направление внешнего поля \mathbf{H} относительно плоскости пленки (угол θ_H). При этом независимо от угла θ_H реализуется поперечная геометрия возбуждения резонанса $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$.

Для регистрации эффекта резонансного поглощения измерялась полевая зависимость сигнала на СВЧ-детекторе $U_{out}(H)$, пропорционального мощности, прошедшей через резонатор с образцом. На рис. 2а приведены примеры записей сигнала ФМР, наблюдаемого в виде провала на зависимости $U_{out}(H)$, для одного из образцов в геометрии рис. 1б.

Отметим, что при $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$ в пике поглощения ФМР наблюдается сильное (в разы) падение сигнала U_{out} . В геометрии $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ пик ФМР существенно ослабевает, однако не исчезает полностью. Это связано со сложностью практической реализации строгого условия $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ из-за конечных размеров образца и неоднородности поля \mathbf{h} в резонаторе (особенно цилиндрическом).

Большая амплитуда сигнала ФМР в геометрии $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$ приводит к искажению формы кривой $U_{out}(H)$ по сравнению с высокочастотной восприимчивостью образца $\chi(H)$, которая характеризует поглощаемую в нем мощность $P \sim \chi f h^2$. В рассматриваемой схеме измерения восприимчивость χ связана с U_{out} соотношением $\chi \propto 1/\sqrt{U_{out}}$ (с точностью до постоянного слагаемого) [9]. На рис. 2б показаны кривые $\chi(H)$, полученные соответствующим пересчетом из экспериментальных кривых $U_{out}(H)$. Указанная процедура позволяет в значительной мере устранить искажение исходных спектральных ли-

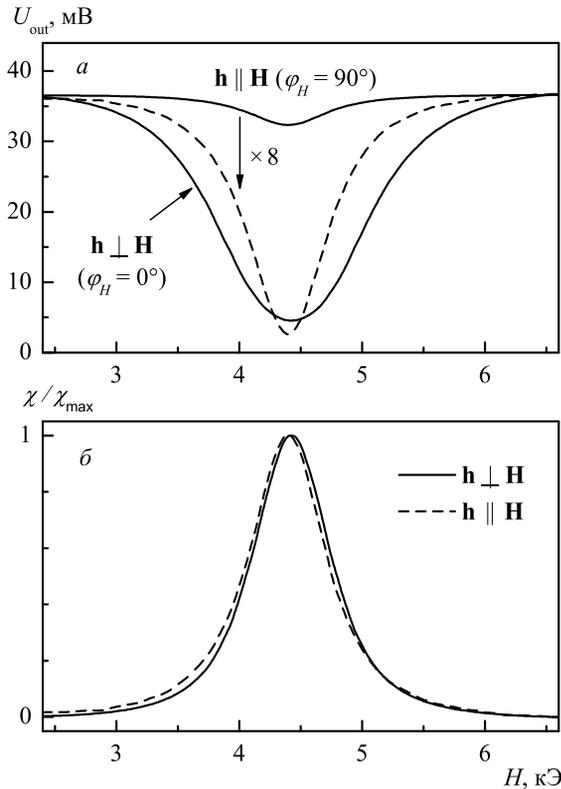


Рис. 2. а) Экспериментальные записи сигнала ФМР в поперечной ($\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$) и продольной ($\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$) геометрии возбуждения резонанса для пленки $(\text{CoFeB})_{51}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{49}$ на частоте $f = 20.4$ ГГц. Штриховой линией показан спектр для $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ в увеличенном масштабе. б) Нормированная высокочастотная восприимчивость $\chi \propto 1/\sqrt{U_{out}}$ в двух геометриях

ний. В частности, форма кривых $\chi(H)$ в геометриях $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$ и $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ практически совпадает, в отличие от исходных кривых $U_{out}(H)$ ¹⁾.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

4.1. Пленки $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$

Исследования спектров магнитного резонанса пленочных НК в случае поля, ориентированного в плоскости пленки, показали, что помимо обычного сигнала ФМР в более слабых полях присутствует дополнительный пик поглощения. При этом, в отличие от обычного ФМР, возбуждаемого попереч-

¹⁾ Небольшой сдвиг пика поглощения (~ 30 Э), наблюдаемый при изменении ориентации внешнего поля φ_H (рис. 2б), может быть связан с присутствием небольшой наведенной роторной анизотропии в плоскости пленки. Этот эффект, однако, слаб, и в дальнейшем им можно пренебречь по сравнению с интересующими нас более сильными эффектами.

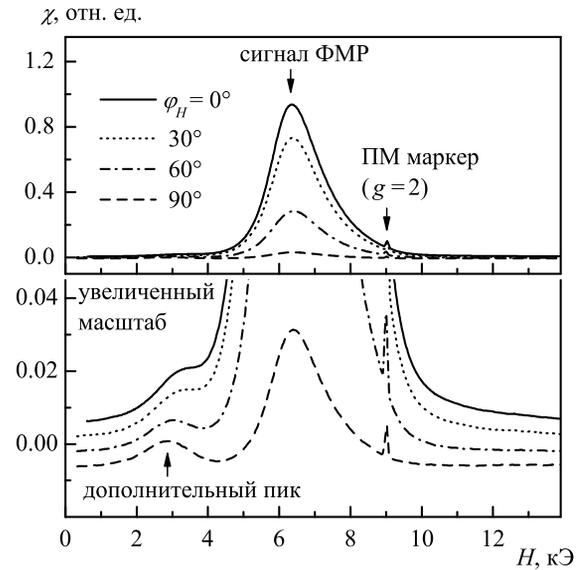


Рис. 3. Экспериментальные спектры поглощения для образца $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ на частоте $f = 25.0$ ГГц при изменении геометрии возбуждения резонанса от поперечной ($\varphi_H = 0^\circ$) до продольной ($\varphi_H = 90^\circ$)

ным СВЧ-полем, дополнительный пик демонстрирует слабую зависимость амплитуды от геометрии возбуждения резонанса. Наиболее ярко этот пик проявляется при продольном возбуждении резонанса, когда сигнал обычного ФМР существенно подавлен (рис. 3). Заметим, что наблюдаемая форма спектров поглощения не меняется при изменении мощности СВЧ-накачки в широком диапазоне порядка 30 дБ, что свидетельствует об отсутствии нелинейных эффектов при возбуждении резонанса.

Дополнительный пик наблюдается для всех образцов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ в диапазоне концентраций $x = 32-48$ ат. % (рис. 4). С увеличением содержания ФМ-фазы пик слегка сдвигается в сторону слабых полей. При этом происходит его уширение и уменьшение интенсивности, в отличие от обычного сигнала ФМР, интенсивность которого, наоборот, растет с увеличением x .

Положение дополнительного пика зависит как от частоты возбуждения резонанса, так и от ориентации поля относительно плоскости пленки. Далее на рис. 5–10 мы приводим экспериментальные данные для образца $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$. Результаты для остальных пленок выглядят похожим образом.

В случае ориентации магнитного поля в плоскости пленки по мере увеличения частоты возбуждения резонанса дополнительный пик сдвигается в более высокие поля (рис. 5). В области низких частот он исчезает.

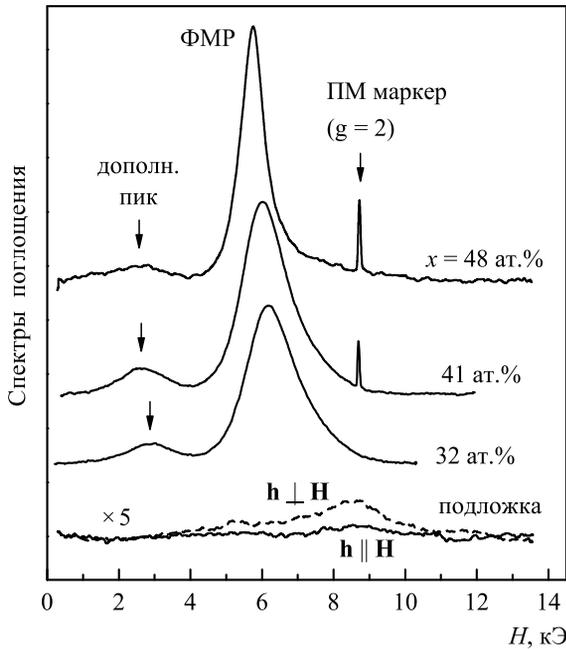


Рис. 4. Экспериментальные спектры поглощения для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ ($x = 32\text{--}48$ ат. %) на частоте $f = 24.5$ ГГц в касательном поле при продольном возбуждении резонанса ($\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$). Для сравнения показаны спектры подложки при $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ и $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$

Результирующие частотно-полевые зависимости (рис. 6) для основного пика ФМР $f_1(H)$ хорошо описываются известной формулой Киттеля

$$f_1(H) = \gamma_1 \sqrt{H(H + 4\pi M)}, \quad (1)$$

где гиромангнитное отношение γ_1 имеет значение $\gamma_1 \approx 2.97$ ГГц/кЭ, типичное для сплавов CoFeB, а величина поля размагничивания $4\pi M$ зависит от содержания ФМ-фазы x . С ростом x от 32 до 48 ат. % величина $4\pi M$ монотонно увеличивается от 4.77 до 5.8 кЭ (см. также [4]).

Зависимость $f_2(H)$ для дополнительного пика имеет существенно другой характер. Она с хорошей точностью ложится на прямую линию:

$$f_2(H) = \gamma_2 H + f_0, \quad (2)$$

где эффективное гиромангнитное отношение $\gamma_2 \approx 6.0$ ГГц/кЭ примерно в 2 раза больше обычного гиромангнитного отношения для электронного спина. Частота в нулевом поле f_0 слегка растет с увеличением концентрации ФМ-фазы — от $f_0 \approx 7.8$ ГГц при $x = 32$ ат. % до $f_0 \approx 9.0$ ГГц при $x = 48$ ат. %.

При отклонении магнитного поля из плоскости пленки дополнительный пик сдвигается в сторону высоких полей, аналогично обычному пику ФМР (рис. 7).

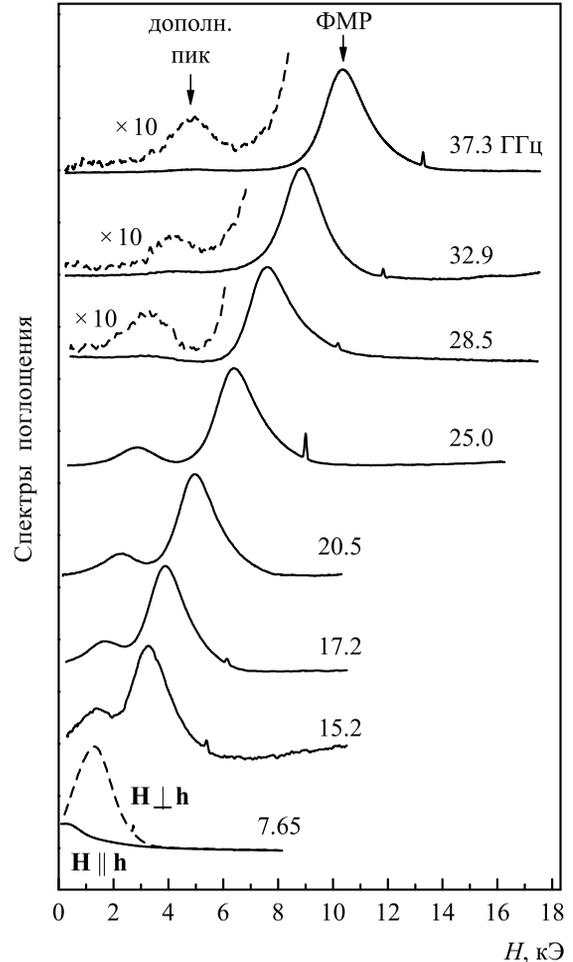


Рис. 5. Экспериментальные спектры поглощения для пленки $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ в касательном поле на разных частотах при продольном возбуждении резонанса $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$. Для частоты $f = 7.65$ ГГц показан также спектр в случае $\mathbf{h} \perp \mathbf{H}$

В случае ориентации магнитного поля нормально пленке, так же как и в касательной геометрии, дополнительный пик возникает на частотах выше $f_0 \sim 10$ ГГц и по мере увеличения частоты сдвигается в высокие поля (рис. 8).

Результирующие частотно-полевые зависимости $f(H)$ обоих наблюдаемых пиков для пленки $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ в нормальной геометрии показаны на рис. 9.

В области высоких частот зависимость $f_1(H)$ для пика ФМР описывается линейной функцией в соответствии с формулой Киттеля

$$f_1(H) = \gamma_1(H - 4\pi M) \quad (3)$$

(кривая 1 на рис. 9). Однако при низких частотах наблюдается отклонение $f_1(H)$ от линейной зависи-

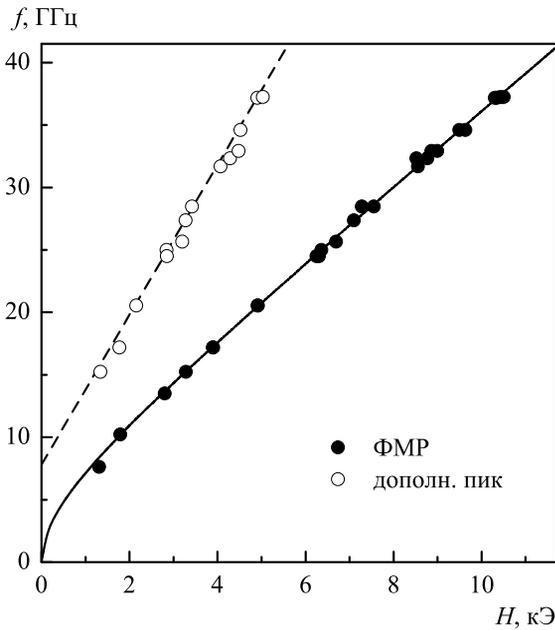


Рис. 6. Частотно-полевые диаграммы пиков магнитного резонанса для пленки $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ в касательном поле. Точки — эксперимент, сплошная линия — формула Киттеля (1), штриховая — линейная зависимость (2)

мости. Это отклонение может быть вызвано магнитной неоднородностью пленки и эффектами суперпарамагнетизма. В этом случае величина $4\pi M$, входящая в формулу (3), не является константой, а зависит от магнитного поля.

На рис. 10 показана зависимость $4\pi M(H)$, полученная с помощью формулы (3) из экспериментальных данных по $f_1(H)$. Видно, что вместо резкого линейного выхода на постоянное значение $4\pi M_S \approx 4.77$ кЭ, которое ожидалось бы для «идеальной» ФМ-пленки, имеется плавное приближение к насыщению. Поведение статической намагниченности (см. вставку к рис. 10), измеренное с помощью СКВИД-магнитометра, хорошо коррелирует как по форме, так и по величине с зависимостью $4\pi M(H)$, найденной из измерений ФМР. Форма кривой $4\pi M(H)$ определяется совокупностью многих факторов: суперпарамагнетизмом наногранул, разбросом их размеров и анизотропии, наличием межгранульных взаимодействий (см., например, [10]). Последовательный учет всех этих факторов чрезмерно сложен. Для дальнейших целей ради простоты мы аппроксимируем зависимость $4\pi M(H)$ эмпирической функцией

$$4\pi M(H) = H + H_S - (H^n + H_S^n)^{1/n} \quad (4)$$

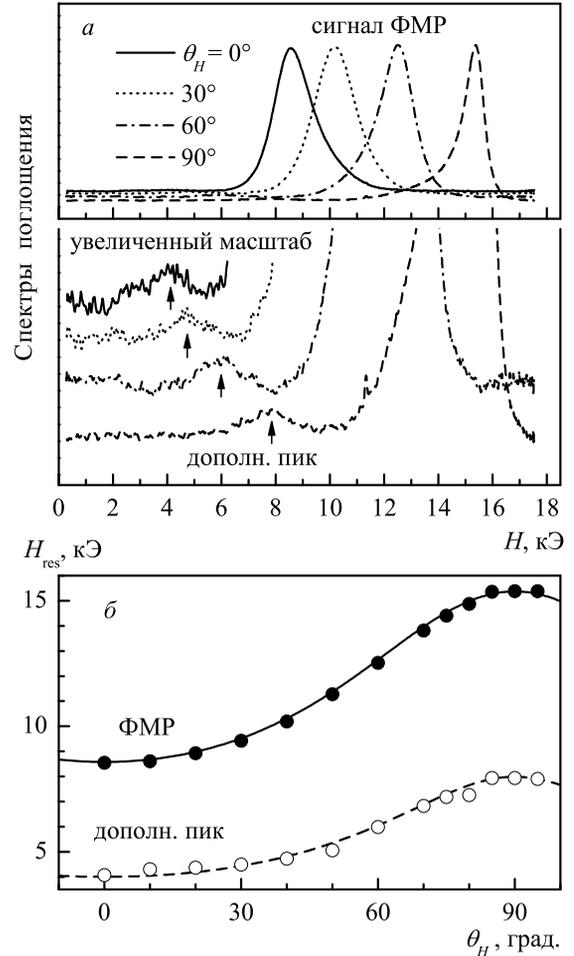


Рис. 7. а) Экспериментальные спектры поглощения НК $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ на частоте 31.7 ГГц при разной ориентации поля относительно плоскости пленки. б) Результирующие угловые зависимости поля резонанса $H_{res}(\theta_H)$. Точки — эксперимент, линии — расчет

с параметрами $n \approx 3.0$ и $H_S = 4\pi M_S \approx 5.0$ кЭ²).

Аппроксимация зависимости $f_1(H)$ для пика ФМР формулой Киттеля (3) с учетом полевой зависимости $4\pi M(H)$ согласно (4) показана на рис. 9 (кривая 2).

Оказалось, что зависимость $f_2(H)$ для дополнительного пика в нормальном поле можно описать формулой, аналогичной формуле (2) для случая касательного поля, с теми же значениями γ_2 и f_0 , но

²⁾ Выбранная функция (4) обладает «подходящими» свойствами, характерными для экспериментальных зависимостей $4\pi M(H)$: ее производная в нуле равна 1, а при больших H она приближается к насыщению как $1/H^{n-1}$. При $n \rightarrow \infty$ функция (4) описывает поведение для «идеальной» ФМ-пленки с резким выходом на насыщение в поле H_S .

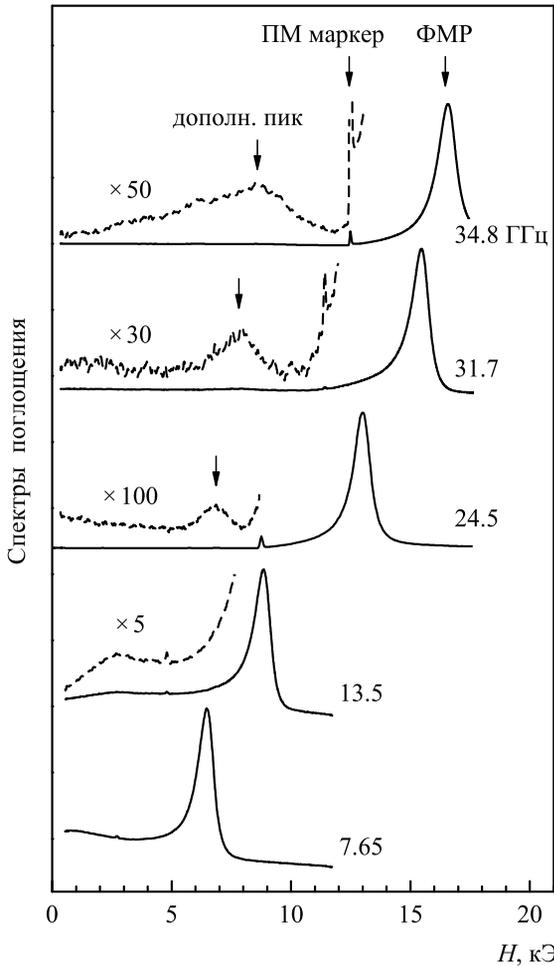


Рис. 8. Экспериментальные спектры поглощения для пленки $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ на разных частотах в поле, ориентированном нормально плоскости

с учетом замены поля H на $H - 4\pi M$:

$$f_2(H) = \gamma_2(H - 4\pi M) + f_0. \quad (5)$$

На рис. 9 показаны соответствующие расчетные зависимости $f_2(H)$ для образца $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ в приближении «идеальной» ФМ-пленки с $4\pi M \approx 4.77$ кЭ (кривая 3) и с учетом полевой зависимости $4\pi M(H)$ по формуле (4) (кривая 4). Как видим, во втором случае имеется приемлемое согласие с экспериментальными данными.

4.2. Происхождение дополнительного пика

Чтобы понять природу наблюдаемого дополнительного пика, прежде всего заметим, что найденное нами для него гиромагнитное отношение $\gamma_2 \approx 6.0$ ГГц/кЭ соответствует эффективному g -фактору $g \approx 4.3$. Это значение характерно для элект-

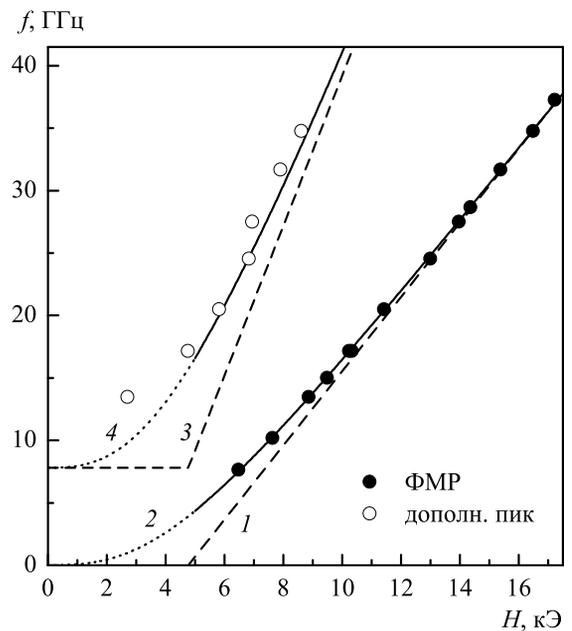


Рис. 9. Частотно-полевые диаграммы для пленки $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ в нормальном поле. Точки — эксперимент, линии — расчет с использованием формул из текста: 1 — формула Киттеля (3), 2 — формула Киттеля с учетом зависимости $4\pi M(H)$ (4), 3 — формула (5), 4 — формула (5) с учетом (4)

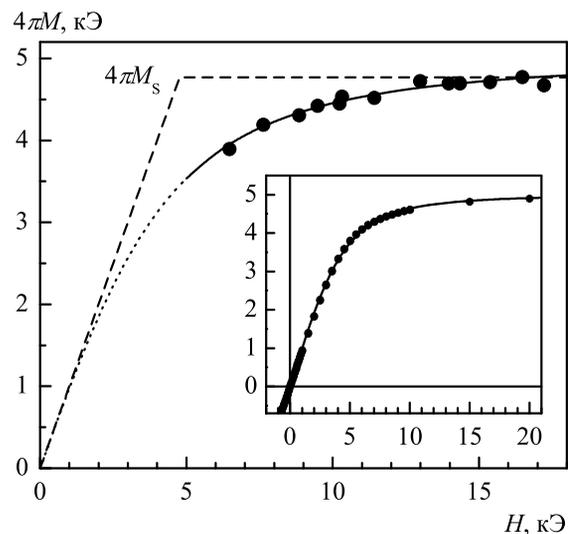


Рис. 10. Зависимость $4\pi M(H)$, полученная из данных ФМР для пленки $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ в нормальном поле (точки). Штриховая линия — теоретическая зависимость для «идеальной» ФМ-пленки, сплошная линия — аппроксимация функцией (4). На вставке показана кривая $4\pi M(H)$ в нормальном поле по данным магнитометрии (точки) и ее аппроксимация функцией (4) (линия)

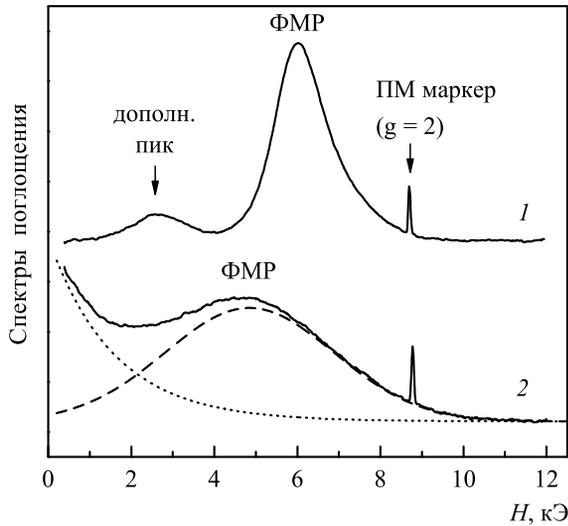


Рис. 11. Сравнение спектров магнитного резонанса для пленок $(\text{CoFeB})_{41}(\text{LiNbO}_3)_{59}$ (1) и $\text{Co}_{41}(\text{LiNbO}_3)_{59}$ (2) на частоте 24.5 ГГц в касательном поле ($\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$). В случае структуры $\text{Co}_{41}(\text{LiNbO}_3)_{59}$ спектр демонстрирует экспоненциальный рост поглощения вблизи $H = 0$ (пунктирная линия), на фоне которого видна широкая линия ФМР гауссовой формы (штриховая линия)

ронного парамагнитного резонанса (ЭПР) ионов переходных элементов с электронной конфигурацией $3d^5$ в аморфных твердотельных матрицах (стеклах, керамиках и т. п.) [11–13]. В нашем случае в качестве таких ионов могут выступать ионы Fe^{3+} , присутствующие в диэлектрической среде в промежутках между ФМ-гранулами. Отметим, что в отличие от ионов Fe^{3+} , ЭПР ионов Fe^{2+} и Co^{2+} , как правило, не проявляется при комнатной температуре [12–14].

Для дополнительной проверки нашего предположения мы провели сравнение спектров магнитного резонанса пленок НК на основе диэлектрической матрицы LiNbO_3 с различным составом металлической ФМ-фазы — CoFeB и Co (структурные и магнитные свойства образцов $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ подробно обсуждаются в работе [15]). Спектры образцов $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ демонстрируют сильно уширенную линию ФМР и значительное поглощение вблизи $H = 0$ (рис. 11). Эти особенности можно связать с существенно возросшим магнитным гистерезисом для структур $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ по сравнению с $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ [15]. В то же время, дополнительный пик поглощения, наблюдаемый для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, в случае $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ отсутствует. Данный факт свидетельствует в пользу предположения, что этот пик обусловлен ЭПР ионов Fe^{3+} .

Линия ЭПР с изотропным g -фактором $g \approx 4.3$ ранее наблюдалась для различных аморфных оксидных матриц, допированных ионами Fe , включая интересные нас LiNbO_3 и Al_2O_3 [16, 17]. В нашем случае, однако, линия с $g \approx 4.3$ не является «изотропной» — положение пика поглощения зависит от ориентации магнитного поля относительно плоскости пленки. Кроме того, частотно-полевая зависимость демонстрирует дополнительную спектральную «щель» в нулевом поле, т. е. конечную частоту резонанса при $H = 0$.

Эти особенности поведения пика с $g \approx 4.3$ можно объяснить наличием взаимодействия ПМ- и ФМ-подсистем, сосуществующих в пленке НК, т. е. подсистем ПМ-ионов и ФМ-гранул. Можно предположить, что частота резонанса в ПМ-подсистеме определяется эффективным полем H_{eff} , действующим на нее со стороны ФМ-подсистемы:

$$f_2 = \gamma_2 H_{eff}. \quad (6)$$

Помимо внешнего поля H , поле H_{eff} должно включать поле размагничивания и эффективное обменное поле, создаваемое ФМ-подсистемой. Формально выражение для H_{eff} можно получить, рассмотрев магнитную энергию системы в виде суммы энергий зеемановского расщепления, магнитной анизотропии формы и обменного взаимодействия:

$$E = -\mathbf{H}(\mathbf{M} + \mathbf{m}) + 2\pi(\mathbf{M} + \mathbf{m}, \mathbf{n})^2 - J\mathbf{M}\mathbf{m},$$

где \mathbf{M} и \mathbf{m} — намагниченности ФМ- и ПМ-подсистем ($|\mathbf{m}| \ll |\mathbf{M}|$), 2π — размагничивающий фактор, \mathbf{n} — нормаль к плоскости пленки, J — обменная константа. Тогда искомое поле

$$\mathbf{H}_{eff} = -\partial E / \partial \mathbf{m} \approx \mathbf{H} - 4\pi(\mathbf{M}, \mathbf{n})\mathbf{n} + J\mathbf{M}.$$

Подставляя абсолютную величину H_{eff} в (6), получаем формулу для частоты ЭПР:

$$f_2 = \gamma_2 H_0 + f_0, \quad (7)$$

где

$$H_0 = \sqrt{H^2 \cos^2 \theta_H + (H \sin \theta_H - 4\pi M \sin \theta)^2},$$

где θ — угол отклонения намагниченности \mathbf{M} из плоскости пленки. При этом спектральная щель в нулевом поле f_0 определяется обменным взаимодействием ФМ- и ПМ-подсистем:

$$f_0 = \gamma_2 J\mathbf{M}. \quad (8)$$

В «касательной» ($\theta_H = \theta = 0$) и «нормальной» ($\theta_H = 90^\circ$) геометрии выражение (7) приводит к обобщающимся выше формулам соответственно (2) и

(5). При произвольной ориентации вектора \mathbf{H} относительно плоскости пленки равновесное направление вектора \mathbf{M} определяется известным соотношением [18]:

$$2H \sin(\theta_H - \theta) = 4\pi M \sin 2\theta. \quad (9)$$

В этом случае величину резонансного поля $H_{res}(\theta_H)$ для ПМ-пика при заданной частоте f можно найти из уравнений (7) и (9) в явном виде:

$$H_{res}(\theta_H) = \left[\frac{\cos^2 \theta_H}{H_0^2} + \frac{\sin^2 \theta_H}{(H_0 + 4\pi M)^2} \right]^{-1/2}, \quad (10)$$

где $H_0 = (f - f_0)/\gamma_2$.

В то же время для пика ФМР поле $H_{res}(\theta_H)$ определяется численно из условия (9) и известных соотношений для частоты резонанса [18]:

$$f_1 = \gamma_1 \sqrt{H_1 H_2},$$

где

$$\begin{aligned} H_1 &= H \cos(\theta_H - \theta) - 4\pi M \sin^2 \theta, \\ H_2 &= H \cos(\theta_H - \theta) + 4\pi M \cos 2\theta. \end{aligned}$$

На рис. 7б показано сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей $H_{res}(\theta_H)$ для ФМ- и ПМ-пиков в пленке $(\text{CoFeB})_{32}(\text{LiNbO}_3)_{68}$ на частоте 31.7 ГГц. Используемые параметры $\gamma_1 = 2.97$ ГГц/кЭ, $\gamma_2 = 6.0$ ГГц/кЭ, $f_0 = 7.8$ ГГц и $4\pi M = 4.7$ кЭ (для ФМ-пика) совпадают с параметрами, полученными при аппроксимации частотно-полевых зависимостей в касательной и нормальной геометриях. Для ПМ-пика использовано уменьшенное значение $4\pi M = 4.0$ кЭ с учетом обсуждавшейся выше поправки на неполное насыщение пленки в нормальном поле. Как видно на рис. 7б, расчетные угловые зависимости $H_{res}(\theta_H)$ хорошо согласуются с экспериментом.

Экспериментально полученная величина f_0 позволяет сделать оценку обменного взаимодействия ФМ- и ПМ-подсистем. Для исследованных НК $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ средняя энергия обмена ПМ-ионов с ФМ-гранулами составляет $\varepsilon = hf_0 \approx 0.03$ мэВ (здесь h — постоянная Планка). Небольшой рост f_0 , наблюдаемый при увеличении концентрации x , можно объяснить усилением обмена между ФМ-гранулами и ПМ-ионами из-за уменьшения среднего расстояния между ними.

Беспорядок в расположении ФМ-гранул и ПМ-ионов в диэлектрической матрице должен приводить к существенному разбросу величины ε . Этот разброс $\Delta\varepsilon$ можно оценить из ширины линии

ПМ-резонанса ΔH . В области низких частот имеем $\Delta H \sim 1$ кЭ, что дает разброс по частоте $\Delta f = \gamma_2 \Delta H \sim f_0$. В итоге получаем оценку $\Delta\varepsilon \sim \varepsilon$, что можно считать ожидаемым результатом, учитывая высокую степень беспорядка в системе.

Резюмируя сказанное выше, можно сказать, что предлагаемая интерпретация дополнительного пика как ЭПР ионов Fe^{3+} , диспергированных в диэлектрической матрице, выглядит правдоподобной. До сих пор мы оставляли за скобками вопрос, почему в рассматриваемом случае интенсивность линии ЭПР слабо зависит от геометрии возбуждения резонанса. Причиной такого не совсем обычного поведения могут являться обменные и магнитодипольные взаимодействия между ПМ-ионами. Известно, что такие взаимодействия могут приводить к модификации правил отбора и условий возбуждения для переходов между различными уровнями энергии ПМ-ионов. В частности, возникает конечная вероятность вынужденных переходов под действием продольного возбуждающего поля [14].

Заметим, что при описанном сценарии также становятся возможными «запрещенные» переходы внутри спиновых мультиплетов ПМ-ионов с изменением проекции спина $\Delta m_S = \pm 2$. Если спектральный фактор расщепления мультиплетов близок к электронному $g_e \approx 2.0$ (например, в случае ионов Fe^{3+} в слабом кристаллическом поле), то такие переходы также могут приводить к появлению линии поглощения с эффективным g -фактором $g \approx 2g_e \approx 4$.

4.3. Структуры $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$

Особенности спектров магнитного резонанса, наблюдаемые в системах на основе диэлектрической матрицы LiNbO_3 , воспроизводятся и для НК-пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$. Такие структуры также показывают присутствие дополнительного пика магнитного резонанса в полях меньших поля ФМР, который возбуждается с одинаковой интенсивностью как поперечным, так и продольным полем. В отличие от образцов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, изучавшихся выше, пленки $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ в исследуемом диапазоне $x \approx 47-56$ ат. % демонстрируют гораздо более выраженную концентрационную зависимость положения дополнительного пика (рис. 12).

На рис. 13 показаны результирующие частотно-полевые диаграммы $f(H)$ для трех пленок с $x \approx 47-56$ ат. % в магнитном поле, приложенном в плоскости пленки. В случае линии ФМР экспериментальные зависимости $f(H)$ описываются стан-

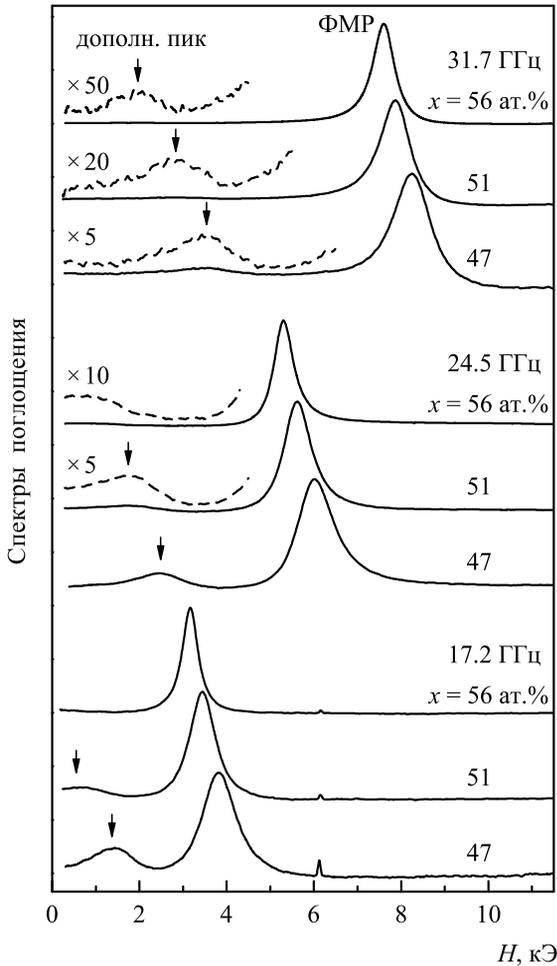


Рис. 12. Экспериментальные спектры поглощения для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ с содержанием ФМ-фазы $x \approx 47, 51$ и 56 ат.%, полученные на разных частотах при продольном возбуждении резонанса $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$ в магнитном поле, приложенном в плоскости пленки. Виден интенсивный пик ФМР и более слабый дополнительный пик (показан стрелками)

Таблица. Параметры аппроксимации кривых $f(H)$ на рис. 13 для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$

x , ат. %	γ_1 , ГГц/кЭ	$4\pi M$, кЭ	γ_2 , ГГц/кЭ	f_0 , ГГц
47	2.92	5.8	6.0	9.0
51	$(g \approx 2.1)$	7.0	$(g \approx 4.3)$	13.8
56		8.1		19.8

дартной формулой Киттеля (1) (параметры аппроксимации приведены в таблице).

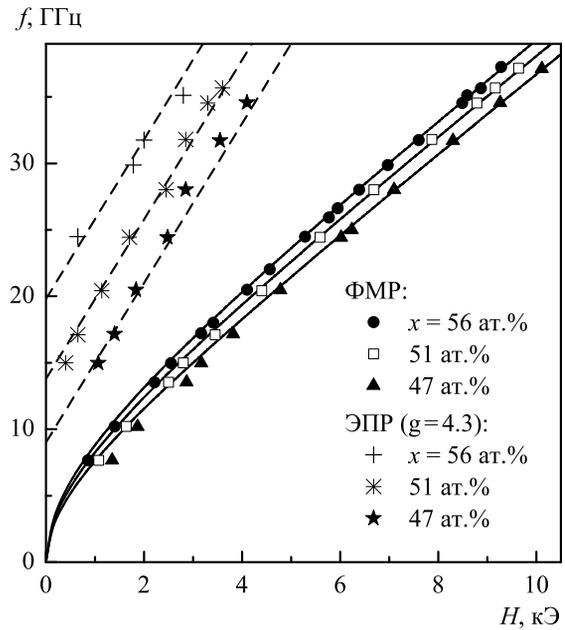


Рис. 13. Частотно-полевые диаграммы для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ в касательном поле. Точки — эксперимент, сплошные линии построены по формуле Киттеля (1), штриховые линии — линейные зависимости (2) с эффективным g -фактором $g = 4.3$ (подгоночные параметры приведены в таблице)

Дополнительный пик демонстрирует линейную зависимость $f(H)$ типа (2) с эффективным g -фактором $g = 4.3$, что подтверждает его связь с ЭПР ионов Fe^{3+} . При этом величина спектральной щели f_0 растет с увеличением содержания ФМ-фазы x , в согласии с предложенной выше интерпретацией. Действительно, при приближении к порогу перколяции $x_p \approx 56$ ат. % вполне естественно ожидать существенного усиления обменных взаимодействий между ПМ-ионами и ФМ-гранулами, что и приводит к значительному росту величины f_0 (см. формулу (8)).

В геометрии «поле нормально плоскости» помимо интенсивного сигнала ФМР пленки демонстрируют еще три дополнительных более слабых пика поглощения (рис. 14). Результирующие частотно-полевые диаграммы $f(H)$ и угловые зависимости $H_{res}(\theta_H)$ для этих пиков показаны на рис. 15 и 16.

Поведение низкополевого пика (№1 на рис. 14) описывается в рамках предложенной модели ЭПР с $g = 4.3$ (формулы (5), (10)) с параметрами, приведенными в таблице. При этом, как и в случае образцов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, лучшее согласие с моделью достигается при учете поправки на неполное насыщение $4\pi M$ в области низких полей (с ис-

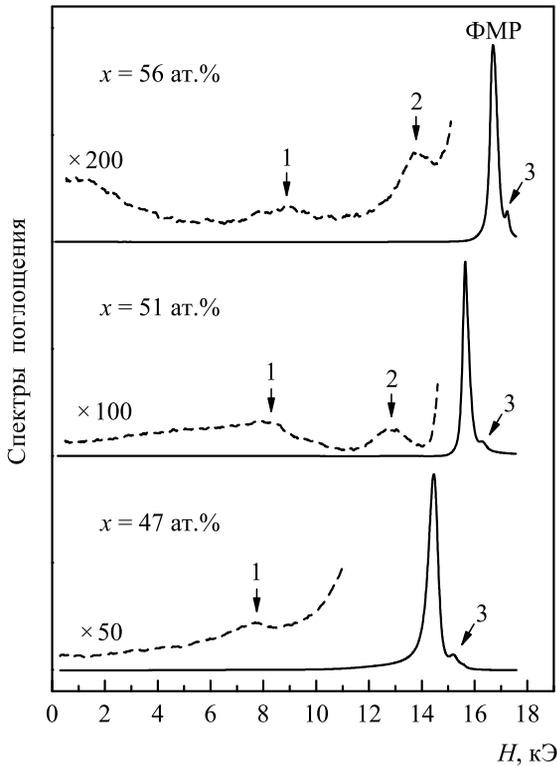


Рис. 14. Экспериментальные спектры поглощения для пленок $(\text{CoFeV})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ на частоте 25.0 ГГц в нормальном поле. Помимо основной линии ФМР, видны более слабые пики 1–3

пользованием описанной выше процедуры аппроксимации данных ФМР эмпирической функцией (4), см. рис. 17).

Оказывается, что поведение пика № 2 на рис. 14 также можно описать формулами (5), (10), если положить в них $\gamma_2 = 2.80$ ГГц/кЭ ($g = 2.0$). Таким образом, можно предположить, что этот пик также связан с ПМ-центрами в диэлектрической матрице, демонстрирующими обычный электронный фактор спектрального расщепления $g_e = 2.0$. В качестве таких центров могут выступать как изолированные ионы Fe^{3+} , так и малые кластеры сильно связанных ФМ-атомов [13]. Пик с $g = 2.0$ удается наблюдать лишь при ориентации магнитного поля вблизи нормали к плоскости и лишь для образцов с $x \approx 51$ и 56 ат.%. Только в этом случае его удается разрешить на фоне интенсивного, но достаточно узкого пика ФМР (см. рис. 16).

Величина спектральной щели f_0^* для пика № 2 оказывается несколько меньше значений f_0 для пика № 1 ($g = 4.3$), приведенных в таблице. Для пленки с $x \approx 51$ ат. % эта величина составляет $f_0^* \approx 8.0$ ГГц, а для пленки с $x \approx 56$ ат. % — $f_0^* \approx 9.0$ ГГц. В

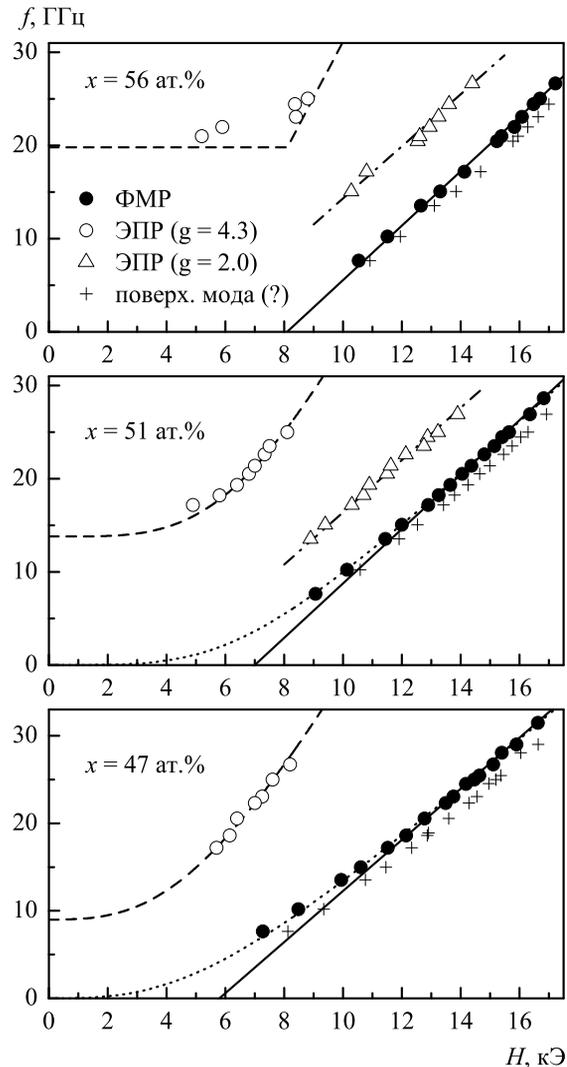


Рис. 15. Частотно-полевые диаграммы для пленок $(\text{CoFeV})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ в нормальном поле. Точки — эксперимент, линии — расчет

то же время интересно отметить, что эффективное обменное поле $H_{ex} = JM$, пересчитанное из f_0 по формуле (8) — $H_{ex} = f_0/\gamma_2$, имеет близкие значения для пиков с $g = 4.3$ (H_{ex}) и $g = 2.0$ (H_{ex}^*). Так, для пленки с $x \approx 51$ ат. % получаем $H_{ex} \approx 2.3$ кЭ, $H_{ex}^* \approx 2.9$ кЭ, а для пленки с $x \approx 56$ ат. % — $H_{ex} \approx 3.3$ кЭ, $H_{ex}^* \approx 3.2$ кЭ.

Происхождение узкого пика справа от основной линии ФМР (№ 3 на рис. 14) до конца не ясно. Подобный пик наблюдался нами ранее и для образцов $(\text{CoFeV})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ с достаточно высоким содержанием ФМ-фазы $x > 43$ ат. % [4]. Этот пик также проявляется только при ориентации магнитного поля вблизи нормали к плоскости пленки. Одно из возможных его объяснений — возбуждение по-

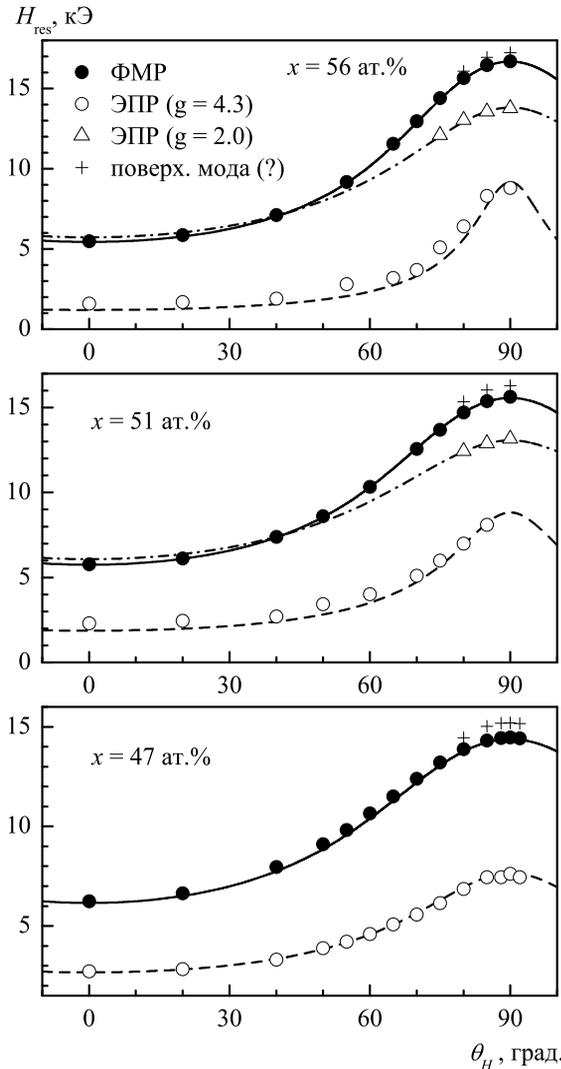


Рис. 16. Угловые зависимости поля резонанса $H_{res}(\theta_H)$ для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ на частоте 25.0 ГГц. Точки — эксперимент, линии — расчет

верхностных мод спин-волнового резонанса, для которых характерно наблюдаемое поведение. Однако не исключено и более тривиальное объяснение такого пика неоднородностью пленки (см. обсуждение и ссылки в работе [4]).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом магнитного резонанса исследованы пленки металл-диэлектрических наногранулярных композитов $(\text{CoFeB})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ и $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ с концентрацией металлической ФМ-фазы CoFeB вблизи и несколько ниже порога перколяции $x \lesssim 56$ ат. %. Магниторезонанс-

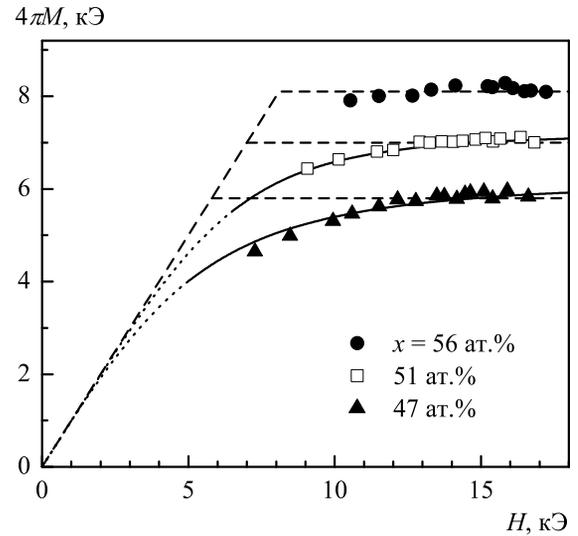


Рис. 17. Зависимости $4\pi M(H)$, полученные из данных ФМР для пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ в нормальном поле (точки). Штриховые линии — теоретические зависимости для «идеальной» ФМ-пленки, сплошные линии — аппроксимация функцией (4)

ные свойства структур изучены при комнатной температуре в широком диапазоне частот 7–38 ГГц при различных ориентациях магнитного поля относительно плоскости пленки.

Обнаружено, что экспериментальные спектры содержат линию ФМР, а также дополнительный более слабый пик резонансного поглощения, демонстрирующий ряд необычных свойств. Частотно-полевая зависимость $f(H)$ для этого пика в области высоких частот имеет линейный характер с эффективным g -фактором $g = 4.3$, что позволяет связать его с ЭПР ионов Fe^{3+} , присутствующих в аморфной диэлектрической матрице LiNbO_3 , либо Al_2O_3 . В то же время, в нулевом поле зависимость $f(H)$ демонстрирует наличие спектральной щели, величина которой увеличивается с ростом концентрации ФМ-фазы x . Появление такой щели мы связываем с наличием обменного взаимодействия ПМ-ионов с ФМ-гранулами, которое растет с увеличением x . Помимо концентрации x положение пика ЭПР зависит также от угла приложения поля относительно плоскости пленки. Этот эффект мы объясняем влиянием поля размагничивания, создаваемого массивом ФМ-гранул. Наконец, еще одной особенностью наблюдаемого пика является слабая зависимость его амплитуды от геометрии возбуждения резонанса, что может быть связано с наличием обменных, либо магнитодипольных взаимодействий между ПМ-ионами.

Таким образом, обнаруженные особенности спектров магнитного резонанса исследуемых структур свидетельствуют о присутствии в диэлектрической матрице ПМ-ионов, связанных обменным взаимодействием с системой ФМ-гранул. Полученные результаты подтверждают существенную роль таких ионов в формировании ФМ-порядка в изучаемых пленках нанокomпозитов с содержанием ФМ-фазы ниже порога перколяции.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-29-00392) в части исследования магниторезонансных и электрофизических свойств нанокomпозитных образцов, а также Российского фонда фундаментальных исследований в части синтеза нанокomпозитных пленок (проект № 19-29-03022).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Bedanta, O. Petracic, and W. Kleemann, *Handbook of Magnetic Materials. Chapter 1 Supermagnetism*, ed. by K. H. J. Buschow, Vol. 23, Elsevier (2015), p. 1.
2. В. В. Рыльков, А. В. Емельянов, С. Н. Николаев, К. Э. Никируй, А. В. Ситников, Е. А. Фадеев, В. А. Демин, А. Б. Грановский, *ЖЭТФ* **158**, 164 (2020).
3. К. В. Efetov and A. Tschersich, *Phys. Rev. B* **67**, 174205 (2003).
4. А. В. Drovosekov, N. M. Kreines, A. S. Barkalova, S. N. Nikolaev, V. V. Rylkov, and A. V. Sitnikov, *J. Magn. Magn. Mater.* **495**, 165875 (2020).
5. А. Б. Дровосеков, Н. М. Крейнс, А. С. Баркалова, С. Н. Николаев, А. В. Ситников, В. В. Рыльков, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 88 (2020).
6. В. В. Рыльков, С. Н. Николаев, В. А. Демин, А. В. Емельянов, А. В. Ситников, К. Э. Никируй, В. А. Леванов, М. Ю. Пресняков, А. Н. Талденков, А. Л. Васильев, К. Ю. Черноглазов, А. С. Веденев, Ю. Е. Калинин, А. Б. Грановский, В. В. Тугушев, А. С. Бугаев, *ЖЭТФ* **153**, 424 (2018).
7. V. V. Rylkov, S. N. Nikolaev, K. Yu. Chernoglazov, V. A. Demin, A. V. Sitnikov, M. Yu. Presnyakov, A. L. Vasiliev, N. S. Perov, A. S. Vedeneev, Yu. E. Kalinin, V. V. Tugushev, and A. B. Granovsky, *Phys. Rev. B* **95**, 144202 (2017).
8. V. V. Rylkov, A. V. Sitnikov, S. N. Nikolaev, V. A. Demin, A. N. Taldenkov, M. Yu. Presnyakov, A. V. Emelyanov, A. L. Vasiliev, Yu. E. Kalinin, A. S. Bugaev, V. V. Tugushev, and A. B. Granovsky, *J. Magn. Magn. Mater.* **459**, 197 (2018).
9. Г. Д. Богомолов, *Прикладная электродинамика: учебное пособие*, МФТИ, Долгопрудный (1979).
10. А. В. Drovosekov, N. M. Kreines, M. A. Milyaev, L. N. Romashev, and V. V. Ustinov, *Phys. Stat. Sol. (c)* **3**, 109 (2006).
11. Н. Н. Wickman, M. P. Klein, and D. A. Shirley, *J. Chem. Phys.* **42**, 2113 (1965).
12. T. Castner Jr., G. S. Newell, W. C. Holton, and C. P. Slichter, *J. Chem. Phys.* **32**, 668 (1960).
13. D. L. Griscom, *J. Non-Cryst. Sol.* **40**, 211 (1980).
14. С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев, *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп*, Наука, Москва (1972).
15. Е. А. Фадеев, М. А. Шахов, Е. Лахдеранта, А. Н. Талденков, А. Л. Васильев, А. В. Ситников, В. В. Рыльков, А. Б. Грановский, *ЖЭТФ* **160**, 903 (2021).
16. C. D. Fierro-Ruiz, O. Sánchez-Dena, E. M. Cabral-Larquier, J. T. Elizalde-Galindo, and R. Farías, *Crystals* **8**, 108 (2018).
17. R. Stösser and G. Scholz, *Appl. Magn. Reson.* **15**, 449 (1998).
18. Р. Суху, *Магнитные тонкие пленки*, Мир, Москва (1967).

СПИНОВЫЙ ТРАНСПОРТ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ InSb С РАЗЛИЧНОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Н. А. Виглин^{a*}, *Ю. В. Никулин*^{b,c}, *В. М. Цвелиховская*^a,

Т. Н. Павлов^a, *В. В. Проглядо*^a

^a *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

^b *СФИРЭ им. В. А. Котельникова Российской академии наук
410019, Саратов, Россия*

^c *СГУ им. Н. Г. Чернышевского
410012, Саратов, Россия*

Поступила в редакцию 2 декабря 2021 г.,
после переработки 11 декабря 2021 г.
Принята к публикации 22 декабря 2021 г.

В латеральных спиновых устройствах, изготовленных на полупроводниках InSb с различной концентрацией электронов, исследовались величина спин-индуцированного напряжения при эффекте Ханле и значение коэффициента спиновой поляризации электронов. Установлено, что с увеличением концентрации электронов величины как напряжения, так и коэффициента поляризации уменьшаются.

DOI: 10.31857/S0044451022060104

EDN: DUNZVZ

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение последних нескольких десятилетий интенсивно исследуются спин-зависимые явления в полупроводниках в контексте их применения в электронике [1]. Одну из основных составляющих этих явлений представляет электрическая спиновая инжекция — прямой метод создания неравновесной спиновой населенности в системе электронов проводимости полупроводников. Метод был предложен Ароновым и Пикусом еще в 70-х годах прошлого века [2]. С тех пор сделано много важных достижений как в области управления спиновой поляризацией электрического тока с помощью магнитного поля, так и наоборот, управления магнетизмом электрическими средствами [3–6], однако надежный эффект инжекции спина в полупроводники долго не был достигнут [7–9]. Основной причиной, вызывающей подавление спиновой поляризации электронов в полупроводнике при электрической инжекции спинов из ферромагнитного металла является эффект «несоответствия проводимостей» (conductivity mismatch)

[10]. Значительно ослабить этот эффект можно, если разместить в интерфейсе между ферромагнитным металлом и полупроводником дополнительный слой, фильтрующий ток спинов, например, монослой графена [11]. Фильтрующими свойствами обладают тонкие диэлектрические пленки, образующие туннельный барьер, а также барьеры Шоттки. Понадобилось почти два десятилетия, для того чтобы результаты спиновой инжекции были существенно улучшены. Появились сообщения о регистрации величины спиновой поляризации в полупроводнике $P_n \approx 40\%$ при электрической инжекции спинов в вырожденный GaAs с концентрацией электронов $n = 6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ из магнитного полупроводника (Ga, Mn)As через барьер Шоттки [12] и в вырожденный Si ($n = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) через слой графена из ферромагнитного сплава NiFe [11]. В невырожденном полупроводнике InSb ($n = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) был достигнут $P_n = 25\%$ при инжекции спинов из ферромагнитного сплава CoFe через туннельный барьер, созданный в слое диэлектрика MgO с низким содержанием дефектов [13].

Отметим, что высокие значения спиновой поляризации получены как для вырожденных, так и для невырожденных полупроводников, имеющих суще-

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

ственно различные концентрации электронов. Поскольку результаты получены в различных спиновых устройствах с разными полупроводниками и инжекторами, представляется актуальным исследовать зависимость P_n от n для одного и того же полупроводника, например InSb.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЙ

Коэффициент спиновой поляризации электронов проводимости

$$P_n^{(\lambda)} = s/n, \quad (1)$$

где индекс λ обозначает материал, например, $\lambda = F$ для ферромагнетика или $\lambda = N$ для немагнитного полупроводника, n_{\uparrow} и n_{\downarrow} — концентрации электронов проводимости со спином вверх и со спином вниз в соответствующих материалах, $s = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$ — концентрация спинов, общая концентрация электронов $n = (n_{\uparrow} + n_{\downarrow})$. Определим также поляризацию спиновой проводимости $P_{\sigma}^{(\lambda)} = \sigma_s/\sigma$, где спиновая проводимость $\sigma_s = (\sigma_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow})$ и проводимость $\sigma = (\sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow})$, а σ_{\uparrow} и σ_{\downarrow} — составляющие проводимости для электронов соответственно со спином вверх и со спином вниз. Аналогично определим поляризацию спинового тока $P_j^{(\lambda)} = j_s/j$, где плотность тока спинов $j_s = (j_{\uparrow} - j_{\downarrow})$ и плотность тока зарядов $j = (j_{\uparrow} + j_{\downarrow})$, а j_{\uparrow} и j_{\downarrow} — составляющие плотности тока для электронов соответственно со спином вверх и со спином вниз.

При электрической инжекции спин-поляризованных электронов из F в N (см. рис. 1) поляризация электронов P_n^N в полупроводнике оценивается по величине спин-индуцированного напряжения, возникающего на ферромагнитном детекторе. Природа этого напряжения связана с изменением электрохимического потенциала электронного газа в немагнитном проводнике вследствие поляризации в нем электронов по спину. Существует несколько подходов для расчета этого напряжения. В исторически первой модели «спин-зарядовой связи» Джонсона и Силсби [14] напряжение на детекторе рассматривается как напряжение, необходимое для установления электрохимического равновесия в электронных системах ферромагнитного и немагнитного металлов. Модель имеет недостаток, заключающийся в том, что не позволяет проводить прямое вычисление спиновой поляризации тока [15]. В дрейф-диффузионной модели, предложенной в работе [16], спин-индуцированное напряжение рассматривается как следствие изменения контак-

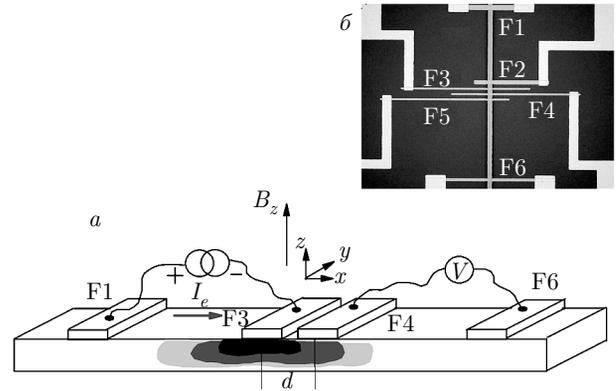


Рис. 1. а) Схема устройства для измерения электрических сигналов, обусловленных диффузией спин-поляризованных электронов. Ферромагнитные электроды F1, F3, F4, F6, намагничены вдоль оси y , расположены на поверхности полупроводникового канала, в котором происходит спиновый транспорт. Между контактами и полупроводником — тонкая прослойка диэлектрика (на схеме не показана). Ток I_e течет от F1 к F3. Под F3 затемнением с разной контрастностью условно показано облако поляризованных по спину электронов, степень поляризации которых убывает по мере дрейфа в направлении к F1 и диффузии во всех направлениях. Измерение напряжения, индуцированного диффундирующими электронами, проводится между контактами F4 и F6, расположенными вне цепи тока. б) Фотография устройства с латеральными контактами. Вертикальная полоска — полупроводник InSb, который виден в окне, сделанном в слое фоторезиста. Размер окна 50 мкм \times 1.8 мм. Канал из полупроводника пересекают шесть ферромагнитных горизонтальных контактов, состав и структура которых описаны в тексте. К ферромагнитным контактам подведены переходные, заканчивающиеся контактными площадками (на фотографии не видны). Контакты F2 и F3 использовались в качестве инжекторов, а F3, F4 и F5 — как детекторы

ной разности потенциалов между F и N при отклонении спиновой системы полупроводника от равновесия. В основу этой модели заложена непрерывность спиновых и зарядовых токов, протекающих через контакт между N и F. В рамках модели напряжение на детекторе рассчитывается с помощью выражения

$$V_D(d) = \pm e^{-1} P_n^F P_n^N [n/\partial n/\partial \zeta] \exp(-d/L_s^N). \quad (2)$$

Здесь e — заряд электрона, L_s^N — длина спиновой диффузии в N, n — концентрация электронов в N, величина множителя $[n/\partial n/\partial \zeta]$ порядка энергии Ферми для вырожденного полупроводника и составляет порядка $k_B T$ для невырожденного [16], ζ — химический потенциал в N, k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Знак перед выражением за-

висит от взаимного направления намагниченности инжектора и детектора. Спиновая поляризация

$$P_n^N = P_j w \tau_s j / 2ne(L_s^N)^2. \quad (3)$$

Здесь w — ширина инжектора, P_j — поляризация спинового тока, τ_s — время спиновой релаксации, L_s^N — длина спиновой диффузии, $j = I_e/A$ — плотность тока, I_e — ток зарядов, A — площадь инжектора. Параметры P_j , τ_s и L_s^N находятся при подгонке экспериментальных данных, полученных при эффекте Ханле, к теоретическим. Модель неплохо описывает поведение поляризации электронов P_n^N в зависимости от плотности тока j . Однако поведение P_n^N в зависимости от n можно оценить только качественно из-за отсутствия в этой модели влияния величин сопротивлений F, N и контакта между ними на поляризацию спинового тока P_j . В явном виде зависимость P_j от сопротивлений ферромагнетика, контакта и немагнитного материала представлена в модели так называемого квазихимического потенциала, предложенной в работе [17]. Под квазихимическим потенциалом подразумевается добавка к химическому потенциалу, обусловленная спиновой поляризацией электронов проводимости. Согласно этой модели химический потенциал претерпевает скачок в области контакта, а напряжение на детекторе пропорционально падению квазихимического потенциала на дистанции между инжектором и детектором.

В модели, предложенной в работе [17], инжекция спин-поляризованных электронов из F в N осуществляется через тонкий диэлектрический слой, имеющий эффективное сопротивление R_C . На ферромагнитном контакте-детекторе, расположенном на расстоянии d от инжектора, индуцируется напряжение $V_D(d)$, зависящее от величин спиновой поляризации P_n^N , возникшей в немагнитном полупроводнике, от концентрации электронов n в N, от дистанции d и от поляризации спинового тока P_j в системе ферромагнетик–контакт–полупроводник:

$$V_D(d) = \pm e^{-1} P_j P_n^N [n/\partial n/\partial \zeta] \exp(-d/L_s^N). \quad (4)$$

Поляризация спинового тока P_j зависит от соотношения эффективных сопротивлений диэлектрической прослойки R_C , ферромагнетика $R_F = \rho_F L_s^F/A$ и полупроводника $R_N = \rho_N L_s^N/A$, где ρ_F и ρ_N — удельные сопротивления F и N, а также от поляризации проводимости P_σ^F ферромагнетика и P_σ^C контакта [17]:

$$P_j = (R_F P_\sigma^F + R_C P_\sigma^C)/(R_F + R_C + R_N). \quad (5)$$

Спиновая поляризация P_n^N определяется следующим выражением [17]:

$$P_n^N = P_j j e R_N [(\partial n / \partial \zeta) / n]. \quad (6)$$

В модели прозрачного контакта при инжекции электронов из ферромагнитного металла в немагнитный полупроводник, когда $R_C \ll R_F \ll R_N$, поляризация спинового тока

$$P_j \approx (R_F/R_N) P_\sigma^F \ll P_\sigma^F, \\ P_n^N \approx P_\sigma^F j e R_F [\partial n / \partial \zeta] / n.$$

Фактор $[n/(\partial n/\partial \zeta)]/e$ имеет размерность напряжения, обозначим его V_0 . Величина V_0 зависит от n . Ниже мы рассчитаем $n/(\partial n/\partial \zeta)$ и покажем, что напряжение V_0 увеличивается с ростом концентрации электронов. Падение напряжения на эффективном сопротивлении ферромагнетика обозначим $V_F = j R_F$, тогда в прозрачном контакте $P_n^N = P_\sigma^F V_F/V_0$. В туннельном контакте, когда $R_C \gg \gg R_F, R_N$, поляризация тока $P_j \approx P_\sigma^C$ и $P_n^N \approx P_\sigma^C V_N/V_0$, где $V_N = j R_N$.

Видно, что величина P_n^N в туннельном контакте выше, чем в прозрачном, поскольку напряжение $V_N \gg V_F$ при $R_F \ll R_N$. Характер зависимости P_n^N от n в прозрачном и туннельном контактах различаются, поскольку в прозрачном контакте от концентрации электронов зависит только $1/V_0$, а в туннельном контакте — отношение V_N/V_0 .

Вид зависимости P_n^N от n определяется соотношением сопротивлений R_F и R_N , а также R_C , которое зависит от свойств интерфейса между ферромагнитными контактами и полупроводником. В свою очередь, характеристики интерфейса между F и N зависят от состояния поверхностей этих материалов и наличия дефектов в промежуточном диэлектрическом слое [18]. Поэтому окончательные свойства интерфейсов и характер зависимости P_n^N от n мы установим экспериментально.

Нашей задачей было экспериментальное исследование зависимости величин напряжения $V_D(d)$ и P_n^N от концентрации электронов n в четырех полупроводниковых спиновых устройствах, изготовленных на пленках полупроводника InSb с концентрацией электронов n , варьирующейся от $4 \cdot 10^{16}$ до $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и одном устройстве, сформированном на пластине InSb с $n = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

3. МАТЕРИАЛЫ, МЕТОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Измерения проводились в латеральном спиновом устройстве, представляющем собой планарную микросхему с набором узких, параллельных друг другу

Таблица. Параметры полупроводников и сформированных на них латеральных спиновых устройств: номер устройства, тип подложки, толщина пленки, концентрация электронов при комнатной температуре и при $T = 77$ К, подвижность электронов, поляризация тока в каждом устройстве, удельное сопротивление диэлектрического слоя в интерфейсе, время спиновой релаксации и длина спиновой диффузии, отношение концентрации электронов к плотности состояний для каждого устройства

№	Подложка	t , мкм	n_{293} , см^{-3}	n_{77} , см^{-3}	μ_{293} , $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	P_j	ρ_C , $\Omega \cdot \text{см}$	τ_s , нс	L_s^N , мкм	$\frac{n}{\partial n / \partial \zeta}$
1	GGG	0.45	$5 \cdot 10^{17}$	$4 \cdot 10^{17}$	$0.8 \cdot 10^4$	0.027	2.5	0.8	50	$15.3k_B T$
2	GGG	0.9	$1.1 \cdot 10^{17}$	$8.8 \cdot 10^{16}$	$1.75 \cdot 10^4$	0.028	5	1.1	60	$5.6k_B T$
3	AlN	1.05	$1 \cdot 10^{17}$	$8 \cdot 10^{16}$	$2.6 \cdot 10^4$	0.036	4.5	1.5	80	$5.2k_B T$
4	Si/SiO ₂	0.5	$5 \cdot 10^{16}$	$4 \cdot 10^{16}$	$3.6 \cdot 10^4$	0.041	13	1.0	45	$3.3k_B T$
5	Пластина InSb	400		$1.2 \cdot 10^{14}$	$6.2 \cdot 10^5$	0.013	30	1.5	25	$1.02k_B T$

ферромагнитных контактов, пересекающих под прямым углом полупроводниковый канал (рис. 1).

Полупроводниковые латеральные спиновые устройства предполагают совершенные интерфейсы между металлическими контактами и каналом из полупроводника, в котором происходит спиновый транспорт. Для этих целей используются пластины из монокристалла полупроводника с высококачественной (Epi-ready) полировкой поверхности или эпитаксиальные пленки, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МВЕ). Методом МВЕ получают эпитаксиальные пленки GaAs, Si, а также InSb [19]. Однако мы исследовали пленки InSb, полученные методом взрывного термического испарения в вакууме, поскольку эти пленки были у нас в наличии, а концентрация электронов в этих пленочных образцах находилась в интересующем нас диапазоне $n \sim 10^{16} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Исследовались четыре образца с пленками InSb толщиной t от 0.5 до 1 мкм, синтезированных на подложках из гадолиний-галлиевого граната $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_2$ (GGG), AlN и Si/SiO₂ (см. таблицу). Исследовалось также спиновое устройство, изготовленное на пластине полупроводника с концентрацией электронов $n = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ при $T = 77$ К, соответствующее номеру 5 в таблице. Рентгеноструктурные исследования показали, что пленки неоднородны и массовая концентрация компонентов: InSb — 90%, In — 10%. Пленки поликристаллически со средним размером кристаллитов 250 нм, ориентированных перпендикулярно плоскости подложки вдоль направления [111]. Средняя квадратичная шероховатость поверхности пленок, измеренная на атомном силовом микроскопе, составляла около 45 нм. Определение кон-

центрации n в пленках InSb были сделаны для комнатной температуры при измерении эффекта Холла. Значения концентрации носителей при комнатной температуре, n_{293} , приведены в таблице, там же даны ориентировочные значения концентрации n_{77} для температуры $T = 77$ К. Эти значения получены на основании данных измерения при двух температурах эффекта Холла в еще одной пленке InSb толщиной 750 нм, синтезированной на подложке GGG. Было определено, что в этом образце при $T = 293$ К плотность носителей $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $2.7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при $T = 8$ К. Видно, что концентрация носителей уменьшается с изменением температуры от комнатной до $T = 8$ К приблизительно на 30%. Мы предположили, что при температуре $T = 77$ К в исследованных нами образцах концентрация носителей n_{77} уменьшится приблизительно на 20% по сравнению со значениями n_{293} .

Методами фотолитографии на поверхности пластины и образцов с пленками InSb были изготовлены латеральные спиновые устройства, содержащие по шесть $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ ферромагнитных контактов F1, F2 шириной по 35 мкм и F3–F6 шириной по 15 мкм, пересекающих под прямым углом полупроводниковый канал шириной 50 мкм (см. рис. 1). Расстояния между центральными осями контактов F1 и F2, F5 и F6 по 0.64 мм. Расстояние между соседними центральными осями контактов F3, F4, F5 составляло 50 мкм, а контактов F2 и F3 — 60 мкм. Перед нанесением ферромагнитных контактов с поверхности пластины и пленок удалялись слои оксидов путем травления ионами Ag. Ферромагнитные контакты наносились на пластину полупроводника методом магнетронного напыления. Состав и толщина

слоев, образующих контакт (в порядке нанесения): слой диэлектрика из MgO (1.8 нм), ферромагнитный слой из $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ (80 нм) и закрывающий слой из Au (3 нм). Переходы и контактные площадки, состоят (в порядке нанесения) из слоев Ni (3 нм), Cu (10 нм) и Ag (60 нм). Слои из Ni и Cu фабриковались магнетронным, а из Ag — резистивным испарениями.

Величина напряжения, возникающего на детекторе при спиновой инжекции, оценивалась при измерениях эффекта Ханле. Напряжение регистрировалось на детекторах F3, F4 или F5 относительно удаленного электрода F6. В качестве инжектора использовались контакты F2 или F3. Для этого между одним из них и F1 пропускался постоянный ток. Для измерения эффекта Ханле использовались источник постоянного тока на химических элементах, нановольтметр, криостат и электромагнит с программируемым источником питания. При измерениях ферромагнитные контакты намагничивались полем 400 Гс, направленным вдоль их продольной оси (см. рис. 1). Затем поле снижалось до нуля, и все устройство поворачивалось в криостате на 90° так, чтобы направление поля стало перпендикулярным плоскости контактов. При регистрации эффекта Ханле проводилась медленная развертка поперечного магнитного поля B в диапазоне ± 20 Гс. Отметим, что эти поля по величине много меньше поперечного поля анизотропии плоского ферромагнитного контакта, которое для $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ составляет порядка 1.5 Тл. Поэтому поперечное поле B не оказывает существенного влияния на продольную намагниченность контактов. Спин-зависимое нелокальное напряжение $V_H(d, B)$ при эффекте Ханле может быть записано [16, 17] как

$$V_H(d, B) = \pm P_j^2 R_N j \exp(-\alpha d/L_s^N) \times \frac{\alpha \cos(\beta d/L_s^N) - \beta \sin(\beta d/L_s^N)}{\alpha^2 + \beta^2}, \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{1 + (\omega_L \tau_s)^2} + 1}{\sqrt{2}},$$

$$\beta = \frac{\sqrt{1 + (\omega_L \tau_s)^2} - 1}{\sqrt{2}},$$

где частота Лармора $\omega_L = g\mu_B B/\hbar$, g есть g -фактор электронов проводимости в N, B — поперечное магнитное поле, \hbar — постоянная Планка, d — дистанция между инжектором и детектором, μ_B — магнетон Бора, τ_s — время релаксации спина в N. При расчете осуществляется подгонка теоретической зависимости напряжения $V_H(d, B)$ к эксперименталь-

но полученной. Подгоночными параметрами являются L_s^N , τ_s и P_j . Эффективность спиновой инжекции P_j , как видно из ее определения (5), зависит от соотношения сопротивлений R_C , R_F и R_N , а также от поляризации проводимости P_σ^F ферромагнетика и P_σ^C контакта. Сопротивление $R_F = \rho_F L_s^F/A$, где $\rho_F = 7 \cdot 10^{-10}$ Ом · см, $L_s^F = 1.2 \cdot 10^{-6}$ см для ферромагнетика $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ [20], A — площадь контакта, $R_N = \rho_N L_s^N/A$ рассчитывается на основании данных измерений Холла для каждого образца. Мы предположили, что в ферромагнетике $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$, который применялся в качестве инжектора, поляризация проводимости приблизительно равна поляризации электронов, $P_\sigma^F \approx P_n^F = 0.224$ [16]. Нам ничего не известно о величине поляризации проводимости контакта P_σ^C , поэтому в качестве начального, «затравочного», значения мы приняли, что $P_\sigma^C \approx 0.5$ как величина промежуточная между максимальным и минимальным значениями. Таким образом, при подгонке мы подбирали значение $R_C = \rho_C \Lambda/A$, где Λ — толщина, а ρ_C — удельное сопротивление слоя, разделяющего F и N. Видно, что в поле $B = 0$ напряжения, рассчитанные с помощью выражений (4) и (7), совпадают, $V_H(d, B) = V_D(d)$.

При расчете величин $V_D(d)$ и P_n^N в полупроводниках с различной концентрацией электронов необходимо вычислять значения $n/(\partial n/\partial \zeta)$. Для расчета воспользуемся соотношением, связывающим концентрацию носителей n в зоне проводимости с интегралом Ферми с индексом 1/2 [21]:

$$n = N_c \Phi_{1/2}(\zeta^*), \quad (8)$$

где N_c — эффективная плотность состояний; $\Phi_{1/2}(\zeta^*)$ — интеграл Ферми с индексом 1/2, $\zeta^* = \zeta/k_B T$ — приведенная энергия Ферми, ζ — энергия Ферми,

$$\Phi_{1/2}(\zeta^*) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp(x - \zeta^*)}, \quad (9)$$

$\Phi_{1/2}(\zeta^*)$ рассчитывается численными методами. Эффективная плотность состояний рассчитывается по формуле

$$N_c = 2(m_n k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2}. \quad (10)$$

Здесь m_n — эффективная масса электрона. Для InSb $m_n = 0.013m_0$, где m_0 — масса свободного электрона. При $T = 77$ К для InSb величина $N_c = 4.82 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$. С помощью соотношения (8) выразим множитель $n/(\partial n/\partial \zeta)$ через интеграл Ферми $\Phi_{1/2}(\zeta^*)$:

$$n/(\partial n/\partial \zeta) = \Phi_{1/2}(\zeta^*) k_B T / (\partial \Phi_{1/2}(\zeta^*)/\partial \zeta^*). \quad (11)$$

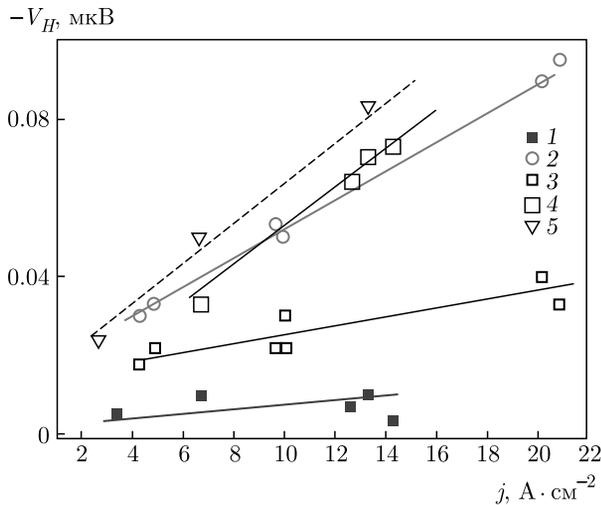


Рис. 2. Зависимость напряжения $-V_H(d, B)$ при эффекте Ханле от плотности тока j , протекающего через инжектор. Поперечное магнитное поле $B = 0$, расстояние между инжектором и детектором $d = 50$ мкм. Цифры, помечающие символы на рисунке, соответствуют номерам образцов в таблице

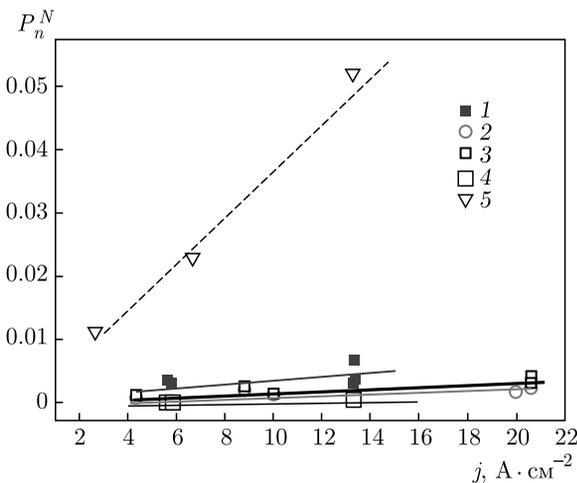


Рис. 3. Зависимость P_n^N от плотности тока j , протекающего через инжектор. Поперечное магнитное поле $B = 0$, расстояние между инжектором и детектором $d = 50$ мкм. Цифры, помечающие символы на рисунке, соответствуют номерам образцов в таблице

Значения $n/(\partial n/\partial \zeta)$ приведены в таблице. Видно, что $n/(\partial n/\partial \zeta)$ растет с увеличением n .

В предельных случаях $\Phi_{1/2}(\zeta^*)$ выражается простыми функциями. Для невырожденного полупроводника $\Phi_{1/2}(\zeta^*) = \exp(\zeta^*)$, в случае вырождения $\Phi_{1/2}(\zeta^*) = (4/3)\pi^{1/2}(\zeta^*)^{3/2}$.

На рис. 2 изображена зависимость напряжения $V_H(d, B)$ эффекта Ханле при $B = 0$ от плотности

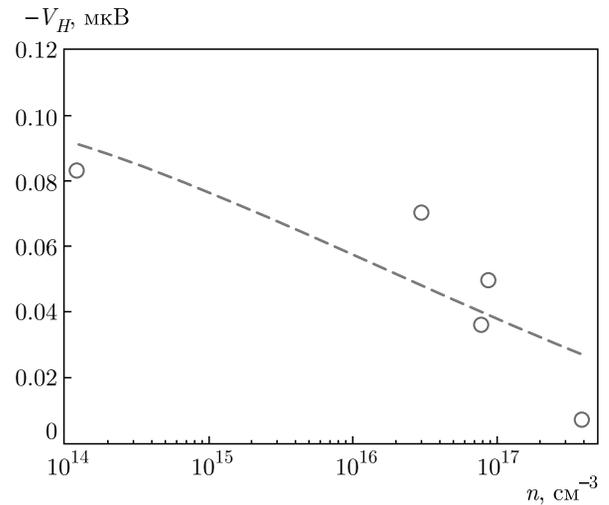


Рис. 4. Зависимость напряжения $-V_H$ при эффекте Ханле от n для $j \approx 13 A/cm^2$ (кружки). Штриховая линия — функция $y = 0.36 - 0.0084 \ln(x + 6 \cdot 10^{13})$, $x = n \cdot cm^3$

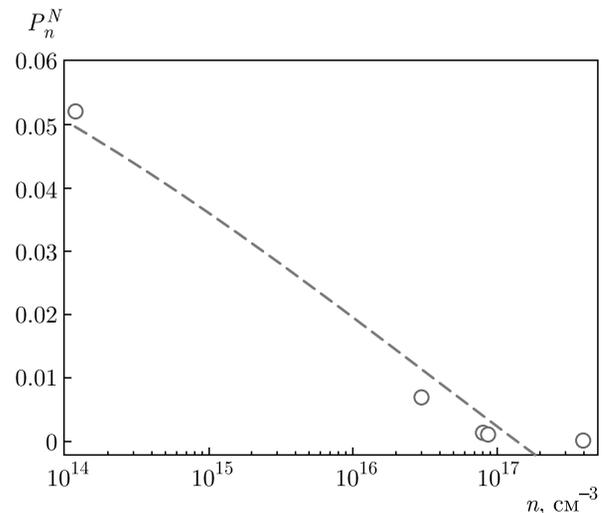


Рис. 5. Зависимость поляризации электронов в полупроводнике P_n^N от n для $j \approx 13 A/cm^2$ (кружки). Штриховая линия — функция $y = 0.29 - 0.0074 \ln(x + 6.34 \cdot 10^{14})$, $x = n \cdot cm^3$

тока j , протекающего через инжектор. Цифры, обозначающие символы, соответствуют номерам полупроводников, перечисленным в таблице. Нарастание спин-индуцированного напряжения при увеличении плотности тока в полупроводниках с низкой концентрацией электронов более быстрое.

На рис. 3 приведена зависимость величины поляризации P_n^N от плотности тока j , протекающего через инжектор. Величина поляризации P_n^N в полупроводниках рассчитывалась при подгонке теоретических значений напряжения при эффекте Ханле (уравнение (7)) к экспериментальным. Подгоночны-

ми параметрами являются ρ_C , τ_s и L_s . Видно, что P_n^N нарастает при увеличении плотности тока. Также заметно, что скорость нарастания выше в полупроводниках с меньшей концентрацией электронов n .

На рис. 4 изображена зависимость напряжения V_H от n , а на рис. 5 зависимость поляризации P_n^N от n для плотности тока в инжекторе $J \approx 13 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2}$. Видно, что величина спиновой поляризации электронов P_n^N в полупроводниках n-InSb уменьшается при росте концентрации электронов n . Напряжение эффекта Ханле V_H также убывает при увеличении n .

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали величину спин-индуцированного напряжения V_H при эффекте Ханле и значение коэффициента спиновой поляризации электронов P_n^N в латеральных спиновых устройствах, изготовленных на полупроводниках InSb с различной концентрацией электронов n . Самые высокие значения спиновой поляризации были достигнуты в устройствах с полупроводниками, обладающими наименьшими концентрациями носителей заряда. В устройствах, изготовленных на пластине InSb ($n = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) и на пленке InSb ($n = 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$), при плотности тока инжектора около 13 А/см^2 значения P_n^N равны соответственно 5.2% и 0.7%. В устройствах, которые были изготовлены на пленках полупроводников с $n = 8 \cdot 10^{16}$, $8.8 \cdot 10^{16}$ и $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, значения P_n^N равны соответственно 0.13, 0.11 и 0.013%. Уменьшение P_n^N согласуется с уменьшением сопротивления полупроводников R_N и множителя $[(\partial n / \partial \zeta) / n]$ при увеличении концентрации n (см. (6)), а также коэффициента спиновой поляризации тока P_j , который уменьшается от 4.1% до 2.7% при росте концентрации от $4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ до $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ (см. таблицу). Более низкое значение $P_j = 1.3\%$ для образца №5 может быть за счет более высокого в этом образце удельного сопротивления диэлектрического слоя, $\rho_C = 30 \text{ Ом} \cdot \text{см}$. Как следует из таблицы, в пленочных образцах №1–№4 удельное сопротивление контакта ρ_C существенно ниже, чем в образце №5, поскольку шероховатость пленок значительно выше, чем шероховатость пластины InSb. Тем не менее за счет самых высоких значений R_N и $[(\partial n / \partial \zeta) / n]$ величина P_n^N в образце №5 наибольшая. Таким образом, величина спиновой поляризации P_n^N уменьшается с увеличением плотности электронов. При том соотношении сопротивлений R_N , R_F и R_C , которое

было получено в наших спиновых устройствах, наблюдается спад $P_n^N \sim \ln(1/n)$.

Спин-индуцированное напряжение $V_H = V_D(d)$ (уравнение (5)) также убывает при росте концентрации n в соответствии с уменьшением P_j и P_n^N . Уменьшение V_H несколько нивелируется за счет роста множителя $n / (\partial n / \partial \zeta)$ при увеличении n (см. таблицу). Заметим, что спад напряжения V_H при росте n соответствует уменьшению контактной разности потенциалов в паре F и N. Контактная разность потенциалов ϕ_C между F и N зависит от разности работ выхода из F и N, которые определяются положением уровней Ферми ζ_F и ζ_N в каждом из этих материалов, $\phi_C = (\zeta_F - \zeta_N) / e$. Для вырожденного полупроводника $\zeta_N = k_B T \ln(n / N_c)$ [21]. Видно, что ζ_N увеличивается как $\ln n$ при росте плотности электронов в N, а контактная разность потенциалов ϕ_C уменьшается пропорционально $\ln(1/n)$.

Для спиновых устройств, изготовленных на тонких пленках, мы получили значения длины спиновой диффузии L_s^N в 2–3 раза более высокие, чем в устройстве, изготовленном на монокристаллической пластине InSb (см. таблицу). Корреляцию величины L_s^N в зависимости от толщины пленок, материала подложки или концентрации электронов мы не обнаружили. Можно предположить, что аномальные значения длины спиновой диффузии связаны с неоднородным составом пленок, представляющих собой гетеросистемы.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования России (тема «Спин», № АААА-А18-118020290104-2) при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 19-02-00038, 20-07-00968).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Fabian and I. Žutić, Phys. Rev. B **69**, 115314 (2004).
2. А. Г. Аронов, Г. Е. Пикус, ФТП **10**, 1177 (1976).
3. V. V. Osipov, N. A. Viglin, and A. A. Samokhvalov, Phys. Lett. A **247**, 353 (1998).
4. P. R. Hammar and M. Johnson, Phys. Rev. Lett. **88**, 066806 (2002).
5. R. Fiederling, M. Kleim, G. Reuscher et al., Nature (London) **402**, 787 (1999).

6. Y. Ohno, D. K. Young, B. Beschoten et al., Nature (London) **402**, 790 (1999).
7. A. T. Filip, B. H. Hoving, F. J. Jedema et al., Phys. Rev. B **62**, 9996 (2000).
8. F. G. Monzon, D. S. Patterson, M. L. Roukes, J. Magn. Magn. Mater. **198**, 632 (1999).
9. C. M. Hu, J. Nitta, A. Jensen et al., Phys. Rev. B **63**, 125333 (2001).
10. G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp et al., Phys. Rev. B **6**, R4790(R) (2000).
11. O. M. J. van't Erve, A. L. Friedman, E. Cobas et al., Nat. Nanotechnol. **7**, 737 (2012).
12. M. Ciorga, A. Einwanger, U. Wurstbauer et al., Phys. Rev. B **79**, 165321 (2009).
13. N. A. Viglin, V. M. Tselikhovskaya, N. A. Kulesh et al., JETP Lett. **110**, 273 (2019).
14. M. Johnson and R. H. Silsbee, Phys. Rev. Lett. **55**, 1790 (1985).
15. M. Johnson and R. H. Silsbee, Phys. Rev. B **35**, 4959 (1987).
16. N. A. Viglin, V. V. Ustinov, S. O. Demokritov et al., Phys. Rev. B **96**, 235303 (2017).
17. J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler et al., Acta Phys. Slov. **57**, 565 (2007).
18. Н. А. Виглин, И. В. Грибов, В. М. Цвелиховская и др., ФТП **53**, 280 (2019).
19. А. К. Бакаров, А. К. Гутаковский, К. С. Журавлев и др., ЖТФ **87**, 900 (2017).
20. J. Bass and W. P. Pratt Jr., J. Phys.: Condens. Matter **19**, 183201 (2007).
21. К. Зеерер, *Физика полупроводников*, Мир, Москва (1977).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Ti_5Si_3

Л. С. Чумакова^a, А. В. Бакулин^{a*}, С. Е. Кулькова^{a,b}

^a Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук
634055, Томск, Россия

^b Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

Поступила в редакцию 25 января 2022 г.,
после переработки 1 февраля 2022 г.
Принята к публикации 2 февраля 2022 г.

Методом проекционных присоединенных волн в рамках теории функционала электронной плотности рассчитаны атомная и электронная структуры, модули упругости, вибрационные частоты и термодинамические характеристики силицида титана Ti_5Si_3 . Рассчитана поверхность Ферми и оценена скорость электронов на всех ее четырех листах. Анализ пространственной зависимости линейной сжимаемости и модулей Юнга и сдвига показал их слабую анизотропию, тогда как анизотропия коэффициента Пуассона является более выраженной. Рассчитан фононный спектр силицида титана и проведена оценка термодинамических характеристик. Показано, что в целом результаты расчетов находятся в хорошем согласии с экспериментом.

DOI: 10.31857/S0044451022060116

EDN: DUUZAV

1. ВВЕДЕНИЕ

Повышенный интерес к изучению физико-химических и механических свойств силицидов обусловлен их технологическими приложениями. Прежде всего, это было связано с масштабным производством компьютеров на основе кремния в 80-х годах, когда силициды использовались в основном в качестве омических контактов из-за низкого электрического сопротивления и термической совместимости с кремнием [1, 2]. Последняя достигается за счет использования фаз, находящихся в термодинамическом равновесии с кремнием, а именно дисилицидов, среди которых наиболее полезными свойствами обладают $TiSi_2$, $CoSi_2$ и WSi_2 [1–5].

Вторая область применения силицидов связана с ограничением использования металлических сплавов в качестве конструкционных материалов при высоких температурах. Известно, что суперсплавы, являющиеся основными материалами для данных приложений, быстро теряют сопротивление ползучести и стойкость к окислению при температурах

выше 1100 °С. Поэтому считается, что конструкционный материал, который будет выдерживать температуры от 1300 до 1600 °С, окажет такое же большое влияние на мировую экономику, как и микроэлектронная промышленность. Необходимость повышения рабочей температуры с сохранением хороших механических свойств привела к интенсивным исследованиям интерметаллических сплавов, которые продолжают и в настоящее время. Изначально интерметаллиды привлекали такими свойствами, как высокая температура плавления (для некоторых — выше 2000 °С), низкая удельная плотность (ниже 7 г/см³) и широкие возможности легирования. Поскольку количество интерметаллических соединений очень велико, большая часть ранних исследований была связана с нахождением наиболее перспективных материалов на основе анализа ряда характеристик. Были сформулированы необходимые требования к свойствам материалов для высокотемпературных приложений, которые включали высокое сопротивление ползучести и стойкость к окислению при температурах выше 1000 °С, низкую плотность, сохранение прочности при повышенных температурах, а также возможность понижения хрупкости, присущей некоторым интерметаллическим соединениям, путем легирования. Наиболее

* E-mail: bakulin@ispms.tsc.ru

перспективными в этом ключе оказались алюминиды и силициды переходных металлов. Были установлены также наиболее важные аспекты синтеза таких материалов. В частности было показано, что легирующие добавки даже в очень малых количествах, а также способ обработки могут существенно влиять на их свойства [6–8].

Известно, что γ -TiAl и сплавы на его основе обладают целым комплексом уникальных механических свойств, в том числе отмеченных выше, что делает их перспективными материалами для применения в аэрокосмической, автомобильной, судостроительной промышленности. Однако стойкость к окислению алюминидов титана при высоких температурах остается недостаточно высокой [9], что ограничивает их технологические приложения. Считается, что легирование кремнием сплава γ -TiAl улучшает коррозионную стойкость. Например, в работе [10] теоретическими методами было показано, что примесь кремния способствует локальному повышению концентрации титана в сплаве γ -TiAl путем образования Ti-антиструктурных атомов. Последнее приводит к повышению химической активности алюминия и, как следствие, способствует образованию защитного слоя Al_2O_3 . Кроме того, в [11] было установлено, что примесь Si, а также Nb, Ta и W, замещающая Ti в пленке TiO_2 , понижает коэффициент диффузии кислорода, что также должно повышать коррозионную стойкость TiAl. В работе [12] экспериментально было показано, что образование пленки силицида титана состава Ti_5Si_3 и слоев, обогащенных алюминием, приводит к образованию Al_2O_3 , который подавляет дальнейшее окисление и, следовательно, способствует значительному повышению коррозионной стойкости сплава. Однако противоположный вывод о влиянии кремния был сделан в работе [13]. Авторы считают, что образование хрупкой фазы Ti_5Si_3 приводит к растрескиванию и отслаиванию оксидной шкалы. Недавно в работе [14] путем холодного напыления Al-40Si (масс. %) на поверхность сплава γ -TiAl было создано новое диффузионное покрытие $Ti(Al,Si)_3$, которое значительно повысило стойкость сплава к окислению. В процессе окисления образовался стабильный диффузионный барьер, состоящий из фазы Ti_5Si_3 , который, как показали авторы [14], может тормозить интердиффузию между покрытием и подложкой и способствовать формированию оксидной шкалы Al_2O_3 .

Силициды со стехиометрией M_5Si_3 обладают многими преимуществами по сравнению с другими силицидами. Кристаллическая структура является гексагональной, если $M = Sc, Y, Ti, Mn$, и объем-

но-центрированной тетрагональной в случае $M = V, Mo, W$. В отличие от других силицидов возможности легирования этих структур выражены в большей степени. Кроме того, гексагональная структура может вместить до 11 ат. % небольших атомов, таких как B, C, O и др., т. е. эти соединения также обладают значительными возможностями междуузельного легирования, которые не наблюдаются для силицидов любой другой стехиометрии. Другие преимущества включают более высокую температуру плавления (например, $2130^\circ C$ в случае Ti_5Si_3) и потенциал для вязкого упрочнения [15, 16].

К недостаткам идеальных соединений M_5Si_3 следует отнести недостаточную стойкость к окислению, низкую вязкость разрушения и высокую анизотропию свойств. Последние являются результатом анизотропной кристаллической структуры, что приводит к появлению при обработке остаточных напряжений и микротрещин [7]. Следует отметить, что обработка силицидов затруднена, поскольку углерод, кислород, азот и другие примеси стремятся заполнить междуузельное пространство.

Для того чтобы понять на микроскопическом уровне влияние формирования фазы Ti_5Si_3 на диффузию кислорода и интерфейсную прочность, необходимо, прежде всего, изучить его электронную и фононную структуру, а также физико-химические и механические свойства, что и является целью настоящей работы. Кроме того, проводятся оценки ряда термодинамических характеристик силицида титана, а также коэффициент теплового расширения.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Расчеты атомной и электронной структур соединения Ti_5Si_3 проводились методом проекционных присоединенных волн (PAW) в плоско-волновом базисе [17, 18] с обобщенным градиентным приближением для обменно-корреляционного функционала в форме PBE [19]. Энергия обрезания была равна 550 эВ. Оптимизация электронной структуры проводилась с точностью 10^{-6} эВ. Релаксация атомной структуры проводилась методом сопряженных градиентов с использованием полной оптимизационной схемы, допускающей изменение положения атомов, формы и размера ячейки. Сходимость считалась достигнутой, когда силы, действующие на атомы, не превышают 10^{-4} эВ/Å. В расчетах использовалась Γ -центрированная сетка k -точек $7 \times 7 \times 9$.

Зарядовые состояния атомов и заселенность перекрывания орбиталей оценивались с помощью

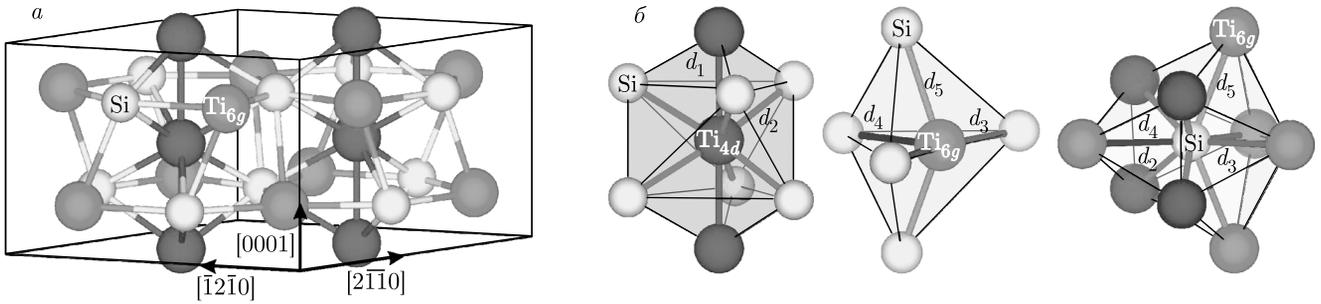


Рис. 1. Равновесная атомная структура соединения Ti_5Si_3 (а), локальное окружение атомов Ti_{4d} , Ti_{6g} и Si (б)

Таблица 1. Параметры решетки соединения Ti_5Si_3 в сопоставлении с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными. В скобках приведено отличие от экспериментальных значений в процентах

Структурные параметры	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	c/a	x_{Ti}	x_{Si}
Настоящие результаты (PAW PBE)	7.466 (+0.07)	5.108 (-0.83)	0.684 (-0.87)	0.2502 (+1.17)	0.6081 (+0.30)
Эксперимент [23]	7.461	5.151	0.690	0.2473	0.6063
Теория (NCPD LDA) [24]	7.377	5.084	0.689	0.2473	0.6063
Теория (PP GGA) [25]	7.472	5.132	0.687	—	—

метода DDEC6 [20], который представляет собой уточнение электростатического химического метода, основанного на электронной плотности (Density Derived Electrostatic and Chemical approach). Заселенность кристаллических орбиталей Гамильтона (СОНР) рассчитывалась с помощью программы LOBSTER [21, 22].

Функция локализации электронов (ELF) рассчитывалась по следующей формуле:

$$\text{ELF} = \frac{1}{1 - (D/D_h)^2}, \quad (1)$$

где D — плотность кинетической энергии Паули электронного газа со спином «вверх»:

$$D = \frac{1}{2} \sum_i |\nabla \varphi_i|^2 - \frac{1}{8} \frac{|\nabla \rho_\uparrow|^2}{\rho_\uparrow}, \quad (2)$$

где φ_i — орбитали Кона–Шема, ρ_\uparrow — плотность электронов со спином «вверх»; а D_h — плотность кинетической энергии однородного газа электронов со спином «вверх»:

$$D_h = \frac{3}{10} (2\pi^2 \rho_\uparrow)^{5/3}. \quad (3)$$

Необходимо отметить, что по определению функция ELF может принимать значения от 0 до 1, при этом

в области $\text{ELF} \rightarrow 1$ наблюдается локализация электронных пар, кинетическая энергия которых стремится к нулю. Области $\text{ELF} = 1/2$ соответствуют полной делокализации электронов, например, в случае однородного электронного газа. Наконец, значения $\text{ELF} \rightarrow 0$ характерны для областей, разделяющих электронные пары, где плотность кинетической энергии высока.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Атомная и электронная структуры

Соединение Ti_5Si_3 имеет гексагональную структуру $D8_8$ и характеризуется пространственной группой $P6_3/mcm$ (№ 193). Атомы титана занимают два типа позиций Вайкоффа (Wyckoff positions) $4d$ ($1/3, 2/3, 0$) и $6g$ ($x, 0, 1/4$), атомы кремния также занимают $6g$ -позиции (рис. 1а). Равновесные параметры решетки и смещения атомов Ti и Si в $6g$ -позициях приведены в табл. 1. Видно, что рассчитанные структурные параметры Ti_5Si_3 находятся в согласии с результатами ранних теоретических и экспериментальных работ.

На рис. 1б показано локальное окружение атомов каждого типа и приведены обозначения для

межатомных связей, которые будут использоваться далее. Видно, что атомы Ti_{4d} образуют две связи d_1 (2.55 Å) с соседними атомами Ti_{4d} и шесть связей d_2 (2.63 Å) с атомами кремния. Другие атомы Ti_{6g} пятикратно координированы атомами кремния, при этом две связи d_3 , лежащие в плоскости (0001), имеют наименьшую длину 2.57 Å. Связь d_4 (2.67 Å) также расположена в плоскости (0001), но ориентирована вдоль кристаллографического направления $\langle 2\bar{1}10 \rangle$ или $\langle 1\bar{1}00 \rangle$. Только две связи d_5 (2.76 Å) обуславливают взаимодействие Ti_{6g} -Si между атомными слоями. Таким образом, каждый атом кремния образует четыре связи d_2 с атомами Ti_{4d} и пять связей с атомами Ti_{6g} : две из них d_3 -типа, одна — d_4 и две — d_5 .

На рис. 2а, на котором приведен электронный энергетический спектр Ti_5Si_3 , видно, что соединение является проводником, поскольку кривые дисперсии пересекают уровень Ферми (E_F) вдоль разных направлений в неприводимой части зоны Бриллюэна. Отметим, что приведенные состояния вблизи E_F позволяют интерпретировать рассчитанные листы поверхности Ферми, которые обсуждаются ниже. На рис. 2б видно, что валентная зона состоит из двух подзон: первая, расположенная при энергиях от -10.2 до -6.3 эВ, образована преимущественно s -состояниями Si, вторая, расположенная выше -5.0 эВ, обусловлена преимущественно p -состояниями Si, а при энергиях выше -3.6 эВ — d -состояниями Ti. При этом электронная структура атомов Ti_{4d} и Ti_{6g} отличается только высотой отдельных пиков, тогда как их расположение на энергетической шкале совпадает. Кроме того, положение пиков на кривых плотности электронных состояний атомов Ti двух типов хорошо коррелирует с соответствующими пиками на кривой плотности электронных состояний Si, что указывает на сильное взаимодействие этих атомов. На рис. 2б видно, что на кривой полной плотности электронных состояний уровень Ферми находится в локальном минимуме, что, согласно критерию Ямашиты [26], указывает на стабильность силицида. На рис. 2в приведены кривые СОНР для всех пяти типов связей в соединении Ti_5Si_3 . Видно, что только в случае d_1 -связи между атомами Ti_{4d} связующие орбитали являются частично заполненными, тогда как для остальных типов связей уровень Ферми отделяет связующие состояния от разрыхляющих. Последнее указывает на ковалентный вклад в механизм химической связи.

Все характеристики связей, включая зарядовое состояние взаимодействующих атомов, приведены в табл. 2. Площадь под кривой СОНР ($-ICOHP$), так

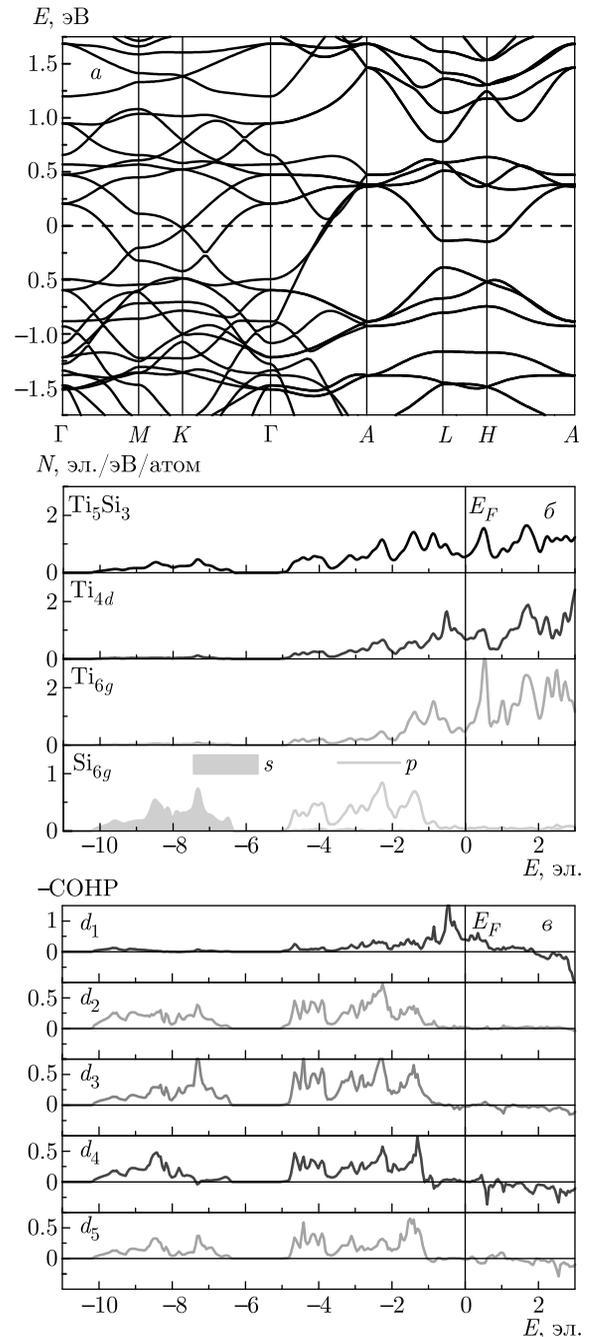


Рис. 2. Электронный энергетический спектр соединения Ti_5Si_3 (а), полная и локальные плотности электронных состояний (б), а также кривые СОНР для всех типов связей (в)

же как и заселенность перекрывания орбиталей (θ), рассчитанная методом DDEC6, могут служить мерой ковалентности химической связи. Однако первая величина измеряется в электронвольтах, тогда как вторая в электронах, что делает невозможным их прямое сопоставление, хотя корреляция между

Таблица 2. Характеристики связей в соединении Ti_5Si_3

Характеристика	$d_1, \text{Å}$	$d_2, \text{Å}$	$d_3, \text{Å}$	$d_4, \text{Å}$	$d_5, \text{Å}$
Связь X–Y	$\text{Ti}_{4d}\text{--Ti}_{4d}$	$\text{Ti}_{4d}\text{--Si}$	$\text{Ti}_{6g}\text{--Si}$	$\text{Ti}_{6g}\text{--Si}$	$\text{Ti}_{6g}\text{--Si}$
Ориентация	[0001]	mix	(0001)	$\langle\bar{2}110\rangle, \langle 1\bar{1}00\rangle$	mix
Длина, Å	2.55	2.63	2.57	2.67	2.76
–ИОНР, эВ	1.50	1.84	2.15	1.55	1.44
θ , эл.	0.24	0.34	0.45	0.33	0.30
$q(X)$, эл.	0.74	0.74	0.63	0.63	0.63
$q(Y)$, эл.	0.74	–1.12	–1.12	–1.12	–1.12

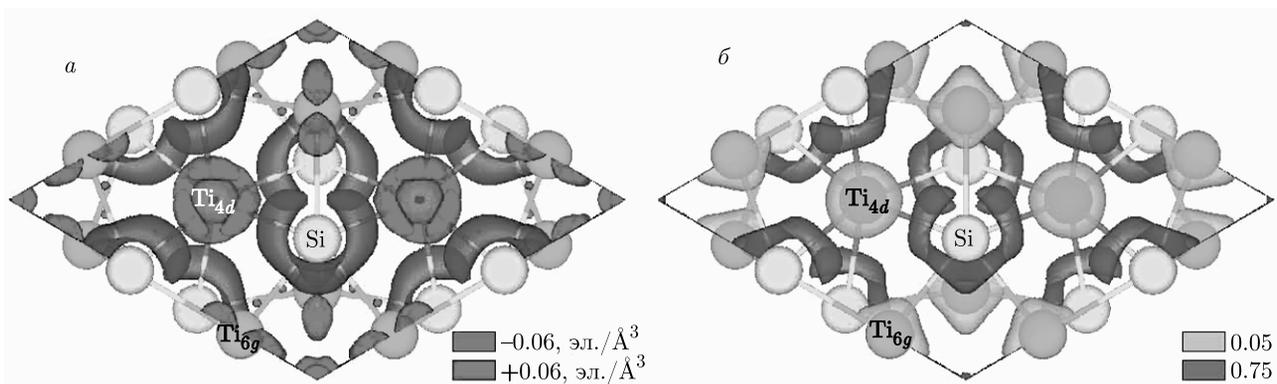


Рис. 3. Распределение разности зарядовой плотности (а): области аккумуляции и ухода заряда показаны соответственно синим и красным цветом; функции локализации электронов (б): области локализации электронных пар и их разделения показаны соответственно фиолетовым и зеленым цветом

ними имеет место. Из табл. 2 следует, что уменьшение длины связи $\text{Ti}\text{--Si}$ коррелирует с увеличением значений –ИОНР и θ . В то же время атомы Ti_{6g} отдают меньший заряд атомам Si , чем Ti_{4d} , что указывает на большую ионность связей в последнем случае. Очевидно, что d_1 -связь ($\text{Ti}_{4d}\text{--Ti}_{4d}$) является преимущественно металлической с незначительной примесью ковалентности. Поскольку она может формироваться с помощью только d_{z^2} -орбиталей Ti , которые практически не заполнены, то заселенность перекрывания орбиталей в этом случае минимальна.

На рис. 3а приведено распределение разности зарядовой плотности ($\Delta\rho$), которое рассчитывалось как разность между суммой атомных электронных плотностей ρ_{at} всех атомов и самосогласованной электронной плотностью соединения ρ_{sc} :

$$\Delta\rho(\mathbf{r}) = \sum \rho_{at}(\mathbf{r}) - \rho_{sc}(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Отметим, что отрицательные значения $\Delta\rho$ соответствуют областям пространства, где происходит аккумуляция заряда при образовании соединения, а положительные — областям его ухода. Видно, что электронная плотность локализуется в области вокруг атомов кремния, при этом она имеет наибольшую ширину на связях d_2 между атомами Si и Ti_{4d} . Это указывает на большой зарядовый перенос к кремнию именно от этих атомов титана, что согласуется с данными из табл. 2. Напротив, d_4 -связи ($\text{Si}\text{--Ti}_{6g}$, ориентированные вдоль кристаллографических направлений $\langle\bar{2}110\rangle$ и $\langle 1\bar{1}00\rangle$) демонстрируют лишь небольшие области ухода заряда вблизи атомов Ti_{6g} . Отметим, что области с высокими значениями функции локализации электронов, ELF (более 0.75), показанные на рис. 3б, соответствуют локализации обобществленных электронов атомов Ti и Si . Их смещение в сторону кремния отражает наличие ионного вклада в химическую связь. Значения за-

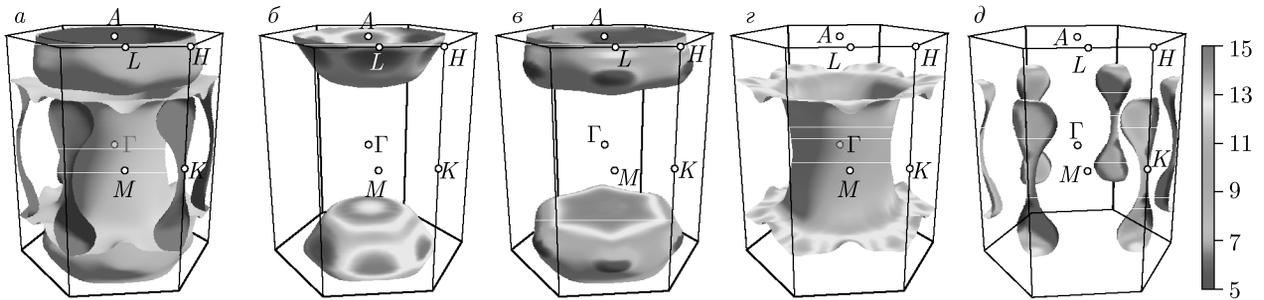


Рис. 4. Полная поверхность Ферми Ti_5Si_3 (а) и ее четыре отдельных листа (б–д) с указанием значений скорости Ферми на термометре

Таблица 3. Упругие константы соединения Ti_5Si_3

Модель	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{13} , ГПа	C_{33} , ГПа	C_{44} , ГПа	P_1 , ГПа	P_2 , ГПа
Настоящий расчет	283.9	109.2	57.4	265.8	91.8	21.9	-33.4
Эксперимент [29]	285	106	53	268	93	16.7	-39.6
Теория [25] US PBE	282.6	107.9	54.0	271.6	94.2	-	-

рядов, ушедших с атомов титана к кремнию, приведены в табл. 2, а сам факт такого переноса обусловлен большей электроотрицательностью кремния по сравнению с титаном: $\text{Si} - 1.90 \text{ эВ}^{1/2}$, $\text{Ti} - 1.54 \text{ эВ}^{1/2}$ [27]. Области, где значения функции ELF ниже 0.05, также показанные на рис. 3б, локализованы вокруг атомов титана и соответствуют высоким значениям кинетической энергии валентных d -электронов. В целом расчеты показали, что химическая связь в силициде титана имеет сложный характер.

Представленная на рис. 4а поверхность Ферми образована четырьмя листами. Первые два листа, соответствующие 31 и 32 зонам, являются дырочными замкнутыми поверхностями, локализованными вокруг точки A неприводимой части зоны Бриллюэна (рис. 4б,в). Третий лист представляет собой многосвязную поверхность, при этом электроны локализованы вокруг точек M и K , тогда как области в центре зоны Бриллюэна (точка Γ) и вокруг точек A , L и H заполнены дырками (рис. 4г). Наконец, четвертый лист, образованный 34 зоной, является замкнутой электронной поверхностью типа гантели (рис. 4д). На рис. 4б–д видно, что скорость Ферми (v_F) достигает наибольшего значения порядка $15 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$ на первом и втором листах поверхности Ферми, тогда как низкие значения $v_F \sim 5 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$ соответствуют некоторым областям на втором и четвертом листах. Скорость электронов, чей волновой

вектор соответствует третьему листу поверхности Ферми, практически везде равен среднему значению $9\text{--}11 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$ и достигает $13 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$ лишь в отдельных областях вблизи границы зоны Бриллюэна.

3.2. Механические свойства

Известно, что в случае гексагонального кристалла имеются пять независимых упругих постоянных (модулей податливости) [28], результаты расчетов которых приведены в табл. 3. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными и теоретическими данными [25, 29], что позволяет также воспроизвести корректно ряд упругих характеристик Ti_5Si_3 на их основе. Несмотря на то, что упругие постоянные рассчитываются для монокристалла, они позволяют оценить поликристаллические модули упругости. Объемный модуль упругости и модуль сдвига для поликристаллического образца, согласно теориям Фойгта, Ройсса и Хилла [30–32], могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned}
 B_V &= (2C_{11} + 2C_{12} + 4C_{13} + C_{33})/9, \\
 G_V &= (3.5C_{11} + C_{33} - 2.5C_{12} - 2C_{13} + 6C_{44})/15, \\
 B_R &= 1/(2S_{11} + S_{33} + 2S_{12} + 4S_{13}), \\
 G_R &= 15/(14S_{11} + 4S_{33} - 10S_{12} - 8S_{13} + 6S_{44}), \\
 B_H &= (B_V + B_R)/2, \\
 G_H &= (G_V + G_R)/2.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Таблица 4. Изотропные (поликристаллические) модули упругости, коэффициент Пуассона и коэффициенты анизотропии для Ti_5Si_3

Модель	B , ГПа	G , ГПа	E , ГПа	ν	A^B , %	A^G , %	A^E , %	A^U
Теория [30]	144.6	93.2	230.1	0.23	0.70	0.95	0.91	0.11
Теория [31]	142.6	91.4	226.0	0.24				
Теория [32]	143.6	92.3	228.0	0.24				
Эксперимент [29]	140	96	234	0.22	–	–	–	–
Эксперимент [34]	–	–	146	–	–	–	–	–
Эксперимент [35]	–	–	268	–	–	–	–	–
Теория [25] US PBE	140.32	95.82	237.16	0.36	–	–	–	–

Модуль Юнга и коэффициент Пуассона можно рассчитать по следующим формулам:

$$E = \frac{9BG}{3B + G}, \quad \nu = \frac{3B - 2G}{6B + 2G}. \quad (6)$$

где B и G берутся в соответствие с одним из трех приближений. Упругая анизотропия объемного модуля, модулей сдвига и Юнга, а также универсальный коэффициент анизотропии рассчитывались по формулам

$$\begin{aligned} A^B &= \frac{B_V - B_R}{B_V + B_R} \cdot 100\%, \\ A^G &= \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R} \cdot 100\%, \\ A^E &= \frac{E_V - E_R}{E_V + E_R} \cdot 100\%, \\ A^U &= \frac{B_V}{B_R} + 5 \frac{G_V}{G_R} - 6. \end{aligned} \quad (7)$$

Значения давления Коши могут быть оценены как

$$P_1 = C_{12} - C_{66}, \quad P_2 = C_{13} - C_{44}. \quad (8)$$

Из табл. 3 следует, что в целом рассчитанные характеристики хорошо согласуются с экспериментальными значениями и результатами ранних расчетов. Отметим, что отрицательное значение давления Коши (P_2 в случае Ti_5Si_3) указывает на направленность химических связей в соединении [33]. Поликристаллические модули упругости, рассчитанные по формулам (5), (6), приведены в табл. 4. Видно, что полученные значения находятся в хорошем согласии с данными из работы [29], в которой упругие константы измерялись методом резонанса прямоугольного параллелепипеда. Отметим, что значения модуля Юнга из работ [34, 35] существенно отличаются как от полученных в настоящей работе,

так и значений из [29]. В работе [34] модуль Юнга измерялся путем сжатия образца, тогда как в [35] он определялся методом наноиндентирования. В последнем случае авторы предположили, что переоценка модуля Юнга может быть обусловлена микropористостью образца. Авторы [29] объяснили наблюдаемое в некоторых экспериментальных работах занижение модуля Юнга поликристаллического Ti_5Si_3 образованием межзеренных мягких фаз, например Ti . Кроме отмеченных выше работ имеются также другие экспериментальные статьи, в которых изучались упругие свойства Ti_5Si_3 . В целом имеет место достаточно большой разброс экспериментальных значений модуля Юнга — от 146 ГПа до 268 ГПа. Напомним, что в настоящей работе поликристаллические модули упругости оценивались по упругим константам, рассчитанным для монокристалла, поэтому значения, приведенные в табл. 4, относятся к идеальному поликристаллическому Ti_5Si_3 без дополнительных фаз и включений.

Близкие к единице значения коэффициентов A^G и A^E , рассчитанных по формулам (7), отражают слабую анизотропию модулей сдвига и Юнга. В то же время анизотропия объемного модуля упругости более выражена, что, в свою очередь, отражается на зависимости линейной сжимаемости β от направления (рис. 5a). Отметим, что низкое значение коэффициента Пуассона (0.22) указывает на хрупкость данного соединения. Кроме того, отношение B/G равно 1.56, что меньше критического значения 1.75, и, согласно критерию Пью [36], также свидетельствует о хрупком характере разрушения силицида титана. В целом теоретические значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

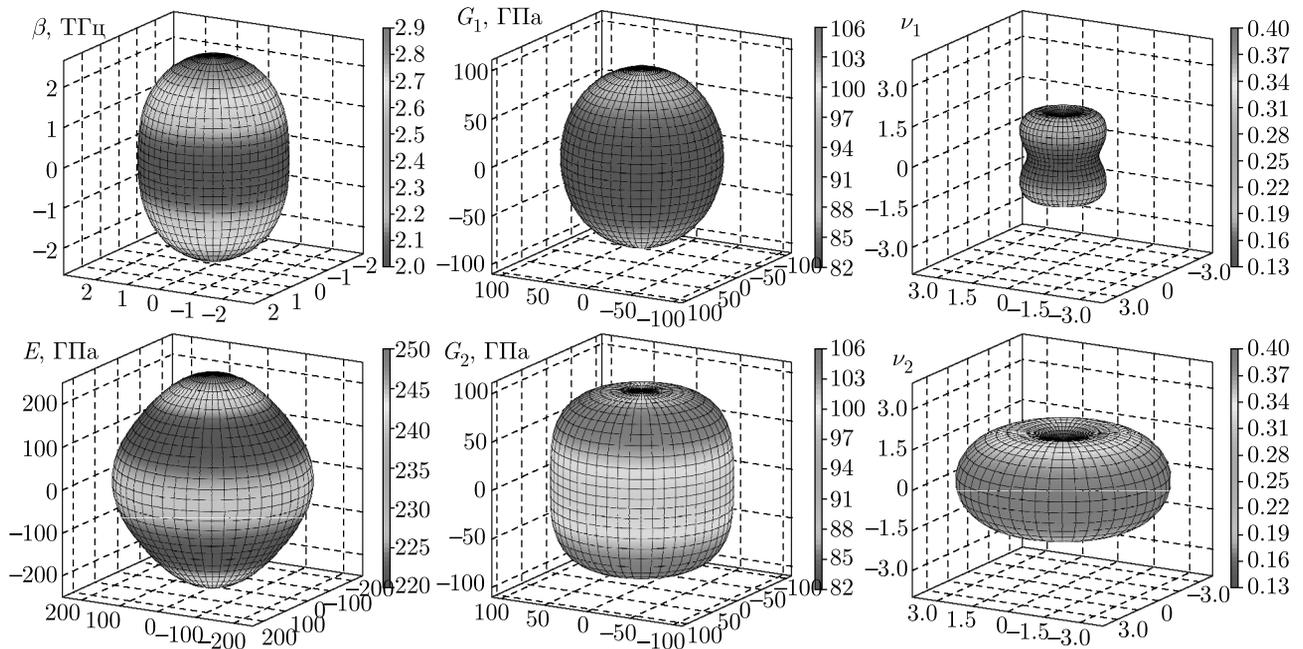


Рис. 5. Зависимость линейной сжимаемости (β), модуля Юнга (E), модуля сдвига (G) и коэффициента Пуассона (ν) от направления деформации. Нижние индексы «1» и «2» в случае двух последних характеристик соответствуют наименьшему и наибольшему их значению при фиксированном направлении

Кроме упомянутых выше поликристаллических упругих характеристик нами были рассчитаны их значения в зависимости от направления в кристалле. Соответствующие формулы и детальное описание можно найти, например, в [28, 37]. Рассчитанные упругие модули как функции направления приведены на рис. 5. Соответствующие проекции на базальную и призматическую плоскости показаны на рис. 6. Напомним, что базальная плоскость является плоскостью изотропии, поэтому модули упругости не зависят от направления в этой плоскости. Видно, что наибольшее значение линейной сжимаемости β (2.87 ТГц) соответствует направлению [0001]. Этому же направлению соответствует максимальное значение модуля Юнга E (249.4 ГПа). При этом минимальное значение β (2.07 ТГц) соответствует деформации в базальной плоскости (0001), а E (219.7 ГПа) — в направлении около 52° к оси c , что согласуется с экспериментом [29]. Минимальное значение модуля сдвига G в плоскости (0001), равно 82.4 ГПа, соответствует одной из плоскостей скольжения, характерной для соединения Ti_5Si_3 [29]. Наибольшее значение G (105.2 ГПа) получено для направления, ориентированного под углом около 45° к оси c . В отличие от других упругих параметров коэффициент Пуассона существенно зависит от на-

правления и изменяется в три раза: от минимального значения 0.13 до максимального 0.39, при этом оба значения достигаются для направления в плоскости (0001). Таким образом, расчеты показывают, что анизотропия упругих свойств силицида титана с гексагональной структурой выражена в меньшей степени, чем ожидалось, что является положительным фактором для его технологического применения.

3.3. Вибрационные, термодинамические и тепловые свойства

На рис. 7 приведены фоновый энергетический спектр и локальные фононные плотности состояний. Видно, что структура Ti_5Si_3 является динамически стабильной, поскольку на спектре отсутствуют мнимые вибрационные частоты. Поскольку атомы кремния легче атомов титана, частоты выше 8.4 ТГц обусловлены преимущественно ими, тогда как низкие частоты соответствуют колебаниям атомов Ti_{6g} , а частоты колебаний атомов Ti_{4d} являются промежуточными и находятся в диапазоне 5.5–10.7 ТГц.

На рис. 8 показаны рассчитанные термодинамические характеристики Ti_5Si_3 в сопоставлении с экспериментальными данными. Видно, что теплоем-

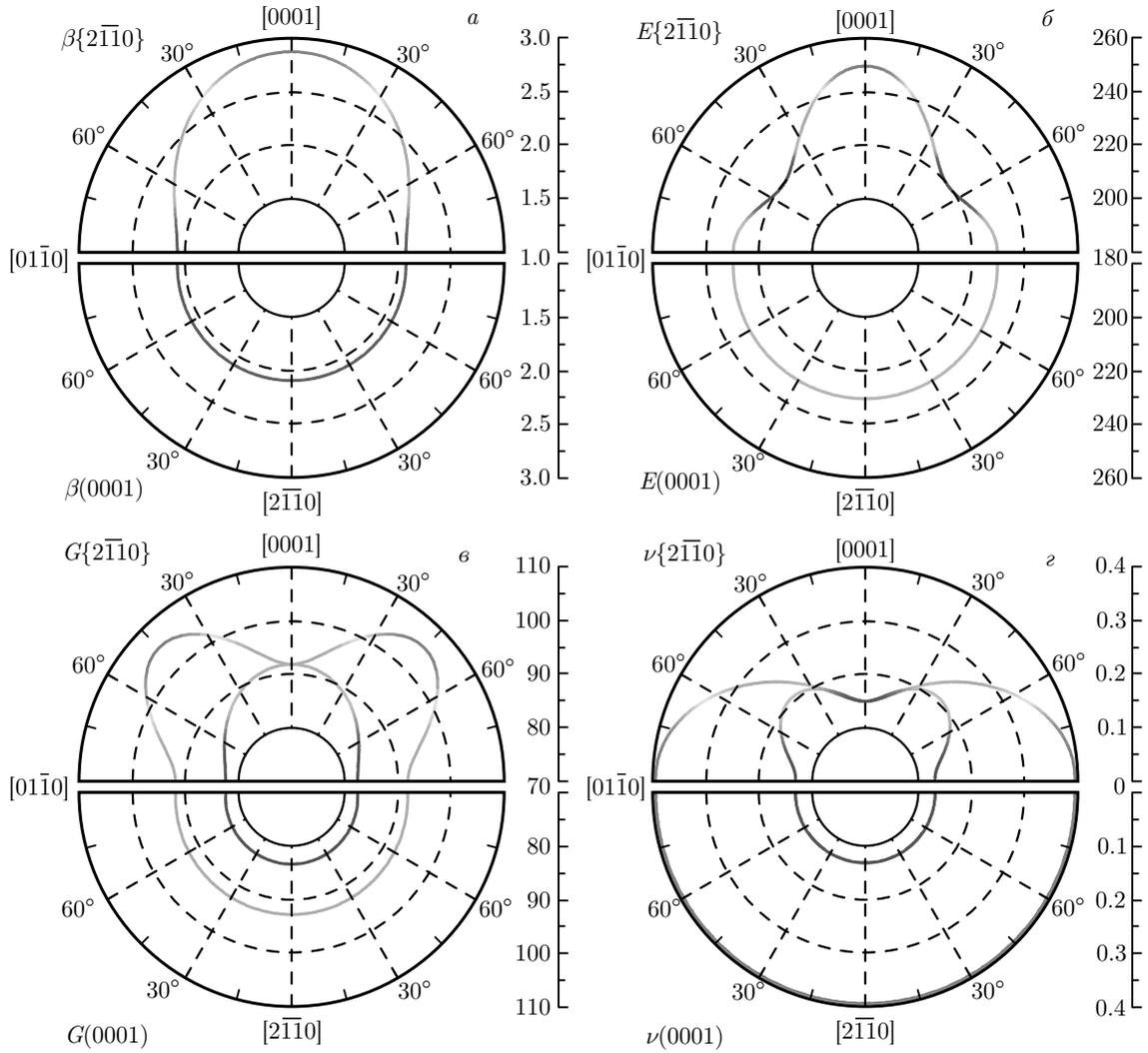


Рис. 6. Зависимость β (а), E (б), G (в), ν (г) Ti_5Si_3 от направления в плоскости $\{2\bar{1}10\}$ (верхний полуокруг) и (0001) (нижний полуокруг)

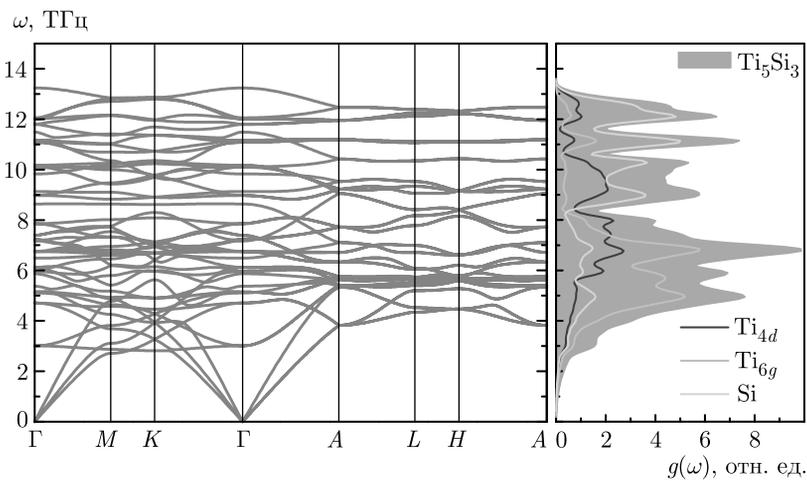


Рис. 7. Энергетический спектр (слева) и плотность фоннных состояний (справа) Ti_5Si_3

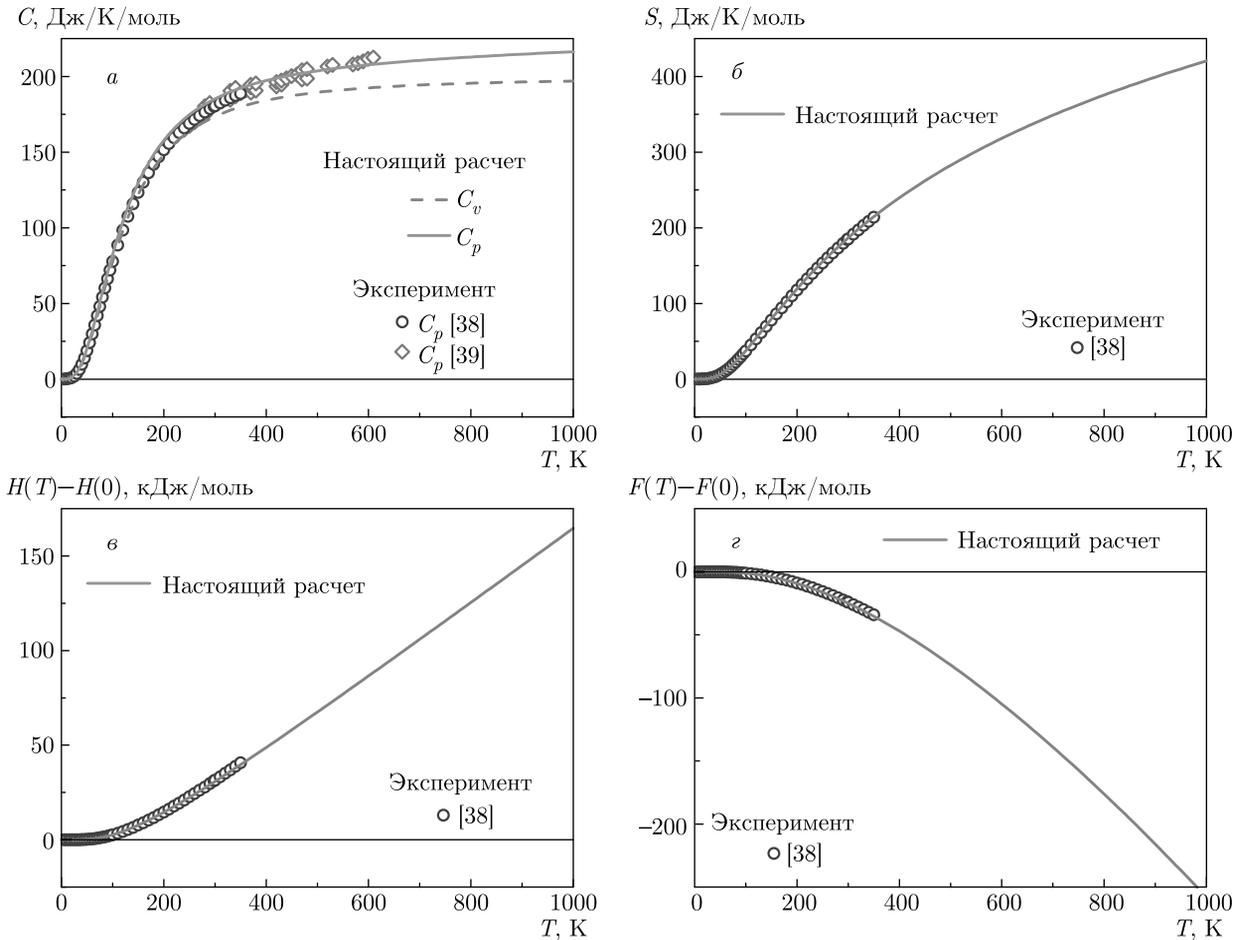


Рис. 8. Зависимость теплоемкости (а), энтропии (б), энтальпии (e) и свободной энергии (z) Ti_5Si_3 от температуры

кость при постоянном давлении (C_P) хорошо согласуется с экспериментом [38, 39], проведенным для разных интервалов температур, при этом низкотемпературное поведение теплоемкости при постоянном объеме (C_V) имеет зависимость пропорциональную T^3 . Напомним, что в рамках гармонической теории кристалла данные характеристики рассчитывались по следующим формулам:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V, \quad C_P = C_V + \alpha^2 BVT, \quad (9)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad F = -k_B T \ln(Z),$$

где E — энергия фононов, равная

$$E = \sum_{\mathbf{q},s} \hbar\omega(\mathbf{q},s) \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\hbar\omega(\mathbf{q},s)/k_B T) - 1} \right], \quad (10)$$

α_V — объемный коэффициент теплового расширения, F — свободная энергия, S — энтропия, а Z —

статистическая сумма, которая оценивалась по формуле

$$Z = \prod_{\mathbf{q},s} \frac{\exp(-\hbar\omega(\mathbf{q},s)/2k_B T)}{1 - \exp(-\hbar\omega(\mathbf{q},s)/k_B T)}. \quad (11)$$

Температурные зависимости энтальпии (H), свободной энергии и вибрационного вклада в энтропию также находятся в хорошем согласии с экспериментом [38]. Известно, что существует противоречие между теоретическими и экспериментальными результатами, заключающееся в предсказании фазы силицида, которая должна находиться в термодинамическом равновесии с твердым раствором Si в матрице α -Ti. Согласно фазовой диаграмме Ti-Si, основанной на экспериментальных данных, тетрагональная фаза Ti_3Si должна находиться в термодинамическом равновесии с твердым раствором ниже температуры эвтектоидной реакции [40]. С другой стороны, теоретические расчеты показывают, что фаза Ti_3Si может распадаться на Ti_5Si_3 [41] или Ti_2Si и

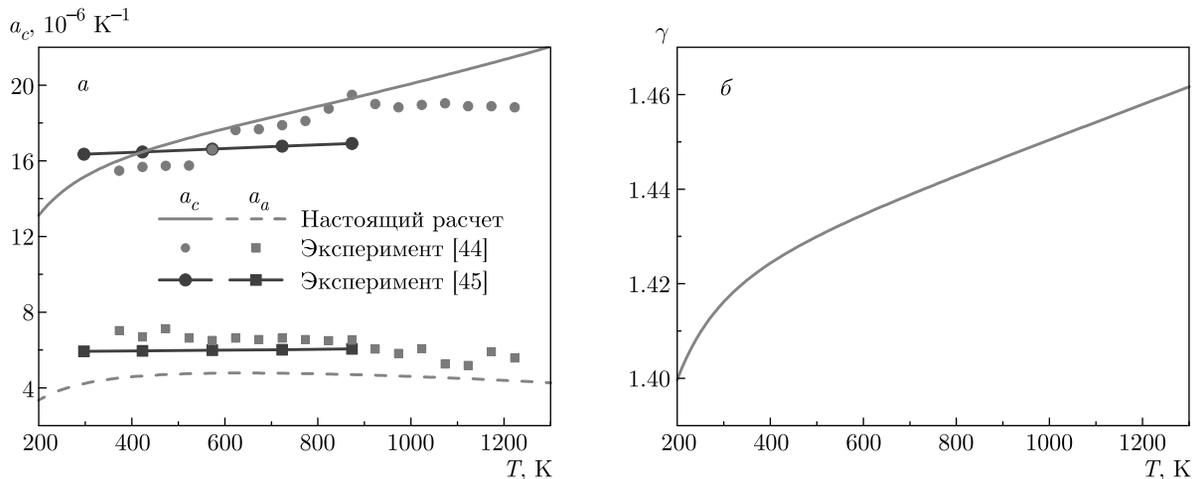


Рис. 9. Зависимость коэффициента линейного теплового расширения (а) и полного параметра Грюнайзена (б) Ti_5Si_3 от температуры

α -Ti [42, 43]. Причиной этих расхождений может являться пренебрежение вкладом колебательных степеней свободы в термодинамические свойства фаз. Как видно на рис. 8г, вибрационная свободная энергия действительно достаточно быстро меняется с ростом температуры, особенно при T выше примерно 100 К. В этой связи, полученные термодинамические характеристики могут быть полезны в дальнейших исследованиях фазовой стабильности в силицидах титана.

В заключение, на рис. 9 приведены зависимости коэффициентов линейного теплового расширения (α_a , α_c) и полного параметра Грюнайзена (γ), которые рассчитывались по следующим формулам:

$$\alpha_l = \frac{1}{l_{298}} \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_P, \quad (12)$$

$$\gamma = \frac{\sum_{\mathbf{q},s} \gamma_{\mathbf{q},s} C_V(\mathbf{q},s)}{\sum_{\mathbf{q},s} C_V(\mathbf{q},s)}, \quad (13)$$

где l_{298} — линейный размер (параметр a или c) при $T = 298$ К; $C_V(\mathbf{q},s)$ — вклад в теплоемкость C_V нормальной моды \mathbf{q},s , а $\gamma_{\mathbf{q},s}$ — параметр Грюнайзена для фононной моды \mathbf{q},s , равный

$$\gamma_{\mathbf{q},s} = - \frac{\partial(\ln \omega(\mathbf{q},s))}{\partial(\ln V)}. \quad (14)$$

Из рис. 9а видно, что теоретические значения параметра α_c согласуются с экспериментальными значениями [44] в интервале температур от 300 К до 900 К, но превышают их при $T > 900$ К. Отметим,

что в [45] коэффициент α_c в отличие от результатов, полученных в работе [44], практически не зависит от температуры. Коэффициент теплового расширения вдоль оси a существенно меньше, чем α_c , при этом его функциональная зависимость от температуры согласуется с экспериментом: как и в работах [44, 45] он практически не зависит от температуры и слегка понижается при $T > 900$ К, как и в эксперименте [44]. В то же время, теоретические значения α_a примерно на $2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ меньше экспериментальных [44, 45]. Оценка анизотропии теплового расширения α_c/α_a достигает 3.55–4.36 в интервале температур 200–1000 К, что превышает экспериментальное значение 2.7 [44, 45]. Такое расхождение обусловлено преимущественно недооценкой коэффициента α_a . Коэффициент линейного теплового расширения для поликристаллического образца при этих же температурах равен $(6.61\text{--}9.76) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, тогда как экспериментальное значение, приведенное в работе [46], составляет $7.1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Полный параметр Грюнайзена (рис. 9б), который в среднем характеризует зависимость фононных частот от объема, может быть также рассчитан по формуле

$$\gamma = \frac{\alpha_V B}{C_V \rho}, \quad (15)$$

где α_V , B , C_V и ρ — соответственно коэффициент объемного теплового расширения, объемный модуль упругости, теплоемкость при постоянном объеме и плотность силицида, которые зависят от температуры. Отметим, что в случае гексагональной структуры $\alpha_V \approx 2\alpha_a + \alpha_c$. Поскольку все четыре

множителя в формуле (15) зависят от температуры ($1/f \partial f / \partial T \approx 10^{-4} - 10^{-3}$, где $f = \alpha_V, B, C_V$ или ρ), то γ также меняется с температурой даже в высокотемпературной области. Теоретические значения параметра Грюнайзена равны 1.40–1.46 в интервале температур от 300 К до 1300 К, что согласуется с экспериментальным значением 1.44 [46]. В целом тепловые свойства идеального силицида титана Ti_5Si_3 воспроизводятся удовлетворительно в настоящих расчетах, что позволит в дальнейшем использовать данную методику для оценки этих характеристик в случае легированного силицида.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом проекционных присоединенных волн рассчитана атомная и электронная структуры, механические и термодинамические свойства силицида титана Ti_5Si_3 . Анализ особенностей химических связей между атомами показал, что взаимодействие Ti–Si носит металло-ковалентный характер с существенным ионным вкладом. При этом атомы кремния выступают в роли анионов и получают заряд порядка 1.12 эл. Только связи Ti–Ti, ориентированные вдоль оси [0001], демонстрирует ярко выраженный металлический характер. Рассчитана поверхность Ферми силицида титана и оценены скорости электронов на ее листах. Показано, что скорости электронов на поверхности Ферми зависят от направления, а ее сложная структура указывает на анизотропию электронных транспортных свойств. Рассчитаны упругие константы и поликристаллические модули упругости. Проведен расчет упругих характеристик Ti_5Si_3 в зависимости от направления в кристалле. Показано, что наибольшие значения модуля Юнга и линейной сжимаемости соответствуют деформации вдоль оси (0001), тогда как наименьшее значение модуля сдвига получено для деформации в базальной плоскости. Коэффициент Пуассона при деформации в базальной плоскости может принимать значение в диапазоне от 0.13 до 0.39, что указывает на его анизотропию, тогда как анизотропия упругих свойств Ti_5Si_3 выражена в меньшей степени. Низкие значения коэффициента Пуассона и отношения $B/G < 1.75$ указывают на хрупкое поведение материала при разрушении. Расчет фононного спектра подтвердил динамическую стабильность Ti_5Si_3 и позволил рассчитать термодинамические характеристики, такие как теплоемкость, энтропия, энтальпия и свободная энергия и другие. Показано,

что свободная энергия существенно изменяется с температурой, что указывает на необходимость учета вибрационного вклада в энергию Гиббса при изучении стабильности силицидов титана. Теоретические коэффициенты линейного теплового расширения находятся в хорошем согласии с экспериментом, хотя значения α_a в рассмотренном интервале температур недооцениваются. В целом получена значительная анизотропия коэффициента теплового расширения, что согласуется с экспериментом. Параметр Грюнайзена также находится в согласии с экспериментальным значением и имеет несущественную зависимость от температуры.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-23-00078). Численные расчеты проводились на суперкомпьютере СКИФ Cyberia в Томском государственном университете.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. P. Gambino and E. G. Colgan, *Mater. Chem. Phys.* **52**, 99 (1998).
2. L. J. Chen, *Silicide Technology for Integrated Circuits*, IEE, London (2009).
3. L. N. Lie, W. A. Tiller, and K. C. Saraswat, *J. Appl. Phys.* **56**, 2127 (1984).
4. H. Jeon, C. A. Sukow, J. W. Honeycutt et al., *J. Appl. Phys.* **71**, 4270 (1992).
5. F. La Via, F. Mammoliti, G. Corallo et al., *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1864 (2001).
6. T. Takasugi, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **213**, 403 (1991).
7. H. J. Grabke and G. H. Meier, *Oxid. Met.* **44**, 147 (1995).
8. M. K. Meyer and M. Akinc, *J. Amer. Ceram. Soc.* **79**, 938 (1996).
9. Z. Li and W. Gao, in *Intermetallics Research Progress*, ed. by Y. N. Berdovsky, Nova Sci. Publ., New York (2008), p. 1.
10. А. В. Бакулин, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **154**, 1136 (2018).
11. А. В. Бакулин, Л. С. Чумакова, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **160**, 206 (2021).
12. X. Y. Li, S. Taniguchi, Y. Matsunaga et al., *Intermetallics* **11**, 143 (2003).

13. H. R. Jiang, Z. L. Wang, W. S. Ma et al., *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **18**, 512 (2008).
14. J. Huang, F. Zhao, X. Cui et al., *Appl. Surf. Sci.* **582**, 152444 (2022).
15. Z. Tang, A. J. Thom, and M. Akinc, *Intermetallics* **14**, 537 (2006).
16. L. Zhang and J. Wu, *Acta Mater.* **46**, 3535 (1998).
17. P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
18. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
19. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
20. T. A. Manz and N. G. Limas, *RSC Adv.* **6**, 47771 (2016).
21. R. Dronskowski and P. E. Blöchl, *J. Phys. Chem.* **97**, 8617 (1993).
22. S. Maintz, V. L. Deringer, A. L. Tchougreff et al., *J. Comput. Chem.* **37**, 1030 (2016).
23. P. Villars and L. D. Calvert, *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, ASM, Metals Park, OH (1985).
24. J. J. Williams, Y. Y. Ye, M. J. Kramer et al., *Intermetallics* **8**, 937 (2000).
25. P. F. Zhang, Y. X. Li, and P. K. Bai, *IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng.* **284**, 012013 (2017).
26. J. Yamashita and S. Asano, *Prog. Theor. Phys.* **48**, 2119 (1972).
27. W. M. Haynes, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 96th Edition, CRC Press/Taylor and Francis, Boca Raton, FL (2015), p. 9-97.
28. F. J. Nye, *Physical Properties of Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1985).
29. K. Kishida, M. Fujiwara, H. Adachi et al., *Acta Mater.* **58**, 846 (2010).
30. W. Voigt, *Physical Properties of Crystals*, 2nd ed., Teubner, Leipzig (1928), p. 716.
31. A. Reuss and Z. Angew. Math. Mech. **9**, 49 (1929).
32. R. Hill, *Proc. Phys. Soc. London, Sect. A* **65**, 349 (1952).
33. D. G. Pettivor, *Mater. Sci. Technol.* **8**, 345 (1992).
34. L. Zhang and J. Wu, *Scr. Mater.* **38**, 307 (1998).
35. K. Kasraee, M. Yousefpour, and S. A. Tayebifard, *J. Alloys Compd.* **779**, 942 (2019).
36. S. F. Pugh, *Philos. Mag.* **45**, 823 (1954).
37. T. C. T. Ting, *J. Elast.* **81**, 271 (2005).
38. D. G. Archer, *J. Chem. Eng. Data* **41**, 571 (1996).
39. S. Agarwal, E. J. Cotts, S. Zarembo et al., *J. Alloys Compd.* **314**, 99 (2001).
40. H. Seifert, H. Lukas, and G. Petzow, *Z. Metallkd.* **87**, 2 (1996).
41. D. O. Poletaev, A. G. Lipnitskii, A. I. Kartamyshev et al., *Comput. Mater. Sci.* **95**, 456 (2014).
42. C. Colinet and J. C. Tedenac, *Intermetallics* **18**, 1444 (2010).
43. C. Colinet and J. C. Tedenac, *Calphad* **37**, 94 (2012).
44. T. Nakashima and Y. Umakoshi, *Philos. Mag. Lett.* **66**, 317 (1992).
45. G. Rodrigues, C. A. Nunes, P. A. Suzuki et al., *Intermetallics* **14**, 236 (2006).
46. G. Frommeyer and R. Rosenkranz, in *Metallic Materials with High Structural Efficiency*, ed. by O. N. Senkov, D. B. Miracle, S. A. Firstov, Kluwer Academic Publishers, New York (2004), p. 287.

ОСОБЕННОСТИ ГЕНЕРАЦИИ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ВЕЩЕСТВО ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ ЛАЗЕРНОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА

Г. А. Вергунова ^{a*}, С. Ю. Гуськов ^a, И. Ю. Вичев ^b,
А. С. Грушин ^b, Д. А. Ким ^b, А. Д. Соломянная ^b

^a Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^b Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»
125047, Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 октября 2021 г.,
после переработки 22 октября 2021 г.
Принята к публикации 12 ноября 2021 г.

На основании результатов численных расчетов исследуются особенности термодинамического состояния высокотемпературной излучающей лазерной плазмы. Обсуждаются зависимости характеристик лазерно-индуцированного рентгеновского излучения от длины волны и интенсивности воздействующего импульса Nd-лазера в диапазонах изменения их значений, отвечающих схеме сжатия мишени инерциального термоядерного синтеза импульсом рентгеновского излучения. Исследуются особенности термодинамического состояния плазмы, образованной в результате воздействия импульса лазерно-индуцированного рентгеновского излучения на плоские мишени из легких материалов, наиболее востребованных в качестве материалов внешнего слоя термоядерной мишени — аблятора, в котором происходит образование давления, сжимающего мишень. Представлено сравнение термодинамических характеристик плазмы, образованной при воздействии лазерного импульса, и плазмы, образованной при воздействии лазерно-индуцированного рентгеновского импульса.

DOI: 10.31857/S0044451022060128
EDN: DUWAQY

1. ВВЕДЕНИЕ

В основе выбора длины волны излучения лазерного драйвера установки инерциального термоядерного синтеза (ИТС) лежит сравнительный анализ зависимостей от длины волны энергетических эффективностей собственно процесса генерации излучения и его воздействия на термоядерную мишень. В качестве драйвера действующей [1–3] и строящихся [4–7] лазерных установок, предназначенных для зажигания термоядерной мишени — получения термоядерной энергии, превышающей лазерную — используется лазер на неодимовом стекле, способный

в настоящее время обеспечить максимальную энергетическую установку. Применительно к Nd-лазеру речь идет об использовании лазерного импульса основной, второй и третьей гармоник излучения с длинами волн соответственно $\lambda = 1.06$ мкм, 0.53 мкм и 0.35 мкм. Энергетическая эффективность преобразования излучения основной гармоники Nd-лазера в излучение второй гармоники составляет около 60 %, а третьей — около 40 %. С другой стороны, с уменьшением длины волны воздействие излучения становится более эффективным с точки зрения различных аспектов сжатия мишени как при прямом облучении мишени лазерным излучением, так и при непрямом облучении рентгеновским излучением, в которое предварительно преобразуется лазерное излучение. С уменьшением длины волны увеличивается коэффициент поглощения излучения, медлен-

* E-mail: vergunovaga@lebedev.ru

нее развиваются плазменные неустойчивости, ответственные за генерацию быстрых электронов, которые могут осуществить нежелательный предварительный прогрев мишени.

В случае прямого облучения, когда лазерное излучение воздействует непосредственно на внешний слой мишени — аблятор, материалом которого служат легкие материалы, такие как пластик, бериллий или углерод повышенной плотности — зависимости термодинамических величин образующейся плазмы от интенсивности и длины волны воздействующего лазерного импульса достаточно подробно исследованы и теоретически, и экспериментально. Основным фактором, который регулирует термодинамическое состояние лазерной плазмы легких материалов, является поглощение лазерного излучения в области плазменного резонанса с плотностью, близкой к критической плотности плазмы, $\rho_{cr} [\text{г/см}^3] = 1.83 \cdot 10^{-3} A/Z\lambda_\mu^2$ (A и Z — атомный номер и зарядовое число ионов плазмы, $\lambda_\mu [\text{мкм}]$ — длина волны лазерного излучения). Этот факт приводит к хорошо известным зависимостям температуры и плотности от длины волны λ и интенсивности I_{las} лазерного импульса [2, 8]:

$$T \propto (I_{las}/\rho_{cr})^{2/3} \propto (I_{las}\lambda^2)^{2/3},$$

$$P \propto \rho_{cr} (I_{las}/\rho_{cr})^{2/3} \propto (I_{las}/\lambda)^{2/3}.$$

В схеме непрямого сжатия на термоядерную капсулу воздействует импульс рентгеновского излучения, который образуется при воздействии лазерного импульса на внутреннюю стенку оболочки-конвертера, в геометрическом центре которого помещается термоядерная капсула. На действующей мегаджоульной лазерной установке NIF (LLNL, США) [2, 3] используется конвертер цилиндрической формы. Для обеспечения высокой степени конверсии лазерного излучения в рентгеновское в качестве материала конвертера используются вещества с большими зарядовыми числами, такие как золото и обедненный уран [9]. В результате при непрямом облучении конечное энергетическое воздействие на аблятор термоядерной капсулы имеет комплексный характер, который определяется термодинамическими свойствами как плазмы конвертера, так и плазмы аблятора, а также нелинейными зависимостями пробегов рентгеновского излучения от температуры и плотности в той и другой плазме. В частности, по этой причине в большинстве ранее опубликованных работ, посвященных физике непрямого облучения, результаты представлены в виде итогового заключения о работе

конкретной схемы лазер–конвертер–капсула. Такие данные применительно к условиям облучения на установке NIF суммированы в работах [2, 3] и относятся к облучению капсулы с аблятором из пластика рентгеновским импульсом, образованным при облучении внутренней поверхности конвертера из золота излучением третьей гармоники Nd-лазера.

Вместе с тем для детального понимания конечного результата комплексного процесса непрямого воздействия представляется важным исследование его составных частей в различных условиях облучения. Такие расчетно-теоретические исследования, выполненные в данной работе, относятся к изучению термодинамического состояния и излучательных свойств плазмы конвертера, образованной воздействием излучения первых трех гармоник Nd-лазера, и термодинамического состояния плазмы аблятора, образованной воздействием импульса лазерно-индуцированного рентгеновского излучения.

Расчеты были проведены по 1D-программе RADIAN [10]. В основу кода RADIAN положена физико-математическая модель, содержащая уравнения двухтемпературной радиационной гидродинамики. Учитывается электрон-ионный обмен, классическая или уменьшенная электронная теплопроводность. Лазерное излучение поглощается обратно-тормозным способом. Уравнения газовой динамики решаются совместно с многогрупповым уравнением переноса собственного излучения плазмы. В рамках представленной работы использовались уравнения состояния вещества (УРС) и спектральные коэффициенты поглощения излучения из базы данных THERMOS [11, 12]. В области высоких температур и низких плотностей рассматриваемой задачи УРС, как правило, близко к УРС идеального газа.

В разд. 2 представлены результаты численного моделирования взаимодействия импульсов излучения первой, второй и третьей гармоник Nd-лазера с интенсивностями в диапазоне 10^{13} – 10^{15} Вт/см² с плоской мишенью из золота. Особое внимание уделяется случаю импульса второй гармоники Nd-лазера, использование которого предполагается в проекте российской мегаджоульной установки [5]. Обсуждаются особенности образования плазмы и ее излучательных свойств, связанных с переносом энергии собственным излучением плазмы. Проводится сравнительный анализ термодинамических характеристик, относящихся к излучающей лазерной плазме мишени из золота, образованной лазерным излучением первой, второй и третьей гармоник Nd-лазера.

В разд. 3 представлены результаты численного моделирования взаимодействия лазерно-индуцированного рентгеновского излучения с плоскими мишенями из легких материалов — пластика и высокоплотного углерода, которые используются в качестве материалов аблятора термоядерных мишеней. Обсуждаются особенности образования плазмы, связанные с поглощением и переносом воздействующего рентгеновского излучения. Проводится сравнительный анализ термодинамических характеристик, относящихся к лазерной плазме одного и того же материала при облучении импульсами лазерного и рентгеновского излучения.

2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ИЗЛУЧАЮЩЕЙ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ

Численные расчеты взаимодействия импульсов излучения первой, второй и третьей гармоник Nd-лазера, интенсивности которых лежали в диапазоне 10^{13} – 10^{15} Вт/см², с плоскими мишенями из золота были выполнены с использованием оптических констант, рассчитанных в отсутствие локального термодинамического равновесия (ЛТР) в плазме [11], и с учетом ограничения потока электронной теплопроводности. Ограничение потока электронной теплопроводности моделировалось введением коэффициента ограничения $f_e = 0.03$ – 0.08 , что давало возможность согласовать результаты расчета с экспериментальными результатами по конверсии лазерного излучения в рентгеновское. Отсутствие ограничения теплопроводности приводит к расчетным значениям конверсии, значительно превышающим экспериментальные данные.

На рис. 1 представлены результаты расчета воздействия лазерного импульса с постоянной интенсивностью $I_{las} = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² и длиной волны $\lambda = 0.53$ мкм на плоскую мишень из золота толщиной 30 мкм. Приведены зависимости от пространственной координаты плотности и температуры плазмы, а также плотности потока электронной теплопроводности и лучистой теплопроводности плазмы на момент времени $t = 0.5$ нс. Лазерное излучение поглощается в испаренной части мишени — короне — за счет обратно-тормозного механизма и достигает областей с критической плотностью $\rho_{cr} \approx 0.017$ г/см³ при $Z \approx 62$. (На рис. 1 координата x отсчитывается от левой границы мишени, лазерное излучение падает на мишень справа.) С течением времени критическая плотность плазмы удаля-

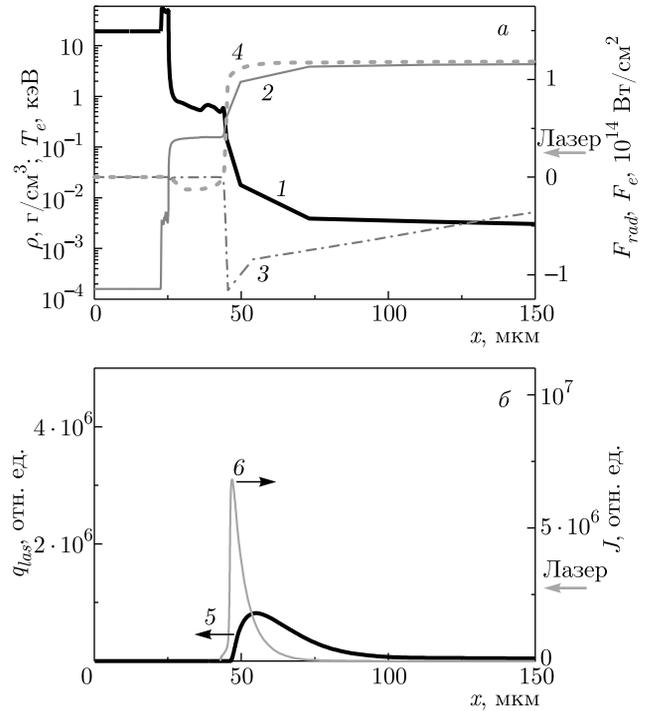


Рис. 1. а) Зависимости от пространственной координаты плотности ρ (линия 1), температуры T_e (линия 2), потока электронной теплопроводности F_e (линия 3) и радиационного потока F_{rad} (линия 4). б) Зависимости от пространственной координаты скорости удельного (в единице объема) энерговыделения лазерной энергии q_{las} (линия 5) и излучательной способности J (линия 6) плазмы. Рисунки относятся к моменту времени $t = 0.5$ нс, лазерному импульсу с постоянным потоком $I_{las} = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см², $\lambda = 0.53$ мкм на плоскую мишень из золота. Начальное положение мишени $0 \leq x \leq 30$ мкм, лазерное излучение падает на мишень справа

ется от начального положения границы мишени: к 0.5 нс она располагается на расстоянии 24 мкм от начальной границы слоя золота, в точке с координатой $x \approx 54$ мкм. Большая часть лазерного излучения поглощается в области с критической плотностью (рис. 1, кривая 5). Из области поглощения лазерного излучения энергия потоком электронной теплопроводности (кривая 3 на рис. 1а) переносится вглубь золотого слоя. Это приводит к прогреву плотных слоев мишени, где формируется область генерации собственного излучения плазмы. В расчетах с учетом ограничения потока электронной теплопроводности образуются более резкие профили плотности и температуры, чем в расчетах без ограничения потока электронной теплопроводности.

Электронная теплопроводность переносит тепло в менее плотной части короны в области с координатой

натами $x > 45$ мкм (линия 3 на рис. 1а). Радиационный поток (линия 4 на рис. 1а) является более эффективным механизмом переноса энергии вглубь мишени, чем поток электронной теплопроводности. Рентгеновское излучение эффективно поглощается (отрицательные значения потока рентгеновского излучения на кривой 4) вблизи границы неиспаренного золота ($x \approx 30$ мкм), прогревая и испаряя новые слои золота. В результате распределения плотности и температуры вблизи области испарения характеризуются значительными градиентами этих величин. Так, при изменении пространственной координаты на 6 мкм ($45.5 \text{ мкм} < x < 51.5 \text{ мкм}$) плотность ρ увеличивается от $\rho_{cr} \approx 0.017 \text{ г/см}^3$ до $10\rho_{cr} \approx 0.17 \text{ г/см}^3$, электронная температура уменьшается от $T_e \approx 1.8 \text{ кэВ}$ до $T_e \approx 400 \text{ эВ}$, средний заряд уменьшается от 62 до 47. При изменении пространственной координаты на 2 мкм ($43.5 \text{ мкм} < x < 45.5 \text{ мкм}$) плотность увеличивается от $10\rho_{cr}$ до $50\rho_{cr}$ (около 0.65 г/см^3). То есть в соответствии с [13] плотность на фронте абляции уменьшается практически по экспоненциальному закону. Температура от фронта абляции до области с критической плотностью растет как $T \propto x^{2/5}$.

Излучательная способность плазмы приближенно может быть представлена как [14, 15]

$$J = 1.5 \cdot 10^{10} \overline{Z^2 Z} \sqrt{T_e} \left(\frac{\rho}{A}\right)^2 \times \left(1 + \frac{2.4I}{T_e}\right) \text{ Дж/см}^3 \cdot \text{с},$$

где I — средний потенциал ионизации вещества. Первое слагаемое в скобках определяет вклад тормозного излучения свободных электронов, второе — вклад связанно-связанных и свободно-связанных переходов. При этом в высокотемпературной плазме легких элементов основной вклад в излучательную способность вносит первое слагаемое. Для плазмы многозарядных ионов I/T_e оказывается в диапазоне 4–10, и основной вклад в излучательную способность вносит второе слагаемое. В плазме с установившимся зарядовым составом излучательная способность зависит от температуры как $T_e^{1/2}$, от плотности — как ρ^2 . Такая зависимость приводит к тому, что максимум рентгеновского излучения (кривая 6, рис. 1б) приходится на область с плотностью $(4\text{--}10)\rho_{cr}$ и температурой 400 эВ и смещен приблизительно на 3 мкм от максимума поглощения лазерного излучения вглубь твердых слоев плазмы.

На рис. 2 для сравнения представлены пространственные распределения плотности ρ , температуры T_e , скорости удельного энерговыделения лазерной

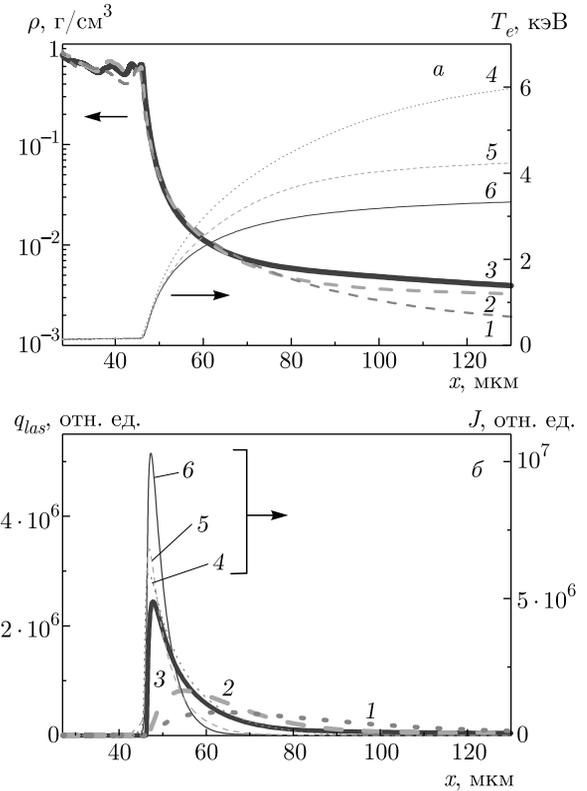


Рис. 2. Сформированные в золотом слое к моменту 0.5 нс под действием излучения первой (линии 1, 4), второй (линии 2, 5) и третьей (линии 3, 6) гармоник Nd-лазера с $I_{las} = 3 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$. а) Зависимости от пространственной координаты плотности ρ (линии 1, 2, 3) и температуры T_e (линии 4, 5, 6). б) Удельное энерговыделение q_{las} лазерного излучения (линии 1, 2, 3) и излучательная способность плазмы J (4, 5, 6). Начало координат совпадает с левой границей мишени. В начальный момент времени правая граница мишени расположена на расстоянии 30 мкм от начала координат

энергии q_{las} и излучательной способности плазмы J в момент времени 0.5 нс, сформированные при воздействии первой, второй и третьей гармоник лазерного излучения на плоский слой золота. Приведены результаты расчетов с коэффициентом ограничения электронной теплопроводности $f_e = 0.03$. Лазерное излучение поглощается в области плазмы с плотностью вплоть до критической плотности плазмы, соответствующей длине волны воздействующего лазерного излучения. С уменьшением длины волны уменьшается ширина области поглощения: излучение первой гармоники поглощается в относительно протяженной области с шириной около 28 мкм, излучение второй гармоники — в области шириной около 16 мкм, третьей — около 5 мкм. Зависимость $N_{e,cr} \propto \lambda^{-2}$ приводит к тому, что области погло-

Таблица 1. Значения координаты поверхности с критической плотностью плазмы, x_{cr} , критической плотности ρ_{cr} , а также температуры T_e и среднего заряда Z в области критической плотности в момент времени 0.5 нс при воздействии на плоскую мишень из золота лазерного излучения с потоком $I_{las} = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² на первой ($\lambda = 1.06$ мкм), на второй ($\lambda = 0.53$ мкм) и на третьей ($\lambda = 0.35$ мкм) гармониках

λ , мкм	x_{cr} , мкм	ρ_{cr} , г/см ³	T_e , кэВ	Z
0.35	50	0.045	1	60
0.53	54	0.017	1.8	62
1.06	91	0.0038	3.9	66

щения лазерного излучения с меньшей длиной волны расположены ближе к поверхности абляции. При этом в области поглощения плотность плазмы тем выше, а температура тем ниже, чем меньше длина волны лазерного излучения. В табл. 1 приведены значения координаты поверхности с критической плотностью, x_{cr} , критической плотности ρ_{cr} , а также температуры T_e и средней степени ионизации Z плазмы в области критической плотности в момент времени 0.5 нс при воздействии постоянного потока лазерного излучения $I_{las} = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² с длинами волн 1.06 мкм, 0.53 мкм и 0.35 мкм на плоский слой золота. Начальное положение границы мишени, на которую действует лазерное излучение, 30 мкм.

Перенос энергии электронной и лучистой теплопроводностью в более плотные по сравнению с критической плотностью области мишени приводит к формированию крутых градиентов плотности и температуры, особенно плотности в короне вблизи абляционной поверхности. Перенос энергии внутрь мишени волной лучистой теплопроводности (волна Маршака) описывается решением, приведенным в [14, 16, 17]. С использованием рассчитанного в [11] росселандова пробега коэффициент поглощения излучения в золоте в диапазоне плотностей 0.1–1 г/см³ и температур 0.01–0.5 кэВ может быть аппроксимирован формулой

$$k_R = \frac{1}{l_R} \approx \delta \frac{\rho^\alpha}{T_e^\beta} \text{ см}^2/\text{г},$$

где $\delta = 5.3$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 2$, ρ в г/см³, T_e в кэВ. В предположении, что из области поглощения лазерного излучения плазма прогревается постоянным

потоком излучения I_{rad} , зависимость координаты фронта тепловой волны определяется как

$$x_{rw} \propto \rho^{-(\alpha+\beta+4)/(\beta+5)} I_{rad}^{(\beta+3)/(\beta+5)} t^{(\beta+4)/(\beta+5)}.$$

В условиях рассматриваемой задачи

$$x_{rw} \propto \rho^{-0.9} I_{rad}^{0.71} t^{0.86}.$$

Из этого соотношения следует, что скорость прогрева холодного золота медленно уменьшается со временем и растет с увеличением греющего потока излучения. К моменту времени $t = 0.5$ нс рентгеновское излучение, образованное в области поглощения лазерного излучения второй гармоники с интенсивностью $I_{las} = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см², прогревает приблизительно 3 мкм первоначально твердого золота. Следует отметить, что при той же интенсивности лазерного излучения рентгеновское излучение, образованное при воздействии лазерного излучения третьей гармоники, проникает в холодное золото на 0.22 мкм глубже, чем при воздействии излучения второй гармоники, и на 0.36 мкм глубже, чем при воздействии излучения первой гармоники, поскольку интенсивность рентгеновского излучения, образованного под действием излучения третьей гармоники выше, чем при воздействии излучения первой и второй гармоник.

Максимум излучательной способности плазмы смещен в область с плотностью, превышающей критическую плотность, и соответственно с температурой, меньшей температуры в области поглощения лазерного излучения. Наименьшее смещение — около 3 мкм — имеет место для случая третьей гармоники. Для второй гармоники оно составляет 9 мкм, для первой — 44 мкм. В результате (с учетом расположения областей поглощения лазерного излучения) максимумы излучательной способности оказываются локализованными примерно на одинаковом расстоянии от абляционной поверхности. Их значения тем больше, чем меньше длина волны лазерного излучения за счет более высокой плотности в области излучения. При этом, однако, ширина области излучения уменьшается с уменьшением длины волны за счет более высоких градиентов плотности и температуры. Это приводит к тому, что доля лазерного излучения, конвертируемая в собственное излучение плазмы, растет незначительно с уменьшением длины волны воздействующего лазерного излучения.

На рис. 3 приведена зависимость от времени конверсии лазерного излучения в рентгеновское излучение на плоском слое золота при воздействии постоянного лазерного импульса $3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² с различ-

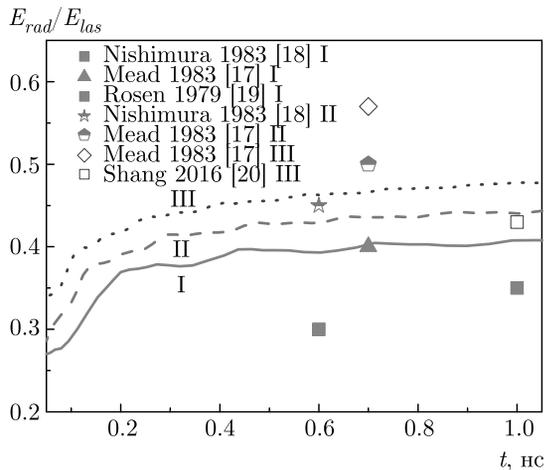


Рис. 3. Зависимость конверсии постоянного лазерного импульса $I_{las} = 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² в рентгеновское излучение от времени. Кривые подписаны номерами гармоник: I — $\lambda = 1.06$ мкм, II — $\lambda = 0.53$ мкм, III — $\lambda = 0.35$ мкм

ными длинами волн. С течением времени масса прогретой плазмы и, как следствие, конверсия в рентгеновское излучение увеличиваются. После ~ 0.5 нс рост конверсии замедляется. После этого момента времени относительно больше поглощенной энергии переходит во внутреннюю и кинетическую энергию плазмы, вклад в потери на излучение уменьшается.

Конверсия относительно слабо растет с уменьшением длины волны лазерного импульса: примерно от 0.38 при $\lambda = 1.05$ мкм до 0.45 при $\lambda = 0.35$ мкм. Эти данные находятся в хорошем согласии с опубликованными данными экспериментов, которые для интенсивности лазерного импульса 10^{14} – 10^{15} лежат в достаточно узком диапазоне 0.3–0.5. Так, в экспериментах [18–21] значение конверсии составило около 0.4 для излучения первой гармоники, около 0.44 для излучения второй гармоники и около 0.48 для излучения третьей гармоники. Результаты численного моделирования согласуются с экспериментальными данными по конверсии при учете ограничения потока электронной теплопроводности с коэффициентом $f_e = 0.03$.

Весьма высокая конверсия излучения первых трех гармоник Nd-лазера в рентгеновское излучение в «открытой» геометрии облучения плоской мишени на уровне 0.3–0.5 является причиной того, что в «закрытой» геометрии облучения лазерным импульсом внутренней стенки конвертера при переизлучении и перепоглощении рентгеновского излучения увеличивается масса нагретого золота, а степень конверсии достигает значений вплоть до 80 % [3, 22].

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ПЛАЗМЫ, НАГРЕВАЕМОЙ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫМ РЕНТГЕНОВСКИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Термодинамическое состояние плазмы, которая образуется при нагреве лазерно-индуцированным рентгеновским излучением плоской мишени, исследовалось на основе численных расчетов взаимодействия импульса рентгеновского излучения, генерируемого в конвертере из золота, с мишенями из пластика (плотность 1.07 г/см³) и высокоплотного углерода HDC (high density carbon, плотность 3.5 г/см³). На рис. 4а на момент времени 1 нс приведены пространственные распределения температуры, плотности и давления в плазме мишени из пластика при воздействии на нее импульса рентгеновского излучения с интенсивностью $I_{rad} = 2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см², который генерировался от импульса излучения второй гармоники Nd-лазера с интенсивностью $I_{las} = 3.3 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Соответствующая этой интенсивности рентгеновского импульса радиационная температура составляет $T_{rad} = (I_{rad} \sigma)^{1/4} = 246$ эВ, где σ — постоянная Стефана–Больцмана, I_{rad} — интегральный по спектру поток излучения. Планковский спектральный поток излучения имеет максимум при энергии квантов $h\nu \sim 2.72 T_{rad} \approx 700$ эВ. Генерируемое рентгеновское излучение золота в диапазоне энергий, больших 2 кэВ, имеет локальные пики, обусловленные линиями на переходах на M-оболочку (энергия излучения линии $M_{\alpha 1}$ составляет 2.1 кэВ) и рекомбинационными скачками в этом же диапазоне.

В начальный момент времени правая граница пластикового слоя, на которую воздействует внешнее рентгеновское излучение, находится при x [мкм] = 0. Абляционное давление, которое приводит к генерации ударной волны внутрь мишени, образуется в области короны, прогретой рентгеновским излучением до температуры около 150 эВ, расположенной на расстоянии -84 мкм от границы облучения. Плотность в этой области составляет около 0.8 г/см³. Величина абляционного давления в расчете составляет около 60 Мбар. Известный из работ [2, 3] скейлинг для абляционного давления при воздействии рентгеновского излучения на мишень из пластика P [Мбар] = $170 I_{rad(15)}^{7/8}$ при потоке $I_{rad} = 2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см² дает значение около 50 Мбар, что хорошо согласуется с результатом численных расчетов.

Излучение высокоэнергетической части спектра прогревает мишень перед фронтом ударной волны.

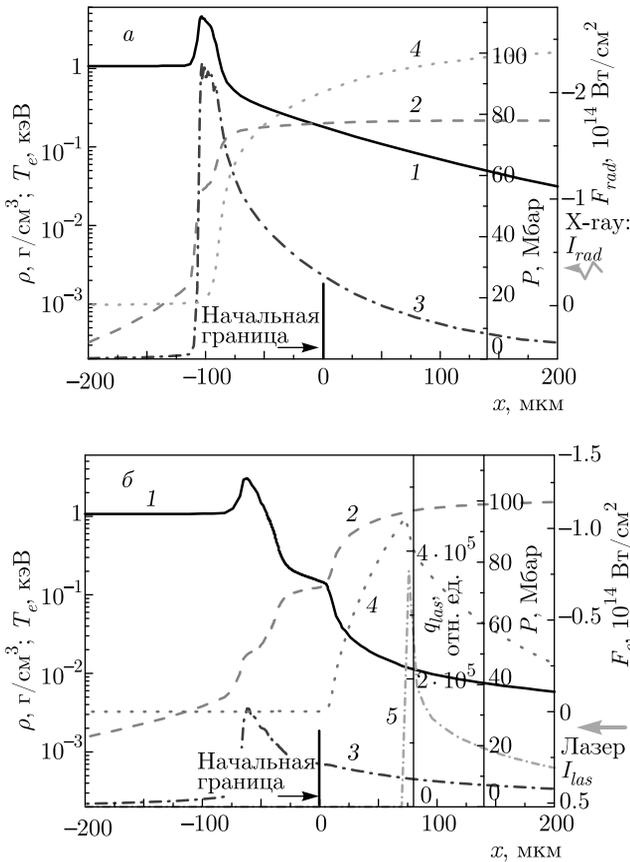


Рис. 4. а) Пространственные распределения плотности ρ (линия 1), температуры T_e (линия 2), давления P (линия 3), сформированные в пластиковом слое к 1 нс под действием падающего справа радиационного потока $I_{rad} = 2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см², радиационный поток F_{rad} — линия 4. F_{rad} на внешней границе x_{bound} равен греющему радиационному потоку I_{rad} ($F_{rad}(x = x_{bound}) = I_{rad}$). б) Пространственные распределения плотности ρ (линия 1), температуры T_e (линия 2), давления P (линия 3), потока электронной теплопроводности F_e (линия 4), сформированные в пластиковом слое под действием лазерного импульса $I_{las} = 2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см², $\lambda = 0.53$ мкм в $t = 1$ нс. Линия 5 — вклад лазерного излучения q_{las}

Так, излучение с энергиями квантов, превышающими 2.1 кэВ, проникает в мишень приблизительно на расстояние 10 мкм (от -90 мкм до -100 мкм), где формирует область, прогретую до температуры около 10 эВ. Более жесткое излучение с энергией, превосходящей 3.4 кэВ (выше энергии связи M -электронов), проникает еще глубже, прогревая плазму перед фронтом ударной волны до ~ 1 эВ (на рис. 4а координата $x = (-200) - (-100)$ мкм). Тем не менее ударная волна является сильной. Плотность за ее фронтом составляет около 4.6 г/см³, давление — около 100 Мбар. К моменту времени 1 нс ударная волна распространяется на расстояние ≈ 103 мкм.

На рис. 4б представлены пространственные распределения в момент времени $t = 1$ нс температуры, плотности и давления в плазме мишени из пластика (СН), образованной при воздействии импульса излучения второй гармоники Nd-лазера с той же интенсивностью $I_{las} = 2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см², что и в расчете с импульсом лазерно-индуцированного рентгеновского излучения. В этот момент времени лазерное излучение наиболее эффективно поглощается при $x \approx 100$ мкм в области критической плотности (≈ 0.012 г/см³), температура в короне достигает 1.7 кэВ. Из области поглощения лазерного излучения потоком электронной теплопроводности плазма прогревается до областей с координатой $x \approx -17$ мкм от первоначальной границы вещества. Величина абляционного давления составляет около 30 Мбар. Аналитические зависимости температуры и давления полностью ионизованной плазмы от интенсивности и длины волны излучения лазерного импульса, воздействующего на мишень легких элементов, даются известными скейлингами [2, 8]:

$$T \text{ [кэВ]} = \frac{1}{C_V} \left[\frac{2(\gamma - 1)}{3\gamma - 1} \right]^{2/3} (I_{las}/\rho_{cr})^{2/3} \approx \approx 12 I_{las(15)}^{2/3} \lambda_\mu^{4/3},$$

$$P \text{ [Мбар]} = \left[\frac{2(\gamma - 1)}{3\gamma - 1} \right]^{2/3} \rho_{cr} (I_{las}/\rho_{cr})^{2/3} \approx \approx 35 I_{las(15)}^{2/3} \lambda_\mu^{-2/3}.$$

Здесь $I_{las(15)}$ — интенсивность лазерного излучения в единицах 10^{15} Вт/см², $C_V = (Z + 1)k_B/A(\gamma - 1)m_p$ — удельная теплоемкость нагреваемого вещества, k_B — постоянная Больцмана, m_p — масса протона, γ — показатель адиабаты.

Скейлинг дает близкие к расчетным значениям характерной температуры в области нагрева плазмы лазерным излучением — около 1.2 кэВ, и абляционного давления — около 22 Мбар. Ударная волна с давлением за фронтом 32 Мбар к моменту времени 1 нс достигает области с координатой около -62 мкм.

Представленные данные позволяют провести количественное сопоставление характеристик термодинамического состояния плазмы, образованной воздействием лазерного импульса второй гармоники Nd-лазера и импульса лазерно-индуцированного излучения при одинаковых интенсивностях обоих импульсов. Рентгеновское излучение нагревает

Таблица 2. Зависимости от плотности потока греющего рентгеновского импульса скорости абляции вещества мишени dm/dt , давления P_{abl} и плотности ρ_{abl} на границе абляции, скорости распространения фронта абляции по мишени $V_{abl} = (dm/dt)/\rho$ и скорости ударной волны D_{sw}

	$I_{rad},$ 10^{14} Вт/см ²	$\lambda,$ мкм	$dm/dt,$ 10^6 г/см·с	$P_{abl},$ Мбар	$\rho_{abl},$ г/см ³	$V_{abl},$ 10^6 см/с	$D_{sw},$ 10^6 см/с
СН	0.63	1.06	1.33	20	0.3	0.31	5.63
СН	2.52	0.53	3.8	59	0.47	0.88	10.8
СН	5.74	0.35	6.7	103	0.7	1.56	16
НДС	0.63	1.06	1.33	23	0.55	0.1	3.07
НДС	2.52	0.53	4.1	72	1	0.29	5.84
НДС	5.74	0.35	7.8	142	1.3	0.56	8.47

корону СН-мишени до температуры 100–200 эВ, примерно на порядок более низкой, чем в случае нагрева лазерным излучением. Вместе с тем характерная плотность в области нагрева рентгеновским импульсом 0.5–0.8 г/см³ в 40–60 раз превосходит плотность плазмы в области нагрева лазерным излучением, которая в этом случае близка к критической плотности плазмы — 0.012 г/см³. В результате абляционное давление и давление за фронтом ударной волны в неиспаренной части мишени в случае рентгеновского нагрева примерно в 3 раза выше, чем в случае лазерного нагрева.

Из теоретических и экспериментальных исследований известно (см., например, [23]), что при воздействии лазерного потока I_{las} с длиной волны λ на вещество классический обратнотормозной механизм поглощения, при котором энергия лазерного импульса передается тепловым электронам плазмы, преобладает при значениях параметра взаимодействия $I_{las}\lambda^2 < 10^{14}$ Вт·мкм²/см². При $I_{las}\lambda^2 > 10^{14}$ Вт·мкм²/см² увеличивается роль бесстолкновительных механизмов поглощения, которые сопровождаются трансформацией лазерной энергии в энергию быстрых электронов. Для того чтобы избежать нежелательного эффекта генерации быстрых электронов при одной и той же величине $I_{las}\lambda^2$, например 10^{14} Вт·мкм²/см², при меньшей длине волны может быть использован лазерный импульс с большей интенсивностью $I_{las} \propto \lambda^{-2}$. Применительно к непрямому сжатию это означает, что при одной и той же величине $I_{las}\lambda^2$ увеличивается радиационная температура в конвертере и тем самым увеличивается поток излучения на внутреннюю капсулу. Если $I_{las}\lambda^2 = 10^{14}$ Вт·мкм²/см², при длине

волны лазерного излучения $\lambda = 1.06$ мкм допустимый поток лазерного излучения на конвертор $I_{las} = 0.89 \cdot 10^{14}$ Вт/см², а при длине волны $\lambda = 0.35$ мкм допустимый поток лазерного излучения увеличивается до $I_{las} = 8.16 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Таким образом, при заданном значении параметра взаимодействия с уменьшением длины волны лазерного излучения радиационный поток растет примерно как $I_{rad} \propto \lambda^{-2}$, а радиационная температура — как $T_{rad} \propto \lambda^{-1/2}$, что приводит к увеличению абляционного давления и скорости абляции.

Регулировка интенсивностей лазерных импульсов излучения различных гармоник в соответствии с условием $I_{las}\lambda^2 = 10^{14}$ Вт·мкм²/см² была использована для сравнительных расчетов взаимодействия импульса лазерно-индуцированного рентгеновского излучения с мишенями из пластика и высокоплотного углерода НДС. Некоторые результаты этих расчетов приведены в табл. 2. Высокоплотный углерод как материал аблятора для термоядерных мишеней обладает рядом преимуществ по сравнению с СН-пластиком. Основное из них состоит в том, что за счет значительно более высокой плотности (более чем в 3 раза) ударная волна, при прочих равных условиях, нагревает вещество до меньшей температуры, что позволяет достичь более высокой степени сжатия мишени. При этом НДС-материал, состоящий из углерода — элемента с относительно низким зарядовым числом, остается материалом с незначительными потерями энергии на собственное излучение плазмы. В приведенных расчетах конверсия лазерного излучения в рентгеновское составляет 70%–80% и слабо зависит от длины волны (разница составляет 5%) рентгенообразующего лазерного

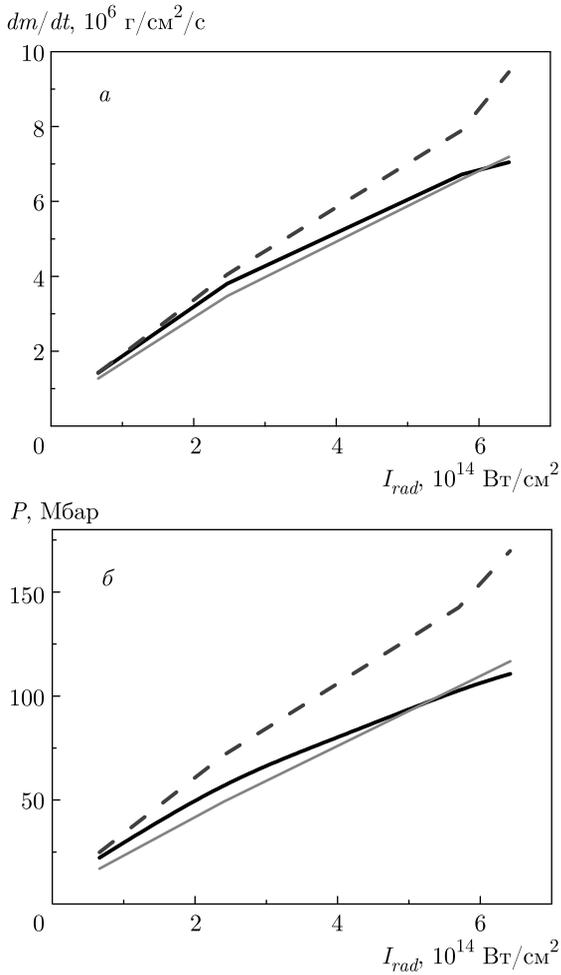


Рис. 5. Скорость абляции вещества мишени (а) и абляционное давление для аблятора (б) из пластика СН (сплошные черные линии) и высокоплотного углерода HDC (штриховые линии) в зависимости от потока греющего рентгеновского излучения. Аналитические выражения из [2] на графиках — сплошные красные линии

излучения. Во втором и третьем столбцах табл. 2 указаны интенсивности рентгеновского импульса и длины волн излучения рентгенообразующего лазерного импульса. В табл. 2 приведены усредненные по времени значения скорости абляции вещества мишени dm/dt , давления P_{abl} и плотности ρ_{abl} на границе абляции, скорости распространения фронта абляции по мишени $V_{abl} = (dm/dt)/\rho$ (где ρ — плотность за фронтом ударной волны) и скорости ударной волны D_{sw} .

На рис. 5 построены графики зависимости скорости абляции dm/dt и абляционного давления от падающего радиационного потока для пластика и высокоплотного углерода. Результаты расчетов для пластика хорошо совпадают с формулами

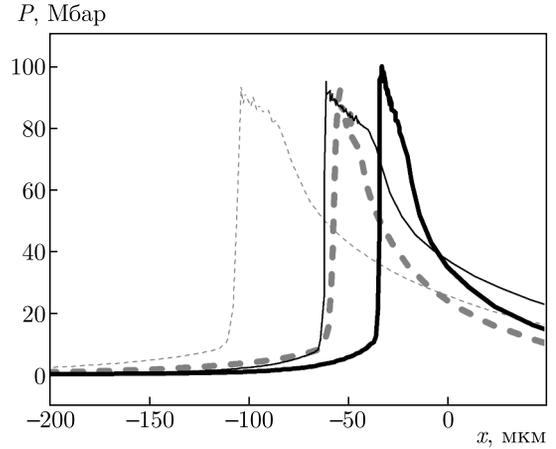


Рис. 6. Пространственное распределение давления в моменты времени 0.5 нс (жирные линии) и 1 нс (тонкие линии), характеризующие распространение ударной волны в мишенях СН (штриховые линии) и HDC (сплошные линии), при воздействии потока рентгеновского излучения $2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см², генерируемого в золотом конверторе при его облучении лазерным импульсом второй гармоники с интенсивностью $3.56 \cdot 10^{14}$ Вт/см²

$$P_{abl} [\text{Мбар}] = 170 I_{rad(15)}^{7/8},$$

$$dm/dt [\text{г/см}^2/\text{с}] = 10^7 I_{rad(15)}^{3/4}$$

работы [2]. Скорость абляции dm/dt и абляционное давление с увеличением греющего рентгеновского потока для HDC растет сильнее, чем для пластика. Результаты расчетов для HDC могут быть интерполированы как

$$P [\text{Мбар}] = 214 I_{rad(15)}^{0.84},$$

$$dm/dt [\text{г/см}^2/\text{с}] = 1.2 \cdot 10^7 I_{rad(15)}^{0.8}.$$

На рис. 6 приведены профили давления, формируемые в плазме пластика и HDC в различные моменты времени при воздействии импульса рентгеновского излучения $I_{rad} = 2.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Значения давления в сформированной ударной волне ~ 100 Мбар оказываются близкими в пластике и HDC, скорость распространения ударной волны в пластике выше в 1.9 раза. При одной и той же массе толщина аблятора из HDC меньше толщины пластикового аблятора примерно в 3 раза. Поэтому несмотря на то, что скорость прохождения ударной волны ниже, используемый лазерный импульс для сжатия капсул с аблятором из HDC может быть выбран как минимум в 1.5 раза короче, что выгодно с точки зрения развития гидродинамических неустойчивостей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненные расчетно-теоретические исследования показали, что при облучении плоской мишени из золота плазмообразующим лазерным импульсом степень конверсии энергии лазерного излучения в энергию рентгеновского излучения весьма слабо зависит от длины волны лазерного излучения. Ее значение для первых трех гармоник излучения Nd-лазера лежит в диапазоне 0.4–0.5. В закрытой геометрии облучения конвертора это приводит к увеличению конверсии вплоть до 80%. Из-за слабой зависимости конверсии от длины волны преимущество использования излучения третьей гармоники Nd-лазера может состоять в возможности использования более высокой интенсивности рентгенообразующего лазерного импульса для сохранения низкого уровня генерации быстрых электронов и ВРМБ-рассеяния. Однако в схеме непрямого облучения размер термоядерной капсулы значительно меньше размеров конвертора, что минимизирует негативное влияние быстрых электронов на сжатие капсулы. В свою очередь, ВРМБ-рассеяние может не приводить к значительным отрицательным последствиям, поскольку рассеянное лазерное излучение будет в значительной степени перепоглощаться в конверторе. В таком случае использование импульса излучения второй гармоники Nd-лазера с интенсивностью, близкой к интенсивности импульса излучения третьей гармоники, может быть в конечном счете более энергетически выгодным по сравнению со случаем третьей гармоники с учетом более высокой эффективности преобразования излучения основной гармоники Nd-лазера в излучение второй гармоники по сравнению с преобразованием в излучение третьей гармоники.

Благодарности. Авторы статьи признательны И. Я. Доскочу за полезные обсуждения и помощь в подготовке статьи.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00299А).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Nuckolls and L. Wood, *Nature* **239**, 139 (1972).
2. J. Lindl, *Phys. Plasmas* **2**, 3933 (1995).
3. J. D. Lindl, P. Amendt, R. L. Berger et al., *Phys. Plasmas* **11**, 339 (2004).
4. M. Andre, in *First SPIE International Conference on Solid State Laser for Application to ICF*, Monterey, CA (1999), p. 39.
5. С. А. Бельков, С. Г. Гаранин, В. Г. Рогачев и др., XLVIII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, Звенигород (2021).
6. Z. Fan, M. Chen, Z. Dai et al., arXiv:1303.1252 [physics.plasm-ph].
7. X. T. He, *Plenary Presentation at IFSA 8*, Nara, Japan (2013).
8. Yu. V. Afanasiev and S. Yu. Gus'kov, *Nuclear Fusion by Inertial Confinement*, ed. by G. Velarde et al., CRC Press (1993), p. 99.
9. S. W. Haan, A. L. Kritcher, D. S. Clark et al., Report LLNL-TR-741418 (2017).
10. G. A. Vergunova and V. B. Rozanov, *Laser Part. Beams* **17**, 579 (1999).
11. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы*, Физматлит, Москва (2000).
12. Д. А. Ким, И. Ю. Вичев, А. Д. Соломянная, А. С. Грушин, Препринт ИПМ **58**, Москва (2020).
13. W. M. Manheimer, D. G. Colombant, and J. H. Gardner, *Phys. Fluids* **25**, 1644 (1982).
14. Y. B. Zel'dovich and Y. P. Raizer, *Physics of Shock Waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Acad. Press, New York (1966).
15. Ю. В. Афанасьев, Е. Г. Гамалий, В. Б. Розанов, *Труды ФИАН* **134**, 10 (1982).
16. R. E. Marshak, *Phys. Fluids* **1**, 24 (1958).
17. G. A. Vergunova, A. S. Grushin, V. G. Novikov et al., *J. Russ. Laser Res.* **34**, 355 (2013).
18. W. C. Mead, E. M. Campbell, K. Estabrook et al., *Phys. Fluids* **26**, 2316 (1983).
19. H. Nishimura, F. Matsuoka, M. Yagi et al., *Phys. Fluids* **26**, 1688 (1983).
20. M. D. Rosen, D. W. Phillion, V. C. Rupert et al., *Phys. Fluids* **22**, 2020 (1979).
21. W. Shang, J. Yang, W. Zhang et al., *Appl. Phys. Lett.* **108**, 064102 (2016).
22. L. J. Suter, R. L. Kauffman, C. B. Darrow et al., *Phys. Plasmas* **3**, 2057 (1996).
23. S. Atzeni and J. Meyer-ter-Vehn, *The Physics of Inertial Fusion — Beam Plasma Interaction, Hydrodynamics, Dense Plasma Physics*, Clarendon Press — Oxford Univ. Press, Oxford (2004).

ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИКИ САМОВОЗДЕЙСТВИЯ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ С ИСХОДНО НОРМАЛЬНОЙ ДИСПЕРСИЕЙ ГРУППОВОЙ СКОРОСТИ В НЕЛИНЕЙНЫХ РЕШЕТКАХ

Л. А. Смирнов ^{a,b*}, В. А. Миронов ^a, А. Г. Литвак ^a

^a *Институт прикладной физики Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия*

^b *Институт информационных технологий, математики и механики,
Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 16 января 2022 г.,
после переработки 27 января 2022 г.
Принята к публикации 22 февраля 2022 г.

Исследованы особенности процессов самовоздействия волновых полей в рамках дискретного нелинейного уравнения Шредингера. Аналитически и численно показано, что динамика волновых пакетов с исходно нормальной дисперсией групповой скорости в системах, описываемых данным модельным уравнением, может существенным образом отличаться от эволюции аналогичных распределений в сплошной среде. Детально проанализировано поведение волновых полей с изначально гладкими (по сравнению с периодом рассматриваемых решеток) амплитудным профилем и фазовым фронтом и изучен механизм их разрушения в цепочках эквидистантно расположенных элементов. Предложена модификация бездисперсионного приближения, с использованием которой удастся теоретически описать эффекты, приводящие к развитию мелкомасштабных неустойчивостей на фоне плавной огибающей и к ее последующим существенным деформациям (вплоть до распада). Представлены оценки критических параметров, при превышении которых следует ожидать указанных (нехарактерных для континуальных сред) процессов.

DOI: 10.31857/S004445102206013X
EDN: DVESCO

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время нелинейные решеточные модели находят широкое применение при теоретическом исследовании физических явлений в различных по своей природе дискретных системах и при интерпретации экспериментально полученных данных [1–6]. При изучении распространения волновых полей в наборах, состоящих из большого числа связанных между собой эквидистантно расположенных элементов, активно используется дискретное нелинейное уравнение Шредингера (ДНУШ) [1–6]. Несмотря на то, что оно является непосредственным аналогом непрерывного нелинейного уравнения Шредингера (НУШ) [6–8], позволяю-

щего успешно описать процессы самовоздействия в сплошных средах и вместе со своими разнообразными обобщениями представляющего один из наиболее важных классов модельных уравнений в частных производных, в пространственно-структурированной ситуации эволюция полей оказывается намного сложнее и естественно ожидать эффектов, которые отсутствуют в континуальной задаче. В частности, на данное обстоятельство указывает различие в дисперсионных свойствах и особенности, связанные с периодичностью выражающих их законов в дискретном случае и спецификой отдельно взятой зоны Бриллюэна, в которой присутствуют одновременно области как с нормальной, так и с аномальной дисперсией групповой скорости.

Детальный анализ динамики волновых пакетов в решетках в основном опирается на результаты численного моделирования. Как показывают такого рода расчеты (например, см. работы [9–14]), для плав-

* E-mail: smirnov_lev@appl.sci-nnov.ru

ных (по сравнению с периодом рассматриваемой решетки) начальных распределений поля их дальнейшее поведение может рассматриваться в континуальном пределе лишь на ограниченных трассах или в течение конечных временных интервалов. Применимость непрерывной аппроксимации для дискретных уравнений оправдана только до тех пор, пока характерные пространственные масштабы локализации неоднородностей не становятся того же порядка, что и расстояния между соседними структурными элементами обсуждаемой системы. Это приводит к тому, что даже в одномерной цепочке возникает целый ряд эволюционных сценариев, которые не встречаются в сплошной среде [9–14]. Например, в работах [9–12] изучалось распространение исходно широких квазиоптических пучков, инжектируемых в решетку эквидистантно расположенных световодов, и было показано, что их самофокусировка при превышении критической мощности заканчивается локализацией большей части электромагнитного излучения в одном из волноводов. Кроме того, подобный процесс самоканализирования приводит к отклонению трассы распространения максимума интенсивности от прямой линии [9, 11, 12, 15].

Похожие эффекты обсуждались также и в приложении к динамике набора взаимодействующих между собой облаков бозе-эйнштейновского конденсата, каждое из которых сосредоточено вблизи одного из соответствующих минимумов внешнего периодического потенциала, созданного оптической ловушкой [16–21]. Подчеркнем, что выводы, сделанные в большинстве из указанных выше статей, справедливы, только когда волновые пакеты находятся в области аномальной дисперсии. Стоит отметить, что во всех перечисленных здесь случаях, несмотря на разную физическую природу объектов, исследование проводилось в рамках ДНУШ, для которого развито существенно меньше аналитических методов построения точных и приближенных решений по сравнению с НУШ. Оказалось, что для дискретных моделей весьма полезным и конструктивным может быть использование вариационного подхода, основанного на априорных представлениях о форме изучаемых нелинейных возбуждений конечной амплитуды и позволяющего качественно, а порой и количественно адекватно описать в безаберрационном приближении ключевые аспекты эволюции и самоканализирования локализованных образований в пространственно-структурированных средах [10–14, 16].

В данной работе рассматриваются особенности динамики и процесса самовоздействия волновых пакетов с нормальной дисперсией групповой скорости, когда не удается сделать столь определенного прогноза о возможных сценариях распространения поля, как в случае аномальной дисперсии. В первую очередь связано это с тем, что в обсуждаемых условиях среда фактически становится дефокусирующей, вследствие чего использование пробных функций в виде гауссиана с линейной и квадратичной коррекциями фазового фронта при вариационном подходе не представляется до конца оправданным. Кроме того, на первый взгляд, есть основания полагать, что можно ограничиться вообще только континуальным пределом, в рамках которого все протекающие процессы описываются с помощью НУШ, поскольку на начальных этапах исходно плавные распределения будут еще больше расплываться. Однако, как показывают численные расчеты, существуют критические значения параметров таких распределений, при превышении которых на фоне расширяющегося гладкого профиля поля развивается неустойчивость, приводящая к его разрушению. Подобные динамические режимы, на которые отчасти обращалось внимание в работах [16–18, 21], заведомо отсутствуют в аналогичных непрерывных моделях.

Основная цель представленной статьи заключается в объяснении механизмов возникновения данных сценариев поведения волнового поля в рамках ДНУШ. При этом для определенности постановка задачи формулируется применительно к распространению оптического излучения в дискретной системе, состоящей из большого числа связанных между собой световодов, хотя результаты проведенного анализа несложно перенести и на другие случаи, где речь идет об эволюции нелинейных возбуждений в цепочках эквидистантно расположенных элементов, для которых могут быть использованы соответствующие модельные уравнения.

Прежде чем переходить к изложению основного материала, сделаем еще ряд важных замечаний. Во-первых, нетривиальные режимы эволюции динамических систем нередко удается успешно классифицировать, изучая устойчивость стационарных состояний и автомодельных решений исследуемой задачи [1, 6–8, 22, 23]. В большинстве случаев это можно сделать посредством процедуры линеаризации исходных уравнений, описывающих то, как протекают интересующие нас процессы (например, распространение электромагнитного излучения в пространственно-структурированных средах, взаимодействие когерентных волн материи и формиро-

вание интерференционных картин в гидро- и газодинамике). Анализ поведения малых возмущений на заданном фоне достаточно часто позволяет оценить типичные времена перехода от одного нелинейного режима к другому, присущие масштабы возникающих неоднородностей, а также пороговые величины для основных характеристик волнового поля и бифуркационные значения управляющих параметров рассматриваемой системы, при которых начинают развиваться те или иные неустойчивости. В итоге такого рода подход в целом помогает прогнозировать возможные сценарии эволюции нелинейных возбуждений и объяснить ключевые моменты в динамике их развития, наблюдаемые на различных этапах непосредственно в эксперименте или при численном моделировании. Особенностью интересующей нас здесь ситуации является то, что ее можно интерпретировать как «жесткий» режим возникновения неустойчивости, когда распространение огибающей волнового поля довольно долго оказывается плавным (практически равновесным), перед тем как перейти к существенно нелинейному неравновесному варианту своего поведения.

Во-вторых, в рамках НУШ с дефокусирующей нелинейностью, для которого хорошо известно, что однородный фон конечной амплитуды устойчив, численно, аналитически, а также экспериментально подробно изучалась задача о разлете локализованных распределений поля, заданных как на пьедестале [24–33], так и на спадающих до нуля на бесконечности (т. е., можно сказать, расплывающихся в «вакуум») [24, 25, 34–45]. В частности, было наглядно показано, что для исходно широких сигналов дисперсионными эффектами можно пренебречь [24–33, 36–45] и, кроме того, для ряда ситуаций свести описание динамики поля к уравнению простой волны (уравнению Хопфа) [24, 25, 46–48], скорость распространения которой зависит от интенсивности в отдельно взятой точке. Следовательно, в ходе расширения изначально гладких огибающих волновых пакетов следует ожидать укручения профиля [24–33, 36–48]. Такого рода процесс способен быть причиной возникновения мелкомасштабных возмущений, на формирование и эволюцию которых уже оказывает принципиальное влияние конкуренция нелинейности и дисперсии [24–33, 36–48]. Однако детальные исследования, выполненные на основе НУШ, в том числе с помощью прямого его моделирования, достоверно демонстрируют, что при указанных условиях появляющиеся на плавном фоне неоднородности не приводят к его разрушению [24–33, 36–49]. Похожие процессы также не наблюда-

ются и при столкновении волн рефракции, взаимодействие которых изучалось в статьях [36–43, 49].

В данной работе представлены численные и аналитические аргументы в пользу того, что учет дискретности среды в надпороговых условиях приводит в ходе эволюции к формированию локально неустойчивых распределений волнового поля. Отметим, что подобные процессы, по всей видимости, могут также наблюдаться при распространении лазерного излучения в волокнах, в которых проявляются линейные дисперсионные эффекты высокого порядка [48, 50–53]. Ниже описана постановка задачи, которая для определенности выполнена в терминах распространения электромагнитного излучения в наборе эквидистантно расположенных световодов, и приведены основные приближения, позволяющие использовать ДНУШ в качестве базовой модели. Затем проведено обобщение метода нелинейной геометрической оптики на случай дискретной среды. Оно состоит в более корректном учете изменения фазы волнового поля по сравнению с тем, как это обычно делается при использовании квазиклассического подхода для построения приближенных решений НУШ [24–33, 36–53]. Полученная в результате совокупность бездисперсионных соотношений, как и в случае сплошной среды, имеет схожий вид с системами квазилинейных уравнений, часто встречающихся в газодинамике [22–33, 36–49]. Однако в рассматриваемой нами ситуации данная совокупность уравнений в частных производных не является строго гиперболической. С учетом указанного обстоятельства удастся показать, что при выполнении надпороговых условий в процессе плавного расплывания локализованных распределений поля в периферийной области тип системы квазилинейных уравнений меняется на эллиптический, что свидетельствует о потенциальной возможности развития неустойчивости гладкого профиля огибающей волнового пучка.

2. ОПИСАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛНОВОГО ПОЛЯ В ПРОСТРАНСТВЕННО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ СРЕДАХ

2.1. Базовая модель в виде цепочки дискретных уравнений. Формулировка основной проблемы

Рассмотрим распространение одномерных квазиоптических волновых пучков, инжектируемых в

пространственно-неоднородную среду, состоящую из набора эквидистантно расположенных одномодовых световодов. Анализ проведем на базе стандартной теоретической модели [1–5, 9–14], в рамках которой предполагается, что фундаментальные направляемые моды ориентированных параллельно оси z оптических волноводов слабо связаны между собой. Огибающие поля каждой из таких мод медленно эволюционируют вдоль z и характеризуются своими комплексными амплитудами. Изменение этих индивидуальных амплитуд в зависимости от координаты z описывается системой уравнений, учитывающих как собственную нелинейность структурных элементов рассматриваемой решетки, так и взаимодействие с ближайшими соседями, возникающее из-за перекрытия направляемых ими мод. При отсутствии потерь в среде из неограниченного числа тонких световодов с дефокусирующей керровской нелинейностью приходим к бесконечной упорядоченной последовательности соотношений, которая называется ДНУШ и имеет в нормированных переменных следующий вид [1–5, 9–14]:

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial z} - \psi_{n-1} - \psi_{n+1} + |\psi_n|^2 \psi_n = 0. \quad (1)$$

Здесь функция $\psi_n(z)$ определяет комплексную амплитуду моды n -го волновода. ДНУШ (1) является одной из наиболее простых и универсальных дискретных моделей и при этом (не только качественно, но и количественно) адекватно описывает физическую ситуацию, когда пучок непрерывного излучения падает на решетку с большим числом направляющих элементов, в каждом из которых можно пренебречь дисперсионными и дифракционными эффектами [1–5].

Формально дискретному уравнению (1) можно поставить в соответствие континуальное НУШ

$$i \frac{\partial \psi}{\partial z} + 2i \sin \kappa \frac{\partial \psi}{\partial x} - \cos \kappa \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + |\psi|^2 \psi = 0. \quad (2)$$

Для этого обычно вводят непрерывную координату x , ассоциированную с индексом n , и затем делают замену $\psi_n(z)$ на $\psi(x, z)$, считая функцию $\psi(x, z)$ плавной по x на масштабах, сравнимых с периодом рассматриваемой одномерной решетки, а также предварительно выделив в фазе компоненты $\psi_n(z)$ комплексного вектора составляющую вида $2 \cos \kappa z - \kappa n$, которая может достаточно резко изменяться по величине при переходе от одного элемента цепочки к соседнему, когда характерное значение волнового числа κ лежит вне малой окрестности центра зоны Бриллюэна. Отметим, что такое

сопоставление имеет смысл при рассмотрении динамики исходно широких волновых пакетов.

Проведем более детальный, чем это обычно делается, анализ процессов в ДНУШ и получим полезные для понимания результатов численных расчетов аналитические соотношения. Для этого, во-первых, выделим у комплексного поля $\psi_n(z)$ амплитуду и фазу, т. е. представим $\psi_n(z)$ в виде

$$\psi_n(z) = \phi_n(z) \exp(-i\theta_n(z)), \quad (3)$$

где $\phi_n(z)$ и $\theta_n(z)$ являются действительными функциями. Затем, подставив (3) в (1) и приравняв по отдельности к нулю действительную и мнимую части полученного соотношения, в итоге придем к следующей системе дискретных уравнений:

$$\frac{\partial \phi_n}{\partial z} + \phi_{n+1} \sin v_{n+1} - \phi_{n-1} \sin v_n = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \theta_n}{\partial z} - \frac{\phi_{n+1}}{\phi_n} \cos v_{n+1} - \frac{\phi_{n-1}}{\phi_n} \cos v_n + \phi_n^2 = 0. \quad (5)$$

Здесь для удобства дальнейшего рассмотрения введено обозначение для разности фаз $v_n(z) = \theta_n(z) - \theta_{n-1}(z)$ волновых функций $\psi_n(z)$ и $\psi_{n-1}(z)$ в соседних элементах рассматриваемой цепочки. Несложно заметить, что именно $v_n(z)$, а не $\theta_n(z)$ играет роль истинной динамической переменной, так как ДНУШ (1), а вслед за ним и соотношения (4), (5) инвариантны относительно преобразования $\theta_n(z) \rightarrow \theta_n(z) + \text{const}$, т. е. все равенства остаются неизменными при сдвиге фазы $\theta_n(z)$ на произвольную постоянную величину. Поэтому для теоретического рассмотрения динамических процессов в решетках локально связанных элементов совместно с (4) зачастую стоит использовать уравнение для $v_n(z)$, которое непосредственно следует из (5):

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_n}{\partial z} - \frac{\phi_{n+1}}{\phi_n} \cos v_{n+1} + \frac{\phi_n}{\phi_{n-1}} \cos v_n - \\ - \frac{\phi_{n-1}}{\phi_n} \cos v_n + \frac{\phi_{n-2}}{\phi_{n-1}} \cos v_{n-1} + \phi_n^2 - \phi_{n-1}^2 = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, при описании эволюции волнового поля в дискретной среде далее будем отталкиваться от упорядоченной последовательности пар соотношений (4), (6).

В данной работе нас прежде всего интересуют особенности процесса самовоздействия пучков, изначально плавных на масштабах, сравнимых с периодом решетки. При этом основное внимание уделено ситуации, когда согласно представлениям, которые основаны на хорошо известных результатах, полученных в рамках НУШ, исходно широкие волновые пакеты будут расплываться, а все возникающие

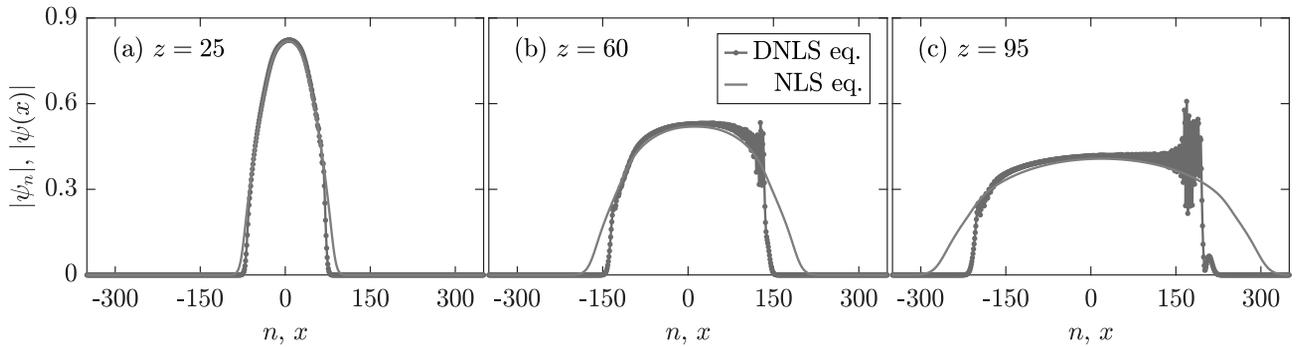


Рис. 1. (В цвете онлайн) Рассчитанные с помощью прямого численного моделирования в рамках ДНУШ (1) и НУШ (2) соответственно распределения амплитуды $|\psi_n(z)|$ волнового поля в узлах эквидистантной решетки световодов (точки, соединенные между собой линиями синего цвета) и профили аналогичной характеристики $|\psi(x, z)|$ в континуальной задаче (сплошные линии красного цвета) для пучков, заданных при $z = 0$ в форме $\psi_n(0) = \psi(x = n, 0) \exp(-i\gamma n)$ и $\psi(x, 0) = a \exp[-(x/\sigma)^{2m}]$ с параметрами $\gamma = 0.1$, $a = 1.125$, $\sigma = 15$ и $m = 3$. На начальном этапе своего распространения (а) такие пучки в дискретном и континуальном случаях ведут себя схожим образом (не только качественно, но и количественно с допустимой степенью точности). Однако в процессе дальнейшей эволюции различия постепенно становятся намного более существенными (б). На периферии локализованного амплитудного распределения начинается резкий рост мелкомасштабных возмущений, который в конечном итоге приводит к разрушению плавного профиля волнового поля (с)

(например, из-за возможных эффектов укручения фронта и его опрокидывания) неоднородности не должны сильно нарастать [24–48]. Однако, как показывают численные расчеты (рис. 1), проведенные на базе ДНУШ (1), динамика распределения поля в решетке нередко существенно отличается от того, что предсказывают вычисления, выполненные в непрерывном пределе. Несмотря на достаточно хорошее совпадение на начальном этапе (рис. 1а), начиная с некоторого момента, в целом ряде случаев различия становятся значительными (рис. 1б). Распространяющийся в цепочке пучок сильно искажается, чаще всего перестает быть симметричным относительно своего центра, мелкомасштабные возмущения на периферии демонстрируют резкий рост, что в конечном итоге приводит к разрушению плавного профиля, из которого выделяются локализованные образования довольно большой амплитуды (рис. 1с). Отмеченный процесс носит взрывной характер и не укладывается в рамки стандартного континуального рассмотрения задачи, что указывает на развитие неустойчивости, обусловленной дискретностью системы.

Мы предприняли попытку объяснить причины возникновения подобного процесса и выявить основной физической механизм, вызывающий такое деструктивное поведение. Согласно изложенному ниже анализу, для этого достаточно сделать чуть более корректный переход от математической модели,

используемой нами для изучения распространения излучения в системе эквидистантно расположенных нелинейных одномодовых световодов и записанной в терминах счетного набора комплексных амплитуд, характеризующих поле в каждом из структурных элементов обсуждаемой цепочки, к уравнениям в частных производных для гладких функций, непрерывно распределенных в поперечном к оси z направлении и совпадающих в узлах решетки со значениями истинных динамических переменных.

Прежде чем привести последовательное описание основных идей развитого теоретического подхода, заранее обратим внимание на довольно неожиданный и относительно нетривиальный факт. Оказывается достаточно ограничиться бездисперсионным приближением, когда учитываются только производные первого порядка (производные же второго порядка и выше отбрасываются), а специфика дискретности в первую очередь проявляется в модификации уравнения непрерывности и соотношения для градиента фазы, которая позволяет их применять в любой части зоны Бриллюэна и отслеживает эффективный тип нелинейности.

2.2. Бездисперсионный предел для дискретной модели

В качестве отправной точки для дальнейшего анализа нами была выбрана полученная выше система разностных уравнений (4), (6). Для того чтобы

перейти к ее аналогу в непрерывном пределе, предположим, что значения $\phi_n(z)$ и $v_n(z)$ слабо изменяются при уменьшении или увеличении индекса n на несколько единиц \tilde{n} , т. е. при смещении вдоль цепочки на конечное число ячеек. Такое предположение справедливо при плавном на масштабах неоднородности среды распределении величин $\phi_n(z)$ и $v_n(z)$. В этом случае можно перейти от дискретного набора пар $\phi_n(z)$ и $v_n(z)$ к двум непрерывным функциям $\phi(x, z)$ и $v(x, z)$, зависящим не только от переменной z , но и от координаты по оси x , направленной вдоль одномерной решетки эквидистантно расположенных элементов. Если выразить $\phi_{n \pm \tilde{n}}(z)$ и $v_{n \pm \tilde{n}}(z)$ соответственно через $\phi(x, z)$ и $v(x, z)$, ограничившись лишь двумя основными членами в формальном разложении в ряд Тейлора вблизи точки $x = n$,

$$\begin{aligned}\phi_{n \pm \tilde{n}}(z) &\approx \left(1 \pm \tilde{n} \frac{\partial}{\partial x}\right) \phi(x, z), \\ v_{n \pm \tilde{n}}(z) &\approx \left(1 \pm \tilde{n} \frac{\partial}{\partial x}\right) v(x, z),\end{aligned}$$

то несложно получить для $\phi(x, z)$ и $v(x, z)$ замкнутую систему квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} + 2 \sin v \frac{\partial \phi}{\partial x} + \phi \cos v \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial z} + 2 \sin v \frac{\partial v}{\partial x} + 2\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0. \quad (8)$$

При выводе данных соотношений считалось, что применение дифференциального оператора $\partial/\partial x$ к функциям $\phi(x, z)$ и $v(x, z)$ повышает порядок малости тех комбинаций, в которых они возникают, что позволяет не принимать во внимание целый ряд слагаемых, содержащих произведения первых производных от $\phi(x, z)$ и $v(x, z)$ по x или более высокие производные и не оказывающих существенного влияния при анализе указанных выше эффектов. Отметим также тот факт, что совокупность уравнений (7), (8) может быть представлена в неканонической гамильтоновой форме

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{H}(\rho, v)}{\partial v} \right) = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{H}(\rho, v)}{\partial \rho} \right) = 0$$

с гамильтонианом $\mathcal{H}(\rho, v) = \rho^2/2 - 2\rho \cos v$, где $\rho = \phi^2$. Фактически, систему (7), (8) можно интерпретировать как бездисперсионный предел дискретной модели (4), (6). Здесь прослеживается полная аналогия с приближением нелинейной геометрической оптики для сплошной среды (см., например, работу [54]), в которой эволюция огибающей волнового поля описывается континуальным НУШ, так

как именно в такие уравнения трансформируются равенства (7), (8) при условии, что в процессе распространения излучения отклонения $\tilde{v}(x, z)$ градиента фазы от исходно заданного значения v_0 оказываются малыми, т. е. $|\tilde{v}(x, z)| \ll \pi$ в ситуации, когда $v(x, z) = v_0 + \tilde{v}(x, z)$, где $v_0 = \text{const}$. Следовательно, в системе (7), (8) выполнен более корректный учет особенностей изменений фазового фронта и его локальных перестроек в дискретном случае.

3. ЭВОЛЮЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ВОЛНОВОГО ПОЛЯ И РАЗВИТИЕ НА ИХ ФОНЕ ХАРАКТЕРНОЙ ДЛЯ ДИСКРЕТНОЙ СИСТЕМЫ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

3.1. Ключевые отличия бездисперсионного предела для дискретной модели от континуального аналога

Для удобства дальнейшего рассмотрения введем обозначения

$$\rho(x, z) = \phi^2(x, z), \quad u(x, z) = 2 \sin v(x, z), \quad (9)$$

которые позволяют переписать соотношения (7), (8) в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial u \rho}{\partial x} = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} + u \frac{\partial u}{\partial x} + 2 \cos v \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad (11)$$

наиболее близком по своей структуре к уравнениям одномерной газодинамики [22, 23]. Если поставить величинам $\rho(x, z)$ и $u(x, z)$ в соответствие плотность и поле скоростей, то несложно заметить, что первое равенство системы (10), (11) фактически играет роль уравнения непрерывности, а второе является аналогом уравнения Эйлера. Основное различие заключается в специфическом для рассматриваемой нами задачи множителе $2 \cos v$, стоящем перед последним слагаемым в левой части равенства (11).

Согласно принятой классификации набора квазилинейных уравнений, совокупность соотношений (10), (11) может быть либо эллиптического, либо гиперболического типа [22, 23]. Для определения, к какому типу относится интересующая нас система (10), (11), поступим следующим образом. Используя выражения

$$\frac{\partial \chi}{\partial x} = -\rho(x, z), \quad \frac{\partial \chi}{\partial z} = u(x, z)\rho(x, z), \quad (12)$$

введем формально функцию $\chi(x, z)$, удовлетворяющую тождественно уравнению непрерывности (10). Затем, продифференцировав по z второе из определяющих $\chi(x, z)$ равенств (12), после несложных преобразований с учетом (10), (11) получим соотношение, связывающее между собой частные производные второго порядка от $\chi(x, z)$ по z и x , линейное по ним и записанное в канонической форме [23]

$$A \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} + 2B \frac{\partial^2 \chi}{\partial z \partial x} + C \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = 0, \quad (13)$$

где коэффициенты A , B и C в свою очередь зависят от $\rho(x, z)$ и $v(x, z)$ (т.е. могут быть представлены только через производные первого порядка от $\chi(x, z)$ по z и x):

$$A = 1, \quad B = 2 \sin v, \quad C = 2\rho \cos v + 4 \sin^2 v. \quad (14)$$

Исходя из общих представлений в случае, когда выполняется неравенство $B^2 - AC = 2\rho \cos v > 0$, уравнение (13) (а вместе с ним и система (10), (11), как и ее эквивалент (7), (8)) относится к гиперболическому типу, а в противоположной ситуации, когда $B^2 - AC = 2\rho \cos v < 0$, соответствующие соотношения принадлежат к эллиптическому классу. Отметим, что в первом из указанных двух вариантов уравнения

$$\frac{dx}{dz} = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - AC}}{A} = 2 \sin v \pm \sqrt{2\rho \cos v} \quad (15)$$

определяют в плоскости xz два семейства характеристик $x_{\pm}(z)$ (для заданных $\rho(x, z)$, $v(x, z)$, а вместе с ними для $\chi(x, z)$) [22, 23].

Если для системы квазилинейных уравнений (7), (8) известно решение $\bar{\rho}(x, z)$, $\bar{v}(x, z)$, которому отвечает своя функция $\bar{\chi}(x, z)$, удовлетворяющая (12) и (13), то можно рассмотреть задачу об устойчивости данного решения относительно малых возмущений $\tilde{\rho}(x, z)$, $\tilde{v}(x, z)$ в рамках соотношения (13). При этом предположим, что для возникающих в силу тех или иных физических причин поправок $\tilde{\chi}(x, z)$ к сформировавшемуся профилю $\bar{\chi}(x, z)$ выполняются несколько требований, которые можно интерпретировать при $B^2 - AC > 0$ как условия геометрической акустики [23]. Будем считать, что подобные отклонения, описываемые $\tilde{\chi}(x, z)$, а также $\tilde{\rho}(x, z)$ и $\tilde{v}(x, z)$, на начальном этапе слабо отражаются на характерной динамике волнового поля (т.е. функция $\tilde{\chi}(x, z)$ и ее первые производные малы), однако сами возмущения являются достаточно мелкомасштабными и претерпевают довольно сильные изменения на сравнительно небольших пространственных интервалах

(таким образом, вторые производные от $\tilde{\chi}(x, z)$ по x и z относительно велики). Подставим в (13) суперпозицию $\chi(x, z) = \bar{\chi}(x, z) + \tilde{\chi}(x, z)$ и линеаризуем полученное выражение относительно $\tilde{\chi}(x, z)$, принимая во внимание выбранный нами вид поправок $\tilde{\chi}(x, z)$ к исходному решению $\bar{\chi}(x, z)$ и связанным с ним решениям $\bar{\rho}(x, z)$ и $\bar{v}(x, z)$. В итоге придем к следующему уравнению для $\tilde{\chi}(x, z)$:

$$A(\bar{\rho}, \bar{v}) \frac{\partial^2 \tilde{\chi}}{\partial z^2} + 2B(\bar{\rho}, \bar{v}) \frac{\partial^2 \tilde{\chi}}{\partial z \partial x} + C(\bar{\rho}, \bar{v}) \frac{\partial^2 \tilde{\chi}}{\partial x^2} = 0, \quad (16)$$

в котором коэффициенты $A(\bar{\rho}, \bar{v})$, $B(\bar{\rho}, \bar{v})$ и $C(\bar{\rho}, \bar{v})$ рассчитываются с применением невозмущенных распределений поля $\bar{\rho}(x, z)$ и $\bar{v}(x, z)$. В частности, из (16) непосредственно вытекает, что в тех областях, где выполняется неравенство

$$B^2(\bar{\rho}, \bar{v}) - A(\bar{\rho}, \bar{v})C(\bar{\rho}, \bar{v}) = 2\bar{\rho} \cos \bar{v} > 0,$$

малоамплитудные возбуждения, обуславливающие наличие поправок $\tilde{\chi}(x, z)$, $\tilde{\rho}(x, z)$ и $\tilde{v}(x, z)$, по мере проникновения излучения в пространственно-структурированную среду нарастать не будут, а их распространение на заданном фоне $\bar{\chi}(x, z)$, $\bar{\rho}(x, z)$ и $\bar{v}(x, z)$ происходят вдоль соответствующих характеристик (15). В этом несложно убедиться, воспользовавшись стандартным методом перехода от волновой к геометрической акустике [23, 54], т.е. представив $\tilde{\chi}(x, z)$ в виде

$$\tilde{\chi}(x, z) = \text{Re} \left[\alpha(x, z) e^{-i\beta(x, z)} \right]$$

и построив на базе (16) уравнение для эйконала $\beta(x, z)$. С другой стороны, из (16) также наглядно видно, что в той части пространства, где

$$B^2(\bar{\rho}, \bar{v}) - A(\bar{\rho}, \bar{v})C(\bar{\rho}, \bar{v}) = 2\bar{\rho} \cos \bar{v} < 0,$$

должен наблюдаться экспоненциальный рост рассматриваемого класса возмущений.

В итоге эквивалентные друг другу системы квазилинейных уравнений (10), (11) и (7), (8), описывающие эволюцию исходно широких волновых пучков в дискретных цепочках в бездисперсионном приближении, являются гиперболическими, если $\cos v(x, z) > 0$, и эллиптическими там, где $\cos v(x, z) < 0$. Из приведенных выше аргументов можно сделать вывод, что в пространственно-структурированных средах характерное поведение поля в различных локализованных областях может существенно образом различаться и определяется прежде всего знаком величины $\cos v(x, z)$ в отдельно выделенной и рассматриваемой окрестности, охватывающей конечное число структурных элементов

решетки. В данном обстоятельстве состоит принципиальное отличие дискретной задачи от континуальной, в которой класс системы квазилинейных уравнений, полученной из НУШ (2) аналогичным путем, состоящим по сути в пренебрежении дисперсионными эффектами высшего порядка, однозначно определяется типом нелинейности. Так, для дефокусирующих сред в динамике плавных непрерывных распределений амплитуды и фазы во всем пространстве проявляются только черты, присущие гиперболическим моделям (распространение вдоль характеристик, возникновение участков с резкими градиентами вследствие процессов опрокидывания), тогда как для фокусирующей нелинейности в силу эллиптичности структуры базовых уравнений одну из основных ролей играет развитие модуляционной неустойчивости.

В дискретных системах, как показывают наши рассуждения, возможно возникновение ситуации, когда одновременно на разных участках наблюдаются разноплановые варианты поведения. В одних областях эволюция поля будет протекать по сценариям, характерным исключительно для дефокусирующего (гиперболического) случая, а в других областях пойдет усиление мелкомасштабных возмущений на фоне гладкого профиля с последующим резким ростом интенсивности поля и его локализацией в ограниченных пространственных областях, как при самофокусировке (свойственной эллиптической ситуации).

3.2. Распространение пучка со ступенчатым профилем интенсивности. Автомодельные решения в рамках бездисперсионного приближения для дискретной модели

В этом разделе рассмотрим модельную задачу о распаде полуограниченного пучка [22–25, 36–43, 55, 56] с исходно линейным фазовым фронтом, для которого $v(x, 0) = \gamma$ ($|\gamma| < \pi/2$), а профиль интенсивности $\rho(x, z) = \phi^2(x, z)$ в сечении $z = 0$ задан в виде кусочно-постоянной (ступенчатой) функции действительного аргумента x :

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} \rho_0, & x \leq 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (17)$$

Такая постановка начальных условий для рассматриваемой проблемы дает возможность аналитически описать особенности протекающих процессов и получить наглядное представление о том, что может происходить с плавной огибающей излучения,

значительная часть которого сосредоточена в ограниченной области, при его проникновении в пространственно-структурированную среду и как следует интерпретировать наблюдаемые эффекты. Ниже продемонстрировано, что для указанной ситуации удается построить автомодельное решение, а затем использовать его совместно с развитым нами подходом, что позволяет найти критическое значение параметра ρ_0 , при котором качественная картина распространения волнового поля меняется кардинально.

По аналогии с одномерной газодинамикой [23], где подобные автомодельные движения, возникающие, в частности, в цилиндрической трубе при равномерном перемещении поршня, играют важную роль, в случае рассматриваемой дискретной системы анализ эволюции распределения поля изначально ступенчатой формы является одной из отправных точек для общего понимания специфики и выделения ключевых отличительных черт поведения локализованных образований.

Будем искать решение совокупности уравнений (10), (11) в виде

$$\rho(x, z) = \rho(\xi), \quad v(x, z) = v(\xi), \quad u(x, z) = \sin v(\xi),$$

где все перечисленные величины зависят только от безразмерной автомодельной переменной $\xi = x/z$ [23, 43, 55, 56]. Другими словами, предположим, что форма каждой отдельно взятой интересующей нас функции при различных конечных значениях $z > 0$ подобна самой себе и отличается лишь своим масштабом вдоль оси x , увеличивающимся пропорционально z . В результате придем к следующей совокупности обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$(u - \xi) \frac{d\rho}{d\xi} + \rho \frac{du}{d\xi} = 0, \quad (18)$$

$$2 \cos v \frac{d\rho}{d\xi} + (u - \xi) \frac{du}{d\xi} = 0. \quad (19)$$

Для того чтобы найти нетривиальные решения данной системы, во-первых, исключим (например) из (18) производные, выразив и подставив их из (19). Эта процедура эквивалентна приравнению к нулю определителя системы (18), (19). В итоге находим, что в бездисперсионном приближении для решений, имеющих автомодельную форму, должно выполняться соотношение

$$\xi = x/z = u \pm \sqrt{2\rho \cos v}, \quad (20)$$

которое, в частности, лишней раз подчеркивает, что волны такого типа существуют только в области гиперболическости квазилинейных уравнений (18), (19),

т.е. при $\cos v(x, z) > 0$. Прежде чем переходить к дальнейшему изложению результатов данного раздела, обратим внимание, что в ситуации, когда $v(x, 0) = \gamma$, где $-\pi/2 < \gamma \leq 0$, а распределение $\rho(x, 0)$ в плоскости $z = 0$ достаточно хорошо аппроксимируется выражением (17), при $z > 0$ естественно ограничить возможные значения $v(x, z)$ интервалом $\gamma \leq v(x, z) < \pi/2$, а в (20) выбрать знак «-». Оправданность таких предположений обосновывается в первую очередь физическими соображениями и интуитивными представлениями, согласно которым граница резкого перехода между областью, занятой полем конечной амплитуды $\sqrt{\rho_0}$, и «вакуумом» (той частью пространства, где внутри структурных элементов решетки излучение практически отсутствует) должна постепенно размываться прежде всего за счет возникновения знакоопределенных градиентов фазы, что в гидродинамической терминологии отвечает процессу разлета «газа», а распространение малых возмущений по однородному фону с $\rho(x, z) = \rho_0$ и $v(x, z) = \gamma$ от места исходного разрыва происходит со скоростью $\sqrt{\rho_0}$, являющейся аналогом «скорости звука» [55, 56].

Подставив $\xi = u - \sqrt{2\rho} \cos v$ в (18) и проинтегрировав полученное дифференциальное уравнение с учетом граничных условий $\rho(-\infty, z) = \rho_0$ и $v(-\infty, z) = \gamma$, найдем следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \sqrt{\rho_0} - \sqrt{\rho} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{\gamma}^v \sqrt{\cos w} dw = \\ &= \sqrt{2} \left(E(v/2, 2) - E(\gamma/2, 2) \right), \end{aligned} \quad (21)$$

которое совместно с задействованным при его выводе выражением для ξ дает полное аналитическое решение интересующей нас задачи об эволюции полуограниченного пучка с кусочно-постоянным профилем интенсивности в рамках бездисперсионного приближения для ДНУШ. Отметим, что в (21) используется стандартное обозначение $E(v/2, 2)$ для неполного эллиптического интеграла второго рода.

Согласно проведенному нами в предыдущем разделе анализу, до тех пор пока в каждой точке пространства выполняется неравенство $\cos v(x, z) > 0$, совокупность квазилинейных уравнений (7), (8) (как и эквивалентная ей форма записи (10), (11)) является всюду гиперболической. Следовательно, неоднородное распределение волнового поля при распространении не подвержено неустойчивости. Однако если возникают области, где $\cos v(x, z) < 0$, то малые возмущения на этих участках будут экспоненциально нарастать, что в конечном итоге должно

привести к разрушению пучка. Принимая во внимание данные обстоятельства и соотношение (21), справедливое для автомодельного решения, несложно показать, что гиперболичность системы (7), (8) сохраняется в процессе эволюции волнового пучка лишь при начальных интенсивностях ρ_0 , не превышающих критическое значение

$$\rho_{0cr} = 2 \left(E(\pi/2, 2) - E(\gamma/2, 2) \right)^2. \quad (22)$$

В итоге естественно ожидать, что в ситуациях, когда $\rho_0 > \rho_{0cr}$, дискретность среды принципиальным образом сказывается на динамике световых пучков в одномерной решетке волноводов и приводит к разрушению плавных распределений поля. Этот вывод подтверждается сравнением данных прямого численного моделирования эволюции поля в рамках ДНУШ (1) и НУШ (2), исходный профиль которого был задан в форме соответственно

$$\begin{aligned} \psi_n(0) &= \psi(x = n, 0) e^{-i\gamma n} \quad \text{и} \\ \psi(x, 0) &= \sqrt{\rho_0} \left[1 - \text{th}(x/\sigma) \right], \end{aligned} \quad (23)$$

которая является часто используемой непрерывной аппроксимацией кусочно-постоянной функции.

На рис. 2 представлен случай, когда величина интенсивности ρ_0 ниже критического значения (22). Видно, что результаты расчетов для дискретной и континуальной задач практически совпадают не только качественно, но и количественно. Однако в ситуации, показанной на рис. 3 и отвечающей выбору $\rho_0 > \rho_{0cr}$, заметны существенные различия, объяснить которые можно развитием неустойчивости. В процессе эволюции в периферийной части волнового пучка возникает область, в которой поведение поля определяется эллиптической системой квазилинейных уравнений и малые возмущения нарастают экспоненциально, распространяясь к зону гиперболичности (см. рис. 3b, c).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что сделанный выше вывод не зависит от сосредоточенной в пучке мощности. Следовательно, для любых широких распределений произвольной амплитуды с исходно плоским ($v_n(0) = 0$) или слегка наклонным ($v_n(0) = \gamma$, где $|\gamma| < \pi/2$) фазовым фронтом начальная стадия эволюции достаточно хорошо описывается системой гиперболических квазилинейных уравнений и практически не отличается от того, что происходит с такими же волновыми полями в непрерывной задаче

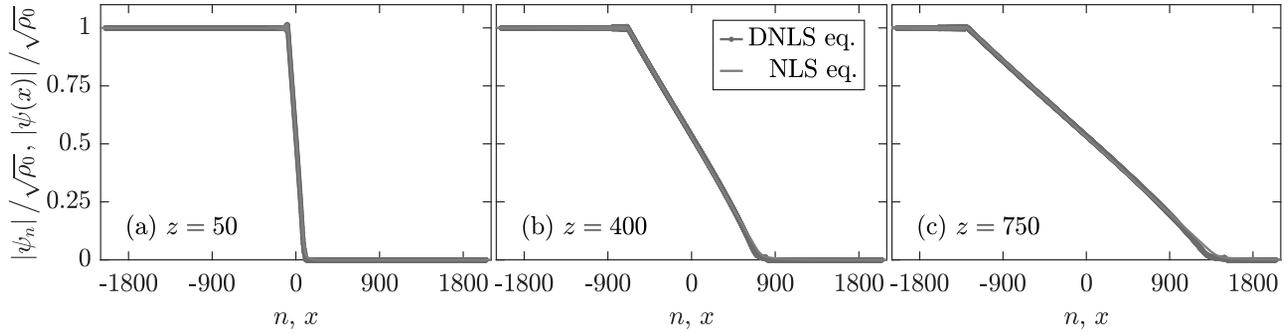


Рис. 2. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 1, для пучков, заданных при $z = 0$ в форме (23). Представленные результаты отвечают параметрам $\gamma = -0.25$, $\sigma = 1.33$ и $\sqrt{\rho_0} = 0.85\sqrt{\rho_{0cr}}$, где $\rho_{0cr} \approx 0.493$ — рассчитанное по формуле (22) критическое значение интенсивности для данной ситуации. Результаты расчетов практически совпадают для всех представленных сечений $z = 50$ (a), $z = 400$ (b) и $z = 750$ (c). Отличия между ними можно считать несущественными, так как на сплошные кривые красного цвета фактически накладываются точки, соединенные между собой линиями синего цвета

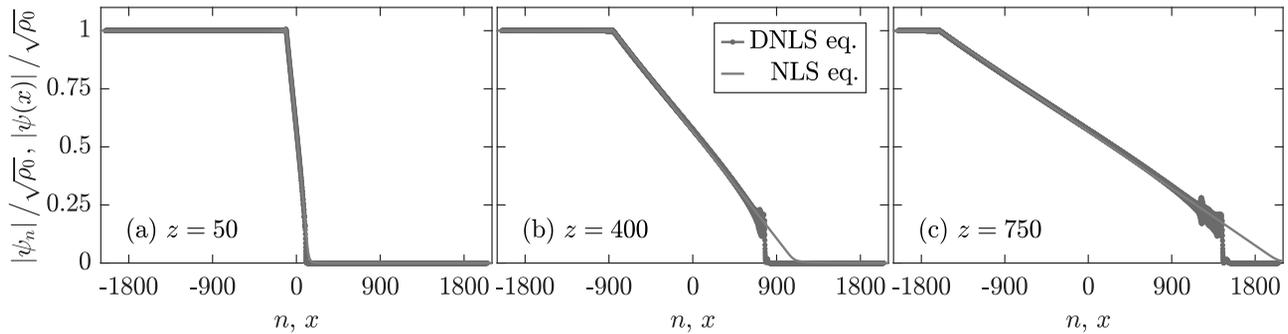


Рис. 3. (В цвете онлайн) То же, что и на рис. 2, только для $\sqrt{\rho_0} = 1.15\sqrt{\rho_{0cr}}$. В этой ситуации пороговое значение $\rho_{0cr} \approx 0.493$ превышено, что, согласно развитым нами теоретическим представлениям, должно приводить к разрушению профиля пучка в дискретном случае. Видно, что данный процесс начинается с нарастания возмущений на периферии плавного профиля поля, которое вызвано развитием неустойчивости на его фоне. В расчетах, выполненных в рамках НУШ (2), подобного эффекта не наблюдается

че при описании их динамики в рамках дефокусирующего НУШ. Другими словами, нелинейные эффекты в первую очередь приводят к расплыванию огибающей пучка, на фоне которого происходит локальное укручение поперечного профиля и образование резкого перепада аналогично тому, как протекают подобные процессы в газодинамике. Однако последующие этапы распространения в континуальной и дискретной моделях могут как совпадать, так и существенным образом различаться в зависимости от того, выполняется ли для разности фаз $v_n(z) = \theta_n(z) - \theta_{n-1}(z)$ комплексной волновой функции $\psi_n(z) = \phi_n(z) \exp[-i\theta_n(z)]$ в соседних элементах решетки условие $\cos v_n(z) > 0$ по-прежнему во всем пространстве или же возникают области, где $\cos v_n(z) < 0$. Как показывает проведенный нами анализ, данное условие позволяет находить крити-

ческие параметры начальных распределений поля, для которых следует ожидать развития неустойчивости, приводящей впоследствии к их разрушению.

Численное моделирование эволюции системы в рамках ДНУШ подтверждает сделанные выводы относительно динамики поля в дефокусирующем режиме. В работе приведены примеры различных вариантов эволюции неоднородных профилей интенсивности электромагнитных пучков, инжектируемых в одномерную решетку эквидистантно расположенных световодов. При этом наглядно продемонстрировано, что существуют сценарии, которые отсутствуют в аналогичных ситуациях в сплошной (неструктурированной) среде и характеризуются ростом малых возмущений и возникновением изрезанностей на периферии плавных распределений поля. В конечном счете этот

процесс распространяется на центральную часть волнового пучка. При дальнейшем увеличении амплитуды поля интенсивность мелкомасштабной неустойчивости увеличивается. Это означает, что волновые поля с амплитудой, превышающей критическое значение, теряют когерентность в процессе распространения в дефокусирующей среде. Естественно ожидать нарушения плавной структуры поля и при распространении его в активной среде. Такого рода нарушение когерентности наступает катастрофическим образом.

Финансирование. Работа выполнена в Научном центре мирового уровня «Центр фотоники» при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2020-906).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. G. Kevrekidis, *The Discrete Nonlinear Schrödinger Equation: Mathematical Analysis, Numerical Computations and Physical Perspectives*, Springer Science & Business Media (2009).
2. C. Denz, S. Flach, Yu S. Kivshar et al., *Nonlinearities in Periodic Structures and Metamaterials*, Springer (2010).
3. F. Lederer, G. I. Stegeman, D. N. Christodoulides et al., *Phys. Rep.* **463**, 1 (2008).
4. Yu. V. Kartashov, B. A. Malomed, and L. Torner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 247 (2011).
5. I. L. Garanovich, S. Longhi, A. A. Sukhorukov, and Yu. S. Kivshar, *Phys. Rep.* **518**, 1 (2012).
6. Э. Скотт, *Нелинейная наука: рождение и развитие когерентных структур*, Физматлит, Москва (2007).
7. Э. Инфельд, Дж. Роуланс, *Нелинейные волны, солитоны и хаос*, Физматлит, Москва (2005).
8. J. Yang, *Nonlinear Waves in Integrable and Nonintegrable Systems*, SIAM (2010).
9. A. B. Aceves, C. De Angelis, T. Peschel et al., *Phys. Rev. E* **53**, 1172 (1996).
10. A. A. Balakin, A. G. Litvak, V. A. Mironov, and S. A. Skobelev, *Phys. Rev. A* **94**, 063806 (2016).
11. А. Г. Литвак, В. А. Миронов, С. А. Скобелев, Л. А. Смирнов, *ЖЭТФ* **153**, 28 (2018).
12. A. A. Balakin, A. G. Litvak, V. A. Mironov, and S. A. Skobelev, *Quant. Electr.* **48**, 720 (2018).
13. A. A. Balakin, A. G. Litvak, V. A. Mironov, and S. A. Skobelev, *Laser Phys.* **28**, 045401 (2018).
14. A. A. Balakin, A. G. Litvak, V. Mironov et al., *Laser Phys.* **28**, 105401 (2018).
15. O. Bang and P. D. Miller, *Opt. Lett.* **21**, 1105 (1996).
16. A. Trombettoni and A. Smerzi, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2353 (2001).
17. A. Smerzi, A. Trombettoni, P. G. Kevrekidis, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 170402 (2002).
18. T. Anker, M. Albiez, R. Gati et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 020403 (2005).
19. R. Franzosi, R. Livi, G.-L. Oppo, and A. Politi, *Nonlinearity* **24**, R89 (2011).
20. H. Hennig and R. Fleischmann, *Phys. Rev. A* **87**, 033605 (2013).
21. H. Hennig, T. Neff, and R. Fleischmann, *Phys. Rev. E* **93**, 032219 (2016).
22. Дж. Уизем, *Линейные и нелинейные волны*, Мир, Москва (1977).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Физматлит, Москва (2001).
24. S. Trillo and M. Conforti, in *Handbook of Optical Fibers*, ed. by G.-D. Peng, Springer Singapore (2019), pp. 373–419.
25. А. М. Камчатнов, *УФН* **191**, 52 (2021).
26. А. М. Камчатнов, *ЖЭТФ* **154**, 1016 (2018).
27. А. М. Камчатнов, *Phys. Rev. E* **99**, 012203 (2019).
28. M. Isoard, A. M. Kamchatnov, and N. Pavloff, *Phys. Rev. A* **99**, 053819 (2019).
29. M. Isoard, A. M. Kamchatnov, and N. Pavloff, *Europhys. Lett.* **129**, 64003 (2020).
30. S. Ivanov and A. Kamchatnov, *Phys. Fluids* **31**, 057102 (2019).
31. S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, *Phys. Fluids* **32**, 126115 (2020).
32. S. K. Ivanov, J.-E. Suchorski, A. M. Kamchatnov et al., *Phys. Rev. E* **102**, 032215 (2020).
33. G. Xu, A. Mussot, A. Kudlinski et al., *Opt. Lett.* **41**, 2656 (2016).

34. V. A. Brazhnyi, A. M. Kamchatnov, and V. V. Konotop, *Phys. Rev. A* **68**, 035603 (2003).
35. А. М. Камчатнов, *ЖЭТФ* **125**, 1041 (2004).
36. Y. Kodama and S. Wabnitz, *Opt. Lett.* **20**, 2291 (1995).
37. Y. Kodama, S. Wabnitz, and K. Tanaka, *Opt. Lett.* **21**, 719 (1996).
38. Y. Kodama, *SIAM J. Appl. Math.* **59**, 2162 (1999).
39. G. Biondini and Y. Kodama, *J. Nonlinear Sci.* **16**, 435 (2006).
40. O. C. Wright, M. G. Forest, and K.-R. McLaughlin, *Phys. Lett. A* **257**, 170 (1999).
41. M. Forest, C. J. Rosenberg, and O. C. Wright, *Nonlinearity* **22**, 2287 (2009).
42. S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, *Phys. Rev. A* **99**, 013609 (2019).
43. S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, *Europhys. Lett.* **132**, 65001 (2020).
44. G. Marcucci, D. Pierangeli, S. Gentilini et al., *Adv. Phys. X* **4**, 1662733 (2019).
45. T. Bienaimé, M. Isoard, Q. Fontaine et al., *Phys. Rev. Lett.* **126**, 183901 (2021).
46. B. Wetzels, D. Bongiovanni, M. Kues et al., *Phys. Rev. Lett.* **117**, 073902 (2016).
47. D. Bongiovanni, B. Wetzels, P. Yang et al., *Opt. Lett.* **44**, 3542 (2019).
48. D. Bongiovanni, B. Wetzels, Z. Li et al., *Opt. Express* **28**, 39827 (2020).
49. M. A. Hofer, P. Engels, and J. J. Chang, *Physica D* **238**, 1311 (2009).
50. B. G. Bale and S. Boscolo, *J. Opt.* **12**, 015202 (2009).
51. S. Wabnitz, *J. Opt.* **15**, 064002 (2013).
52. M. Conforti, F. Baronio, and S. Trillo, *Phys. Rev. A* **89**, 013807 (2014).
53. S. Bose, R. Chattopadhyay, and S. K. Bhadra, *Opt. Comm.* **412**, 226 (2018).
54. A. B. Shvartsburg, *Phys. Rep.* **83**, 107 (1982).
55. A. M. Kamchatnov, *J. Phys. Comm.* **2**, 025027 (2018).
56. S. K. Ivanov, *Phys. Rev. A* **101**, 053827 (2020).

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 161 ЗА 2022 г.

		Вып. Стр.			Вып. Стр.
EDN: DVIQHR					
А					
Аборкин А. В. (см. Решетняк В. В.) ...	1	86	Агафонова Н. Ю., Ряжская О. Г. , от имени Коллаборации LVD. Изучение характеристик космогенных нейтронов и скорости счета импульсов на сцинтилляционных детекторах АСД, LSD и LVD .	4	533
Аврорин А. В., Аврорин А. Д., Айнутдинов В. М., Аллахвердян В. А., Банаш П., Бардачова З., Белолепчиков И. А., Борина И. В., Бруданин В. Б. , Буднев Н. М., Гафаров А. Р., Голубков К. В., Горшков Н. С., Гресь Т. И., Дворниcki Р., Джилкибаев Ж.-А. М., Дик В. Я., Домогацкий Г. В., Дорошенко А. А., Дячок А. Н., Елзов Т. В., Заборов Д. Н., Катулин М. С., Кебкал К. Г., Кебкал О. Г., Кожин В. А., Колбин М. М., Конищев К. В., Копански К. А., Коробченко А. В., Кощечкин А. П., Круглов М. В., Крюков М. К., Кулепов В. Ф., Малецки П., Малышкин Ю. М., Миленин М. Б., Миргазов Р. Р., Назари В., Наумов Д. В., Нога В., Петухов Д. П., Плисковский Е. Н., Розанов М. И., Рушай В. Д., Рябов Е. В., Сафронов Г. Б., Сиренко А. Э., Скурихин А. В., Соловьев А. Г., Сорокинов М. Н., Стромаков А. П., Суворова О. В., Сушенок Е. О., Таболенко В. А., Таращанский Б. А. , Файт Л., Фиалковский С. В. , Храмов Е. В., Шайбонов Б. А., Шелепов М. Д., Шимковиц Ф., Штекл И., Эцкерова Э., Яблокова Ю. В., Яковлев С. А. Глубоководный черенковский детектор в озере Байкал	4	476	Адамчак А., Баранов В. А., Богданова Л. Н., Вольных В. П., Вихлянцеv О. П., Герштейн С. С., Грицай К. И., Демин Д. Л., Дугинов В. Н. , Конин А. Д., Максимкин И. П., Мусяев Р. К., Руденко А. И. , Файфман М. П., Фильчагин С. В., Юхимчук А. А. Выход γ -квантов от реакций ядерного синтеза в мюонных молекулах $pt\mu$ и $pd\mu$	2	177
Аврорин А. Д. (см. Аврорин А. В.)	4	476	Айнутдинов В. М. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Авчян Б. Р., Казарян А. Г., Саргсян К. А., Седракян Х. В. Генерация высших гармоник в треугольных квантовых графеновых точках	2	155	Александров А. Б., Васина С. Г., Галкин В. И., Грачев В. М., Коновалов А. С., Коновалова Н. С., Королев П. С., Ларионов А. А., Мангадзе А. К., Мельниченко И. А., Окатьева Н. М., Полухина Н. Г., Роганова Т. М., Садыков Ж. Т., Старков Н. И., Старкова Е. Н., Тюков В. Э., Чернявский М. М., Шевченко В. И., Щедрина Т. В. Мюонная радиография крупных природных и промышленных объектов — новый этап в методике ядерных фотоэмульсий	4	590
Агафонова Н. Ю. (см. Мануковский К. В.)	3	331	Алиев З. С. (см. Макарова Т. П.)	5	711
			Аллахвердян В. А. (см. Аврорин А. В.)	4	476
			Амирасланов И. Р. (см. Макарова Т. П.)	5	711
			Аржников А. К. (см. Грошев А. Г.) ...	3	363

- Астапов И. И., Безъязыков П. А., Бланк М., Бонвеч Е. А., Бородин А. Н., Брюкнер М., Буднев Н. М., Булан А. В., Вайдян-тан А., Вишневский Р., Волков Н. В., Волчугов П. А., Воронин Д. М., Гафаров А. Р., Гресс О. А., Гресс Т. И., Гришин О. Г., Гармаш А. Ю., Гребенюк В. М., Гринюк А. А., Дячок А. Н., Журов Д. П., Загородников А. В., Иванова А. Л., Калмыков Н. Н., Киндин В. В., Кириухин С. Н., Кокоулин Р. П., Компаниец К. Г., Коростелева Е. Е., Кожин В. А., Кравченко Е. А., Крюков А. П., Кузьмичев Л. А., Кьявасса А., Лагутин А. А., Лаврова М. В., Лемешев Ю. Е., Лубсандоржиев Б. К., Лубсандоржиев Н. Б., Миргазов Р. Р., Мирзоян Р., Монхоев Р. Д., Осипова Е. А., Пахоруков А. Л., Пан А., **Панасюк М. И.**, Паньков Л. В., Петрухин А. А., Подгрудков Д. А., Полещук В. А., Попова Е. Г., Порелли А., Постников Е. Б., Просин В. В., Птускин В. С., Пушкин А. А., Разумов А. В., Райкин Р. И., Рубцов Г. И., Рябов Е. В., Сагань Я. И., Самолига В. С., Сатышев И., Силаев А. А., Силаев (мл.) А. А., Сидоренков А. Ю., Скурихин А. В., Соколов А. В., Свешникова Л. Г., Суворкин Я. В., Таболенко В. А., Танаев А. Б., Таращанский Б. А., Терновой М. Ю., Ткачев Л. Г., Тлужиконт М., Ушаков Н. А., Хорнс Д., Чернов Д. В., Яшин И. И. Изучение космических лучей на Астрофизическом комплексе TAIGA: результаты и планы . 4 548
- Атутов С. Н., Сорокин В. А. Оптические релаксационные явления в парах рубидия, помещенных в кювету с антирелаксационным покрытием при бихроматическом лазерном облучении 5 652
- Афонин Г. В. (см. Макаров А. С.) 3 373
- Ашитков С. И. (см. Мурзов С. А.) 3 315
- Б**
- Бабаев А. Б. (см. Муртазаев А. К.) 6 847
- Бабаев П. А., Багуля А. В., Волков А. Е., Горбунов С. А., Калинина Г. В., Коновалова Н. С., Ока-тьева Н. М., Полухина Н. Г., Са-дыков Ж. Т., Старков Н. И., Стар-кова Е. Н., Найнг Со Тан, Черняв-ский М. М., Щедрина Т. В. Оценка эффекта фрагментации при регистрации сверхтяжелых ядер галактических космических лучей в палласитах 4 610
- Багуля А. В. (см. Бабаев П. А.) 4 610
- Бадиев М. К., Муртазаев А. К., Рама-занов М. К., Магомедов М. А. Струк-туры основного состояния модели Изинга на слоистой треугольной решетке в маг-нитном поле 5 753
- Базилевская Г. А., Калинин М. С., Крайнев М. Б., Махмутов В. С., Свиржевская А. К., Свиржев-ский Н. С., Стожков Ю. И. О вос-произведении вариаций солнечной актив-ности в диапазоне 2–40 месяцев в межпла-нетной среде 4 560
- Бакланова Я. В. (см. Бузлуков А. Л.) . 1 53
- Бакулин А. В. (см. Чумакова Л. С.) ... 6 874
- Балагуров Б. Я. К теории омических по-терь в LC-системах 2 296
- Балагуров Б. Я. О проводимости двумер-ной модели Рэлея в области фазового пе-рехода металл–диэлектрик 3 358
- Балаев Д. А. (см. Гохфельд Д. М.) 6 833
- Банаш П. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- Баранов В. А. (см. Адамчак А.) 2 177
- Баранцев К. А., Литвинов А. Н., Паз-галёв А. С., Вершовский А. К. Лазер-ная накачка щелочных атомов в условиях сохранения спинового состояния ядра при столкновениях в газовой ячейке 5 657
- Бардачова З. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- Бахметьев М. В., Губанов В. А., Са-довников А. В., Моргунов Р. Б. Спин-волновые возбуждения в гетерострукту-рах NiFe/Cu/IrMn с варьируемой толщи-ной разделительного слоя Cu 2 245
- Бибенин Н. Г. Влияние электрического тока на спиновую поляризацию электро-нов в материалах с неоднородной намаг-нитченностью 5 737
- Безъязыков П. А. (см. Астапов И. И.) 4 548

- Белов И. А., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Вергунова Г. А., Воронин А. Ю., Гаранин С. Г., Головкин С. Ю., Гуськов С. Ю., Демченко Н. Н., Деркач В. Н., Дмитриев Е. О., Змитренко Н. В., Илюшечкина А. В., Кравченко А. Г., Кузьмин И. В., Кучугов П. А., Мюсова А. Е., Рогачев В. Г., Рукавишников А. Н., Соломатина Е. Ю., Стародубцев К. В., Стародубцев П. В., Чугров И. А., Шаров О. О., Яхин Р. А. Ударная передача давления твердому веществу в мишени с пористым поглотителем излучения мощного лазерного импульса 3 403
- Белолоптиков И. А. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- Белоусов Ю. М. Безызлучательный переход ${}^3E \rightarrow {}^1A_1$ и ${}^1\tilde{E} \rightarrow {}^3A_2$ в NV^- -центре в алмазе 5 668
- Бельков С. А. (см. Белов И. А.) 3 403
- Бережко Е. Г.** (см. Танеев С. Н.) 1 20
- Биленко И. А. (см. Шитиков А. Е.) ... 5 683
- Бланк М. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Блецки Я. (см. Савин С. П.) 3 381
- Богданова Л. Н. (см. Адамчак А.) 2 177
- Бонвеч Е. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Бондаренко С. В. (см. Белов И. А.) ... 3 403
- Борина И. В. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- Бородин А. Н. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Бражкин В. В. (см. Циок О. Б.) 1 65
- Бреев А. И., Гаврилов С. П., Гитман Д. М. Сингулярные функции спинорного поля в КЭД с сильным внешним полем 2 189
- Бруданин В. Б.** (см. Аврорин А. В.) . 4 476
- Брюкнер М. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Буднев Н. М. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- Буднев Н. М. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Бузлуков А. Л., Федоров Д. С., Сердцев А. В., Котова И. Ю., Тютюнник А. П., Корона Д. В., Бакланова Я. В., Оглобличев В. В., Кожевникова Н. М., Денисова Т. А., Медведева Н. И. Ионная подвижность в тройных молибдатах и вольфраматах натрия со структурой NASICON 1 53
- Булан А. В. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Буртебаев Н., Аргынова К., Чернявский М. М., Гиппиус А. А., Коновалова Н. С., Квочкина Т. Н., Насурлла М., Окатьева Н. М., Пан А. Н., Полухина Н. Г., Садыков Ж. Т., Щедрина Т. В., Старков Н. И., Старкова Е. Н., Засавицкий И. И. Особенности регистрации ускоренных тяжелых ионов детекторами из фосфатного стекла при различных температурах 4 616
- Буткевич А. В. Результаты нейтринных экспериментов T2K и NOvA: упорядочивание масс нейтрино и CP-симметрия .. 4 515
- Быков А. М., Осипов С. М., Романский В. И. Ускорение космических лучей до энергий выше 10^{15} эВ трансрелятивистскими ударными волнами 4 570
- Бычков Е. (см. Циок О. Б.) 1 65
- В**
- Вайдянатан А. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Валов А. Ф., Горский А. С., Нечев С. К. Поиск перехода Байка – Бен Аруса – Пеше путем размерной редукции ... 3 430
- Вальков А. Ю. (см. Кузьмин В. Л.) ... 6 779
- Ванг Ч. (см. Савин С. П.) 3 381
- Васильева О. Ф. (см. Зинган А. П.) ... 3 307
- Васина С. Г. (см. Александров А. Б.) .. 4 590
- Васютин М. А. (см. Гохфельд Д. М.) .. 6 833
- Ведяев А. В. (см. Шубин Ю. Н.) 5 746
- Вергунова Г. А. (см. Белов И. А.) 3 403
- Вергунова Г. А., Гуськов С. Ю., Вичев И. Ю., Грушин А. С., Ким Д. А., Соломянная А. Д. Особенности генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза 6 887
- Верещагин С. Н. (см. Дудников В. А.) 3 346
- Вершовский А. К. (см. Баранцев К. А.) 5 657
- Виглин Н. А., Никулин Ю. В., Цвелиховская В. М., Павлов Т. Н., Проглядо В. В. Спиновый транспорт в полупроводниках InSb с различной плотностью электронного газа 6 866
- Вихлянцев О. П. (см. Адамчак А.) 2 177
- Вичев И. Ю. (см. Вергунова Г. А.) 6 887
- Вишневский Р. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Волков А. Е. (см. Бабаев П. А.) 4 610
- Волков Н. В. (см. Астапов И. И.) 4 548

Волошин А. С. (см. Шитиков А. Е.) ...	5	683
Волчугов П. А. (см. Астапов И. И.) ...	4	548
Вольных В. П. (см. Адамчак А.)	2	177
Воронин А. Ю. (см. Белов И. А.)	3	403
Воронин Д. М. (см. Астапов И. И.)	4	548

Г

Гаврилкин С. Ю. (см. Дудников В. А.)	3	346
Гаврилов С. П. (см. Бреев А. И.)	2	189
Галкин В. И. (см. Александров А. Б.) .	4	590
Гаранин С. Г. (см. Белов И. А.)	3	403
Гаркушин Г. В. (см. Савиных А. С.) ...	6	825
Гармаш А. Ю. (см. Астапов И. И.)	4	548
Гафаров А. Р. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Гафаров А. Р. (см. Астапов И. И.)	4	548
Герштейн С. С. (см. Адамчак А.)	2	177
Гиппиус А. А. (см. Буртебаев Н.)	4	616
Гитман Д. М. (см. Бреев А. И.)	2	189
Глазкова Д. А. (см. Макарова Т. П.) ..	5	711
Глазкова Д. А. (см. Шикин А. М.)	1	126
Гогина А. А. (см. Макарова Т. П.)	5	711
Головкин С. Ю. (см. Белов И. А.)	3	403
Голубков К. В. (см. Аврорин А. В.) ...	4	476
Горбунов С. А. (см. Бабаев П. А.)	4	610
Горелов И. К. (см. Шитиков А. Е.)	5	683
Горский А. С. (см. Валов А. Ф.)	3	430
Горшков Н. С. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Гохфельд Д. М., Савицкая Н. Е., Попков С. И., Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Балаев Д. А. Анизотропная намагниченность пленки NbN	6	833
Грачев В. М. (см. Александров А. Б.) .	4	590
Гребенюк В. М. (см. Астапов И. И.) ...	4	548
Гресс О. А. (см. Астапов И. И.)	4	548
Гресс Т. И. (см. Астапов И. И.)	4	548
Гресь Т. И. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Григорьев П. Д. (см. Лебедева Е. В.) ..	5	767
Гринюк А. А. (см. Астапов И. И.)	4	548
Грицай К. И. (см. Адамчак А.)	2	177
Гришин О. Г. (см. Астапов И. И.)	4	548
Грошев А. Г., Аржников А. К. Формирование особенностей собственной энергии термическими флуктуациями сверхпроводящего параметра порядка	3	363
Грушин А. С. (см. Вергунова Г. А.) ...	6	887
Губанов В. А. (см. Бахметьев М. В.) ..	2	245
Гуськов С. Ю. (см. Белов И. А.)	3	403
Гуськов С. Ю. (см. Вергунова Г. А.) ...	6	887

Д

Давыдов В. Ю. (см. Фильнов С. О.) ...	2	227
---------------------------------------	---	-----

Дворницки Р. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Демин Д. Л. (см. Адамчак А.)	2	177
Демченко Н. Н. (см. Белов И. А.)	3	403
Денисова Т. А. (см. Буздуков А. Л.) ..	1	53
Деркач В. Н. (см. Белов И. А.)	3	403
Джафаризаде М. А. (см. Эгбалифам Ф.)	1	31
Джилкибаев Ж.-А. М. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Дзапарова И. М. (см. Новосельцев Ю. Ф.)	4	466
Дик В. Я. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Дмитриев Е. О. (см. Белов И. А.)	3	403
Дмитриев Н. Ю. (см. Шитиков А. Е.) .	5	683
Домогацкий Г. В. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Дорожкин С. И. Равновесные киральные краевые токи спиновых подуровней Ландау	5	760
Дорошенко А. А. (см. Аврорин А. В.) .	4	476
Дровосеков А. Б., Крейнес Н. М., Ковалев О. А., Ситников А. В., Николаев С. Н., Рыльков В. В. Магнитный резонанс в металл-диэлектрических наногранулярных композитах с парамагнитными ионами в изолирующей матрице	6	853
Дугинов В. Н. (см. Адамчак А.)	2	177
Дудников В. А., Верещагин С. Н., Соловьёв Л. А., Гаврилкин С. Ю., Цветков А. Ю., Ситников М. В., Орлов Ю. С. Структура, электрические и магнитные свойства метастабильных фаз $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$	3	346
Дюгаев А. М. (см. Лебедева Е. В.)	5	767
Дячок А. Н. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Дячок А. Н. (см. Астапов И. И.)	4	548

Е

Елжов Т. В. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Елисеев И. А. (см. Фильнов С. О.)	2	227
Ерыженков А. В. (см. Фильнов С. О.)	2	227
Естюнин Д. А. (см. Макарова Т. П.) ...	5	711
Естюнин Д. А. (см. Шикин А. М.)	1	126

Ж

Жаворонков Ю. А. (см. Кузьмин В. Л.)	6	779
Жамков А. С. (см. Миллюков В. К.) ...	4	596
Жаховский В. В. (см. Мурзов С. А.) ..	3	315

- Жуков А. А., Фольк К., Шеперс Т.** Исследование особенностей когерентного магнитотранспорта в нанопроволоках InN в присутствии сканирующего затвора .. 1 116
Журов Д. П. (см. Астапов И. И.) 4 548

З

- Заборов Д. Н.** (см. Аврорин А. В.) 4 476
Завидовский И. А., Ниццак О. Ю., Савченко Н. Ф., Стрелецкий О. А. Влияние низкоэнергетического ионного асистирирования на структуру и оптическое поглощение композитных покрытий а-Sn:Ag 6 803
Загородников А. В. (см. Астапов И. И.) 4 548
Зайцев Н. Л. (см. Шикин А. М.) 1 126
Засавицкий И. И. (см. Буртебаев Н.) . 4 616
Захаров Б. Г. Влияние коллективных ядерных колебаний на эксцентриситеты начального состояния в столкновениях Pb+Pb 6 788
Звездин А. К. (см. Шикин А. М.) 1 126
Звездин К. А. (см. Шикин А. М.) 1 126
Зеленый Л. М. (см. Савин С. П.) 3 381
Зинган А. П., Васильева О. Ф. Нелинейная динамика атомно-молекулярной конверсии изотопов щелочных металлов при сверхнизких температурах 3 307
Змитренко Н. В. (см. Белов И. А.) 3 403

И

- Иванова А. Л.** (см. Астапов И. И.) 4 548
Ивлиев С. В. (см. Фальков А. Л.) 3 438
Илюшечкина А. В. (см. Белов И. А.) . 3 403
Иногамов Н. А. (см. Мурзов С. А.) 3 315
Ипатов А. Н., Паршин Д. А., Коных Д. А. Дисперсия изгибных мод в мягких двумерных решетках 1 40

К

- Казарян А. Г.** (см. Авчян Б. Р.) 2 155
Калинин М. С. (см. Базилевская Г. А.) 4 560
Калинина Г. В. (см. Бабаев П. А.) 4 610
Калмыков Н. Н. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
Карташов И. Н., Кузелев М. В. Проблема повышения рабочей частоты в черенковских плазменных источниках электромагнитного излучения 2 281
Карузский А. Л. (см. Пересторонин А. В.) 1 5
Катулин М. С. (см. Аврорин А. В.) 4 476

- Квочкина Т. Н.** (см. Буртебаев Н.) 4 616
Кебкал К. Г. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Кебкал О. Г. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Киктенко Е. О. (см. Кронберг Д. А.) .. 5 627
Ким Д. А. (см. Вергунова Г. А.) 6 887
Киндин В. В. (см. Астапов И. И.) 4 548
Кирюхин С. Н. (см. Астапов И. И.) ... 4 548
Климачков Д. А. (см. Юденкова М. А.) 3 388
Климов С. И. (см. Савин С. П.) 3 381
Климовских И. И. (см. Макарова Т. П.) 5 711
Климовских И. И. (см. Шикин А. М.) 1 126
Кобелев Н. П. (см. Макаров А. С.) 3 373
Ковалев О. А. (см. Дровосеков А. Б.) . 6 853
Кожевникова Н. М. (см. Бузлуков А. Л.) 1 53
Кожин В. А. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Кожин В. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
Кокоулин Р. П. (см. Астапов И. И.) ... 4 548
Колбин М. М. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Комаров П. С. (см. Мурзов С. А.) 3 315
Компаниец К. Г. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
Кондратьев Н. М. (см. Шитиков А. Е.) 5 683
Конин А. Д. (см. Адамчак А.) 2 177
Конищев К. В. (см. Аврорин А. В.) ... 4 476
Коновалов А. С. (см. Александров А. Б.) 4 590
Коновалова Н. С. (см. Александров А. Б.) 4 590
Коновалова Н. С. (см. Бабаев П. А.) .. 4 610
Конюх Д. А. (см. Ипатов А. Н.) 1 40
Копански К. А. (см. Аврорин А. В.) .. 4 476
Коробченко А. В. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Коровай О. В. Законы дисперсии четырехуровневого атома с эквидистантным энергетическим спектром при высоком уровне возбуждения 5 631
Королев П. С. (см. Александров А. Б.) 4 590
Корона Д. В. (см. Бузлуков А. Л.) 1 53
Коростелева Е. Е. (см. Астапов И. И.) 4 548
Котова И. Ю. (см. Бузлуков А. Л.) 1 53
Кох К. А. (см. Макарова Т. П.) 5 711
Кох К. А. (см. Шикин А. М.) 1 126
Кочкаров М. М. (см. Новосельцев Ю. Ф.) 4 466
Кошечкин А. П. (см. Аврорин А. В.) .. 4 476
Кравченко А. Г. (см. Белов И. А.) 3 403
Кравченко Е. А. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
Крайнев М. Б. (см. Базилевская Г. А.) 4 560
Крейнес Н. М. (см. Дровосеков А. Б.) . 6 853

Кронберг Д. А., Киктенко Е. О., Грушечкин А. С., Федоров А. К. Комментарий к статье «Достаточно ли состояний ловушек (Decoy state-метода) для гарантии секретности ключей в квантовой криптографии?» С. Н. Молоткова, К. С. Кравцова, М. И. Рыжкина и к поправке к этой статье	5	627
Круглов М. В. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Кругляк В. В. (см. Пойманов В. Д.) ...	5	720
Крюков А. П. (см. Астапов И. И.)	4	548
Крюков М. К. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Ксенофонтов Л. Т. (см. Танеев С. Н.) .	1	20
Кузелев М. В. (см. Карташов И. Н.) ..	2	281
Кузьмин В. Л., Жаворонков Ю. А., Ульянов С. В., Вальков А. Ю. Моделирование переноса излучения в терминах уравнения Бете–Солпитера для двухслойных систем биотканей	6	779
Кузьмин И. В. (см. Белов И. А.)	3	403
Кузьмичев Л. А. (см. Астапов И. И.) .	4	548
Кузьмичев Н. Д. (см. Гохфельд Д. М.)	6	833
Кулепов В. Ф. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Кулькова С. Е. (см. Чумакова Л. С.) ..	6	874
Куреня А. Н. (см. Новосельцев Ю. Ф.)	4	466
Кутузов М. И. (см. Цебро В. И.)	2	266
Кучугов П. А. (см. Белов И. А.)	3	403
Кьявасса А. (см. Астапов И. И.)	4	548

Л

Лаврова М. В. (см. Астапов И. И.)	4	548
Лагутин А. А. (см. Астапов И. И.)	4	548
Ларионов А. А. (см. Александров А. Б.)	4	590
Ларионов Н. В. Q-распределение для одноатомного лазера, работающего в «классическом» режиме	2	166
Лебедева Е. В., Дюгаев А. М., Григорьев П. Д. Диагностика микрочастиц на поверхности воды	5	767
Лежен Л. А. (см. Савин С. П.)	3	381
Лемешев Ю. Е. (см. Астапов И. И.) ...	4	548
Лидванский А. С. (см. Романенко В. С.)	4	523
Лидванский А. С., Хаердинов М. Н., Хаердинов Н. С. Вариации потока мюонов космических лучей во время гроз .	4	497
Литвак А. Г. (см. Смирнов Л. А.)	6	897
Литвинов А. Н. (см. Баранцев К. А.) ..	5	657
Лобанов В. Е. (см. Шитиков А. Е.)	5	683
Лобода П. А. (см. Фальков А. Л.)	3	438
Лоншаков Е. А. (см. Шитиков А. Е.) ..	5	683

Лубсандоржиев Б. К. (см. Астапов И. И.)	4	548
Лубсандоржиев Н. Б. (см. Астапов И. И.)	4	548
Луганский Л. Б. (см. Цебро В. И.)	2	266
Ляхов В. В. (см. Савин С. П.)	3	381

М

Магомедов М. А. (см. Бадиев М. К.) ..	5	753
Магомедов М. А. (см. Рамазанов М. К.)	6	816
Макаров А. С., Афонин Г. В., Цзiao Ц. Ч., Кобелев Н. П., Хоник В. А. Прогнозирование кинетики релаксации модуля сдвига при кристаллизации металлических стекол на основе калориметрических измерений	3	373
Макарова Т. П., Естюнин Д. А., Фильнов С. О., Глазкова Д. А., Пудиков Д. А., Рыбкин А. Г., Гогина А. А., Алиев З. С., Амирасланов И. Р., Мамедов Н. Т., Кох К. А., Терещенко О. Е., Шикин А. М., Отроков М. М., Чулков Е. В., Климовских И. И. Влияние атомов Со на электронную структуру топологических изоляторов Bi_2Te_3 и $MnBi_2Te_4$	5	711
Максимкин И. П. (см. Адамчак А.) ...	2	177
Малецки П. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Мальшикин Ю. М. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Мальгин А. С. (см. Мануковский К. В.)	3	331
Мамедов Н. Т. (см. Макарова Т. П.) ...	5	711
Манагадзе А. К. (см. Александров А. Б.)	4	590
Мануковский К. В., Юдин А. В., Агафонова Н. Ю., Мальгин А. С. , Ряжская О. Г. Моделирование отклика детектора LSD на нейтринную вспышку от SN1987A	3	331
Махмутов В. С. (см. Базилевская Г. А.)	4	560
Машаев М. Х. (см. Шубин Ю. Н.)	5	746
Медведева Н. И. (см. Бузлуков А. Л.)	1	53
Мельниченко И. А. (см. Александров А. Б.)	4	590
Мерзликин А. М. (см. Родионов С. А.)	5	702
Миленин М. Б. (см. Аврорин А. В.) ...	4	476
Милюков В. К., Филеткин А. И., Жамков А. С. Космический гравитационный градиентометр: пути повышения точности моделей гравитационного поля Земли	4	596

- Миньков К. Н.** (см. Шитиков А. Е.) ... 5 683
Миргазов Р. Р. (см. Аврорин А. В.) ... 4 476
Миргазов Р. Р. (см. Астапов И. И.) 4 548
Мирзоян Р. (см. Астапов И. И.) 4 548
Миронов В. А. (см. Смирнов Л. А.) ... 6 897
Монхоев Р. Д. (см. Астапов И. И.) 4 548
Моргунов Р. Б. (см. Бахметьев М. В.) . 2 245
Мурзов С. А., Ашитков С. И., Струлева Е. В., Комаров П. С., Хохлов В. А., Жаховский В. В., Иногамов Н. А. Упругопластические и полиморфные превращения в пленках железа при нагрузке ультракороткими лазерными ударными волнами 3 315
Муртазаев А. К. (см. Бадиев М. К.) .. 5 753
Муртазаев А. К. (см. Рамазанов М. К.) 6 816
Муртазаев А. К., Бабаев А. Б. Фазовые переходы в двумерных моделях Поттса на гексагональной решетке 6 847
Мусяев Р. К. (см. Адамчак А.) 2 177
Мюсова А. Е. (см. Белов И. А.) 3 403
- Н**
- Назари В.** (см. Аврорин А. В.) 4 476
Найнг Со Тан (см. Бабаев П. А.) 4 610
Нами С. (см. Эгбалифам Ф.) 1 31
Насурлла М. (см. Буртебаев Н.) 4 616
Наумов Д. В. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Немечек З. (см. Савин С. П.) 3 381
Нечаев С. К. (см. Валов А. Ф.) 3 430
Нещадим В. М. (см. Савин С. П.) 3 381
Николаев Е. Г. (см. Цебро В. И.) 2 266
Николаев С. Н. (см. Дровосеков А. Б.) 6 853
Никулин Ю. В. (см. Виглин Н. А.) 6 866
Нищак О. Ю. (см. Завидовский И. А.) 6 803
Новосельцев Ю. Ф., Дзапарова И. М., Кочкаров М. М., Куреня А. Н., Новосельцева Р. В., Петков В. Б., Стриганов П. С., Унатлоков И. Б., Янин А. Ф. Мониторинг нейтринных вспышек в Галактике 4 466
Новосельцева Р. В. (см. Новосельцев Ю. Ф.) 4 466
Нога В. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- О**
- Овечкин А. А.** (см. Фальков А. Л.) 3 438
Оглобличев В. В. (см. Бузлуков А. Л.) 1 53
Окатьева Н. М. (см. Александров А. Б.) 4 590
Окатьева Н. М. (см. Бабаев П. А.) 4 610
Орлов Ю. С. (см. Дудников В. А.) 3 346
- Осипов С. М.** (см. Быков А. М.) 4 570
Осипова Е. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
- о**
- от имени Коллаборации LVD** (см. Агафонова Н. Ю.) 4 533
- О**
- Отроков М. М.** (см. Макарова Т. П.) .. 5 711
- П**
- Павлов Т. Н.** (см. Виглин Н. А.) 6 866
Пазгалёв А. С. (см. Баранцев К. А.) ... 5 657
Пан А. (см. Астапов И. И.) 4 548
Пан А. Н. (см. Буртебаев Н.) 4 616
Панасюк М. И. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
Паньков Л. В. (см. Астапов И. И.) 4 548
Паршин Д. А. (см. Ипатов А. Н.) 1 40
Пахоруков А. Л. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
Пересторонин А. В., Карузский А. Л. Условия применимости приближения, предполагающего малое влияние торможения излучением на движение классического электрона в поле монохроматической плоской волны 1 5
Петков В. Б. (см. Новосельцев Ю. Ф.) . 4 466
Петков В. Б. (см. Романенко В. С.) 4 523
Петросян А. С. (см. Юденкова М. А.) . 3 388
Петрухин А. А. (см. Астапов И. И.) ... 4 548
Петухов Д. П. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Плисковский Е. Н. (см. Аврорин А. В.) 4 476
Подгрудков Д. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
Поддубный А. Н. (см. Юлин А. В.) ... 2 206
Подлазов А. В. Решение самоорганизованно-критической модели Маннны для размерностей пространства 2–4 3 414
Пойманов В. Д., Кругляк В. В. Невзаимность распространения обменно-дипольных спиновых волн в двуслойных магнитных пленках со скрещенной намагниченностью слоев 5 720
Полетаев Г. М., Ситников А. А., Яковлев В. И., Филимонов В. Ю. Молекулярно-динамическое исследование зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti₃Al, TiAl и TiAl₃ от их диаметра в вакууме и в жидком алюминии 2 221
Полещук В. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
Полухина Н. Г. (см. Александров А. Б.) 4 590
Полухина Н. Г. (см. Бабаев П. А.) 4 610

Полухина Н. Г. (см. Буртебаев Н.)	4	616
Попков С. И. (см. Гохфельд Д. М.)	6	833
Попова Е. Г. (см. Астапов И. И.)	4	548
Порелли А. (см. Астапов И. И.)	4	548
Постников Е. Б. (см. Астапов И. И.)	4	548
Пошакинский А. В. (см. Юлин А. В.)	2	206
Проглядо В. В. (см. Виглин Н. А.)	6	866
Просин В. В. (см. Астапов И. И.)	4	548
Птускин В. С. (см. Астапов И. И.)	4	548
Пудиков Д. А. (см. Макарова Т. П.)	5	711
Пушнин А. А. (см. Астапов И. И.)	4	548

Р

Разоренов С. В. (см. Савиных А. С.)	6	825
Разумов А. В. (см. Астапов И. И.)	4	548
Райкин Р. И. (см. Астапов И. И.)	4	548
Рамазанов М. К. (см. Бадиев М. К.)	5	753
Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А. Фрустрированная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ в магнитном поле	6	816
Рахманова Л. С. (см. Савин С. П.)	3	381
Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Аборкин А. В., Филиппов А. В. Межатомное взаимодействие на границе алюминий-фуллерен C_{60}	1	86
Решетняк О. Б. (см. Решетняк В. В.)	1	86
Роганова Т. М. (см. Александров А. Б.)	4	590
Рогачев В. Г. (см. Белов И. А.)	3	403
Родионов С. А., Мерзликин А. М. Эффективный показатель преломления двумерных пористых композитов	5	702
Розанов М. И. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Романенко В. С., Петков В. Б., Лидванский А. С. Гамма-астрономия сверхвысоких энергий на установке «Ковер» Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН	4	523
Романский В. И. (см. Быков А. М.)	4	570
Рубцов Г. И. (см. Астапов И. И.)	4	548
Руденко А. И. (см. Адамчак А.)	2	177
Рукавишников А. Н. (см. Белов И. А.)	3	403
Рушай В. Д. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Рыбкин А. Г. (см. Макарова Т. П.)	5	711
Рыбкин А. Г. (см. Фильнов С. О.)	2	227
Рыбкин А. Г. (см. Шикин А. М.)	1	126
Рыбкина А. А. (см. Фильнов С. О.)	2	227
Рыльков В. В. (см. Дровосеков А. Б.)	6	853
Рябов Е. В. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Рябов Е. В. (см. Астапов И. И.)	4	548
Ряжская О. Г. (см. Агафонова Н. Ю.)	4	533

Ряжская О. Г. (см. Мануковский К. В.)	3	331
Рязанцева М. О. (см. Савин С. П.)	3	381

С

Савин А. В., Савина О. И. Упругие и пластические деформации многослойных упаковок углеродных нанотрубок на плоской подложке	1	75
Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Ванг Ч., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Блецки Я., Лежен Л. А. Собственные колебания головной ударной волны и их взаимосвязь с магнитосферными резонансами	3	381
Савина О. И. (см. Савин А. В.)	1	75
Савиных А. С., Гаркушин Г. В., Разоренов С. В. Влияние малых предварительных деформаций и начальной температуры на сопротивление высокоскоростному деформированию Армко-железа в ударных волнах и волнах разрежения	6	825
Савицкая Н. Е. (см. Гохфельд Д. М.)	6	833
Савченко Н. Ф. (см. Завидовский И. А.)	6	803
Сагань Я. И. (см. Астапов И. И.)	4	548
Садовников А. В. (см. Бахметьев М. В.)	2	245
Садыков Ж. Т. (см. Александров А. Б.)	4	590
Садыков Ж. Т. (см. Бабаев П. А.)	4	610
Садыков Ж. Т. (см. Буртебаев Н.)	4	616
Самолига В. С. (см. Астапов И. И.)	4	548
Саргсян К. А. (см. Авчян Б. Р.)	2	155
Сатышев И. (см. Астапов И. И.)	4	548
Сафронов Г. Б. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Свешникова Л. Г. (см. Астапов И. И.)	4	548
Свиржевская А. К. (см. Базилевская Г. А.)	4	560
Свиржевский Н. С. (см. Базилевская Г. А.)	4	560
Седракян Х. В. (см. Авчян Б. Р.)	2	155
Сёмкин С. В., Смагин В. П., Тарасов В. С. Фрустрации в разбавленном изинговском магнетике на решетке Бете	6	840
Сердцев А. В. (см. Буздуков А. Л.)	1	53
Сидоренков А. Ю. (см. Астапов И. И.)	4	548
Силаев (мл.) А. А. (см. Астапов И. И.)	4	548
Силаев А. А. (см. Астапов И. И.)	4	548
Сиренко А. Э. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Ситников А. А. (см. Полетаев Г. М.)	2	221

- Ситников А. В. (см. Дровосеков А. Б.) 6 853
 Ситников М. В. (см. Дудников В. А.) . 3 346
 Скальский С. А. (см. Савин С. П.) 3 381
 Скурихин А. В. (см. Аврорин А. В.) .. 4 476
 Скурихин А. В. (см. Астапов И. И.) ... 4 548
 Смагин В. П. (см. Сёмкин С. В.) 6 840
 Смирнов Л. А., Миронов В. А., Литвак А. Г. Особенности динамики самовоздействия волновых пакетов с исходно нормальной дисперсией групповой скорости в нелинейных решетках 6 897
 Смородин Б. Л. Волновые режимы электроконвекции при инжекции с катода и нагреве сверху 1 137
 Соколов А. В. (см. Астапов И. И.) 4 548
 Соловьев А. Г. (см. Аврорин А. В.) 4 476
 Соловьёв Л. А. (см. Дудников В. А.) .. 3 346
 Соломатина Е. Ю. (см. Белов И. А.) .. 3 403
 Соломянная А. Д. (см. Вергунова Г. А.) 6 887
 Сорокин В. А. (см. Атутов С. Н.) 5 652
 Сороковиков М. Н. (см. Аврорин А. В.) 4 476
 Старков А. С., Старков И. А. Усреднение термоэлектрических сред: непрерывность термоэлектрического потенциала . 2 253
 Старков И. А. (см. Старков А. С.) 2 253
 Старков Н. И. (см. Александров А. Б.) 4 590
 Старков Н. И. (см. Бабаев П. А.) 4 610
 Старков Н. И. (см. Буртебаев Н.) 4 616
 Старкова Е. Н. (см. Александров А. Б.) 4 590
 Старкова Е. Н. (см. Бабаев П. А.) 4 610
 Старкова Е. Н. (см. Буртебаев Н.) 4 616
 Стародубцев К. В. (см. Белов И. А.) .. 3 403
 Стародубцев П. В. (см. Белов И. А.) .. 3 403
 Стенькин Ю. В. Выдающиеся достижения эксперимента LHAASO в области гамма-астрономии сверхвысоких энергий .. 4 461
 Стожков Ю. И. (см. Базилювская Г. А.) 4 560
 Стрелецкий О. А. (см. Завидовский И. А.) 6 803
 Стрелков Н. В. (см. Шубин Ю. Н.) 5 746
 Стриганов П. С. (см. Новосельцев Ю. Ф.) 4 466
 Стромаков А. П. (см. Аврорин А. В.) . 4 476
 Струлева Е. В. (см. Мурзов С. А.) 3 315
 Суворкин Я. В. (см. Астапов И. И.) ... 4 548
 Суворова О. В. (см. Аврорин А. В.) ... 4 476
 Сушенок Е. О. (см. Аврорин А. В.) 4 476
- Т**
- Таболенко В. А. (см. Аврорин А. В.) .. 4 476
 Таболенко В. А. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
- Танаев А. Б. (см. Астапов И. И.) 4 548
 Танеев С. Н., Ксенофонтов Л. Т., Бережко Е. Г. Влияние коронального выброса массы на ускорение солнечных космических лучей ударной волной в нижней короне Солнца 1 20
 Тарасов А. В. (см. Фильнов С. О.) 2 227
 Тарасов В. С. (см. Сёмкин С. В.) 6 840
 Таращанский Б. А. (см. Аврорин А. В.) 4 476
 Таращанский Б. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
 Тверьянович А. С. (см. Циок О. Б.) .. 1 65
 Терещенко О. Е. (см. Макарова Т. П.) 5 711
 Терещенко О. Е. (см. Шикин А. М.) .. 1 126
 Терновой М. Ю. (см. Астапов И. И.) .. 4 548
 Ткачев Л. Г. (см. Астапов И. И.) 4 548
 Тлужиконт М. (см. Астапов И. И.) 4 548
 Тонких А. А. (см. Цебро В. И.) 2 266
 Трушечкин А. С. (см. Кронберг Д. А.) 5 627
 Тюков В. Э. (см. Александров А. Б.) .. 4 590
 Тютюнник А. П. (см. Бузлуков А. Л.) 1 53
- У**
- Ульянов С. В. (см. Кузьмин В. Л.) 6 779
 Унатлоков И. Б. (см. Новосельцев Ю. Ф.) 4 466
 Ушаков Н. А. (см. Астапов И. И.) 4 548
- Ф**
- Файт Л. (см. Аврорин А. В.) 4 476
 Файфман М. П. (см. Адамчак А.) 2 177
 Фальков А. Л., Лобода П. А., Овечкин А. А., Ивлиев С. В. Метод псевдоатомной молекулярной динамики для расчета коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии плотной плазмы 3 438
 Федоров А. К. (см. Кронберг Д. А.) ... 5 627
 Федоров Д. С. (см. Бузлуков А. Л.) ... 1 53
 Фиалковский С. В. (см. Аврорин А. В.) 4 476
 Филеткин А. И. (см. Милькоков В. К.) . 4 596
 Филимонов В. Ю. (см. Полетаев Г. М.) 2 221
 Филиппов А. В. (см. Решетняк В. В.) . 1 86
 Филиппов А. В. Электростатическое взаимодействие заряженного диэлектрического шара с плоской заряженной границей однородных диэлектриков 5 691
 Фильнов С. О. (см. Макарова Т. П.) ... 5 711
 Фильнов С. О. (см. Шикин А. М.) 1 126

Фильнов С. О., Рыбкина А. А., Тарасов А. В., Ерыженков А. В., Елисеев И. А., Давыдов В. Ю., Шикин А. М., Рыбкин А. Г. Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC (0001)	2	227
Фильчагин С. В. (см. Адамчак А.)	2	177
Фольк К. (см. Жуков А. А.)	1	116

Х

Хаердинов М. Н. (см. Лидванский А. С.)	4	497
Хаердинов Н. С. (см. Лидванский А. С.)	4	497
Харьковский А. И. (см. Цебро В. И.) ..	2	266
Хмельницкий Р. А. (см. Цебро В. И.) ..	2	266
Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Новый класс фазовых переходов в водороде и дейтерии при наличии химических реакций ионизации и диссоциации	2	238
Хоник В. А. (см. Макаров А. С.)	3	373
Хорнс Д. (см. Астапов И. И.)	4	548
Хохлов В. А. (см. Мурзов С. А.)	3	315
Храмов Е. В. (см. Аврорин А. В.)	4	476

Ц

Цвелиховская В. М. (см. Виглин Н. А.) ..	6	866
Цветков А. Ю. (см. Дудников В. А.) ..	3	346
Цебро В. И., Николаев Е. Г., Луганский Л. Б., Кутузов М. И., Хмельницкий Р. А., Тонких А. А., Харьковский А. И. Активационный прыжковый транспорт в нематических проводящих аэрогелях	2	266
Цзиао Ц. Ч. (см. Макаров А. С.)	3	373
Циок О. Б., Бражкин В. В., Тверьянович А. С., Бычков Е. Логарифмическая релаксация удельного объема и оптических свойств уплотненного стекла GeS ₂ ..	1	65

Ч

Чернов Д. В. (см. Астапов И. И.)	4	548
Чернявский М. М. (см. Александров А. Б.)	4	590
Чернявский М. М. (см. Бабаев П. А.) ..	4	610
Чернявский М. М. (см. Буртебаев Н.) ..	4	616
Чугров И. А. (см. Белов И. А.)	3	403
Чулков Е. В. (см. Макарова Т. П.)	5	711
Чумакова Л. С., Бакулин А. В., Кулькова С. Е. Электронная структура и механические свойства Ti ₅ Si ₃	6	874

Ш

Шайбонов Б. А. (см. Аврорин А. В.) ..	4	476
Шаров О. О. (см. Белов И. А.)	3	403
Шафранкова Я. (см. Савин С. П.)	3	381
Шевченко В. И. (см. Александров А. Б.) ..	4	590
Шелепов М. Д. (см. Аврорин А. В.) ...	4	476
Шеперс Т. (см. Жуков А. А.)	1	116
Шикин А. М. (см. Макарова Т. П.)	5	711
Шикин А. М. (см. Фильнов С. О.)	2	227
Шикин А. М., Естюнин Д. А., Зайцев Н. Л., Глазкова Д. А., Климовских И. И., Фильнов С. О., Рыбкин А. Г., Кох К. А., Терещенко О. Е., Звездин К. А., Звездин А. К. Модуляция энергетической запрещенной зоны в точке Дирака в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi ₂ Te ₄ как результат изменений поверхностного градиента потенциала ..	1	126
Шимковиц Ф. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Шитиков А. Е., Волошин А. С., Горелов И. К., Лоншаков Е. А., Миньков К. Н., Дмитриев Н. Ю., Кондратьев Н. М., Лобанов В. Е., Биленко И. А. Генерация оптических частотных гребенок в оптическом микрорезонаторе на длине волны 780 нм в режиме затягивания при накачке лазерным диодом ..	5	683
Шкилев В. П. Случайные блуждания с непрерывным временем при конечных концентрациях	1	104
Штекл И. (см. Аврорин А. В.)	4	476
Шубин Ю. Н., Машаев М. Х., Ведяев А. В., Стрелков Н. В. Частота спин-трансферного наносциллятора на основе перпендикулярной туннельной наногетероструктуры с ненулевой эллиптичностью	5	746
Шумихин А. С. (см. Хомкин А. Л.) ...	2	238

Щ

Щедрина Т. В. (см. Александров А. Б.) ..	4	590
Щедрина Т. В. (см. Бабаев П. А.)	4	610
Щедрина Т. В. (см. Буртебаев Н.)	4	616

Э		G	
Эгбалифам Ф., Джафаризаде М. А., Нами С. Закон масштабирования для эн- тропии запутывания для основного состо- яния в решеточной модели суперсиммет- ричных фермионов 1 31		Grinis R. Differentiable programming for particle physics simulations 2 184	
Эцкерова Э. (см. Аврорин А. В.) 4 476		К	
Ю		Коновалова Н. С. (см. Буртебаев Н.) . 4 616	
Юденкова М. А., Климачков Д. А., Петросян А. С. Волны Пуанкаре и вол- ны Россби в сжимаемых течениях мелкой воды 3 388		Korochkin A., Neronov A., Lavaux G., Ramsøy M., Semikoz D. Detectability of large correlation length inflationary mag- netic field with Cherenkov telescopes 4 583	
Юдин А. В. (см. Мануковский К. В.) .. 3 331		L	
Юлин А. В., Пошакинский А. В., Поддубный А. Н. Оптомеханическая лазерная генерация и доменные стенки, обусловленные экситон-фононным взаи- модействием 2 206		Lavaux G. (see Korochkin A.) 4 583	
Юхимчук А. А. (см. Адамчак А.) 2 177		N	
Я		Neronov A. (see Korochkin A.) 4 583	
Яблокова Ю. В. (см. Аврорин А. В.) .. 4 476		O	
Яковлев В. И. (см. Полетаев Г. М.) 2 221		Окатьева Н. М. (см. Буртебаев Н.) 4 616	
Яковлев С. А. (см. Аврорин А. В.) 4 476		R	
Янин А. Ф. (см. Новосельцев Ю. Ф.) .. 4 466		Ramsøy M. (see Korochkin A.) 4 583	
Яхин Р. А. (см. Белов И. А.) 3 403		S	
Яшин И. И. (см. Астапов И. И.) 4 548		Semikoz D. (see Korochkin A.) 4 583	
А		Sokolsky P., D'Avignon R. The unreason- able effectiveness of the air-fluorescence tech- nique in determining the EAS shower maxi- mum 4 544	
Аргынова К. (см. Буртебаев Н.) 4 616			
Д			
D'Avignon R. (see Sokolsky P.) 4 544			

- Оптические релаксационные явления в парах рубидия, помещенных в кювету с антирелаксационным покрытием при бихроматическом лазерном облучении. *Аматов С. Н., Сорокин В. А.* 5 652
- Лазерная накачка щелочных атомов в условиях сохранения спинового состояния ядра при столкновениях в газовой ячейке. *Баранцев К. А., Литвинов А. Н., Пазгалёв А. С., Вершовский А. К.* 5 657
- Генерация оптических частотных гребенок в оптическом микрорезонаторе на длине волны 780 нм в режиме затягивания при накачке лазерным диодом. *Шитиков А. Е., Волошин А. С., Горелов И. К., Лоншаков Е. А., Миньков К. Н., Дмитриев Н. Ю., Кондратьев Н. М., Лобанов В. Е., Биленко И. А.* 5 683
- Особенности генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза. *Вергунова Г. А., Гуськов С. Ю., Вицев И. Ю., Грушин А. С., Ким Д. А., Солянская А. Д.* 6 887
- 1.8 Классическая электродинамика**
- Электростатическое взаимодействие заряженного диэлектрического шара с плоской заряженной границей однородных диэлектриков. *Филлипов А. В.* 5 691
- 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика**
- 2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции**
- Выход γ -квантов от реакций ядерного синтеза в мюонных молекулах $pt\mu$ и $rd\mu$. *Адамчак А., Баранов В. А., Богданова Л. Н., Вольных В. П., Вихлянцева О. П., Герштейн С. С., Грицай К. И., Демин Д. Л., Дугинов В. Н., Конин А. Д., Максимкин И. П., Мусяев Р. К., Руденко А. И., Файфман М. П., Фильчагин С. В., Юхимчук А. А.* 2 177
- Оценка эффекта фрагментации при регистрации сверхтяжелых ядер галактических космических лучей в палласитах. *Бабаев П. А., Багуля А. В., Волков А. Е., Горбунов С. А., Калинин Г. В., Коновалова Н. С., Окатьева Н. М., Полухина Н. Г., Садыков Ж. Т., Старков Н. И., Старкова Е. Н., НайнСо Тан, Чернявский М. М., Щедрина Т. В.* 4 610
- Особенности регистрации ускоренных тяжелых ионов детекторами из фосфатного стекла при различных температурах. *Буртебаев Н., Арғынова К., Чернявский М. М., Гиппиус А. А., Коновалова Н. С., Квочкина Т. Н., Насурлла М., Окатьева Н. М., Пан А. Н., Полухина Н. Г., Садыков Ж. Т., Щедрина Т. В., Старков Н. И., Старкова Е. Н., Засавицкий И. И.* 4 616
- Влияние коллективных ядерных колебаний на эксцентриситеты начального состояния в столкновениях Pb+Pb. *Захаров Б. Г.* . 6 788
- 2.3 Электромагнитные и слабые взаимодействия**
- Результаты нейтринных экспериментов T2K и NOvA: упорядочивание масс нейтрино и CP-симметрия. *Буткевич А. В.* . 4 515
- 2.4 Гравитация и астрофизика**
- Влияние коронального выброса массы на ускорение солнечных космических лучей ударной волной в нижней короне Солнца. *Танеев С. Н., Ксенофонтов Л. Т., Бережко Е. Г.* 1 20
- Моделирование отклика детектора LSD на нейтринную вспышку от SN1987A. *Мануковский К. В., Юдин А. В., Агафонова Н. Ю., Мальгин А. С., Ряжская О. Г.* 3 331
- Выдающиеся достижения эксперимента LHAASO в области гамма-астрономии сверхвысоких энергий. *Стенькин Ю. В.* 4 461
- Мониторинг нейтринных вспышек в Галактике. *Новосельцев Ю. Ф., Дзанапорова И. М., Кочкаров М. М., Куреня А. Н., Новосельцева Р. В., Петков В. Б., Стриганов П. С., Унатлов И. Б., Янин А. Ф.* 4 466

<p>Глубоководный черенковский детектор в озере Байкал. Аврорин А. В., Аврорин А. Д., Айнутдинов В. М., Аллахвердян В. А., Банаши П., Бардачова З., Белолопчиков И. А., Борина И. В., Бруданин В. Б., Буднев Н. М., Гафаров А. Р., Голубков К. В., Горшков Н. С., Гресь Т. И., Дворницки Р., Джилжибаев Ж.-А. М., Дик В. Я., Домогацкий Г. В., Дорошенко А. А., Дячок А. Н., Елжов Т. В., Заборов Д. Н., Катулин М. С., Кебкал К. Г., Кебкал О. Г., Кожин В. А., Колбин М. М., Конищев К. В., Копански К. А., Коробченко А. В., Кошечкин А. П., Круглов М. В., Крюков М. К., Кулепов В. Ф., Малецки П., Малышкин Ю. М., Миленин М. Б., Миргазов Р. Р., Назари В., Наумов Д. В., Нога В., Петухов Д. П., Плисковский Е. Н., Розанов М. И., Рушай В. Д., Рябов Е. В., Сафронов Г. Б., Сиренко А. Э., Скурихин А. В., Соловьев А. Г., Сороковилов М. Н., Стромаков А. П., Суворова О. В., Сушенков Е. О., Таболенко В. А., Таращанский Б. А., Файт Л., Фиалковский С. В., Храмов Е. В., Шайбонов Б. А., Шелепов М. Д., Шимковец Ф., Штекл И., Эцкерова Э., Яблокова Ю. В., Яковлев С. А. 4 476</p> <p>Вариации потока мюонов космических лучей во время гроз. Лидванский А. С., Хаердинов М. Н., Хаердинов Н. С. 4 497</p> <p>Гамма-астрономия сверхвысоких энергий на установке «Ковер» Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН. Романенко В. С., Петков В. Б., Лидванский А. С. 4 523</p> <p>Изучение характеристик космогенных нейтронов и скорости счета импульсов на сцинтилляционных детекторах АСД, LSD и LVD. Агафонова Н. Ю., Рязская О. Г., от имени Коллаборации LVD. 4 533</p> <p>The unreasonable effectiveness of the air-fluorescence technique in determining the EAS shower maximum. Sokolsky P., D'Avignon R. 4 544</p>	<p>Изучение космических лучей на Астрофизическом комплексе TAIGA: результаты и планы. Астапов И. И., Безвязыков П. А., Бланк М., Бонвеч Е. А., Бороздин А. Н., Брюкнер М., Буднев Н. М., Булан А. В., Вайдянатан А., Вишневецкий Р., Волков Н. В., Волчугов П. А., Воронин Д. М., Гафаров А. Р., Гресс О. А., Гресс Т. И., Гришин О. Г., Гармаши А. Ю., Гребенюк В. М., Гринюк А. А., Дячок А. Н., Журов Д. П., Загородников А. В., Иванова А. Л., Калмыков Н. Н., Киндин В. В., Кирюхин С. Н., Кокуюлин Р. П., Компаниец К. Г., Коростелева Е. Е., Кожин В. А., Кравченко Е. А., Крюков А. П., Кузьмичев Л. А., Кьявасса А., Лагутин А. А., Лаврова М. В., Лемешев Ю. Е., Лубсандоржиев Б. К., Лубсандоржиев Н. Б., Миргазов Р. Р., Мирзоян Р., Монхоев Р. Д., Осипова Е. А., Пахоруков А. Л., Пан А., Панасюк М. И., Паньков Л. В., Петрухин А. А., Подгрудков Д. А., Полещук В. А., Попова Е. Г., Порелли А., Постников Е. Б., Просин В. В., Птускин В. С., Пушкин А. А., Разумов А. В., Райкин Р. И., Рубцов Г. И., Рябов Е. В., Сагань Я. И., Самолига В. С., Сатышев И., Силаев А. А., Силаев (мл.) А. А., Сидоренков А. Ю., Скурихин А. В., Соколов А. В., Свешникова Л. Г., Суворкин Я. В., Таболенко В. А., Танаев А. Б., Таращанский Б. А., Терновой М. Ю., Ткачев Л. Г., Тлужиконт М., Ушаков Н. А., Хорнс Д., Чернов Д. В., Яшин И. И. 4 548</p> <p>О воспроизведении вариаций солнечной активности в диапазоне 2–40 месяцев в межпланетной среде. Базилевская Г. А., Калинин М. С., Крайнев М. Б., Махмутов В. С., Свиржевская А. К., Свиржевский Н. С., Стожков Ю. И. 4 560</p> <p>Ускорение космических лучей до энергий выше 10^{15} эВ трансрелятивистскими ударными волнами. Быков А. М., Осипов С. М., Романский В. И. 4 570</p> <p>Detectability of large correlation length inflationary magnetic field with Cherenkov telescopes. Korochkin A., Neronov A., Lavaux G., Ramsøy M., Semikoz D. 4 583</p>
--	---

- Мюонная радиография крупных природных и промышленных объектов — новый этап в методике ядерных фотоэмульсий. *Александров А. Б., Васина С. Г., Галкин В. И., Грачев В. М., Коновалов А. С., Коновалова Н. С., Королев П. С., Ларионов А. А., Манагадзе А. К., Мельниченко И. А., Окатьева Н. М., Полухина Н. Г., Роганова Т. М., Садыков Ж. Т., Старков Н. И., Старкова Е. Н., Тюков В. Э., Чернявский М. М., Шевченко В. И., Щедрина Т. В.* 4 590
- Космический гравитационный градиентометр: пути повышения точности моделей гравитационного поля Земли. *Миллюков В. К., Филеткин А. И., Жамков А. С.* 4 596
- 2.5 Квантовая теория поля, струны**
- Закон масштабирования для энтропии запутывания для основного состояния в решеточной модели суперсимметричных фермионов. *Эгбалифам Ф., Джафаризаде М. А., Нами С.* 1 31
- Differentiable programming for particle physics simulations. *Grinis R.* 2 184
- Сингулярные функции спинорного поля в КЭД с сильным внешним полем. *Бреве А. И., Гаврилов С. П., Гитман Д. М.* 2 189
- 3. Твердые тела и жидкости**
- 3.1 Рассеяние и поглощение частиц и волн, спектры возбуждения**
- Дисперсия изгибных мод в мягких двумерных решетках. *Ипатов А. Н., Паршин Д. А., Конюх Д. А.* 1 40
- Оптомеханическая лазерная генерация и доменные стенки, обусловленные экситон-фононным взаимодействием. *Юлин А. В., Пошакинский А. В., Поддубный А. Н.* ... 2 206
- Молекулярно-динамическое исследование зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti₃Al, TiAl и TiAl₃ от их диаметра в вакууме и в жидком алюминии. *Полетаев Г. М., Ситников А. А., Яковлев В. И., Филлимонов В. Ю.* 2 221
- Эффективный показатель преломления двумерных пористых композитов. *Родионов С. А., Мерзлякин А. М.* 5 702
- Влияние атомов Со на электронную структуру топологических изоляторов Bi₂Te₃ и MnBi₂Te₄. *Макарова Т. П., Естунин Д. А., Фильнов С. О., Глазкова Д. А., Пудиков Д. А., Рыбкин А. Г., Гогина А. А., Алиев З. С., Амирасланов И. Р., Мамедов Н. Т., Кох К. А., Терещенко О. Е., Шижин А. М., Отроков М. М., Чулков Е. В., Климовских И. И.* 5 711
- Влияние низкоэнергетического ионного асистирирования на структуру и оптическое поглощение композитных покрытий α -CH:Ag. *Завидовский И. А., Нищак О. Ю., Савченко Н. Ф., Стрелецкий О. А.* 6 803
- 3.2 Структура, механические свойства, дефекты, рост кристаллов**
- Ионная подвижность в тройных молибдатах и вольфраматах натрия со структурой NASICON. *Бузлуков А. Л., Федоров Д. С., Сердцев А. В., Котова И. Ю., Тютюнник А. П., Корона Д. В., Бакланова Я. В., Оглобличев В. В., Кожевникова Н. М., Денисова Т. А., Медведева Н. И.* 1 53
- Упругие и пластические деформации многослойных упаковок углеродных нанотрубок на плоской подложке. *Савин А. В., Савина О. И.* 1 75
- Упругопластические и полиморфные превращения в пленках железа при нагрузке ультракороткими лазерными ударными волнами. *Мурзов С. А., Ашитков С. И., Струлева Е. В., Комаров П. С., Холлов В. А., Жаховский В. В., Иногамов Н. А.* 3 315
- 3.3 Тепловые свойства твердых тел и жидкостей**
- Логарифмическая релаксация удельного объема и оптических свойств уплотненного стекла GeS₂. *Цюк О. Б., Бражкин В. В., Тверьянович А. С., Бычков Е.* 1 65
- 3.5 Низкоразмерные системы (структура и т. д.)**
- Дисперсия изгибных мод в мягких двумерных решетках. *Ипатов А. Н., Паршин Д. А., Конюх Д. А.* 1 40

- Упругие и пластические деформации многослойных упаковок углеродных нанотрубок на плоской подложке. *Савин А. В., Савина О. И.* 1 75
- Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC (0001). *Фильнов С. О., Рыбкина А. А., Тарасов А. В., Ерыженков А. В., Елисеев И. А., Давыдов В. Ю., Шикин А. М., Рыбкин А. Г.* 2 227
- Диагностика микрочастиц на поверхности воды. *Лебедева Е. В., Дюгаев А. М., Григорьев П. Д.* 5 767
- 4. Порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах**
- 4.1 Неоднородные, неупорядоченные и частично разупорядоченные системы**
- Ионная подвижность в тройных молибдатах и вольфраматах натрия со структурой NASICON. *Бузлуков А. Л., Федоров Д. С., Сердцев А. В., Котова И. Ю., Тютюнник А. П., Корона Д. В., Бакланова Я. В., Оглобличев В. В., Кожевникова Н. М., Денисова Т. А., Медведева Н. И.* 1 53
- Логарифмическая релаксация удельного объема и оптических свойств уплотненного стекла GeS₂. *Цюок О. Б., Бражкин В. В., Тверьянович А. С., Бычков Е.* 1 65
- Межатомное взаимодействие на границе алюминий-фуллерен C₆₀. *Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Аборкин А. В., Филиппов А. В.* 1 86
- Случайные блуждания с непрерывным временем при конечных концентрациях. *Шкилев В. П.* 1 104
- Новый класс фазовых переходов в водороде и дейтерии при наличии химических реакций ионизации и диссоциации. *Хомкин А. Л., Шумихин А. С.* 2 238
- Спин-волновые возбуждения в гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn с варьируемой толщиной разделительного слоя Cu. *Бахметьев М. В., Губанов В. А., Садовников А. В., Моргунов Р. Б.* 2 245
- К теории омических потерь в LC-системах. *Балагуров Б. Я.* 2 296
- Упругопластические и полиморфные превращения в пленках железа при нагрузке ультракороткими лазерными ударными волнами. *Мурзов С. А., Ашитков С. И., Струлева Е. В., Комаров П. С., Хохлов В. А., Жаховский В. В., Иногамов Н. А.* 3 315
- О проводимости двумерной модели Рэлея в области фазового перехода металл-диэлектрик. *Балагуров Б. Я.* 3 358
- Структуры основного состояния модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле. *Бадиев М. К., Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Магомедов М. А.* 5 753
- Влияние малых предварительных деформаций и начальной температуры на сопротивление высокоскоростному деформированию Армко-железа в ударных волнах и волнах разрежения. *Савиных А. С., Гаркушин Г. В., Разоренов С. В.* 6 825
- Фазовые переходы в двумерных моделях Поттса на гексагональной решетке. *Муртазаев А. К., Бабаев А. Б.* 6 847
- Электронная структура и механические свойства Ti₅Si₃. *Чумакова Л. С., Бакулин А. В., Кулькова С. Е.* 6 874
- 4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлектричество**
- Модуляция энергетической запрещенной зоны в точке Дирака в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi₂Te₄ как результат изменений поверхностного градиента потенциала. *Шикин А. М., Естюнин Д. А., Зайцев Н. Л., Глазкова Д. А., Климовский И. И., Фильнов С. О., Рыбкин А. Г., Кох К. А., Терещенко О. Е., Звездин К. А., Звездин А. К.* 1 126
- Структура, электрические и магнитные свойства метастабильных фаз Sr_{0.8}Du_{0.2}CoO_{3-δ}. *Дудников В. А., Верещагин С. Н., Соловьёв Л. А., Гаврилкин С. Ю., Цветков А. Ю., Ситников М. В., Орлов Ю. С.* 3 346

- Невзаимность распространения обменно-дипольных спиновых волн в двуслойных магнитных пленках со скрещенной намагниченностью слоев. *Пойманов В. Д., Кругляк В. В.* 5 720
- Влияние электрического тока на спиновую поляризацию электронов в материалах с неоднородной намагниченностью. *Бибенин Н. Г.* 5 737
- Частота спин-трансферного наноосциллятора на основе перпендикулярной туннельной наногетероструктуры с ненулевой эллиптичностью. *Шубин Ю. Н., Машаев М. Х., Ведяев А. В., Стрелков Н. В.* 5 746
- Структуры основного состояния модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле. *Бадиев М. К., Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Магомедов М. А.* 5 753
- Фрустрированная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ в магнитном поле. *Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А.* 6 816
- Анизотропная намагниченность пленки NbN. *Гохфельд Д. М., Савицкая Н. Е., Попков С. И., Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Балаев Д. А.* 6 833
- Фрустрации в разбавленном изинговском магнетике на решетке Бете. *Сёмкин С. В., Смагин В. П., Тарасов В. С.* 6 840
- Фазовые переходы в двумерных моделях Поттса на гексагональной решетке. *Муртазаев А. К., Бабаев А. Б.* 6 847
- Магнитный резонанс в металл-диэлектрических наногранулярных композитах с парамагнитными ионами в изолирующей матрице. *Дровосеков А. Б., Крейнес Н. М., Ковалев О. А., Ситников А. В., Николаев С. Н., Рыльков В. В.* 6 853
- 4.3 Сверхпроводимость и сверхтекучесть**
- Молекулярно-динамическое исследование зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti₃Al, TiAl и TiAl₃ от их диаметра в вакууме и в жидком алюминии. *Полетаев Г. М., Ситников А. А., Яковлев В. И., Филимонов В. Ю.* 2 221
- Анизотропная намагниченность пленки NbN. *Гохфельд Д. М., Савицкая Н. Е., Попков С. И., Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Балаев Д. А.* 6 833
- 4.4 Общие вопросы физики фазовых переходов**
- О проводимости двумерной модели Рэлея в области фазового перехода металл-диэлектрик. *Балагуров Б. Я.* 3 358
- 5. Электронные свойства твердых тел**
- 5.1 Электронные свойства металлов и диэлектриков**
- Исследование особенностей когерентного магнитотранспорта в нанопроволоках InN в присутствии сканирующего затвора. *Жуков А. А., Фольк К., Шеперс Т.* 1 116
- Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC (0001). *Фильнов С. О., Рыбкина А. А., Тарасов А. В., Ерыженков А. В., Елисеев И. А., Давыдов В. Ю., Шикин А. М., Рыбкин А. Г.* 2 227
- Усреднение термоэлектрических сред: непрерывность термоэлектрического потенциала. *Старков А. С., Старков И. А.* 2 253
- 5.2 Сильно коррелированные электронные системы**
- Исследование особенностей когерентного магнитотранспорта в нанопроволоках InN в присутствии сканирующего затвора. *Жуков А. А., Фольк К., Шеперс Т.* 1 116
- Модуляция энергетической запрещенной зоны в точке Дирака в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi₂Te₄ как результат изменений поверхностного градиента потенциала. *Шикин А. М., Естюнин Д. А., Зайцев Н. Л., Глазкова Д. А., Климовских И. И., Фильнов С. О., Рыбкин А. Г., Кох К. А., Терещенко О. Е., Звездин К. А., Звездин А. К.* 1 126

- Формирование особенностей собственной энергии термическими флуктуациями сверхпроводящего параметра порядка. *Грошев А. Г., Аржников А. К.* 3 363
- Прогнозирование кинетики релаксации модуля сдвига при кристаллизации металлических стекол на основе калориметрических измерений. *Макаров А. С., Афонин Г. В., Цзиао Ц. Ч., Кобелев Н. П., Хоник В. А.* 3 373
- Влияние электрического тока на спиновую поляризацию электронов в материалах с неоднородной намагниченностью. *Бегенин Н. Г.* 5 737

5.3 Физика полупроводников

- Исследование особенностей когерентного магнитотранспорта в нанопроволоках InN в присутствии сканирующего затвора. *Жуков А. А., Фольк К., Шеперс Т.* 1 116
- Оптомеханическая лазерная генерация и доменные стенки, обусловленные экситон-фононным взаимодействием. *Юлин А. В., Пошакинский А. В., Поддубный А. Н.* .. 2 206
- Усреднение термоэлектрических сред: непрерывность термоэлектрического потенциала. *Старков А. С., Старков И. А.* 2 253

5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)

- Исследование особенностей когерентного магнитотранспорта в нанопроволоках InN в присутствии сканирующего затвора. *Жуков А. А., Фольк К., Шеперс Т.* 1 116
- Генерация высших гармоник в треугольных квантовых графеновых точках. *Авчян Б. Р., Казарян А. Г., Саргсян К. А., Седракян Х. В.* 2 155
- Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC (0001). *Фильнов С. О., Рыбкина А. А., Тарасов А. В., Ерыженков А. В., Елисеев И. А., Давыдов В. Ю., Шикин А. М., Рыбкин А. Г.* 2 227
- Активационный прыжковый транспорт в нематических проводящих аэрогелях. *Цебро В. И., Николаев Е. Г., Луганский Л. Б., Кутузов М. И., Хмельницкий Р. А., Тонких А. А., Харьковский А. И.* 2 266

- Равновесные киральные краевые токи спиновых подуровней Ландау. *Дорожкин С. И.* 5 760
- Анизотропная намагниченность пленки NbN. *Гохфельд Д. М., Савицкая Н. Е., Попков С. И., Кузьмичев Н. Д., Васютин М. А., Балаев Д. А.* 6 833
- Спиновый транспорт в полупроводниках InSb с различной плотностью электронного газа. *Виглин Н. А., Никулин Ю. В., Цвеллиховская В. М., Павлов Т. Н., Проглядо В. В.* 6 866
- Электронная структура и механические свойства Ti_5Si_3 . *Чумакова Л. С., Бакулин А. В., Кулькова С. Е.* 6 874

6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи

6.1 Статистическая физика

- Случайные блуждания с непрерывным временем при конечных концентрациях. *Шкилев В. П.* 1 104
- Новый класс фазовых переходов в водороде и дейтерии при наличии химических реакций ионизации и диссоциации. *Хомкин А. Л., Шумихин А. С.* 2 238
- Решение самоорганизованно-критической модели Манна для размерностей пространства 2–4. *Подлазов А. В.* 3 414
- Поиск перехода Байка–Бен Аруса–Пеше путем размерной редукции. *Валов А. Ф., Горский А. С., Нечаев С. К.* 3 430

6.2 Полимеры, жидкие кристаллы

- Поиск перехода Байка–Бен Аруса–Пеше путем размерной редукции. *Валов А. Ф., Горский А. С., Нечаев С. К.* 3 430

6.3 Физика биологических систем

- Волновые режимы электроконвекции при инъекции с катода и нагреве сверху. *Сморodin Б. Л.* 1 137
- К теории омических потерь в LC-системах. *Балагуров Б. Я.* 2 296

6.5 Динамика жидкостей

- Собственные колебания головной ударной волны и их взаимосвязь с магнитосферными резонансами. *Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Ванг Ч., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Блецки Я., Лежсен Л. А.* 3 381
- Волны Пуанкаре и волны Россби в сжимаемых течениях мелкой воды. *Юденкова М. А., Климачков Д. А., Петросян А. С.* 3 388
- Диагностика микрочастиц на поверхности воды. *Лебедева Е. В., Дюгаев А. М., Григорьев П. Д.* 5 767

6.6 Физика плазмы, термоядерный синтез

- Проблема повышения рабочей частоты в черенковских плазменных источниках электромагнитного излучения. *Карташов И. Н., Кузелев М. В.* 2 281
- Собственные колебания головной ударной волны и их взаимосвязь с магнитосферными резонансами. *Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Ванг Ч., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Блецки Я., Лежсен Л. А.* 3 381
- Ударная передача давления твердому веществу в мишени с пористым поглотителем излучения мощного лазерного импульса. *Белов И. А., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Вергунова Г. А., Воронин А. Ю., Гаранин С. Г., Головкин С. Ю., Гуськов С. Ю., Демченко Н. Н., Деркач В. Н., Дмитриев Е. О., Змитренко Н. В., Илюшечкина А. В., Кравченко А. Г., Кузьмин И. В., Кучугов П. А., Мюсова А. Е., Рогачев В. Г., Рукавишников А. Н., Соломатина Е. Ю., Стародубцев К. В., Стародубцев П. В., Чуэров И. А., Шаров О. О., Яхин Р. А.* ... 3 403

- Метод псевдоатомной молекулярной динамики для расчета коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии плотной плазмы. *Фальков А. Л., Лобода П. А., Овечкин А. А., Ивлиев С. В.* 3 438

- Особенности генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза. *Вергунова Г. А., Гуськов С. Ю., Вищев И. Ю., Грушин А. С., Ким Д. А., Соломянная А. Д.* 6 887

6.7 Вычислительная физика, сложные системы

- Волновые режимы электроконвекции при инъекции с катода и нагреве сверху. *Сморodin Б. Л.* 1 137

6.8 Общие вопросы физики нелинейных систем. Теоретическая и математическая физика

- Собственные колебания головной ударной волны и их взаимосвязь с магнитосферными резонансами. *Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Ванг Ч., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Блецки Я., Лежсен Л. А.* 3 381
- Поиск перехода Байка–Бен Аруса–Пеше путем размерной редукции. *Валов А. Ф., Горский А. С., Нечаев С. К.* 3 430
- Особенности динамики самовоздействия волновых пакетов с исходно нормальной дисперсией групповой скорости в нелинейных решетках. *Смирнов Л. А., Мионов В. А., Литвак А. Г.* 6 897

Главный редактор *А. И. Смирнов*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН,
канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ,
д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ
(зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании),
д-р физ.-мат. наук А. А. ЦЕЙТЛИН, акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова