#### РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

#### ПИСЬМА

 $\boldsymbol{B}$ 

### ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

#### том 114

Выпуск 1 10 июля 2021

Журнал издается под руководством Отделения физических наук РАН

Главный редактор В. М. Пудалов Заместители главного редактора Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией И.В.Подыниглазова

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница http://www.jetpletters.ru

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

<sup>©</sup> Российская академия наук, 2021

<sup>©</sup> Редколлегия журнала "Письма в ЖЭТФ" (составитель), 2021

# Effect of the parameterization of the distribution functions on the longitudinal structure function at small x

 $G. R. Boroun^{1)}$ 

Physics Department, Razi University, 67149 Kermanshah, Iran

Submitted 14 May 2021 Resubmitted 23 May 2021 Accepted 25 May 2021

DOI: 10.31857/S1234567821130012

I use a direct method to extract the longitudinal structure function in the next-to-leading order approximation with respect to the number of active flavor from the parametrization of parton distributions. The contribution of charm and bottom quarks corresponding to the gluon distributions (i.e.,  $G_{n_f=3}(x,Q^2)$  and  $G_{n_f=5}(x,Q^2)$ ) is considered. I compare the obtained longitudinal structure function at  $n_f = 4$  with the H1 data [1] and [2] and the result L. P. Kaptari et al. [3] which is based on the Mellin transforms. These calculations compared with the results from CT18 [4] parametrization model. The nonlinear effects on the gluon distribution improve the behavior of the longitudinal structure function in comparison with the H1 data and CT18 at low values of  $Q^2$ . In Figure 1, the Altarelli-Martinelli equation with Gribov-Levin-Ryskin and Mueller-Qiu (GLR-MQ) correction is used to evaluate the longitudinal structure function at low x and  $Q^2$ . As can be seen in this figure, the nonlinear correction is very important to slow down the longitudinal structure function behavior at low  $Q^2$  values. The evolutions of the nonlinear correction to  $F_L$  with  $Q^2$  at fixed value of the invariant mass W and the comparisons with the H1 data and CT18 are shown in this figure. The nonlinear effects of the longitudinal structure function are observable for  $x < x_0 = 0.01$  at hotspot point where gluons are populated across the proton as it is equal to  $\mathcal{R} \simeq 2 \text{ GeV}^{-1}$ . As can be seen, the nonlinear results at hot spot point at low and moderate  $Q^2$  values seem to be compatible with the H1 data and CT18 at NLO and NNLO approximations. Indeed he nonlinear corrections here are negative and result in a better agreement with data and parameterization method.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 0.1134/S0021364021130014

Fig. (Color online) The obtained longitudinal structure function  $F_L(x,Q^2)$  from the nonlinear gluon distribution as a function of variable  $Q^2$  at fixed value of the invariant mass W=230 GeV at hotspot point. The dashed and dashed-dot lines represent the CT18 [4] at the NNLO and NLO approximation respectively. The solid line represents nonlinear behavior of the longitudinal structure function at  $n_f=4$  within the NLO approximation. Experimental data are from the H1-Collaboration [1] as accompanied with total errors

- V. Andreev, A. Baghdasaryan, S. Baghdasaryan et al. (H1 Collaboration), Eur. Phys. J. C 74, 2814 (2014).
- F. D. Aaron, C. Alexa, V. Andreev et al. (H1 Collaboration), Eur. Phys. J. C 71, 1579 (2011).
- L. P. Kaptari, A. V. Kotikov, N. Yu. Chernikova, and P. Zhang, Phys. Rev. D 99, 096019 (2019).
- T.-J. Hou, J. Gao, T. J. Hobbs, K. Xie, S. Dulat, M. Guzzi, J. Huston, P. Nadolsky, J. Pumplin, C. Schmidt, I. Sitiwaldi, D. Stump, and C.-P. Yuan, Phys. Rev. D 103, 014013 (2021).

<sup>1)</sup> e-mail: grboroun@gmail.com; boroun@razi.ac.ir

# Search for a heavy neutrino in the mass range under 750 keV using electron capture in $^7\mathrm{Be}$

 $N. A. Likhovid, V. S. Pantuev^{1)}$ 

Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences, 117312 Moscow, Russia

Submitted 15 September 2020 Resubmitted 24 May 2021 Accepted 31 May 2021

DOI: 10.31857/S1234567821130024

Neutrinos are massive and this property cannot be accommodated in the Standard Model. The simplest mechanism to provide neutrino with mass assumes the existence of new particles – right handed (or "sterile") neutrinos. Their number, masses and mixing angles with left handed ("active") neutrinos, apart from the existing observational restrictions, are free parameters of the theory. Sterile neutrino in the keV mass range is one of the best motivated dark matter particle candidates. Therefore, studies of the sterile neutrino mass may probe a new physics. Currently there have been many attempts to search for such heavy neutrino directly in the laboratory [1]. Nucleus  $\beta$ -decay and electron K-capture are prominent channels to search for a heavy neutrino component [2, 3]. We present reanalysis of the experimental data of electron capture in <sup>7</sup>Be embedded in Ta which have been published in [4]. We decided to use these data for estimation of the possible admixture of a heavy neutrino in contrast to emission of the standard electron neutrino.

<sup>7</sup>Be is a two body decay with emitted neutrino and recoil <sup>7</sup>Li nucleus. <sup>7</sup>Be decays by electron capture from K- or L-orbit to  ${}^{7}Li$  ground or first excited state with Q value of about 862 keV. Thus, it has four possible channels: with a 89.5 % probability the decay is to <sup>7</sup>Li ground state and a neutrino with the total energy of 862 keV is emitted and the residual recoil nucleus gets  $57\,\mathrm{eV}$  kinetic energy; with a  $10.5\,\%$  probability the decay from K-shell may go to  ${}^{7}\mathrm{Li}$  excited state and the neutrino total energy is 384 keV. This decay is quickly followed by a wide angle gamma emission with energy of 478 keV. The recoil nucleus energy spectrum becomes wide; if the capture is from K-shell an Auger electron is emitted from L-shell and its energy of about 55 eV adds to decay signal with a total energy of 112 eV. It allows one to separate K- and L-capture peaks. The capture from L-shell to the exited state is followed by gamma

emission. As a result, the recoil nucleus spectrum has two similar parts: a prominent K line peak at  $112\,\mathrm{eV}$ with a wide distribution from 55 to 112 eV centered at about 80 eV when the decay goes to the excited state, and L line peak at 57 eV and a relevant wide distribution centered at about 30 eV for decays to the excited state. These features were clearly seen in papers [4] and [5]. We assume that the detector response can be described by a finite resolution with Gaussian shape, the width of which does not depend on recoil energy. Formally, an additional heavy neutrino component should demonstrate a similar recoil energy spectrum but shifted to the lower range. Thus, first of all, we should search for other K- and L-line peaks to the left of the main ones. Our analysis has the following steps: we digitize the published recoil spectrum from the plot, and fill our own histogram with the same bin size. Estimation of energy resolution by fitting by Gauss function the main K-line gives  $\sigma = 3.0 \,\text{eV}$ . We set moving energy interval with edges  $E_L$  and  $E_R$  about  $\pm 1$ –1.5  $\sigma$  to search for a signal. The actual interval width was slightly varying to get the optimal ratio between the potential signal and the underlying background with changing shape. Calculation of statistical error done by taking square root from the total number of events for each interval, Sum. Each Sum is corrected for potential missing counts in Gauss tails beyond the interval: dividing by  $K_{\text{erf}}$ , where  $K_{\text{erf}}$ is fraction of the Gauss function between  $E_L$  and  $E_R$ . Multiply the statistical error by 1.95 to get estimation at 95% confidence level (CL). This value is used to set a 95 % upper CL. We have to correct for probability to decay to ground state dividing by its probability (0.895) and for probability to decay in K-channel (0.935). Final cumulative estimation of the maximum statistically excluded number of heavy neutrino contribution is:

$$N_{\text{excl}} = 1.95 \cdot \sqrt{\text{Sum}} / (K_{\text{erf}} \times 0.895 \times 0.935).$$
 (1)

Dividing corrected value by total number of events in the spectrum minus gamma background,  $CL = N_{\text{excl}}/N$ ,

<sup>1)</sup>e-mail: pantuev@inr.ru

we get estimation of 95 % CL. A possible systematic error by assumption that the energy resolution or the shape of the peak are known with 10 % uncertainty translates to about 5 % of CL.

There is a simple relation between the measured energy E and the possible heavy neutrino mass, m:  $m^2 = Q^2 - 2E(Q+M)$ , M is recoil Li nucleus mass and  $Q = 862 \, \mathrm{keV}$ .

Taking into account the statistical significance, we get upper 95 % CL limits,  $U^2$ , for probability to find a heavy neutrino versus its mass, Fig. 1, thick solid line. At the same figure we plot all existing published data. New limits are at least one order of magnitude lower.

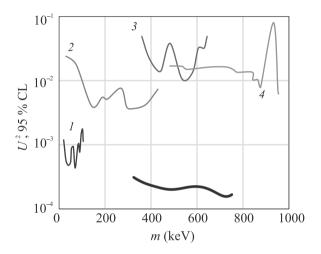


Fig. 1. (Color online) Upper 95 % CL limits,  $U^2$ , for probability to find a heavy neutrino versus its mass, thick solid line. Thin solid numbered lines are for published data: 1-[2]; 2-[3]; 3-[6]; 4-[7]

To conclude, we present our estimation of limits on search for a heavy right-handed (sterile) neutrino. We use the published high statistics data from [4] where they measured electron capture in <sup>7</sup>Be. Electron cap-

ture in  $^7\mathrm{Be}$  is a two body decay with emitted neutrino and recoil  $^7\mathrm{Li}$  nucleus. Neutrino mass defines the maximum energy released by  $^7\mathrm{Li}$ . After performing statistical analysis of the measured spectrum we get an upper 95 % CL in the mass range 300–750 keV. These limits are at least one order of magnitude lower than the existing published data.

This work is supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation under the contract 075-15-2020-778.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 0.1134/S002136402113004X

- R. Adhikari, M. Agostini, N. Anh Ky et al. (Collaboration), JCAP 1701, 025 (2017); doi:10.1088/1475-7516/2017/01/025; arXiv:1602.04816.
- E. Holzschuh, L. Palermo, H. Stussi, and P. Wenk, Phys. Lett. B 482, 1 (2000); doi:10.1016/S0370-2693(00)00476-7.
- K. Schreckenbach, G. Colvin, and F. von Feilitzsch, Phys. Lett. B 129, 265 (1983); doi:10.1016/0370-2693(83)90858-4.
- S. Fretwell, K. G. Leach, C. Bray, G. B. Kim, J. Dilling, A. Lennarz, X. Mougeot, F. Ponce, C. Ruiz, J. Stack-house, and S. Friedrich, Phys. Rev. Lett. 125(3), 032701 (2020); doi:10.1103/PhysRevLett.125.032701; arXiv:2003.04921 [nucl-ex].
- P. A. Voytas, C. Ternovan, M. Galeazzi, D. McCammon, J. J. Kolata, P. Santi, D. Peterson, V. Guimaraes,
   F. D. Becchetti, M. Y. Lee, T.W. O'Donnell,
   D. A. Roberts, and S. Shaheen, Phys. Rev. Lett. 88, 012501 (2002); doi:10.1103/PhysRevLett.88.012501.
- M. M. Hindi, Recep Avci, A. H. Hussein, R. L. Kozub,
   P. Mioinovi, and L. Zhu, Phys. Rev. C 58(4), 2512 (1998); doi:10.1103/PhysRevC.58.2512.
- M. Trinczek, A. Gorelov, D. Melconian et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. 90(1), 012501 (2003); doi:10.1103/PhysRevLett.90.012501.

# Теоретическое исследование реакций в трехчастичной $e^-e^+\bar{p}$ системе и сечения образования антиводорода

 $B. A. \Gamma$ радусов<sup>1)</sup>,  $B. A. Руднев^1$ , E. A. Яревский (1), C. Л. Яковлев (1)

Кафедра вычислительной физики, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 25 апреля 2021 г. После переработки 10 июня 2021 г. Принята к публикации 10 июня 2021 г.

Мы применяем новый высокоэффективный метод решения уравнений Фаддеева—Меркурьева для многоканальных расчетов сечения образования антиводорода при рассеянии антипротонов на основном и возбужденных состояниях позитрония. Наши результаты демонстрируют хорошее согласие с известными данными по полным и парциальным сечениям для всех каналов реакции. Используя умеренные вычислительные ресурсы, мы достигли очень высокого энергетического разрешения.

DOI: 10.31857/S1234567821130036

В ЦЕРН планируются и проводятся несколько экспериментов с антивеществом, использующих установку замедления антипротонов. Два из них, нацеленные на гравитационное поведение антивещества — AEgIS [1] и GBAR [2] — используют, среди прочего, трехтельную реакцию

$$\bar{p} + \mathrm{Ps} \to \overline{\mathrm{H}} + e^-$$
 (1)

образования антиводорода  $\overline{H}$  в процессе рассеяния антипротона  $\bar{p}$  на газе ридберговского позитрония (Ps) для получения частиц антивещества. Несмотря на то, что реакции перезарядки имеют долгую историю экспериментального и теоретического изучения, лишь некоторые подходы продемонстрировали определенный успех в изучении  $e^-e^+\bar{p}$  рассеяния в многоканальном глубоконеупругом режиме [3–8]. В частности, авторы [7, 8] обсуждали рост сечений образования антиводорода, происходящий прямо над порогами высоковозбужденных состояний позитрония, что представляет особый интерес как механизм увеличения скорости реакции образования антиводорода при производстве атомов антивещества.

Однако, теоретическое и вычислительное исследование этой реакции осложняется наличием множества околопороговых резонансов, дальнодействующих поляризационных взаимодействий во многих каналах, сложных вкладов множественных виртуальных возбуждений различной геометрии. В качестве примера чувствительной природы системы можно упомянуть осцилляции Гайлитиса—Дамбурга [9, 10],

которые возникают из-за дальнодействующего дипольного взаимодействия между возбужденным нейтральным атомом (либо  $\overline{\mathbf{H}}$ , либо  $\mathbf{P}\mathbf{s}$ ) и заряженной частицей ( $e^-$  или  $\bar{p}$ ). Все эти особенности системы делают снижение размерности проблематичным и требуют подхода, который учитывал бы динамику системы в полной размерности.

Из-за такой сложной природы системы количество надежных теоретических результатов остается ограниченным: известные результаты имеют недостаточное разрешение либо по энергии, либо по сечению, либо по обеим характеристикам. Имеется определенный недостаток данных о сечениях низкоэнергетического рассеяния  $e^-e^+\bar{p}$ , полученных независимыми подходами.

Мы предложили и реализовали подход к решению квантовой задачи трех тел, который сочетает в себе как теоретически обоснованную технику, так и вычислительно эффективный алгоритм [11]. Он основан на решении уравнений Фаддеева-Меркурьева (ФМ) [12], которые в представлении полного орбитального момента [13] сводятся к конечной системе трехмерных уравнений в частных производных. Это выгодно отличает наш подход от подхода работ [3-5], где разложение по биполярным гармоникам приводит к бесконечной системе двумерных интегродифференциальных уравнений. Наши более ранние расчеты [11] показали, что такой подход позволяет с высокой точностью вычислять энергии связи для состояний с высоким полным орбитальным моментом. Здесь мы применяем его к задачам рассеяния и выполняем серию расчетов сечений образования антиводорода для реакции (1). Мы сравниваем наши

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: v.gradusov@spbu.ru; v.rudnev@spbu.ru; e.yarevsky@spbu.ru; s.yakovlev@spbu.ru

результаты для сечений, обладающие высоким разрешением, с доступными данными для сечений образования антиводорода из работ [3–5, 14–16] для рассеяния антипротонов на основном и первом возбужденном состояниях позитрония как для полных, так и для парциальных сечений. В обоих случаях наши данные расширяют и подтверждают более ранние результаты.

Рассматривается система трех бесспиновых нерелятивистских заряженных частиц с массами  $m_{\alpha}$  и зарядами  $Z_{\alpha}$ ,  $\alpha=1,2,3$ . В дальнейшем, множество индексов  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  пробегает множество  $\{1, 2, 3\}$ , нумерующее частицы. Парой  $\alpha$  называется пара частиц  $\beta\gamma$ , дополнительная к частице  $\alpha$ . Положение частиц описывается набором координат. В системе координат центра масс стандартным выбором является набор координат Якоби. Для разбиения  $\alpha(\beta\gamma)$  они определены как векторы относительного положения между частицами пары  $\alpha$  и между их центром масс и частицей а. Удобно использовать приведенные координаты Якоби  $(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha})$ , которые являются векторами Якоби, масштабируемыми множителями  $\sqrt{2\mu_{\alpha}}$  и  $\sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}$  соответственно. Здесь приведенные массы равны

$$\mu_{\alpha} = \frac{m_{\beta} m_{\gamma}}{m_{\beta} + m_{\gamma}}, \qquad \mu_{\alpha(\beta\gamma)} = \frac{m_{\alpha} (m_{\beta} + m_{\gamma})}{m_{\alpha} + m_{\beta} + m_{\gamma}}.$$
 (2)

Для разных значений  $\alpha$  приведенные векторы Якоби связаны ортогональным преобразованием  $\mathbf{x}_{\beta} = c_{\beta\alpha}\mathbf{x}_{\alpha} + s_{\beta\alpha}\mathbf{y}_{\alpha}, \ \mathbf{y}_{\beta} = -s_{\beta\alpha}\mathbf{x}_{\alpha} + c_{\beta\alpha}\mathbf{y}_{\alpha}$  [12]. В дальнейшем, где необходимо, предполагается, что векторы Якоби  $\beta$  представлены через  $\alpha$ .

В приведенных координатах Якоби уравнения ФМ для трех заряженных частиц [12, 17] могут быть записаны как (полужирный шрифт используется для векторов):

$$\{T_{\alpha} + V_{\alpha}(x_{\alpha}) + V_{\beta}^{(1)}(x_{\beta}, y_{\beta}) + V_{3}(x_{3}, y_{3}) - E\} \times \psi_{\alpha}(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha}) = -V_{\alpha}^{(s)}(x_{\alpha}, y_{\alpha})\psi_{\beta}(\mathbf{x}_{\beta}, \mathbf{y}_{\beta}),$$

$$\alpha \neq \beta = 1, 2. \tag{3}$$

Здесь  $T_{\alpha} \equiv -\Delta_{\mathbf{x}_{\alpha}} - \Delta_{\mathbf{y}_{\alpha}}$  — операторы кинетической энергии. Потенциалы  $V_{\alpha}$  представляют собой парное кулоновское взаимодействие  $V_{\alpha}(x_{\alpha}) = \sqrt{2\mu_{\alpha}}Z_{\beta}Z_{\gamma}/x_{\alpha}$  ( $\beta, \gamma \neq \alpha$ ). Предполагается, что потенциал  $V_{3}$  — отталкивающий. Потенциалы  $V_{\alpha}$  расщепляются на внутреннюю (короткодействующую)  $V_{\alpha}^{(\mathrm{s})}$  и хвостовую (дальнодействующую) части  $V_{\alpha}^{(\mathrm{l})}$ 

$$V_{\alpha}(x_{\alpha}) = V_{\alpha}^{(s)}(x_{\alpha}, y_{\alpha}) + V_{\alpha}^{(l)}(x_{\alpha}, y_{\alpha}). \tag{4}$$

Уравнения (3) можно просуммировать, что приводит к уравнению Шредингера для волновой функции

 $\Psi = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}$ , где  $\psi_{\alpha}$  – компоненты волновой функции, заданные решением уравнений (3).

Расщепление (4) выполняется согласно  $V_{\alpha}^{(\mathrm{s})}(x_{\alpha},y_{\alpha})=\chi_{\alpha}(x_{\alpha},y_{\alpha})V_{\alpha}(x_{\alpha})$ , где функция срезки Меркурьева  $\chi_{\alpha}$  ограничивает короткодействующую часть потенциала областями в трехчастичном конфигурационном пространстве, соответствующими точке трехчастичного столкновения и парной конфигурации  $(x_{\alpha} \ll y_{\alpha}, \text{ когда } y_{\alpha} \to \infty)$  [12]. Следуя [18, 19], мы используем функцию срезки в двухчастичном конфигурационном пространстве пары  $\alpha$ :

$$\chi_{\alpha}(x_{\alpha}, y_{\alpha}) = \chi_{\alpha}(x_{\alpha}) = 2/\{1 + \exp[(x_{\alpha}/x_{0\alpha})^{2.01}]\}.$$
(5)

Параметр  $x_{0\alpha}$  в принципе может быть выбран произвольно, но его выбор изменяет свойства компонент  $\psi_{\alpha}$ , которые важны как с теоретической, так и с вычислительной точек зрения [20]. Его можно эффективно выбрать с помощью простого практического алгоритма, представленного в [19].

Процедура расщепления делает свойства уравнений  $\Phi$ М для кулоновских потенциалов так же подходящими для задач рассеяния, как стандартные уравнения  $\Phi$ аддеева в случае короткодействующих потенциалов [21]. Ключевым свойством уравнений  $\Phi$ М (3) является то, что правая часть каждого уравнения ограничена окрестностью точки тройного столкновения [20]. Это приводит к асимптотическому расщеплению системы уравнений  $\Phi$ М и, следовательно, асимптота каждой компоненты  $\psi_{\alpha}$  для энергий ниже порога развала содержит только члены, соответствующие бинарным конфигурациям в паре  $\alpha$  [20, 21]. Для полной энергии системы E ниже порога трехчастичной ионизации асимптота имеет вид

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha}) = \chi_{\mathbb{A}_{0}}(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha})\delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_{0}} + \Xi_{\alpha}(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha}), \quad (6)$$

где рассеянная волна имеет вид

$$\Xi_{\alpha}(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha}) = \sum_{n\ell m} \frac{\phi_{A}(x_{\alpha})}{x_{\alpha}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_{\alpha}) \sqrt{\frac{p_{n_{0}}}{p_{n}}} \times \times \widetilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}, \mathbb{A}_{0}}(\hat{\mathbf{y}}_{\alpha}, \mathbf{p}_{n_{0}}) \frac{e^{i(p_{n}y_{\alpha} - \eta_{n} \log(2p_{n}y_{\alpha}))}}{y_{\alpha}}.$$
 (7)

Здесь  $Y_{\ell m}$  обозначает стандартную сферическую гармонику. Мультииндекс  $\mathbb{A}=\{Am\}=\{\alpha n\ell m\}$  задает каналы рассеяния, т.е. различные связанные кулоновские состояния двух тел в паре  $\alpha$  с волновой функцией  $\phi_A(x_\alpha)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)/x_\alpha$  и энергией  $\varepsilon_n$ . Импульс  $p_n$  улетающей частицы определяется условием сохранения энергии  $E=p_n^2+\varepsilon_n$ , а параметр Зоммерфельда определяется как  $\eta_n\equiv Z_\alpha(Z_\beta+$ 

 $+Z_{\gamma})\sqrt{2m_{\alpha(\beta\gamma)}}/(2p_n)$ . Начальный канал задается падающей волной

$$\chi_{\mathbb{A}_0}(\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{y}_{\alpha}) = \frac{\phi_{A_0}(x_{\alpha})}{x_{\alpha}} Y_{\ell_0 m_0}(\hat{\mathbf{x}}_{\alpha}) e^{i(\mathbf{p}_{n_0}, \mathbf{y}_{\alpha})} e^{-\pi \eta_{n_0}/2} \times \\ \times \Gamma(1 + i\eta_{n_0})_1 F_1(-i\eta_{n_0}, 1, i(p_{n_0}y_{\alpha} - (\mathbf{p}_{n_0}, \mathbf{y}_{\alpha}))), \quad (8)$$

где  $_1F_1$  – конфлюэнтная гипергеометрическая функция [22]. Амплитуда бинарного рассеяния

$$\mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_{\alpha}, \mathbf{p}_{n_0}) = \mathcal{A}_{\mathcal{C}}(\hat{\mathbf{y}}_{\alpha}, \mathbf{p}_{n_0}) + \widetilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A},\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_{\alpha}, \mathbf{p}_{n_0}) \quad (9)$$

соответствует переходу от начального бинарного канала  $\mathbb{A}_0$  к бинарному каналу  $\mathbb{A}$ . Здесь  $\mathcal{A}_{\mathrm{C}}$  – стандартная двухчастичная кулоновская амплитуда рассеяния [23]. Сечение рассеяния определяется выражением

$$\sigma_{AA_0} = \frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}(2\ell_0 + 1)} \times \times \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{m_0=-\ell_0}^{\ell_0} \int d\hat{\mathbf{y}}_{\alpha} \left| \mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_{\alpha}, \mathbf{p}_{A_0}) \right|^2.$$
 (10)

Добавляя граничные условия (6)–(8) к уравнениям ФМ (3), получаем краевую задачу, которую можно решить численно. Однако каждое уравнение (3) является шестимерным уравнением в частных производных. Чтобы сделать вычисления возможными, уравнения упрощаются путем проецирования (3) на подпространство с заданным полным орбитальным моментом [13], который является интегралом движения для рассматриваемых здесь процессов. Для этого вводятся более подходящие кинематические координаты  $(X_{\alpha}, \Omega_{\alpha})$  в шестимерном конфигурационном пространстве задачи. Координаты  $X_{\alpha}$  =  $=\{x_{\alpha},y_{\alpha},z_{\alpha}=\cos\theta_{\alpha}\equiv(\mathbf{x}_{\alpha},\mathbf{y}_{\alpha})/(x_{\alpha}y_{\alpha})\}$  определяют положение частиц в содержащей их плоскости. Три остальные координаты  $\Omega_{\alpha} = \{\phi_{\alpha}, \vartheta_{\alpha}, \varphi_{\alpha}\}$  определяют положение плоскости в пространстве. Это стандартные углы Эйлера поворота некоторой лабораторной системы координат в связанную с частицами систему координат [24], в которой вектор  $\mathbf{x}_{\alpha}$  расположен вдоль оси z, а вектор  $\mathbf{y}_{\alpha}$  лежит в правой половине плоскости xz. Компоненты  $\Phi M$  в новых координатах раскладываются как

$$\psi_{\alpha}(X_{\alpha}, \Omega_{\alpha}) = \sum_{L=0}^{+\infty} \sum_{\tau=\pm 1}^{\infty} \sum_{M=-L}^{L} \sum_{M'=M_0}^{L} (1 - z_{\alpha}^2)^{M'/2}$$

$$\frac{\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_{\alpha})}{x_{\alpha} y_{\alpha}} F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_{\alpha}). \tag{11}$$

Здесь  $M_0 = (1 - \tau)/2$ , а функции

$$F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2 + 2\delta_{M'0}}} \times \left(D_{MM'}^{L}(\Omega_{\alpha}) + \tau(-1)^{M'}D_{M,-M'}^{L}(\Omega_{\alpha})\right)$$
(12)

являются линейными комбинациями D-функций Вигнера  $D^L_{MM'}$  [24, 25]. Функция  $F^{L\tau}_{MM'}$  является общей собственной функцией квадрата полного орбитального момента, его проекции и операторов пространственной инверсии [13, 25] с собственными значениями L(L+1), M и  $\tau$ . Множитель  $(1-z_{\alpha}^2)^{M'/2}$  в (11) вводится, чтобы сделать парциальные компоненты  $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$  и их производные неособыми в  $z_{\alpha}=\pm 1$  [11, 26]. Теперь, подставляя ряд (11) в уравнения  $\Phi$ M (3), записанные в новых координатах  $(X_{\alpha}, \Omega_{\alpha})$ , и проецируя полученные уравнения на функции  $F^{L\tau}_{MM'}$ , получаем конечный набор трехмерных уравнений для парциальных компонент  $\psi^L_{\alpha MM'}(X_{\alpha})$ 

$$\begin{split} \left[T_{\alpha M M'}^{L\tau} + V_{\alpha}(x_{\alpha}) + V_{\beta}^{(1)}(x_{\beta}, y_{\beta}) + \\ + V_{3}(x_{3}, y_{3}) - E\right] \psi_{\alpha M M'}^{L\tau}(X_{\alpha}) + \\ + T_{\alpha M, M'-1}^{L\tau-} \psi_{\alpha M, M'-1}^{L\tau}(X_{\alpha}) + \\ T_{\alpha M, M'+1}^{L\tau+} \psi_{\alpha M, M'+1}^{L\tau}(X_{\alpha}) = \\ = -\frac{V_{\alpha}^{(s)}(x_{\alpha}, y_{\alpha})}{(1 - z_{\alpha}^{2})^{\frac{M'}{2}}} \frac{x_{\alpha} y_{\alpha}}{x_{\beta} y_{\beta}} \sum_{M''=M_{0}}^{L} \frac{(-1)^{M''-M'} 2}{\sqrt{2 + 2\delta_{M''0}}} \times \\ \times F_{M''M'}^{L\tau}(0, w_{\beta \alpha}, 0)(1 - z_{\beta}^{2})^{\frac{M''}{2}} \psi_{\beta M M''}^{L\tau}(X_{\beta}). \quad (13) \end{split}$$

Операторы кинетической энергии имеют вид

$$T_{\alpha M M'}^{L\tau} = -\frac{\partial^2}{\partial y_{\alpha}^2} + \frac{1}{y_{\alpha}^2} \left( L(L+1) - 2M'^2 \right) - \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha}^2} - \left( \frac{1}{y_{\alpha}^2} + \frac{1}{x_{\alpha}^2} \right) \left( (1 - z_{\alpha}^2) \frac{\partial^2}{\partial z_{\alpha}^2} - 2(M'+1) z_{\alpha} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha}} - M'(M'+1) \right), \tag{14}$$

$$T_{\alpha M, M'+1}^{L\tau+} = \frac{1}{y_{\alpha}^2} \lambda^{L, M'} \sqrt{1 + \delta_{M'0}} \times \left[ -(1 - z_{\alpha}^2) \frac{\partial}{\partial z_{\alpha}} + 2(M' + 1) z_{\alpha} \right],$$

$$T_{\alpha M, M'-1}^{L\tau-} = \frac{1}{y_{\alpha}^2} \lambda^{L, -M'} \sqrt{1 + \delta_{M'1}} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha}}.$$
 (15)

Здесь  $\lambda^{LM'} = \sqrt{L(L+1) - M'(M'+1)}$ . Кинематический угол  $w_{\beta\alpha}$  связан с преобразованием координат  $(X_{\alpha}, \Omega_{\alpha})$  с разными  $\alpha$ . Он дается выражением

$$w_{\beta\alpha} = \begin{cases} \arccos \frac{-s_{\beta\alpha}y_{\alpha}z_{\alpha} + c_{\beta\alpha}x_{\alpha}}{x_{\beta}}, \\ \text{если } (\beta - \alpha) \mod 3 = 2, \\ 2\pi - \arccos \frac{-s_{\beta\alpha}y_{\alpha}z_{\alpha} + c_{\beta\alpha}x_{\alpha}}{x_{\beta}}, \text{ иначе,} \end{cases}$$
(16)

Письма в ЖЭТФ том 114 вып. 1-2 2021

в котором подразумевается, что областью значений агссоя является интервал  $[0,\pi]$ . Полученные уравнения называются (3D) уравнениями ФМ в представлении полного орбитального момента. Важнейшим свойством системы (13) является тот факт, что уравнения на парциальные компоненты  $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$  с различающимися индексами L, M и  $\tau$  образуют независимые системы уравнений. Это непосредственное следствие того, что для рассматриваемых нами трехчастичных систем полный орбитальный момент, его проекция и пространственная четность сохраняются. При данных L, M и au система (13) состоит из  $3(L-M_0+1)$  трехмерных уравнений в частных производных. Парциальные компоненты  $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$  должны удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых  $x_{\alpha} = 0, y_{\alpha} = 0.$ 

Асимптотические граничные условия на парциальные компоненты  $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$  принимают вид суммы

$$\psi_{\alpha M M'}^{L\tau}(X_{\alpha}) = \chi_{\mathbb{A}_{\alpha} M M'}^{L\tau}(X_{\alpha}) \delta_{\mathbb{A} \mathbb{A}_{0}} + \Xi_{\alpha M M'}^{L\tau}(X_{\alpha}) \quad (17)$$

парциальных компонент падающей и рассеянной волн, определенных равенствами (6)–(8). Они могут быть получены проецированием (7) и (8) на функции  $F_{MM}^{L\tau}$ . Если лабораторная система координат выбрана таким образом, что вектор  $\mathbf{p}_{n_0}$  расположен в ней вдоль оси z, парциальная компонента падающей волны дается выражением

$$\chi_{\mathbb{A}_{0}MM'}^{L}(X_{\alpha}) = \delta_{-M,m_{0}} \frac{(-1)^{M} \sqrt{(2\ell_{0}+1)}}{p_{n_{0}}\sqrt{2+2\delta_{M'0}}} \phi_{A_{0}}(x_{\alpha}) \times \\ \times \sum_{\lambda=|L-\ell_{0}|}^{L+\ell_{0}} \sqrt{2\lambda+1} i^{\lambda} e^{i\sigma_{\lambda}(\eta_{n_{0}})} F_{\lambda}(\eta_{n_{0}}, p_{n_{0}}y_{\alpha}) \times \\ \times \frac{Y_{\lambda M'}(\theta_{\alpha}, 0)}{(1-z_{\alpha}^{2})^{\frac{M'}{2}}} C_{\lambda, 0, \ell_{0}, M}^{L, M} C_{\lambda, M', \ell_{0}, 0}^{L, M'} \left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell_{0}-L}\right),$$

$$(18)$$

где кулоновский фазовый сдвиг  $\sigma_{\lambda}(\eta_{n_0})=\arg\Gamma(1+\lambda+i\eta_{n_0}),\;F_{\lambda}$  – регулярная кулоновская функция [23], а  $C^{j,m}_{j1,m1,j2,m2}$  обозначают коэффициенты Клебша–Гордана. Парциальная компонента рассеянной волны имеет вид

$$\Xi_{\alpha M M'}^{L\tau}(X_{\alpha}) = \delta_{M,-m_0} \frac{(-1)^M}{\sqrt{4\pi(2+2\delta_{M'0})}} \sum_{n\ell} \sqrt{2\ell+1} \times \phi_A(x_{\alpha}) e^{i(p_n y_{\alpha} - \eta_n \log(2p_n y_{\alpha}))} \sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell} \frac{Y_{\lambda M'}(\theta_{\alpha}, 0)}{(1-z_{\alpha}^2)^{\frac{M'}{2}}} \times \sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}} \widetilde{\mathcal{A}}_{A\mathbb{A}_0}^{L\lambda} C_{\lambda, M', \ell, 0}^{L, M'} \left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}\right).$$
 (19)

Парциальная амплитуда  $\widetilde{\mathcal{A}}_{A\mathbb{A}_0}^{L\lambda}$  связана с коэффициентами разложения амплитуды  $\widetilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_{\alpha})$  в ряд по сферическим гармоникам. Можно показать, что сечение рассеяния  $\sigma_{AA_0}$ , определенное равенством (10), может быть выражено формулами

$$\sigma_{AA_0} = \sum_{L=0}^{+\infty} \sigma_{AA_0}^L,$$

$$\sigma_{AA_0}^L = \frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}} \frac{1}{2\ell_0 + 1} \sum_{m_0 = -\ell_0}^{\ell_0} \sum_{\lambda = |L-\ell|}^{L+\ell} \left| \mathcal{A}_{A\mathbb{A}_0}^{L\lambda} \right|^2, (20)$$

где  $\sigma^L_{AA_0}$  — парциальные сечения рассеяния, через парциальные компоненты полной амплитуды

$$\mathcal{A}_{A\mathbb{A}_{0}}^{L\lambda} = \widetilde{\mathcal{A}}_{A\mathbb{A}_{0}}^{L\lambda} + \delta_{AA_{0}} \times \frac{\sqrt{\pi(2\lambda+1)}}{\mathrm{i}p_{n_{0}}} \left( \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\sigma_{\lambda}(\eta_{n_{0}})} - 1 \right) C_{\lambda,0,\ell_{0},-m_{0}}^{L,-m_{0}}. \tag{21}$$

Вычитая падающую волну из компонент ФМ, получаем неоднородные уравнения (13). Их решение должно удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых  $x_{\alpha} = 0, y_{\alpha} = 0$  и быть асимптотически равным расходящейся волне (19). Полученная таким образом граничная задача решается численно методом сплайн-коллокации. Численная схема описана в работе [11], где заинтересованный читатель может найти ее детальное описание. Для постановки граничного условия в виде расходящихся волн мы используем гибридный базис, который получается добавлением расходящихся волн в набор базисных сплайнов по переменной  $y_{\alpha}$ . Каждая дополнительная базисная функция имеет вид нерегулярной кулоновской функции [23]  $u_{\ell}^{+}(\eta_{n}, p_{n}y_{\alpha})$  в асимптотической области, а в остальной части интервала решения является полиномом, подобранным таким образом, что он удовлетворяет нулевым граничным условиям типа Дирихле в начале координат и обеспечивает требуемую непрерывность базисной функции. Использование гибридного базиса, с одной стороны, обеспечивает выполнение граничного условия в виде расходящихся волн. С другой стороны, это уменьшает требуемое для получения решения с заданной точностью количество базисных функций, поскольку дополнительные функции достаточно хорошо описывают поведение решения при больших  $y_{\alpha}$ .

Для получения представленных в статье результатов мы вычисляли сечения рассеяния с точностью не хуже 1%. Бинарные процессы рассеяния обозначаются начальным и конечным состояниями атома. Например,  $Ps(1) \to \overline{H}(2)$  означает процесс образования возбужденного антиводорода с n=2 (s и p

состояния) при рассеянии антипротона на основном (n=1) состоянии позитрония. В энергетической области интервала Оре (между порогами состояний  $\mathrm{Ps}(1)$  и  $\overline{\mathrm{H}}(2)$ ), в которой возможны прямой процесс и перестройка с атомами антиводорода и позитрония в начальном и конечном состояниях, мы рассчитали парциальные сечения рассеяния с L=0-9. Парциальные и суммарное сечения рассеяния представлены в табл. 1, на рис. 1 и 2. Значения сравниваются с результатами, полученными другими авторами.

**Таблица 1.** Полные сечения рассеяния (в единицах  $\pi a_0^2$ ), полученные суммированием парциальных сечений до указанного значения полного момента L в энергетической области Ps(1)— $\overline{H}(2)$  в сравнении с результатами других авторов

			_	
E, a.e.	-0.22947	-0.21832	-0.17955	-0.13828
$\sigma_{\mathrm{Ps}(1)\to\mathrm{Ps}(1)}^{L\leq 4}$	22.1	20.6	18.8	17.4
[14]	21.95	20.64	18.88	17.23
[15]	22.00	20.57	19.16	18.20
$\sigma^{L\leq 4}_{\mathrm{Ps}(1)\to \overline{\mathrm{H}}(1)}$		3.31	3.81	4.02
[16]		3.2943	3.7858	4.0551
[15]		3.250	3.779	4.076
$\sigma^{L\leq 9}_{\mathrm{Ps}(1)\to \overline{\mathrm{H}}(1)}$		3.31	3.82	4.07
[16]		3.2949	3.9795	4.1043

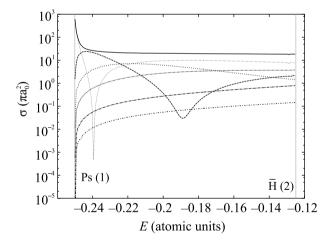


Рис. 1. Парциальные и полное упругие сечения рассеяния (в единицах  $\pi a_0^2$ ) антипротона на позитронии в области энергий  $\mathrm{Ps}(1) - \overline{\mathrm{H}}(2)$ . Полное сечение рассеяния получено суммированием парциальных сечений с L=0–9. Типы линий и парциальные/полные сечения рассеяния: тонкая пунктирная – L=0; штриховая – L=1; разреженная штриховая – L=2; пунктирная – L=3; штрихпунктирная – L=5; разреженная штрихлунктирная – L=5; сплошная – полное

Сравнение наших результатов с результатами других авторов в области энергий выше порога возбужденного состояния антиводорода  $\overline{H}(2)$  приводит-

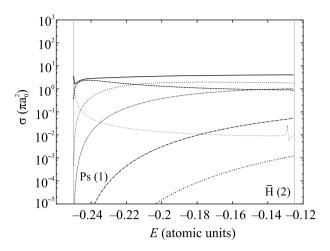


Рис. 2. Парциальные и полное сечения (в единицах  $\pi a_0^2$ ) образования антиводорода в энергетической области  $\mathrm{Ps}(1)$ – $\overline{\mathrm{H}}(2)$ . Полное сечение рассеяния получено суммированием парциальных сечений с L=0–9. Типы линий и парциальные/полные сечения рассеяния: тонкая пунктирная – L=0; штриховая – L=1; разреженная штриховая – L=3; штрихлунктирная – L=5; разреженная штрихпунктирная – L=5; сплошная – полное

ся в табл. 2 и 3. Хотя в целом совпадение результатов

**Таблица 2.** Парциальные сечения расссеяния (в единицах  $\pi a_0^2$ ) в области энергий  $\overline{\rm H}(2)$ –Ps(2) в сравнении с результатами других авторов

			г	
E, a.e.	-0.11473	-0.09973	-0.08473	-0.07973
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1) \to \mathrm{Ps}(1)}$	7.10	6.44	5.82	5.63
[14]	7.09	6.44	5.83	5.63
[27]		6.45		
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1) \to \mathrm{Ps}(1)}$	2.26	2.53	2.79	2.87
[14]	2.28	2.54	2.64	2.87
[27]		2.51		
$\sigma^2_{\mathrm{Ps}(1) \to \mathrm{Ps}(1)}$	1.24	1.03	0.862	0.817
[14]	1.16	1.01	0.929	0.790
[27]		1.02		
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	0.00801	0.00758	0.00719	0.00704
[14]	0.00815	0.00780	0.00729	0.00715
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(1)}$	0.860	0.807	0.757	0.741
[14]	0.858	0.805	0.742	0.739
$\sigma^2_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(1)}$	1.76	1.67	1.59	1.56
[14]	1.77	1.69	1.57	1.58
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.0844	0.0952	0.107	0.113
[14]	0.0884	0.0927	0.105	0.114
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.273	0.630	0.854	0.908
[14]	0.268	0.632	1.05	0.910

хорошее, наблюдаются некоторые достаточно значительные расхождения значений сечений, связанных

их авторов				
E, a.e.	-0.06228	-0.06198	-0.06123	-0.05978
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1,2)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	0.169	0.078	0.037	0.022
[3]	0.282	0.097	0.047	0.030
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1,2)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	3.67	1.98	1.20	0.944
[3]	3.373	1.783	1.130	0.886
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.106	0.105	0.104	0.103
[3]	0.125	0.116	0.112	0.107
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.999	0.995	0.993	0.992
[3]	1.041	1.042	1.015	1.040
$\sigma^0_{\text{Ps}(2) \to \overline{\text{H}}(2)}$	184	79.9	34.0	16.9
[16]	218.84	76.701	32.481	17.201
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(2) \to \overline{\mathrm{H}}(2)}$	479	229	102	50.1
[4.0]	400 05	222 22	404.04	

**Таблица 3.** Парциальные сечения рассеяния (в единицах  $\pi a_0^2$ ) в области энергий Ps(2)- $\overline{H}(3)$  в сравнении с результатами других авторов

с возбужденным позитронием, особенно при энергиях чуть выше порога Ps(2). Можно сделать вывод, что получение с хорошей точностью сечений рассеяния с возбужденным позитронием в начальном или конечном состояниях является достаточно сложной задачей как с теоретической, так и вычислительной точек зрения. Сложность связана с тем обстоятельством, что область взаимодействия позитрония и антипротона в этом случае увеличена как за счет медленно убывающей волновой функции возбужденного позитрония, так и за счет дальнодействующего дипольного взаимодействия между позитронием и антипротоном [14].

На рисунках 3 и 4 представлены некоторые парциальные сечения образования антиводорода. На них в сечении  $\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1) \to \overline{\mathrm{H}}(2)}$  можно обнаружить несколько резонансов Фешбаха.

Резюмируя, мы рассчитали сечения рассеяния процесса образования антиводорода посредством реакции (1) в области энергий как ниже, так и выше порога первого возбужденного состояния позитрония. В будущем мы планируем распространить наши вычисления на области энергии, в которых возможны более высокие возбужденные состояния позитрония.

Работа В. А. Градусова поддержана Российским научным фондом (проект номер 19-72-00076).

Исследования были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра "Вычислительный центр СПбГУ" (http://cc.spbu.ru).

1. G. Testera, S. Aghion, C. Amsler, et al. (AEgIS Collaboration), Hyperfine Interactions 233, 13 (2015).

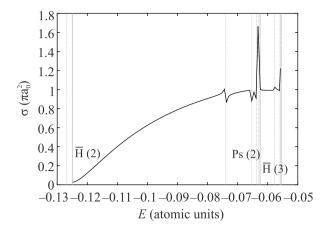


Рис. 3. Сечение образования антиводорода  $\sigma^1_{Ps(1)\to\overline{H}(2)}$ . Вертикальными штриховыми линиями показаны положения резонансов [28–31]

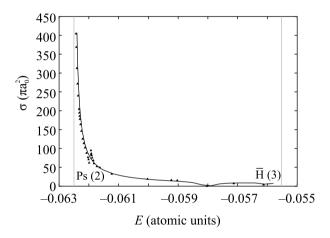


Рис. 4. Сечение образования антиводорода  $\sigma^0_{\mathrm{Ps}(2) \to \overline{\mathrm{H}}(1,2)}$ . Черными треугольниками отмечены точки, соответствующие работе [5] (получены в частном порядке от доктора Р. Лазаускаса)

- 2. P. Pérez, D. Banerjee, F. Biraben et al. (Collaboration), Hyperfine Interactions 233, 21 (2015).
- 3. C.-Y. Hu and D. Caballero, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 3879 (2002).
- C.-Y. Hu, D. Caballero, and Z. Papp, Phys. Rev. Lett. 88, 063401 (2002).
- M. Valdes, M. Dufour, R. Lazauskas, and P.-A. Hervieux, Phys. Rev. A 97, 012709 (2018).
- C. M. Rawlins, A. S. Kadyrov, A. T. Stelbovics, I. Bray, and M. Charlton, Phys. Rev. A 93, 012709 (2016).
- A. S. Kadyrov, I. Bray, M. Charlton, and I. I. Fabrikant, Nat. Commun. 8, 1544 (2017).
- 8. D. Krasnicky, G. Testera, and N. Zurlo, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **52**, 115202 (2019).
- 9. М. Гайлитис, Р. Дамбург, ЖЭТФ 44, 1644 (1963).
- M. Gailitis and R. Damburg, Proc. Phys. Soc. 82, 192 (1963).

- 11. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, E. A. Yarevsky, and S. L. Yakovlev, Commun. Comput. Phys. **30**, 255 (2021).
- 12. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория* рассеяния для систем нескольких частии, Наука, М. (1985).
- V. V. Kostrykin, A. A. Kvitsinsky, and S. P. Merkuriev, Few Body Syst. 6, 97 (1989).
- C.-Y. Hu, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 32, 3077 (1999).
- 15. T. T. Gien, Phys. Rev. A 56, 1332 (1997).
- C.-Y. Hu, D. Caballero, and Z. Hlousek, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 34, 331 (2001).
- 17. S. P. Merkuriev, Ann. Phys. 130, 395 (1980).
- 18. V.A. Gradusov, V.A. Roudnev, and S.L. Yakovlev, Atoms 4, 9 (2016).
- V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, E. A. Yarevsky, and S. L. Yakovlev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 055202 (2019).
- 20. С. Л. Яковлев, З. Папп, ТМФ 163, 314 (2010).
- Z. Papp, C.-Y. Hu, Z. T. Hlousek, B. Kónya, and S. L. Yakovlev, Phys. Rev. A 63, 062721 (2001).

- 22. NIST Digital Library of Mathematical Functions (http://dlmf.nist.gov/, 2019).
- А. Мессиа, Квантовая механика, Наука, М. (1978), т. 1.
- 24. Д. А. Варшалович, В. К. Херсонский, Е. В. Орленко, А. Н. Москалев, *Квантовая теория углового момента и ее приложения*, Физматлит, М. (2017), т. 1.
- 25. Л. Биденхарн, Дж. Лаук, Угловой момент в квантовой физике, Мир, М. (1984), т. 1.
- A. Scrinzi, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29, 6055 (1996).
- J. Mitroy and K. Ratnavelu, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 28, 287 (1995).
- 28. Y.K. Ho and Z.-C. Yan, Phys. Rev. A **70**, 032716 (2004).
- K. Varga, J. Mitroy, J. Zs. Mezei, and A. T. Kruppa, Phys. Rev. A 77, 044502 (2008).
- R.-M. Yu, Y.-J. Cheng, L.-G. Jiao, and Y.-J. Zhou, Chin. Phys. Lett. 29, 053401 (2012).
- M. Umair and S. Jonsell, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47, 225001 (2014).

### Скейлинг для сечений образования К-вакансий при атомных столкновениях

 $A. H. Зиновьев^{1)}, \Pi. Ю. Бабенко, A. П. Шергин$ 

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

> Поступила в редакцию 24 мая 2021 г. После переработки 7 июня 2021 г. Принята к публикации 8 июня 2021 г.

Предложена универсальная зависимость (скейлинг) для оценки сечений образования К-вакансий при столкновениях ионов и атомов кэВ-энергий. Скейлинг базируется на результатах исследования спектров неупругих потерь энергии и сечений эмиссии характеристических Оже-электронов и излучения при распаде К-вакансий. Для столкновений атомов с Z>10 предложена формула, объясняющая процесс ионизации К-оболочки переходами, обусловленными супервыдвижением термов. Скейлинг позволяет оценить сечения образования К-вакансий для неисследованных случаев атомных столкновений, тем самым оценить возможные электронные тормозные потери при прохождении ионов через твердое тело, а также может использоваться для диагностики состава вещества при ионном облучении.

DOI: 10.31857/S1234567821130048

Столкновения в диапазоне кэВ-энергий соударения относятся к так называемым медленным столкновениям, когда скорость сближения сталкивающихся атомов меньше орбитальных скоростей электронов. Как следствие, в момент столкновения формируется квазимолекула, уровни которой перестраиваются по мере сближения и разлета частиц. В недавних работах [1–6] основное внимание уделяется коррелированным переходам и каскадам при распаде Квакансий, а также образованию К-вакансий в релятивистском случае.

Разработка скейлинга для расчета сечений образования К-вакансий представляет интерес для анализа состава вещества при ионном облучении и для расчетов торможения частиц в веществе. В реальности имеют место быть два принципиально различающихся случая образования К-вакансий:

- 1) при наличии вакансии на  $2p\pi$ -орбитали до столкновения К-вакансия образуется вследствие вращательных переходов в пределе объединенного атома с  $2p\sigma$  на  $2p\pi$ -орбиталь. Для этого случая может быть предложен скейлинг для сечения образования К-вакансий по аналогии с разработанным авторами скейлингом для образования L-вакансий [7]. К возможности уточнения описания в этом случае мы вернемся ниже;
- 2) при столкновениях атомов и ионов с Z > 10 $2p\pi$ -орбиталь заполнена и переходы с  $2p\sigma$  на  $2p\pi$ -

орбиталь невозможны. Делались неоднократные попытки [8–10] предложить эмпирические скейлинги для образования К-вакансий для этого случая. Однако сами авторы указывали на отсутствие теоретического объяснения данного явления. Рассмотрению возможного, с нашей точки зрения, механизма образования К-вакансий в столкновениях, когда  $2p\pi$ -орбиталь заполнена, посвящена следующая часть данной работы.

В работе [11] исследовалось поведение термов квазимолекулы в комплексной плоскости межъядерных расстояний. Было обнаружено существование точек ветвления, связывающих различные термы. В рамках этой теории вероятность перехода электрона в континуум рассчитывается как интеграл по обходу точек ветвления. В работе [12] в рамках указанной теории было предложено выражение для сечения испускания электрона с энергией E:

$$\sigma(E) = \frac{4\pi |R(E)|^2 \operatorname{Im} R(E)}{\alpha(E)} \exp\left(-\frac{\alpha(E)}{v}\right),$$

$$\alpha(E) = 2\int_{E_{-}}^{E} \operatorname{Im} R(\varepsilon) d\varepsilon,$$
(1)

где R(E) – функция обратная зависимости рассматриваемого терма E(R) от межъядерного расстояния

<sup>1)</sup>e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

R, v — скорость соударения,  ${\rm Im}\,R(E)$  — мнимая часть зависимости R(E).

Проинтегрируем данное выражение по энергиям испущенного электрона и найдем сечение ионизации  $\sigma_i$  рассматриваемого терма:

$$\sigma_i = \int_{0}^{\infty} \sigma(\varepsilon) d\varepsilon =$$

$$= \int_{0}^{\infty} \frac{4\pi |R(E)|^{2} \operatorname{Im} R(E)}{\alpha(E)} \exp\left(-\frac{\alpha(E)}{v}\right) dE.$$

Принимая во внимание, что  $2 \cdot \operatorname{Im} R(E) \cdot dE = d\alpha$ , можно заменить переменную

$$\sigma_i = \int_{\alpha(0)}^{\infty} 2\pi |R[E(\alpha)]|^2 \frac{v}{\alpha} \exp\left(-\frac{\alpha}{v}\right) d\alpha.$$

Интеграл приближенно вычисляется методом перевала

$$\sigma_i = 2\pi R_0^2 \frac{v}{\alpha(0)} \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{v}\right). \tag{2}$$

Поясним значения переменных. Введем зависимость терма от межъядерного расстояния R.

$$E = -U_0 \left[ 1 + \left( \frac{R}{R_0} \right)^m \right].$$

Тогда  $\alpha(0) \approx 2\frac{m}{m+1} \cdot U_0 \cdot \text{Im } R_0$ . Рассмотрим ионизацию терма  $2p\sigma$  при столкновениях p-H, в этом случае m=2,  $U_0=0.5$  а.е. (в атомных единицах) — энергия терма в пределе объединенного атома. Положение точки квазипересечения терма  $2p\sigma$  с континуумом было вычислено в работе [13], при этом  $\text{Im } R_0(p-H)=1.01$ . Таким образом, для системы  $p-H-\alpha(0)\approx 0.67$ . Нужно также учитывать, что орбиталь  $2p\sigma$  заполнена с вероятностью  $P=50\,\%$ .

В случае столкновений сложных атомов на орбитали  $2p\sigma$  находятся два электрона (P=2). В пределе объединенного атома энергия уровня  $U_0=0.5\cdot Z_{\rm eff}^2/N^2$ , где  $Z_{\rm eff}$  – эффективный заряд для рассматриваемого уровня, N=2 – главное квантовое число.  $R_0=N/Z_{\rm eff}$ , таким образом  $Z_{\rm eff}=(8\cdot U_0)^{0.5}$ ,  $R_0^2=0.5/U_0$ . Положение точки квазипересечения масштабируется при изменении  $Z_{\rm eff}$ 

$$\operatorname{Im} R_0(Z_{\text{eff}}) = \operatorname{Im} R_0(p-H) \cdot \frac{2}{Z_{\text{eff}}}.$$

Следовательно:

$$\alpha(Z_{\text{eff}}) = \frac{m}{m+1} \text{Im} \, R_0(p-H) \cdot \frac{4}{Z_{\text{eff}}} U_0 \approx \alpha(0) \cdot (2U_0)^{0.5}$$
(3)

или

$$U_0 \approx \frac{1}{2} \left[ \frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{\alpha(0)} \right]^2.$$

Для сечения ионизации  $2p\sigma$  получаем выражение (в а.е.):

$$\sigma_i = \pi P \frac{v}{\alpha(Z_{\text{eff}})U_0} \exp\left(-\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{v}\right),$$
 (4)

здесь P – число электронов на уровне  $2p\pi$ .

Для сравнения с экспериментом удобно ввести переменную x:

$$x = \frac{m_e}{M} \cdot \frac{E}{U_0},$$

где  $m_e/M$  — отношение массы электрона к массе налетающей частицы, E — энергия соударения.

Можно увидеть, что:

$$\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{v} = \frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}},$$

и формулу для сечения переписать в виде:

$$\sigma_i(\text{cm}^2) \cdot U_0(\text{k3B}) = \text{K} \cdot \frac{\sqrt{x}}{\alpha(0)} \cdot \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}}\right), \quad (5)$$

где константа  $K = 1.196 \cdot 10^{-18}$ .

На рисунке 1 показана зависимость приведенного сечения от приведенной энергии для различных экспериментально исследованных комбинаций сталкивающихся частиц. Видно, что в этих координатах экспериментальные точки для большинства случаев ложатся на общую кривую. Эта зависимость хорошо описывается формулой (5). Наилучшее согласие с экспериментом достигается при значении  $\alpha(0) = 0.75$ и m=3. На этом же рисунке изображено сечение ионизации для столкновений p-H, умноженное на 4. Видно, что эта зависимость также очень хорошо согласуется с первой группой экспериментальных данных и формулой (5). Видно также, что область применимости предложенной формулы ограничена диапазоном x < 1. При больших v подключаются другие каналы ионизации (Т-ионизация, см. [13]). При v > 1 для оценки K-ионизации используется борновское приближение.

На рисунке 1 приведены также данные для случаев  $N^+$ - $N_2$ ,  $Ne^+$ -Ne-B этих случаях образование К-вакансий связано с переходами между орбиталями  $2p\pi$  и  $2p\sigma$  в пределе объединенного атома при наличии вакансий на  $2p\pi$ -орбитали. Видно, что сечения начинают возрастать при значительно меньших энергиях соударения, что связано с меньшим значением параметра Месси вследствие меньшего расщепления уровней между  $2p\pi$  и  $2p\sigma$  орбиталями по сравнению с переходами в континуум.

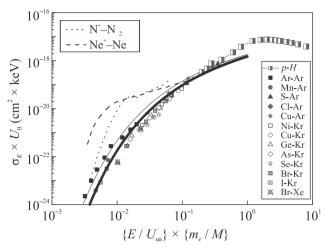


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость сечения ионизации К-оболочки в универсальных координатах. Приведены экспериментальные данные для различных комбинаций "ион—атом" из работы [8], а также для столкновений p-H из [14]. Из-за различия в начальной заселенности  $2p\sigma$  уровня сечение ионизации в случае p-H умножено на 4. Жирной сплошной линией приведена кривая для  $\alpha(0)=0.75,\ m=3$  (формула (5)), которая наилучшим образом описывает эксперимент. Тонкой сплошной линией приведена кривая для случая  $\alpha(0)=0.67,\ m=2$ . Пунктирными линиями приведены экспериментальные данные для столкновений  $N^+-N_2$  [15] и  $Ne^+-Ne$  [16], когда разрешены переходы между  $2p\sigma$  и  $2p\pi$  уровнями

Сечение пропорционально фактору ражающему вероятность наличия вакансии на  $2p\pi$ -орбитали, которая формируется из 2p-оболочки партнера соударения с большим Z. В статическом случае фактор  $f_s$  равен 2/3 числа вакансий на 2p-уровне партнера с бо́льшим Z, а для случая одинаковых атомов 1/3 от суммы числа 2p-вакансий в партнерах соударения. Зависимость вероятности образования K-вакансии от фактора f была проверена экспериментально [17]. При столкновениях Ne-Ne  $2p\pi$ -орбиталь полностью заполнена, а при столкновениях Ne<sup>+</sup>-Ne и Ne<sup>2+</sup>-Ne на орбитали имеется, соответственно, одна и две вакансии. Как было показано экспериментально, вероятность образования К-вакансии при одинаковых условиях соударения соотносится как 0.06:1:2 [18]. Это означает, что помимо статической вероятности  $f_s$  иметь вакансию на  $2p\pi$ -орбитали, может происходить дополнительное образование вакансий вследствие связи  $2p\pi$ -орбитали с верхними незаполненными уровнями, описываемое динамической поправкой  $f_d$ к фактору f.

Как видно из рис. 2, приведенные зависимости хорошо описываются формулой  $f_d = A \exp(-c/v)$ . Зна-

чения параметров A и c для исследованных случаев приведены в табл. 1.

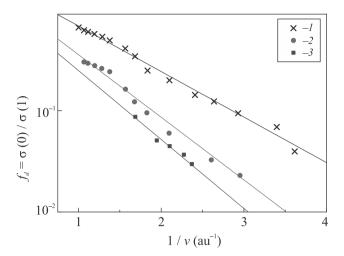


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость динамической поправки к ионизационному фактору  $2p\pi$ -орбитали (фактор  $f_d$ ) от 1/v. Представлено отношение сечений для случаев, когда вакансия на  $2p\pi$  первоначально отсутствует (случаи N<sup>+</sup>-Ne, Na<sup>+</sup>-N<sub>2</sub>, Na<sup>+</sup>-Ne), к случаям, когда имеется одна вакансия (соответственно, столкновения Ne<sup>+</sup>-N<sub>2</sub>, Ne<sup>+</sup>-N<sub>2</sub>, Ne<sup>+</sup>-Ne), которое определяет вероятность динамического образования вакансии. Обозначения:  $1 - \sigma(N^+-Ne)/\sigma(Ne^+-N_2)$ ,  $2 - \sigma(Na^+-N_2)/\sigma(Ne^+-N_2)$ ,  $3 - \sigma(Na^+-Ne)/\sigma(Ne^+-Ne)$ 

**Таблица 1.** Значение параметров A и c для вероятности динамического образования вакансий в рассматриваемых случаях

Номер	Отношение сечений	A	c
	для случаев		
1	$(N^{+}-Ne)/(Ne^{+}-N_{2})$	1.94	1.04
2	$(Na^+-N_2)/(Ne^+-N_2)$	1.49	1.42
3	$(\mathrm{Na^+}\text{-}\mathrm{Ne})/(\mathrm{Ne^+}\text{-}\mathrm{Ne})$	1.20	1.57

Значение фактора  $f=f_s+f_d$ , т.е. в реальных столкновениях, складывается из статической вероятности иметь вакансию на  $2p\pi$ -орбитали  $f_s$  и динамической поправки  $f_d$ , которая может быть оценена с использованием параметров, приведенных в табл. 1.

Как показывает рис. 1, для легких атомов использование параметра  $U_0$  не обеспечивает группировку экспериментальных данных вследствие значительного влияния экранировки заряда ядра электронами. На основе работы Бриггса—Масека [19] может быть предложен скейлинг для сечения образования К-вакансий:

$$\sigma_{\text{vac}}(E_{\text{cms}}) = f \cdot \pi R_{2p}^2 \cdot F\left(\frac{E_{\text{cms}}}{(Z_1 + Z_2 - \delta)^2}\right), \quad (6)$$

где  $E_{\rm cms}$  — энергия соударения в системе центра масс,  $R_{2p}$  — радиус 2p-оболочки объединенного атома,  $R_{2p}\sim (Z_1+Z_2-\delta)^{-1},\ Z_1$  и  $Z_2$  — заряды ядер сталкивающихся атомов,  $\delta=4$  — поправка на экранировку 2p-оболочки электронами 1s и 2s-оболочки объединенного атома. Универсальная функция F(x) может быть описана выражением:

$$\log_{10} F(x) = y_0 + A_1 \cdot e^{-\frac{x}{t_1}} + A_2 \cdot e^{-\frac{x}{t_2}}.$$
 (7)

Значения параметров в формуле (7):  $y_0$ ,  $A_1$ ,  $t_1$ ,  $A_2$ ,  $t_2$  приведены в табл. 2.

**Таблица 2.** Значения параметров в формуле (7):  $y_0$ ,  $A_1$ ,  $t_1$ ,  $A_2$ ,  $t_2$ 

Параметр	Значение
$y_0$	-15.823
$A_1$	-1.208
$t_1$	1.221
$A_2$	-9.264
$t_2$	0.048

Как видно из рис. 3, предложенный скейлинг позволяет описать имеющиеся экспериментальные данные единой универсальной кривой, что делает возможным оценивать сечения ионизации K-оболочек для неисследованных случаев.

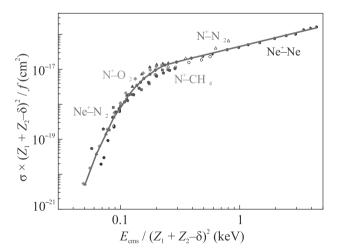


Рис. 3. (Цветной онлайн) Скейлинг для сечений образования К-вакансий при соударении легких атомов с  $Z \leq 10$ . Точками на рисунке показаны экспериментальные данные из работ [15, 16]. Жирная линия – предложенная нами универсальная кривая (формула (6))

Следует также иметь в виду, что K-вакансия, образующаяся в легком партнере соударения, может перейти на K-оболочку более тяжелого партнера вследствие динамической связи  $2p\sigma$  и  $1s\sigma$ -состояний,

так называемый механизм vacancy sharing. Вероятность этого процесса может быть оценена по формулам, предложенным в [20].

Интересно сопоставить два возможных механизма образования K-вакансий. Как видно из рис. 4, расчет сечения образования K-вакансий в системе Ne<sup>+</sup>-

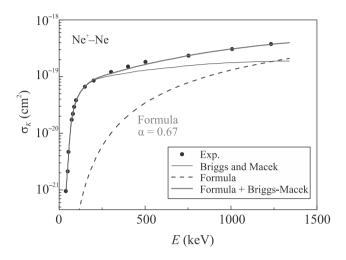


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сравнение экспериментального сечения образования К-вакансий в столкновениях  $Ne^+$ -Ne [16] с расчетами без учета [19] и с учетом поправки на динамическую ионизацию  $2p\sigma$ -уровня (настоящая работа, формула (5)), соответственно

Ne, выполненный в работе [19], при энергиях свыше  $200\,\mathrm{kpB}$  дает значения сечений ниже эксперимента [16]. Учет поправки на ионизацию  $2p\sigma$ -орбитали вследствие переходов в континуум с использованием формулы (5), приводит к практически полному совпадению с экспериментом. Значение  $\alpha(0)=0.67$  соответствует m=2, что хорошо согласуется с расчетами поведения молекулярных орбиталей для случая Ne<sup>+</sup>-Ne [21]. Таким образом, при оценке сечения образования K-вакансий необходимо учитывать оба механизма.

При небольших энергиях соударения механизм, связанный с переходами между орбиталями, приводит к значительно большим сечениям образования К-вакансий по сравнению с сечениями образования вакансий вследствие динамической ионизации из-за супервыдвижения термов в комплексной плоскости R, а при больших энергиях необходимо учитывать оба механизма. Следует различать столкновения атомов в газовой и твердой фазе. При столкновениях в твердой фазе имеет место каскад соударений и может происходить дополнительное образование вакансий во внешних оболочках, которые могут дожить до следующего соударения и привести

к большим сечениям образования K-вакансий вследствие разрешенной возможности  $2p\sigma-2p\pi$  переходов.

Можно ожидать, что предложенный для сечений образования К-вакансий в оболочках сталкивающихся атомов скейлинг найдет применение для расчета электронных тормозных потерь при ионном облучении твердых тел. Применение для этих целей скейлинга, разработанного авторами для сечений образования L-вакансий, было продемонстрировано в [22, 23].

- S. Kucas, A. Momkauskaite, and R. Karazija, Astrophys. J. 810, 26 (2015).
- A. Kucukonder and M. Erguven, AIP Conf. Proc. 2042, 020021 (2018).
- 3. S. Santra, A.C. Mandal, D. Mitra, M. Sarkar, and D. Bhattacharya, Radiat. Phys. Chem. **74**, 282 (2005).
- I.I. Tupitsyn, Y.S. Kozhedub, V.M. Shabaev, A.I. Bondarev, G.B. Deyneka, I.A. Maltsev, S. Hagmann, G. Plunien, and Th. Stohlker, Phys. Rev. A 85, 032712 (2012).
- P. Verma, P.H. Mokler, A. Bräuning-Demian,
   C. Kozhuharov, H. Bräuning, J. Anton, B. Fricke,
   F. Bosch, S. Hagmann, D. Liesen, Z. Stachura, and
   M. A. Wahab, Phys. Scr. T144, 014032 (2011).
- G. Lapicki, ICPEAC XXX Abstracts. 26 July 1 August. Australia. WE-124, Cairns (2017).
- P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B 354, 142 (2015).
- W. N. Lennard, I. V. Mitchell, and J. S. Forster, Phys. Rev. A 18, 1949 (1978).
- C. Foster, T. P. Hoogkamer, P. Woerlee, and F. W. Saris, J. Phys. B 9, 1943 (1976).
- 10. А. Н. Зиновьев, С. Ю. Овчинников, Ю. С. Гордеев, Письма в ЖТФ 7, 139 (1981) [A. N. Zinoviev, S. Yu. Ovchinnikov, and Yu. S. Gordeev, Tech. Phys. Lett. 7, 139 (1981)].

- С. Ю. Овчинников, Е. А. Соловьев, Письма в ЖЭТФ
   91, 477 (1986) [S. Yu. Ovchinnikov and E. A. Solov'ev, JETP Lett. 64, 280 (1986)].
- G. N. Ogurtsov, A. G. Kroupyshev, M. G. Sargsyan, Yu. S. Gordeev, and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. A 53, 2391 (1996).
- M. Pieksma and S. Yu. Ovchinnikov, J. Phys. B 24, 2699 (1991).
- 14. С. В. Авакян, Р. Н. Ильин, В. М. Лавров, Г. Н. Огурцов, Сечения процессов ионизации и возбуждения, ГОИ, СПб. (2000) [S. V. Avakyan, R. N. Il'in, V. M. Lavrov, and G. N. Ogurtsov, Collision Processes and Excitation of UV Emission from Planetary Atmospheric Gases, Gordon and Breach, NY (1998)].
- 15. Г.Г. Месхи, Дисс. канд. физ.-матем. наук, Особенности радиационного и Оже-распада внутренних вакансий, образующихся в атомных столкновениях, ФТИ им. А.Ф. Иоффе (1983).
- N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, B. Aagaard,
   E. Bgving, and B. Fastrup, Phys. Rev. A 12, 1313 (1975).
- B. Fastrup, E. Boving, G. A. Larsen, and P. Dahl, J. Phys. B 7, L206 (1974).
- B. Fastrup, G. Hermann, Q. Kessel, and A. Crone, Phys. Rev. A 9, 2518 (1974).
- 19. J. S. Briggs and J. Macek, J. Phys. B 5, 579 (1972).
- W. E. Meyerhof and K. Taulbjerg, Ann. Rev. Nucl. Sci. 27, 279 (1977).
- 21. J. Eichler and U. Wille, Phys. Rev. A 11, 1973 (1975).
- 22. А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко, Д.С. Мелузова, А.П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **108**, 666 (2018) [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, D.S. Meluzova, and A.P. Shergin, JETP Lett. **108**, 633 (2018)].
- A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B 467, 140 (2020).

#### Локализация источников двух типов "континуум" излучения

 $M.\,M.\,M$ огилевский  $^{+\,1)},\,\mathcal{A}.\,B.\,$  Чугунин  $^{+},\,$  А. А. Чернышов  $^{+},\,$  Т. В. Романцова  $^{+},\,$  И. Л. Моисеенко  $^{+},\,$  А. Кумамото  $^{*\,2)},\,$  Й. Касахара  $^{\times\,2)},\,$  Ф. Тсучия  $^{*\,2)}$ 

+Институт космических исследований РАН, 117997 Москва, Россия

\*Университет Каназава, 920-1192 Каназава, Япония

Университет Тохоку, 980-8578 Сендай, Япония
 Поступила в редакцию 19 мая 2021 г.
 После переработки 31 мая 2021 г.
 Принята к публикации 1 июня 2021 г.

По измерениям электрической составляющей электромагнитного поля в диапазоне частот  $2\,\mathrm{к}\Gamma\mathrm{q}-10\,\mathrm{M}\Gamma\mathrm{q}$  на японском спутнике ERG определены области генерации километрового излучения типа километровый "континуум" и нового излучения типа гектометровый "континуум". Показано, что километровый "континуум" наблюдается, в основном, на дневной стороне магнитосферы, его источник расположен вблизи плоскости геомагнитного экватора, а размеры источника не превышают  $\pm(0.1-0.3R_e)$  поперек этой плоскости, где  $R_e$  — радиус Земли. Гектометровое излучение, наблюдаемое, в основном, в ночной магнитосфере, имеет два источника. Один из них расположен вблизи плазмосферы и может достигать  $3R_e$ . Второй источник наблюдается вблизи Земли на расстояниях от  $1.1R_e$  до  $2R_e$ .

DOI: 10.31857/S123456782113005X

1. Излучение типа нетепловой "континуум" впервые было зарегистрировано на спутнике ИМП-6 [1] и более подробно описано в работах [2] и [3], где приведены характерные спектры этого излучения, выделены две компоненты – излучение, захваченное в плазмосфере и выходящее из нее, а также зарегистрирована связь электромагнитного излучения и электростатическими колебаниями вблизи частоты верхнего гибридного резонанса. В работах [2, 3] также было показано, что источник излучения расположен вблизи плазмопаузы, а интенсивность излучения зависит от геомагнитных обстановки – увеличивается на  $\sim 20$ дБ при геомагнитных возмущениях и коррелирует с плотностью потоков надтепловых электронов с энергиями 1 - 30 кэВ. Последующие исследования [4, 5] показали, что спектр "континуум" излучения является линейчатым и достаточно стабильным - отдельные частотные полосы этого спектра сохраняют свои характеристики – частоту и амплитуду, более одного часа. Само излучение по своему характеру разделяется на низкочастотную часть, которая захвачена в магнитосфере, и более высокочастотную, которая ее покидает. Уходящее из магнитосферы "континуум" излучение наблюдается, как правило, на ночной стороне (18-04 МГТ) [6] и, в некоторых случаях, оно было зарегистрировано на значительных расстояниях от Земли –  $41R_e~(R_e~$  радиус земли) [3].

Измерения на спутниках Geotail [7] и Прогноз-10 [8, 9] позволили обнаружить более высокочастотное "континуум" излучение в диапазоне частот 100—800 кГц. Это излучение также генерируется внутри плазмосферы и имеет линейчатый спектр. Особенностью этого излучения является распространение строго в плоскости магнитного экватора, что было подтверждено позже на спутнике CRRES и одновременных наблюдениях километрового "континуума" на аппаратах Geotail и Image [10].

Вопрос о механизме генерации "континуум" излучения до настоящего времени окончательно не решен. Первоначально была предложена модель синхротронного излучения [11], однако такой механизм оказался в 10 раз слабее, чем механизм генерации нетеплового континуума [6], что объясняет интерес к моделям линейного и нелинейного преобразования мод. Ряд авторов полагает (например, [5]), что изначально возбуждаются электростатические колебания на частотах  $f \approx (n+1/2)f_g \approx f_{\rm UHR}$ , где  $f_g$  – циклотронная частота,  $f_{\text{UHR}}$  – частота верхнего гибридного резонанса, а затем они трансформируются в электромагнитное излучение в результате нелинейного трехволнового взаимодействия с участием ионно-циклотронных волн. Альтернативный механизм связан с линейным преобразованием Z-моды из-

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: mogilevsky2012@gmail.com

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup> A. Kumamoto, Y. Kasahara, F. Tsuchiya.

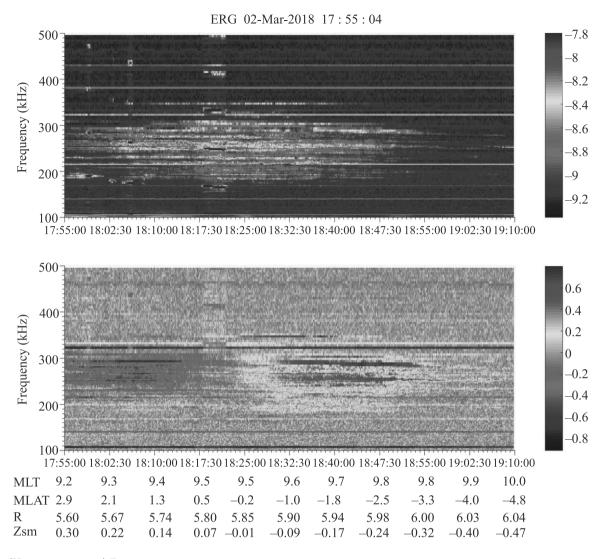


Рис. 1. (Цветной онлайн) Верхняя панель – динамическая спектрограмма электрической компоненты поля в диапазоне частот  $100-500\,\mathrm{k\Gamma}$ ц. Нижняя панель – спектрограмма коэффициента поляризации том же диапазоне частот

лучения в обыкновенную волну вблизи плазменной частоты [12].

В статье [13] авторы приводят результаты измерений излучения с линейчатым спектром в диапазоне частот  $500-1700~\rm k\Gamma\eta$  на спутнике ERG – Exploration of energization and Radiation in Geospace и анализируют возможные механизмы генерации этого излучения.

В настоящей работе приведены результаты измерения "континуум" излучения двух типов на спутнике ERG, различающихся по своим свойствам (частотному диапазону, вариациям отдельных составляющих и др.) и по местоположению источника излучения.

**2.** Японский спутник ERG (после выхода на орбиту был переименован в Arase) [14, 15], запущен

20 декабря 2016 г. и продолжает успешно работать в настоящее время. Его орбита – апогей  $\sim 32000 \,\mathrm{km}$ , перигей  $\sim 400 \,\mathrm{km}$  и наклонение  $31^{\circ}$ , и состав приборов были подобраны для исследования физических процессов в радиационных поясах. Однако измерительные возможности приборов для волновых измерений гораздо шире поставленных задач и позволяют исследовать процессы не только в плазмосфере, но и в авроральной области [16]. Спутник ERG ориентирован на Солнце и стабилизирован вращением вокруг этого направления с периодом 8 с. В этой работе мы используем результаты измерения электрической компоненты поля в диапазоне частот от  $2\,\mathrm{k}\Gamma$ ц до 10 МГц, а также измерения параметра поляризации в плоскости, перпендикулярной направлению на Солнце, вычисляемого на борту спутника [17, 18].

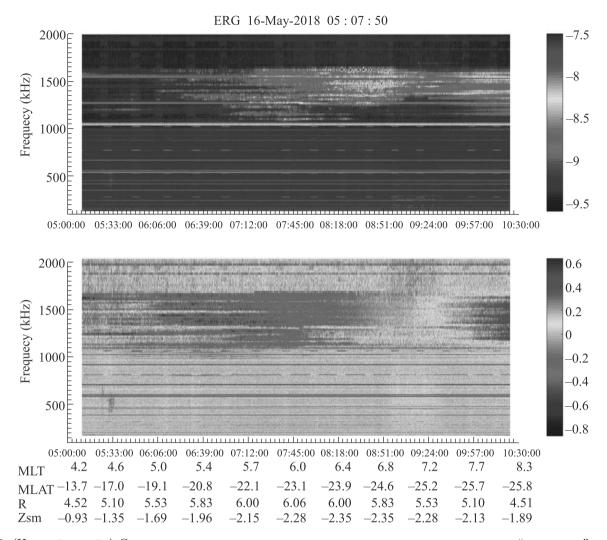


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектральные характеристики гектометрового радиоизлучения типа "континуум", зарегистрированного вдали от плоскости геомагнитной эклиптики. Аналогично рис. 1: верхняя панель – динамическая спектрограмма амплитуды электрической компоненты поля (в логарифмическом масштабе), нижняя панель – спектрограмма поляризационного коэффициента (в линейном масштабе)

**3.** На рисунке 1 приведен пример "континуум" излучения, зарегистрированного на борту спутника ERG 2 марта 2018 г.

Измерения проводились на утренней/дневной стороне плазмосферы на расстоянии  $R=5.6-6.04R_e$  (радиусов Земли) вблизи апогея в течении 1 ч 15 мин. За это время спутник пересек плоскость геомагнитного экватора и опустился в южную полусферу –  $Z_{sm}$  изменялось от 0.3 до  $-0.47R_e$  ( $Z_{sm}$  – координата Z в солнечно-магнитной системе координат). На рисунке 1 "континуум" излучение – набор горизонтальных линий в диапазоне частот  $210-350\,\mathrm{kTq}$ , на верхней и нижней панелях появляется сразу с началом измерений, в  $17:55\,\mathrm{UT}$ , и продолжается до  $18:55\,\mathrm{UT}$ . Непрерывные горизонтальные линии на частотах  $140,\,215,\,320$  и  $380\,\mathrm{kTq}$  – бортовые помехи.

На верхней панели излучение наблюдается непрерывно в течение всего часа — 17:55-18:55 UT, а на нижней панели в интервале от 18:17 до  $\sim 18:30$  UT излучение "исчезает". Это связано с изменением поляризации сигнала, что хорошо видно на рис. 4.

В интервале анализа усредненная интенсивность излучения имеет максимум в  $\sim 18:23$ , а поляризационный коэффициент в это время меняет знак с "—" на "+". Такое изменение поляризации может быть связано с пересечением спутником центра источника излучения, который, в этом предположении, должен лежать в плоскости  $Z_{sm}=0$ . Анализ около 4-х десятков случаев пересечения спутником ERG плоскости геомагнитного экватора вблизи апогея на дневной стороне показал, что практически каждый раз наблюдалось аналогичное излучение, и при  $Z_{sm}=0$ 

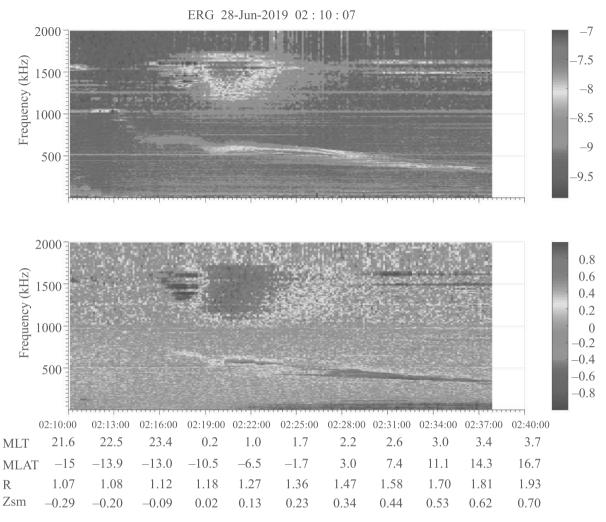


Рис. 3. (Цветной онлайн) Результаты измерений электрической компоненты поля вблизи Земли, проведенные на спутнике ERG 28 июня  $2019\,\mathrm{r}$ . Верхняя панель — аналогично рис. 1 и 2 — динамическая спектрограмма интенсивности излучения, нижняя панель — спектрограмма одновременных измерений поляризационного коэффициента. Излучение в полосе  $700-400\,\mathrm{k}\Gamma\mathrm{q}$  — возбуждение колебаний на верхней гибридной частоте

наблюдалась смена поляризации. Таким образом, измерения на спутнике ERG показали, что в диапазоне частот ниже  $500\,\mathrm{kT}$ ц источники "континуум" излучения находятся вблизи плоскости геомагнитного экватора,  $Z_{sm}=0$ , а их размер по  $Z_{sm}$  не превышает  $0.3-0.5R_e$ . Подавляющее большинство источников было расположено на дневной стороне магнитосферы на расстоянии  $R=4-6R_e$ , т.е. вблизи плазмопаузы, что подтверждает результаты работ [2, 3, 6].

4. На ночной стороне плазмосферы наблюдаются более высокочастотные излучения, 600—1600 МГц, спектр которых также представляет собой набор отдельных частот — линейчатый спектр. Следуя традициям [9, 13], будем называть это излучение гектометровым "континуум" излучением. Пример такого излучения приведен на рис. 2. Измерения проводи-

лись в ночном/утреннем секторе магнитосферы в течении  $5.5\,\mathrm{u}$ . Из амплитудной спектрограммы можно определить область наблюдения максимальной амплитуды сигнала — она расположена вблизи апогея орбиты спутника на расстоянии  $5.5-6R_e$ , т.е. вблизи плазмопаузы. Однако в отличие от сигнала, приведенного на рис. 1, область наблюдения сигнала гораздо более обширная и сильно смещена от плоскости геомагнитного экватора, в данном примере — в южное полушарие, а максимум излучения наблюдается при  $Z_{sm}\sim -2.35R_e$ .

Интегральная интенсивность излучения в диапазоне частот  $1135.2-1721.2\,\mathrm{k\Gamma}$ ц представлена на рис. 5. Максимум излучения наблюдается в  $08:38:24\,\mathrm{UT}$ , когда спутник находился на максимальном удалении от плоскости "геомагнитной

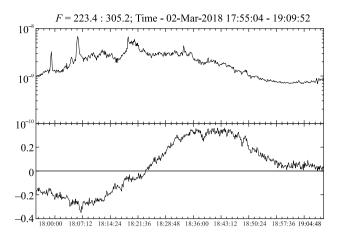


Рис. 4. Верхняя панель — интенсивность "континуум" излучения, усредненная в частотном интервале  $228.3-305.2\,\mathrm{k}\Gamma\mathrm{q}$  (в логарифмическом масштабе). Нижняя панель — коэффициент поляризации с аналогичным усреднением в линейном масштабе

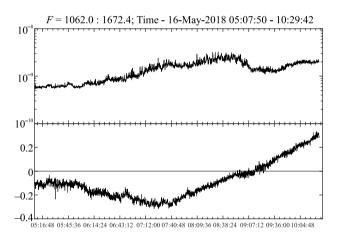


Рис. 5. Верхняя панель — интегральная интенсивность электрической компоненты поля в диапазоне частот  $1062.0-1672.4~\mathrm{k\Gamma}$ ц. Нижняя панель — усредненное значение поляризационного коэффициента в том же диапазоне частот

эклиптики". Поляризация излучения менялась от отрицательной (рис. 5, нижняя панель) к положительной. Максимум отрицательной поляризации наблюдался в  $\sim$  07: 25 UT. В 09: 07 UT поляризация обращается в '0', а затем становится положительной и до окончания измерений она возрастает. Предполагая, что максимум поляризации может находится вблизи 10:30, можно оценить размеры источника излучения –  $\Delta R \sim 1.5 R_e$ ,  $\Delta Z_{sm} \sim 1 R_e$ .

**5.** Источники излучения типа гектометрового "континуума" наблюдаются не только в области плазмосферы, т.е. на расстояниях  $4-6R_e$ , но и вблизи Земли, на расстояниях  $\sim 1.1-2R_e$ . На рис. 3 приведены результаты измерения электрической компонен-

ты и поляризационного коэффициента при пролете спутника вблизи перигея. С 02:15 по 02:18 UT спутник находился в южном полушарии, вблизи местной геомагнитной полуночи. В 02.18.30 UT спутник пересек плоскость геомагнитного экватора и вошел в северное полушарие. В этот момент изменилась поляризация излучения (см. рис. 6), что указывает на

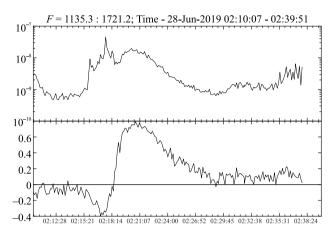


Рис. 6. Аналогично рис. 4 и 5 для 28 июня 2019 г. Полоса усреднения 1295—1696 к $\Gamma$ ц

пересечение спутником области расположения источника излучения. Далее спутник двигался в северном полушарии, постепенно удаляясь от Земли, и на расстоянии  $R=1.24R_e$  интенсивность излучения достигает максимума  $\sim 10^{-7}$  мВ/м  $\Gamma$ ц, а ширина его спектра расширяется до 600 к $\Gamma$ ц – от 1.1 до 1.7 М $\Gamma$ ц. При дальнейшем удалении от Земли интенсивность излучения спадает и в конце интервала измерений почти сравнивается с фоновым уровнем. Следует отметить, что спектральные и частотные характеристики этого излучения практически идентичны характеристикам излучения, приведенного на рис. 2 и 5. Единственное их существенное отличие – расположение источника излучения.

6. Таким образом, по результатам измерений электрической компоненты электромагнитного поля на спутнике ERG можно выделить два излучения типа "континуум". Оба излучения имеют сходный по виду, линейчатый спектр. Отличия гектометрового излучения типа "континуум" от километрового собраны в табл. 1.

Долговременные и повторяющиеся измерения дали возможность оценить стационарность гектометрового излучения — оно сохраняется с минимальными изменениями спектра в течении нескольких дней. В работе [19] было показано, что "континуум" излучение наблюдается у всех планет с магнитным полем нашей солнечной системы. Стабильность "контину-

Параметры	Излучение типа	Излучение типа
	километровый "континуум"	гектометровый "континуум"
Диапазон частот	3-500 кГц	600—1700 кГц
Скорость дрейф частоты	$0\pm1$ к $\Gamma$ ц $/$ мин	Не наблюдается
Удаленность области генерации	Вблизи плазмосферы	1) Вблизи плазмосферы $(5-6R_e)$ ;
от Земли (R)	$(5-6R_e)$	2) Вблизи Земли $(1.1 - 2R_e)$
Размеры области генерации	$\pm (0.1 - 0.3R_e)$	1) $2-3R_e$ ;
(поперек плоскости магнитной эклиптики)		2) $0.5 - 1.5R_e$
Время регистрации	Преимущественно днем	Преимущественно ночью
(Местное магнитное время – MLT)		

Таблица 1. Отличия "континуум" излучений

ум" излучения в сочетании с результатами работы [19] указывают на возможность использовать это излучения в качестве второго маркера планет с магнитным полем. Первым маркером является Авроральное Километровое Радиоизлучение (АКР) [20], которое характеризуется большой амплитудой, но, относительно коротким временем существования, которое зависит от геомагнитной активности (например, [21, 22]). "Континуум" излучение на 3 — 5 порядков слабее АКР, однако стабильность его существования позволяет проводить длительное накопление сигнала и таким образом сформировать второй маркер. Наличие второго маркера позволит в 8 раз увеличить достоверность обнаружения экзопланет с магнитным полем.

Данные спутника ERG (Arase), а также описание и характеристики научных приборов, получены от научного центра ERG под управлением ISAS/JAXA и ISEE/Университет Нагоя на сайте https://ergsc.isee.nagoya-u.ac.jp/ [15]. В исследовании анализируются данные прибора PWE HFA-L2 v01.01 [17].

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства высшего образования и науки РФ 075-15-2020-780 (N13.1902.21.0039).

- 1. L. W. Brown, Astrophys. J. **180**, 359 (1973).
- 2. D. A. Gurnett and R. R. Shaw, J. Geophys. Res.  ${\bf 78}, 8236~(1973).$
- 3. D. A. Gurnett, J. Geophys. Res. 80(19), 2751 (1975).
- W.S. Kurth, D.A. Gurnett, and R.R. Anderson, J. Geophys. Res. 86(A7), 5519 (1981).
- 5. W.S. Kurth, Geophys. Res. Lett. 9(12), 1341 (1982).
- 6. J. L. Green and S. Boardsen, URSI Radio Science Bulletin  $\bf 2006(318),\ 34\ (2006).$
- K. Hashimoto, W. Calvert, and H. Matsumoto, J. Geophys. Res. 104(A12), 28645 (1999).
- 8. В. Н. Курильчик, В. П. Григорьева, А. Тирпак, С. В. Миронов, Л. Фишер, А. Ярошевич, Космические исследования **30**(1), 107 (1992).

- 9. В. Н. Курильчик, В. П. Григорьева, А. Тирпак, С. В. Миронов, Л. Фишер, А. Ярошевич, Космические исследования **30**(2), 231 (1992).
- K. Hashimoto, R. R. Anderson, J. L. Green, and H. Matsumoto, J. Geophys. Res. **110**(A9), A09229 (2005).
- 11. M.S. Frankel, Radio Sci. 8(11), 991 (1973).
- 12. D. Jones, Nature 288(5788), 225 (1980).
- K. Hashimoto, A. Kumamoto, F. Tsuchiya,
   Y. Kasahara, and A. Matsuoka, Geophys. Res.
   Lett. 45(21), 11555 (2018).
- Y. Miyoshi, I. Shinohara, T. Takashima et al. (Collaboration), Earth, Planets, and Space 70(1), 101 (2018).
- 15. Y. Miyoshi, T. Hori, M. Shoji et al. (Collaboration), Earth, Planets, and Space **70**(1), 96 (2018).
- В. И. Колпак, М. М. Могилевский, Д. В. Чугунин, А. А. Чернышов, И. Л. Моисеенко, А. Кумамото, Ф. Тсучия, Е. Касахара, М. Шойи, Е. Миеши, И. Шинохара, Солнечно-земная физика 7(1), 11 (2021).
- A. Kumamoto, F. Tsuchiya, Y. Kasahara, Y. Kasaba,
   H. Kojima, S. Yagitani, K. Ishisaka, T. Imachi,
   M. Ozaki, S. Matsuda, M. Shoji, A. Matsuoka,
   Y. Katoh, Y. Miyoshi, and T. Obara, Earth, Planets,
   and Space 70(1), 82 (2018).
- 18. Y. Kasahara, Y. Kasaba, H. Kojima et al. (Collaboration), Earth, Planets, and Space **70**(1), 86 (2018).
- W. S. Kurth, in *Planetary Radio Emissions III*, ed. by H. O. Rucker, S. J. Bauer, and M. L. Kaiser, Austrian Academy of Sciences Press, Wien (1992).
- 20. Е.А. Бенедиктов, Г.Г. Гетманцев, Ю.А. Сазонов, А.Ф. Тарасов, Космические исследования  ${f 3},~614~(1965).$
- 21. Д. В. Чугунин, А. А. Чернышов, И. Л. Моисеенко, М. Е. Викторов, М. М. Могилевский, Геомагнетизм и аэрономия **60**(5), 538 (2020).
- М. М. Могилевский, Т. В. Романцова, Я. Ханаш, Т. М. Буринская, Р. Шрайбер, Письма в ЖЭТФ 86(11), 819 (2007).

# Неоднородное магнитное состояние тонких пленок YFeO<sub>3</sub> по данным ЯМР спектроскопии

В. В. Оглобличев $^{1)}$ , В. И. Изюров, Ю. В. Пискунов, А. Г. Смольников, А. Ф. Садыков, С. А. Чупраков, С. С. Дубинин, С. В. Наумов, А. П. Носов

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

Поступила в редакцию 16 апреля 2021 г. После переработки 24 мая 2021 г. Принята к публикации 28 мая 2021 г.

Методами спектроскопии ядерного магнитного резонанса исследованы особенности магнитного состояния антиферромагнитных пленок YFeO<sub>3</sub> термообработанных в атмосферах кислорода и воздуха. Обнаружено существенно неоднородное распределение локальных магнитных полей с характерными масштабами порядка межатомного расстояния. Установлено, что в исследованных пленках YFeO<sub>3</sub> присутствуют две магнитно неэквивалентные позиции ионов железа, соответствующие его разным валентным состояниям. Соотношение неэквивалентных позиций железа и степень искажения кристаллической решетки меняются в зависимости от типа атмосферы термообработки.

DOI: 10.31857/S1234567821130061

Введение. Антиферромагнитные материалы представляют особый интерес для спинтроники из-за их невосприимчивости к внешним магнитным возмущениям, отсутствию полей рассеяния и уникальной специфики явлений магнитного резонанса в терагерцовом диапазоне частот. Антиферромагнитная спинтроника может стать физической основой для следующего поколения устройств, характеризующихся сверхбыстрыми динамическими магнитными свойствами и существенно большими по величине магнитотранспортными эффектами [1].

Неослабевающий интерес к редкоземельным ортоферритам в целом, и иттриевому ортоферриту YFeO<sub>3</sub> в частности, обусловлен уникальным сочетанием их физических свойств и многообразием наблюдаемых физических явлений. Так, например, в YFeO<sub>3</sub> зарегистрирована самая высокая скорость движения доменных границ при комнатной температуре [2], которая может доходить до 20 км/с. В настоящее время особенно актуальным является исследование свойств микро-, нано-объектов из ортоферритов (порошков и пленок), физических процессов, характерных для них, которые могут отличаться от таковых в объемных образцах [3–7]. В частности, стоит задача выявления особенностей физико-химических свойств пленочных ортоферритов в зависимости от способа их синтеза, допирования и последующей обработки (например, отжига в различных атмосфеpax) [8–12].

В то же время известной проблемой остается надежное тестирование приготовленных пленок, а именно: определение особенностей их кристаллического и магнитного строения на масштабах порядка межатомных расстояний. Для этих целей, как никакой другой, может подойти такой локальный метод исследования вещества, как ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [13]. Применение данного метода к изучению пленочных ортоферритов имеет ряд сложностей, обусловленных как малым природным содержанием ЯМР-изотопа железа  $^{57}$ Fe (2.12 %), так и малыми фактическими объемами пленочных образцов. Тем не менее, преимущества методов ЯМР для исследования тонких пленок магнетиков, например,  $Y_3$ Fe<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, наглядно продемонстрированы в работах [14, 15].

В настоящей работе методами спектроскопии ЯМР исследованы особенности магнитного состояния антиферромагнитных пленок YFeO<sub>3</sub> термообработанных в атмосферах кислорода и воздуха.

Образцы и методика эксперимента. Тонкие пленки YFeO $_3$  были получены магнетронным распылением мишени стехиометрического состава на подложку  $\mathrm{Al_2O_3}$  с ориентацией  $(1-1\ 2\ 0)$ . Однофазную поликристаллическую мишень состава YFeO $_3$  готовили из простых оксидов, обогащенных изотопом  $^{57}$ Fe до 95%, методом твердофазного синтеза с финальной термообработкой при  $1450\,^{\circ}\mathrm{C}$  в течение  $10\,\mathrm{u}$ . Фазовый состав контролировали методом рентгеновской дифракции. Полученные значения параметров решетки составляли  $a=0.5586(4)\,\mathrm{hm}$ ,

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: ogloblichev@imp.uran.ru

b = 0.7599(3) нм и c = 0.5273(7) нм, соответствовали орторомбической структуре с симметрией *Pbnm* и совпадали с известным справочным данными [16]. Пленки получали распылением мишени на переменном токе с частотой 13.56 МГц в атмосфере  $90\,\%{
m Ar} + 10\,\%{
m O}_2$  при давлении  $9\! imes\!10^{-3}\,$ мбар при мощности разряда 100 Вт. Напыление осуществляли на подложке с типичными размерами  $12 \times 15 \,\mathrm{mm}^2$ . В процессе распыления температуру подложки поддерживали на уровне 200°C. По окончании распыления толщину и параметры шероховатости полученных пленок производили методом оптической профилометрии с использованием прибора Zvgo NewView. Толщина пленки составляла 880 нм, среднеквадратичное отклонение профиля 0.4146 нм, среднеарифметическое отклонение профиля 0.3279 нм. Для изучения влияния атмосферы термообработки исходную подложку разрезали на образцы с типичными размерами  $5 \times 5 \text{ мм}^2$ , которые термобрабатывали при 800°C в течении 3 ч либо на воздухе, либо в кислороде.

Рентгеноструктурные исследования образцов проводили в геометрии Брэгг–Брентано с использованием излучения Со  $K_{\alpha}$ . На рисунке 1 представлен спектр для пленки, термообработанной в потоке кислорода. Для пленки, термообработанной на воздухе был получен качественно аналогичный спектр.

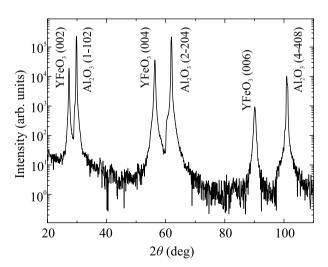


Рис. 1. Рентгеновский дифракционный спектр для пленки YFeO $_3$  толщиной 880 нм на подложке r-Al $_2$ O $_3$ , термообработанной в атмосфере кислорода при 800 °C. Излучение Со  $K_{\alpha}$ 

Из рисунка 1 следует, что ось c пленок ориентирована перпендикулярно плоскости образцов. С использованием процедуры [17] по угловым положениям линий (00l) пленок были вычислены уточненные

значения параметра решетки b. Они оказались равными 0.75805(5) нм для пленки, термообработанной в атмосфере кислорода, и 0.75825(4) нм для пленки, термообработанной на воздухе. Эти значения мало отличаются друг от друга, но на 0.001 нм меньше, чем аналогичное справочное значение [16]. Это позволяет сделать вывод о слабых структурных искажениях кристаллической решетки пленок по сравнению с объемным монокристаллом по меньшей мере вдоль оси b.

В качестве тестового был использован объемный образец монокристалла YFeO $_3$  (с естественным содержанием изотопа  $^{57}$ Fe) в форме пластины с размерами  $5\times8\times0.5\,\mathrm{mm}^3$ . Ориентация кристаллографических осей монокристалла относительно геометрических осей пластины была определена рентгеноструктурными методами.

ЯМР измерения проводились на модернизированном импульсном спектрометре SXP 4100 (фирма "Bruker") при  $T=4.2\,\mathrm{K}$  (образец находился в прямом контакте с жидким гелием) в нулевом внешнем магнитном поле. ЯМР спектры <sup>57</sup>Fe были получены с помощью стандартной методики спинового эха при использовании импульсных последовательностей с альтернированием фазы каждого импульса. Применение альтернирования фазы импульсов позволяет исключить влияние на получаемые спектры переходных процессов, возникающих в колебательном контуре после воздействия радиочастотных (РЧ) импульсов. Длительность РЧ-импульсов выбиралась всегда р = 1 мкс, мощность РЧ-усилителя варьировалась в зависимости от возбуждаемой линии. При записи спектров с шириной, большей полосы частот, возбуждаемой РЧ-импульсом, применялось суммирование массива сигналов, накопленных в требуемом частотном диапазоне с шагом  $\Delta \nu = 100 \, \text{к}$ Гц. Измерения ЯМР спектров проводились при задержке между импульсами  $t_{\rm del} = 50\,{\rm MKC}.$ 

Время спин-спиновой релаксации  $T_2$  измерялось при изменении задержки между импульсами  $t_{\rm del}$  в интервале  $t_{\rm del}=0.05-20\,{\rm mc}$ . Кривые затухания спинового эха хорошо обрабатывались экспоненциальной зависимостью  $M(t)=M_0\exp(-t/T_2)$ , где  $M_0$  – это равновесная ядерная намагниченность спиновой системы, а M(t) – ядерная намагниченность в момент времени t.

Время спин-решеточной релаксации  $T_1$  измерялось методом инвертирования и последующего восстановления ядерной намагниченности. Кривые восстановления ядерной намагниченности хорошо обрабатывались зависимостью  $M(t)=M_0-2M_0 \times \exp(-t/T_1)$ .

Результаты и обсуждение. На рисунке 2 представлены спектры ЯМР  $^{57}$  Fe в пленках YFeO $_3$  в нулевом внешнем магнитном поле при  $T=4.2\,\mathrm{K}$ . В спектрах можно выделить две области частот, в которых наблюдается сигнал:  $\nu_1=71-77\,\mathrm{M}\Gamma$ ц и  $\nu_2=62-66\,\mathrm{M}\Gamma$ ц. Для простоты в дальнейшем линию в области частот  $\nu_1$  мы будем называть линией A, а в области частот  $\nu_2$  – линией B.

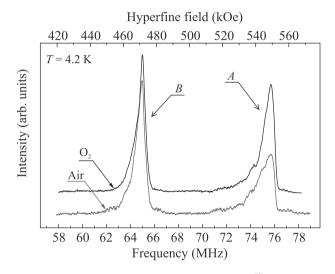


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры ЯМР  $^{57}$  Fe в нулевом внешнем магнитном поле в пленках YFeO $_3$  толщиной 880 нм, термообработанных в атмосферах кислорода (черная линия) и воздуха (красная линия)

Сигнал ЯМР  $^{57}$  Fe, дающий вклад в линию A, хорошо изучен в работах на объемных монокристаллах YFeO<sub>3</sub> [18–23]. Особенностью данной линии A является малая мощность радиочастотного импульса для возбуждения сигнала ЯМР  $^{57}$  Fe в импульсной последовательности спинового эха. Используемый уровень мощности радиочастотного импульса был очень мал из-за эффекта усиления, индуцируемого в магнитных системах колеблющимися (на частоте радиочастот) электронными магнитными моментами. Значительное усиление ЯМР сигнала является типичным для ферромагнитных фаз и сигналов от доменных стенок [20–23] и может рассматриваться как свидетельство наличия таковых в образце.

Столь большая ширина линии A,  $\Delta \nu \approx 6\,\mathrm{MFz}$ , свидетельствует о значительной неоднородности локальных магнитных полей,  $\Delta h_\mathrm{lok} \approx 40\,\mathrm{k}$ Э, в месте расположения ядер железа. Форму спектра можно объяснить, если предположить, что он обязан своим происхождением ядрам, расположенным в областях магнитной неоднородности, характеризующихся отклонением вектора ферромагнетизма [18, 20, 21]. Подобное распределение намагниченности может на-

блюдаться в окрестностях дефектных участков с отрицательной первой константой магнитной анизотропии Р. Константа магнитной анизотропии включает в себя два основных вклада: отрицательный вклад от одноосной анизотропии и положительный двухионный вклад, обусловленный антисимметричным обменом Дзялошинского-Мория. Учитывая, что оба вклада чрезвычайно чувствительны к искажениям кристаллической решетки ортоферритов, естественно предположить, что деформация последней в окрестностях дефектов (дислокаций, границ домена, примесей и пр.) будет нарушать примерный баланс этих основных вкладов в Р и приводить к флуктуациям ее величины и знака. Другими словами, такая форма линии указывает на то, что в ее формировании участвуют ядра, расположенные в дефектных участках кристалла с искаженной кристаллической решеткой. Подобные сильные искажения в пленках YFeO<sub>3</sub> наблюдали в работе [6] методами просвечивающей электронной микроскопии.

Обратимся теперь к линии B. В работах [18–22] об этой линии не упоминается. Авторы работы [23] так же, как и мы, наблюдали эту линию в частотном диапазоне  $\nu_2$  и сделали предположение о том, что это сигнал ЯМР от иттрия <sup>89</sup> Y. Мы проверили эту гипотезу, выполнив <sup>57</sup> Fe ЯМР-измерения на двух пленках YFeO<sub>3</sub>, обогащенной изотопом <sup>57</sup> Fe и не обогащенной. Относительная интенсивность линий A и B в обеих пленках была примерно одинаковой, чего никак не могло бы быть в случае, если бы линия B была сигналом ЯМР от <sup>89</sup> Y ЯМР.

Мы также отмечаем, что время спин-спиновой релаксации  $T_2$  ядерных моментов <sup>57</sup> Fe в исследуемых пленках YFeO<sub>3</sub> всего в два раза короче времени спин-решеточной релаксации  $T_1$  (см. табл. 1). Это говорит о том, что процессы спин-спиновой релаксации определяются только лишь механизмами спинрешеточной релаксации [24], а также о том, что процессы, связанные с косвенным ядерно-ядерным взаимодействием Сула-Накамуры, существенно подавлены. Такое имеет место в случае, когда разность частот прецессии соседних ядерных спинов железа  $\Delta \nu_{\rm L}$  превышает частотный диапазон  $\Delta \nu_{\rm rf}$ , возбуждаемый РЧ-импульсами в импульсной последовательности, формирующей спиновое эхо. Поскольку  $\Delta \nu_{\rm rf} \approx 500 \, {\rm k} \Gamma$ ц, неоднородность локальных магнитных полей в пленке на межатомных расстояниях Fe-Fe превышает 3.6 кЭ. Это еще раз доказывает, что полученные сигналы в спектре ЯМР на рис. 2 (линии A и B) соответствуют ядрам железа, расположенным в доменных стенках.

**Таблица 1.** Релаксационные параметры ЯМР-сигналов ядер  $^{57}$  Fe, дающих вклад в разные ЯМР-линии в YFeO $_3$ 

	$T_1$ , MC	$T_2$ , MC
$\Pi$ иния $A$	9.5	5.1
$\Pi$ иния $B$	9	5
$\Pi$ иния $C$	1400	24

Локальное магнитное поле  $\mathbf{h}_{\mathrm{loc}}$  на ядре железа определяет частоту ЯМР. Предполагается, что валентная оболочка ионов железа  $\mathrm{Fe^{3+}}$  в YFeO<sub>3</sub> имеет конфигурацию  $4s^03d^5$  с суммарным электронным спином S=5/2 [8,9]. В этом случае локальное магнитное поле на ядре железа будет определяться сверхтонким полем (СТП)  $\mathbf{h}_{\mathrm{hf}}$ , обусловленным магнетизмом собственных неспаренных 3d-электронов и переносом спиновой поляризации от ближайшего магнитного окружения [25, 26]. Сверхтонкое поле  $\mathbf{h}_{\mathrm{hf}}$  на ядре иона  $\mathrm{Fe}$  определяется следующим выражением [25, 26]:

$$\mathbf{h}_{\mathrm{hf},\alpha} = g\mu_B A_{\alpha} S,\tag{1}$$

где  $g\mu_B S$  — среднее значение магнитного момента; S — электронный спин; g — g-фактор для Fe;  $A_{\alpha}$  — анизотропная константа сверхтонкого взаимодействия (СТВ), которая включает в себя несколько вкладов:

$$A_{\alpha} = H_{\rm c} + H_{\rm cp} + H_{\rm sd,\alpha} + H_{\rm so,\alpha},\tag{2}$$

где  $H_{\rm c}$  – константа фермиевского контактного взаимодействия ядра с неспаренными электронами sоболочки,  $H_{\rm cp}$  – константа сверхтонкого взаимодействия (СТВ) поляризации остова,  $H_{\mathrm{sd},\alpha}$  и  $H_{\mathrm{so},\alpha}$  – константы спин-дипольного и спин-орбитального взаимодействий, соответственно. Мы пренебрегли в выражении (2) вкладами так называемого наведенного СТВ и диполь-дипольного взаимодействия с магнитными моментами соседних атомов железа. Первый вклад обычно пренебрежимо мал в соединениях с ионной связью, в которых электронные орбитали соседних ионов практически не перекрываются, а второй вклад мал из-за большого расстояния между соседними ионами железа. Поскольку в валентной оболочке иона железа Fe<sup>3+</sup>, имеющей конфигурацию  $4s^03d^5$ , отсутствуют s-электроны, вклад  $H_{\rm c} = 0$ , и в выражении (2) остаются только три слагаемых. Известно, что константа сверхтонкого взаимодействия поляризации остова для 3d электронов  $H_{\rm cp} = -125\,{\rm K}\Theta/\mu_B$  [25]. Отрицательный знак константы  $H_{\rm cp}$  означает, что магнитное поле, создаваемое собственными неспаренными 3d электронами на ядре, ориентировано противоположно направлению спина иона [25, 27]. Для определения суммарного СТП  $\mathbf{h}_{\mathrm{hf},\alpha}=550\,\mathrm{k}$  на ядрах железа, соответствующих линии A, использовалась частота  $\nu=75.68\,\mathrm{M}\Gamma$ ц, отвечающая максимуму интенсивности данной линии, и гиромагнитное отношение железа  $^{57}\gamma=1.37\,\mathrm{M}\Gamma$ ц/Тл. Тогда, используя значение спина S=5/2 и выражения (1), (2), находим, что суммарное значение констант  $H_{\mathrm{sd},\alpha}$  и  $H_{\mathrm{so},\alpha}$  для иона  $\mathrm{Fe}^{3+}$  составляет  $+15\,\mathrm{k}\Theta/\mu_B$ .

Линия B на рис. 2 соответствует ядрам железа, находящимся в более низких локальных магнитных полях. Уменьшение СТП на ядрах железа возможно в трех случаях.

I. Если ионы  ${\rm Fe}^{3+}$  с конфигурацией валентной оболочки  $4s^03d^5$  превращаются в ионы  ${\rm Fe}^{2+}$  с конфигурацией  $4s^03d^6$ . В этом случае в 3d-оболочке остается только 4 неспаренных электрона, соответственно, сверхтонкое поле поляризации остова  $H_{\rm cp}$  уменьшится на величину, равную  $125\,{\rm k}$ Э. С другой стороны, СТП, соответствующие максимумам линий A и B, различаются на  $78\,{\rm k}$ Э. Данную разницу можно объяснить изменением у ионов  ${\rm Fe}^{2+}$  суммарной константы спин-дипольного и спин-орбитального взаимодействия. В предположении неизменности константы  $H_{\rm cp}=-125\,{\rm k}$ Э/ $\mu_B$  при переходе от  ${\rm Fe}^{3+}$  к  ${\rm Fe}^{2+}$  находим, что в  ${\rm Fe}^{2+}$  сумма  $H_{\rm sd,\alpha}+H_{\rm so,\alpha}=7\,{\rm k}$ Э/ $\mu_B$ , т.е. уменьшается в 2 раза.

II. Кроме вышеприведенного случая I можно объяснить положение линии B в спектре ЯМР  $^{57}$  Fe ненулевой заселенностью 4s-оболочки ионов  $\mathrm{Fe}^{3+}$ , т.е. реализацией в них валентной конфигурации  $4s^{\delta}3d^{5-\delta}$ . Подобное может иметь место при небольшом подмешивании состояний 3d к 4s, т.е. при наличии слабой sd-гибридизации. В этом случае отрицательное сверхтонкое поле поляризации остова, создаваемое на ядре пятью неспаренными 3d-электронами, может частично компенсироваться положительным полем от неспаренного 4s-электрона. Сверхтонкое поле, создаваемое на ядре одним 4s-электроном, составляет 2000 кЭ [27]. Тогда для объяснения природы и положения линии B в спектре ЯМР  $^{57}$  Fe необходимо предположить, что заселенность 4s-оболочки ионов железа в части  $FeO_6$  октаэдров равна  $\delta = 0.04$ .

III. Третья возможность наблюдения дополнительной линии B в ортоферрите  ${\rm YFeO_3}$  — это появление в нем ионов  ${\rm Fe^{4+}}$  с конфигурацией валентной оболочки  $4s^03d^4$ . Наличие железа в состоянии  ${\rm Fe^{4+}}$  наблюдалось в ортоферритах и ранее (см. работы [18, 22]). Их появление связывали с наличием избыточного кислорода в образцах. Для данной ситуации будут справедливы все рассуждения о природе и положении линии B, которые были приведены для случая I.

Какая из трех возможностей реализуется в пленках YFeO<sub>3</sub>? Случай I возможен при недостатке кислорода в кристаллической структуре, т.е. при наличии вакансий по кислороду. Из условия нейтральности соединения и в предположении примерно равного количества в исследуемом ортоферрите ионов  ${
m Fe}^{3+}$  и  ${
m Fe}^{2+}$  (интенсивности линий A и B примерно равны) легко оценить степень нестехиометрии соединения по кислороду. В случае реализации условия I состав пленки должен иметь следующую формулу:  $Y^{3+}Fe_{0.5}^{3+}Fe_{0.5}^{2+}O_{2.75}^{2-}$ . В пользу варианта I говорят наши ЯМР эксперименты, выполненные на пленках, термообработанных в атмосферах кислорода и воздуха (рис. 2). Линии A и B для пленки, термообработанной на воздухе, шире соответствующих линий для пленки, термообработанной в атмосфере кислорода. Кроме того, отношения интегральных интенсивностей линий A и B для пленок, термообработанных в разных атмосферах, существенно отличаются:  $(Int_A/Int_B)_{\rm oxygen} \approx 1.1, (Int_A/Int_B)_{\rm air} = 0.8.$  Mcxoдя из того, что ширина линий ЯМР отражает степень дефектности кристаллической решетки, а отношение  $(Int_A/Int_B)$  характеризует соотношение в образце ионов  $Fe^{3+}$  и  $Fe^{2+}$ , можно утверждать: при термообработке в кислороде часть позиций железа Fe<sup>2+</sup> окисляется до состояния  $\mathrm{Fe^{3+}}\ (4s^03d^5)$ , что и должно наблюдаться при уменьшении кислородных вакансий во время термообработки в кислороде. Возможное наличие вакансий по кислороду в пленках YFeO<sub>3</sub> также показано в работе [28]. В этой работе [28] методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии было доказано, что при определенных давлениях кислорода при синтезе пленок YFeO<sub>3</sub> содержание кислорода уменьшается.

Что касается варианта II, то здесь представляется довольно проблематичным объяснить, почему в стехиометрических образцах YFeO $_3$  в половине FeO $_6$ -октадров имеет место sd-гибридизация, а в другой половине – нет. Случай же III не согласуется с экспериментами на пленках, термообработанных в разных атмосферах. При термообработке в кислороде относительная интенсивность линии В должна расти, а она, наоборот, уменьшается.

Выше были рассмотрены спектры ЯМР  $^{57}$ Fe в доменных стенках пленки YFeO<sub>3</sub>. Для наблюдения сигнала ЯМР от ядер, расположенных внутри доменов, мы выполнили ЯМР-измерения на монокристаллическом образце YFeO<sub>3</sub> с природным содержанием изотопа  $^{57}$ Fe (2.1%). На рисунке 3 представлен спектр ЯМР  $^{57}$ Fe в монокристалле YFeO<sub>3</sub> в нулевом внешнем магнитном поле при  $T=4.2\,\mathrm{K}$ . Спектр представляет собой одиночную узкую ( $\Delta\nu\approx40\,\mathrm{kTg}$ )

симметричную линию, которую мы будем называть линией C. Подобную линию уже наблюдали в более ранних работах [19, 29], она соответствует сигналу от ядер железа, находящихся внутри антиферромагнитного ( $A\Phi$ ) домена.

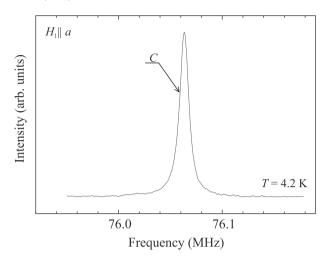


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектр ЯМР  $^{57}$ Fe в нулевом внешнем магнитном поле в монокристалле YFeO<sub>3</sub>. Сигнал ЯМР от ядер  $^{57}$ Fe, находящихся внутри антиферромагнитных доменов

При записи линии C наблюдался гораздо более слабый эффект усиления. Мощность импульсов в импульсной последовательности, формирующей спиновое эхо, при записи линии C на  $43\,\mathrm{д}\mathrm{B}$  превышала мощность импульсов при детектировании линий A и В. Слабость эффектов усиления указывает на большую "жесткость" АФ связей магнитных моментов железа внутри домена по сравнению со связями в доменной стенке. Кроме того, времена релаксации  $T_1$ и  $T_2$  для монокристаллических объемных образцов YFeO<sub>3</sub> различаются более чем на порядок величины. Это не удивительно, поскольку при ширине линии ЯМР  $\Delta \nu \approx 40 \, \text{к}$ Гц основной вклад в спин-спиновую релаксацию вносят как прямое диполь-дипольное, так и косвенное сул-накамуровское ядерно-ядерные взаимодействия. Отметим также, что в монокристалле сигналов от доменных границ в частотных диапазонах A и B мы не обнаружили, а в пленках YFeO<sub>3</sub> линии C не наблюдали. Последнее возможно связано с тем, что пленка сформирована из кристаллических наноблоков, повернутых друг относительно друга вокруг оси c на  $90^{\circ}$  [6].

Таким образом, данное исследование показало, что ЯМР является сравнительно простым методом определения качества приготовленной пленки ортоферрита. В процессе исследования было выяснено, что пленки перовскита YFeO<sub>3</sub> (а возможно, и других

редкоземельных ортоферритов), приготовленные методом магнетронного напыления, получаются существенно нестехиометричными по кислороду. И требуется их последующая обработка (например, отжиг в атмосфере кислорода) для достижения стехиометрии. В дальнейшем предполагается приготовление пленок  $YFeO_3$ , стехиометричных по кислороду, с лучшим структурным качеством, и их исследование методом ЯМР.

Заключение. В работе представлены результаты исследования методами ЯМР 57 Fe пленок ортоферритов YFeO<sub>3</sub>, термообработанных при 800°C в течении 3-х ч в атмосферах кислорода и воздуха. Определены параметры релаксации ядерных моментов, которые свидетельствуют о существенной неоднородности распределения локальных магнитных полей в пленках YFeO<sub>3</sub> на масштабах межатомного расстояния. В пользу данного факта говорят также форма и ширина линий ЯМР спектра <sup>57</sup>Fe. Подобные сильные искажения наблюдали в работе [6] методами просвечивающей электронной микроскопии. Обнаружено, что в исследованных пленках примерно половина ионов железа находится в состоянии  $Fe^{3+}$ , другая половина в состоянии  $Fe^{2+}$ . Предполагается, что это связано с кислородной дефицитностью пленок. Для подтверждения данного предположения требуются дополнительные ЯМРисследования на пленках с различной степенью кислородной нестехиометрии. Кроме того, в исследованных пленках не был обнаружен сигнал от ядер железа, находящихся внутри антиферромагнитного домена. Это может указывать на то, что пленка YFeO<sub>3</sub> состоит практически из одних доменных стенок.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (шифр "Функция"  $\Gamma$ .р. # AAAA-A19-119012990095-0).

- H. Jani, J.-C. Lin, J. Chen, J. Harrison, F. Maccherozzi, J. Schad, S. Prakash, C.-B. Eom, A. Ariando, T. Venkatesan, and P.G. Radaelli, Nature 590, 74 (2021).
- 2. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, М. В. Четкин, УФН  ${\bf 146}(3),\,417$  (1985).
- 3. V.I. Popkov and O.V. Almjasheva, Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics **5**(5), 703 (2014).
- R. Maiti, S. Basu, and D. Chakravorty, J. Magn. Magn. Mater. 321, 3274 (2009).
- A. V. Racu, D. H. Ursu, O. V. Kuliukova, C. Logofatu, A. Leca, and M. Miclau, Mater. Lett. **140**(1), 107 (2015).

- J. Scola, P. Boullay, W. Noun, E. Popova, Y. Dumont, A. Fouchet, and N. Keller, J. Appl. Phys. 110, 043928 (2011).
- N. O. Khalifa, H. M. Widatallah, A. M. Gismelseed,
   F. N. Al-Mabsali, R. G. S. Sofin, and M. Pekala,
   Hyperfine Interactions 237, 46 (2016).
- M. Shang, C. Zhang, T. Zhang, L. Yuan, L. Ge, H. Yuana, and S. Feng, Appl. Phys. Lett. **102**, 062903 (2013).
- Z. X. Cheng, H. Shen, J. Y. Xu, P. Liu, S. J. Zhang, J. L. Wang, X. L. Wang, and S. X. Dou, J. Appl. Phys. 111(3), 034103 (2012).
- L. Duan, G.-J. Jiang, W. Peng, M. Cheng, and X.-J. Wang, Rengong Jingti Xuebao/Journal of Synthetic Crystals 44(8), 2144 (2015).
- L. J. Downie, R. J. Goff, W. Kockelmann, S. D. Forder, J. E. Parker, F. D. Morrison, and P. Lightfoot, J. Solid State Chem. 190, 52 (2012).
- A. Sklyarova, V.I. Popkov, I.V. Pleshakov,
   V.V. Matveev, H. Štěpanková, and V. Chlan,
   Applied Magnetic Resonance 51, 1701 (2020).
- A. Yu. Germov, K. N. Mikhalev, Z. N. Volkova,
   A. P. Gerashchenko, E. I. Konstantinova, and
   I. A. Leonidov, JETP Lett. 109, 252 (2019).
- H. Štěpanková, P. Novák, J. Englich, J. Kohout, E. G. Caspary, M. Kučera, K. Nitsch, and H. de Gronckel, J. Magn. Magn. Mater. 196–197, 412 (1999).
- 15. O. Gamaliy, Hyperfine interactions in magnetic iron oxides with nonmagnetic substitutions, Abstract of doctoral thesis, Charles University in Prague (2006).
- $16. \ http://materials.springer.com/isp/crystallographic/\\ docs/sd \ 1412837 \ .$
- J. B. Nelson and D. P. Riley, Proc. Phys. Soc. 57(3), 160 (1945).
- 18. A. V. Zalesskii, Sov. Phys.-Uspekhi 28, 638 (1985).
- 19. А. М. Балбашов, А. В. Залесский, В. Г. Кривенко, Е. В. Синицын, Письма в ЖТФ  ${\bf 14}(4),\,293$  (1988).
- 20. А. В. Залесский, Письма в ЖЭТФ 12(10), 468 (1970).
- A. V. Zalesskii, A. N. Lobachev, L. N. Dem'yanets, A. N. Ivashchenko, O. K. Mel'nikov, and T. G. Lebedeva, Sov. Phys. JETP 34(6), 1252 (1972).
- S. Nadolski and H. Szymczak, J. Magn. Magn. Mater. 21, 167 (1980).
- 23. Н. М. Ковтун, Е. Е. Соловьев, А. А. Шемяков, В. А. Хохлов, Письма в ЖЭТФ  ${\bf 14},\,105\,\,(1971).$
- 24. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, Harper & Row, N.Y. (1963).
- 25. A. Freeman and R. Frankel, *Hyperfine Interactions*, Academic Press, N.Y.-London (1967).
- 26. A. G. Smol'nikov, V. V. Ogloblichev, A. Yu. Germov, K. N. Mikhalev, A. F. Sadykov, Yu. V. Piskunov,

- A. P. Gerashchenko, A. Yu. Yakubovskii, M. A. Muflikhonova, S. N. Barilo, and S. V. Shiryaev, JETP Lett. **107**, 134 (2018).
- 27. G. C. Carter, L. H. Bennett, and D. J. Kahan, *Metallic Shifts in NMR*, Pergamon, Oxford (1977), part 1.
- 28. И. В. Грибов, Н. А. Москвина, А. П. Носов, С. С. Дубинин, Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований **1**, 46 (2018).
- H. Lutgemeier, H.G. Bohn, and M. Brajczewska, J. Magn. Magn. Mater. 21, 289 (1980).

### О магнитоэлектрической связи в $(Ni, Cu)B_2O_4$

 $M. B. Еремин^{1)}, A. P. Нурмухаметов^{1)}$ 

Институт физики Казанского (Приволжского) федерального университета, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 18 мая 2021 г. После переработки 2 июня 2021 г. Принята к публикации 2 июня 2021 г.

Анализируется механизм магнитоэлектрической связи спинов  $\mathrm{Ni}^{2+}$  и  $\mathrm{Cu}^{2+}$  с внешним электрическим полем в ( $\mathrm{Ni}, \mathrm{Cu})\mathrm{B}_2\mathrm{O}_4$ , обусловленный связью 3d-электронов с электрическим полем и спин-орбитальным взаимодействием. Показано, что упорядочение спинов в плоскости ab кристалла индуцирует электрическую поляризацию вдоль оси c кристалла, причем она главным образом обусловлена ионами никеля. Для получения электрической поляризации в антиферромагнетике  $\mathrm{CuB}_2\mathrm{O}_4$  необходимо приложить внешнее магнитное поле в плоскости ab.

DOI: 10.31857/S1234567821130073

1. Введение. Выяснение микроскопических моделей связи спинов с электрическим полем - актуальная задача современных исследований магнитоэлектриков и мультиферроиков [1–5]. Подробный обзор предложенных механизмов магнитоэлектрической связи до 2015 г. приведен в обзоре [6]. В последние годы обнаруживаются новые соединения, для объяснения магнитоэлектрических свойств которых требуются новые микроскопические механизмы магнитоэлектрической связи. К числу таких соединений относится и (Ni, Cu)B<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Как уже подчеркивалось в экспериментальной работе [7], особенности связи спинов Ni и Cu с электрическим полем в этом соединении не могут быть объяснены ни моделью спиновых токов [8], ни стрикционным механизмом [9]. Авторы работы [7], в качестве возможного, указали на механизм Аримы [10], однако численных оценок параметра связи спинов никеля с электрическим полем не привели. Таким образом, проблема осталась не разрешенной. В данной работе мы приводим результаты нашего расчета связи спинов с электрическим полем, которая индуцируется взаимодействием орбитальных моментов с электрическим полем и затем передается орбитально-спиновыми взаимодействиями на спины Ni и Cu. Идея такого двухзвенного механизма обсуждалась ранее в теории электрополевого эффекта магнитного резонанса в разбавленных парамагнетиках [11]. Новизна нашего рассмотрения в этом плане связана с описанием первого звена, а именно природы связи 3*d*-электронов с электрическим полем.

Эффективность рассматриваемого механизма зависит от особенностей энергетической структуры

магнитного иона. Согласно структурным данным [7, 12] магнитные ионы  $Ni^{2+}$  и  $Cu^{2+}$  занимают позиции с точечной группой симметрии  $S_4$ .

**2. Уровни энергии и волновые функции.** Оператор кристаллического поля имеет вид:

$$H_{cr} = B_0^{(2)} C_0^{(2)} + B_0^{(4)} C_0^{(4)} + B_4^{(4)} C_4^{(4)} + B_{-4}^{(4)} C_{-4}^{(4)}, (1)$$

где  $C_q^{(k)}$  — компоненты сферических тензорных операторов кристаллического поля, действующих на состояния 3d-электронов. Они связаны со сферическими функциями  $Y_{k,q}\left(\theta,\phi\right)$  соотношением:  $C_q^{(k)}=\sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}}\sum Y_{k,q}\left(\theta_i,\phi_i\right)$ . Индекс суммирования i относится к электронам в 3d-оболочке.

Параметры кристаллического поля  $B_q^{(k)}$  рассчитывались нами с использованием модели обменных зарядов [13]. Для оценки обменного заряда на связях медь-кислород привлекались экспериментальные данные о кристаллических расщеплениях  $\mathrm{Cu}^{2+}$  в  $\mathrm{CuB}_2\mathrm{O}_4$ , которые получены в работе [14]. Наша теоретико-групповая интерпретация возбужденных состояний  $\mathrm{Cu}^{2+}$  соответствует, предложенной Меньшениным [15]. В локальной системе координат с  $\mathrm{Im}\left[B_4^{(4)}\right] = 0$  и  $\mathrm{Re}\left[B_4^{(4)}\right] > 0$  параметры кристаллического поля оказались равными (в см $^{-1}$ ):

$$B_0^{(2)} = -17720, \ B_0^{(4)} = 9940, \ B_4^{(4)} = 14030.$$
 (2)

Ниже мы будем считать, что  $\mathrm{Re}\left[B_4^{(4)}\right]>0$ . Это означает, что для позиции A1 локальная система координат повернута относительно кристаллографической системы на угол  $20.9^\circ$  вокруг оси c кристалла (угол отсчитывается против часовой стрелки), для позиции A2 угол поворота соответственно равен

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: meremin@kpfu.ru; alrnurmuhametov@gmail.com

 $-20.9^{\circ}$ . Энергии кристаллических подуровней основного терма  $\mathrm{Ni^{2+}(^3F)}$  и  $\mathrm{Cu^{2+}(^2D)}$  и соответствующие им волновые функции приведены в табл. 1 и 2 соответственно.

**Таблица 1.** Уровни энергии и волновые функции  ${\rm Ni}^{2+}(^3{\rm F})$  в  ${\rm NiB_2O_4}$ 

Уровни	Представления	Волновые
энергии,	точечной	функции
$_{\rm CM}^{-1}$	группы $S_4$	
13943	$^2\Gamma_{34}$	$\psi_7 = C_2  -1\rangle + C_1  3\rangle$
10040	1 34	$\psi_6 = C_2 1\rangle + C_1 -3\rangle$
13768	$\Gamma_1$	$\psi_5 =  0\rangle$
11179	$^2\Gamma_2$	$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}( 2\rangle +  -2\rangle)$
4744	$^1\Gamma_{34}$	$\psi_3 = C_1  -1\rangle - C_2  3\rangle$
4144	± 34	$\psi_2 = C_1 1\rangle - C_2 -3\rangle$
0	$^1\Gamma_2$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}( 2\rangle -  -2\rangle)$

**Таблица 2.** Уровни энергии и волновые функции  $\mathrm{Cu^{2+}(^2D)}$  в  $\mathrm{CuB_2O_4}.$  В скобках указаны экспериментальные значения из [14]

Уровни	Представления	Волновые
энергии,	точечной	функции
$_{\mathrm{CM}}^{-1}$	группы $S_4$	
15540	Г	$\psi_5 = \frac{i}{\sqrt{2}}( -1\rangle +  1\rangle)$
(15440)	$\Gamma_{34}$	$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}( -1\rangle -  1\rangle)$
13330	$\Gamma_1$	$\psi_3 =  0\rangle$
(13450)	1 1	$\varphi_3 =  0\rangle$
11170	$^2\Gamma_2$	$\psi_2 = \frac{i}{\sqrt{2}}( -2\rangle -  2\rangle)$
(11340)	1 2	$\varphi_2 = \sqrt{2}( -2/- 2/)$
0	$^1\Gamma_2$	$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}( 2\rangle +  -2\rangle)$

Значения коэффициентов в волновых функциях с точностью 1% равны  $C_1\cong\sqrt{\frac{1}{3}}, C_2\cong\sqrt{\frac{2}{3}}.$  Как видно из таблиц 1 и 2, основными состояниями ионов никеля и меди являются орбитальные синглеты.

3. Оператор связи 3d-электронов с электрическим полем. Эффективный оператор энергии связи 3d-электронов электрическим полем записывается в виде [16, 17].

$$H_E = \sum_{k,p,t} \left\{ E^{(1)} U^{(k)} \right\}_t^{(p)} D_t^{(1k)p}.$$
 (3)

Здесь фигурные скобки обозначают прямое произведение сферических компонент электрического поля  $E_0^{(1)}=E_z;\; E_{\pm 1}^{(1)}=\mp \frac{1}{\sqrt{2}}\left(E_x\pm i\cdot E_y\right)$  с компонентами единичного тензорного оператора  $U^k,p$  принимает значения  $1,\;3$  и  $5,\;k$  — четные числа 2 и 4. Ве-

личины  $D_t^{(1k)p}$  определяются двумя вкладами. Первый из них обусловлен смешиванием состояний электронных конфигураций  $3d^N$  и  $3d^{(N-1)}4p$  нечетным кристаллическим полем, а второй связан с процессами переноса заряда от ионов кислорода в 3d-болочку иона. Общие выражения для расчета те же самые, что и в [16, 17]. В локальной системе координат для позиции CuA1 рассчитанные параметры оказались равными (в атомных единицах, а. u.):

$$D_2^{(12)3} = 0.018 + 0.164i,$$

$$D_2^{(14)3} = -0.110 - 0.055i,$$

$$D_2^{(14)5} = -0.015 - 0.02i.$$
(4)

### 4. Оператор связи спинов основного состояния с электрическим полем.

 $4.1.~Ni^{2+}(^3F)$ . В третьем порядке теории возмущений имеются три типа процессов виртуальных возбуждений, приводящих к связи спинов с электрическим полем. Они поясняются на рис. 1.

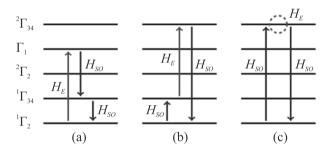


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схемы виртуальных возбуждений  $\mathrm{Ni^{2+}(^3F)}$ 

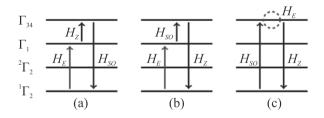


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схемы виртуальных возбуждений  $\mathrm{Cu}^{2+}(^2\mathrm{D})$ 

В процессе возбуждения типа (а) из-за взаимодействия с электрическим полем (оператор  $H_E$ ) происходит переход из основного состояния в возбужденное состояние  $\Gamma_1$ , затем из-за спин-орбитального взаимодействия в состояние  ${}^1\Gamma_{34}$  и потом в основное  ${}^1\Gamma_2$ . При этом промежуточное состояние  ${}^1\Gamma_{34}$  может быть заменено на  ${}^2\Gamma_{34}$ . Учитывая также процессы, сопряженные описанным, получаем эффективный оператор:

$$H_{\text{eff}}^{(a)} = i \frac{\lambda_{\text{Ni}}^2 D_z^{(a)}}{E(\Gamma_1)} \left( \frac{C_1 \left( \sqrt{15}C_1 + 3C_2 \right)}{E(\Gamma_{34})} + \frac{C_2 \left( \sqrt{15}C_2 - 3C_1 \right)}{E(\Gamma_{34})} \right) \left( S_+^2 - S_-^2 \right) E_z, \tag{5}$$

где  $S_+$  и  $S_-$  – операторы повышения и понижения спина, соответственно, и введено следующее обозначение:

$$D_z^{(a)} = \operatorname{Im}\left[\frac{1}{5}\sqrt{\frac{1}{21}}D_{-2}^{(12)3} - \frac{1}{6}\sqrt{\frac{1}{35}}D_{-2}^{(14)3} + \frac{1}{30}D_{-2}^{(14)5}\right]. \tag{6}$$

На рисунке 1b изображен второй возможный процесс: возбуждение вначале индуцируется спинорбитальным взаимодействием (оператор  $H_{SO}$ ) на  $^1\Gamma_2$ , затем происходит переход из-за взаимодействия с электрическим полем на  $^2\Gamma_2$  и на третьем этапе под действием спин-орбитального взаимодействия — в основное состояние  $^1\Gamma_2$ . Соответствующий этому типу процессов оператор связи спинов с электрическим полем записывается следующим образом:

$$H_{\text{eff}}^{(b)} = \frac{\lambda_{\text{Ni}}^{2} \left(\sqrt{5}C_{1} + \sqrt{3}C_{2}\right) \left(\sqrt{3}C_{1} - \sqrt{5}C_{2}\right)}{2E\left({}^{1}\Gamma_{34}\right)E\left({}^{2}\Gamma_{34}\right)} \left(\left(S_{+}^{2} + S_{-}^{2}\right) \operatorname{Re}\left[D_{z}^{(b)}\right] + i\left(S_{+}^{2} - S_{-}^{2}\right) \operatorname{Im}\left[D_{z}^{(b)}\right]\right) E_{z},\tag{7}$$

$$D_z^{(b)} = \left(C_1^2 - C_2^2\right) \left[ -\frac{1}{5} \sqrt{\frac{1}{21}} D_2^{(12)3} - \sqrt{\frac{1}{35}} D_2^{(14)3} + \frac{1}{5} D_2^{(14)5} \right] + C_1 C_2 \left[ -\frac{2}{5} \sqrt{\frac{1}{35}} D_{-2}^{(12)3} + \frac{2}{3} \sqrt{\frac{1}{21}} D_{-2}^{(14)3} - \frac{2}{3} \sqrt{\frac{1}{15}} D_{-2}^{(14)5} \right].$$
 (8)

Третий тип процессов на рис. 1с реализуется через орбитально вырожденные состояния  ${}^2\Gamma_{34}$  (а также через  ${}^1\Gamma_{34}$ ), в базисе которых имеются матричные элементы от оператора  $H_E$ . Соответствующий оператор связи спинов с электрическим полем записывается в виде:

$$H_{\text{eff}}^{(c)} = -\frac{\lambda_{\text{Ni}}^{2}}{4} \left( \frac{\left(\sqrt{5}C_{1} + \sqrt{3}C_{2}\right)^{2} \left(\left(S_{+}^{2} + S_{-}^{2}\right) \operatorname{Re}\left[D_{z}^{(c_{1})}\right] + i\left(S_{+}^{2} - S_{-}^{2}\right) \operatorname{Im}\left[D_{z}^{(c_{1})}\right]\right)}{E\left({}^{1}\Gamma_{34}\right)^{2}} + \frac{\left(\sqrt{3}C_{1} - \sqrt{5}C_{2}\right)^{2} \left(\left(S_{+}^{2} + S_{-}^{2}\right) \operatorname{Re}\left[D_{z}^{(c_{2})}\right] + i\left(S_{+}^{2} - S_{-}^{2}\right) \operatorname{Im}\left[D_{z}^{(c_{2})}\right]\right)}{E\left({}^{2}\Gamma_{34}\right)^{2}} \right) E_{z},$$

$$(9)$$

где введены обозначения:

$$D_z^{(c_1)} = C_1^2 D_1 + C_1 C_2 D_2,$$

$$D_z^{(c_2)} = C_2^2 D_1 - C_1 C_2 D_2,$$

$$D_1 = -\frac{2}{5} \sqrt{\frac{1}{35}} D_{-2}^{(12)3} + \frac{2}{3} \sqrt{\frac{1}{21}} D_{-2}^{(14)3} - \frac{2}{3} \sqrt{\frac{1}{15}} D_{-2}^{(14)5},$$

$$D_2 = \frac{2}{5} \sqrt{\frac{1}{21}} D_2^{(12)3} + 2 \sqrt{\frac{1}{35}} D_2^{(14)3} - \frac{2}{5} D_2^{(14)5}.$$
(10)

4.2.  $Cu^{2+}(^2D)$ . Отметим, что описанные выше операторы можно рассмотреть и в случае иона  $Cu^{2+}(^2D)$  для соединения  $CuB_2O_4$ . Однако, как нетрудно убедиться, для ионов с S=1/2 все матричные элементы операторов  $S_+^2$  и  $S_-^2$  равны нулю. Это

объясняет резкое усиление связи спинов с электрическим полем в кристаллах  $\mathrm{CuB_2O_4}$  при замене ионов  $\mathrm{Cu^{2+}(^2D)}$  на ионы  $\mathrm{Ni^{2+}(^3F)}$ , обнаруженное в работе [7]. Происхождение магнитоэлектрической связи в  $\mathrm{CuB_2O_4}$  мы можем также объяснить виртуальными процессами возбуждения иона меди (поясняются на рис. 2). Комбинируя в третьем порядке теории возмущений операторы  $H_E,\ H_{SO}$  и оператор взаимодействия орбитального момента меди с индукцией магнитного поля, получаем эффективный оператор энергии связи:

$$H_{\text{eff}}^{\text{Cu}} = \frac{\lambda_{\text{Cu}} \mu_B d_z^{(a)}}{E(\Gamma_1) E(\Gamma_{34})} [S_+ B_+ + S_- B_-] E_z - \frac{\lambda_{\text{Cu}} \mu_B}{2E(\Gamma_{34})^2} \left[ d_{z_-}^{(b)} S_+ B_+ + d_{z_+}^{(b)} S_- B_- \right] E_z,$$
 (11)

где  $B_{+}=B_{x}+iB_{y}, B_{-}=B_{x}-iB_{y}$ , а параметры, описывающие связь 3d-электронов с электрическим полем, определяются выражениями:

$$d_z^{(a)} = \operatorname{Re}\left[-2\sqrt{\frac{1}{35}}D_2^{(12)3} + \sqrt{\frac{1}{21}}D_2^{(14)3} - \sqrt{\frac{1}{15}}D_2^{(14)5}\right],$$

$$d_{z\pm}^{(b)} = \sqrt{\frac{1}{35}}D_{\pm 2}^{(12)3} + \frac{2}{3}\sqrt{\frac{1}{21}}D_{\pm 2}^{(14)3} - \frac{2}{3}\sqrt{\frac{1}{15}}D_{\pm 2}^{(14)5}.$$
(12)

5. Обсуждение результатов. Из выражений (5), (7) и (9) видно, что спонтанное упорядочение спинов Ni (или внешнее магнитное поле) в плоскости ab кристалла индуцирует возникновение электрической поляризации вдоль оси c. Этот результат нашего расчета соответствует экспериментальным данным [7]. Далее перейдем к численным оценкам входящих в (5), (7), (9) величин.

Подставляя (4) в (6), (8) и (10), получаем (в а. и.):  $D_z^{(a)} = -0.006, \ D_z^{(b)} = -0.012 + 0.007i, \ D_z^{(c_1)} = -0.019 + 0.016i, \ D_z^{(c_2)} = 0.004 - 0.013i.$  Используя эти величины и значения энергетических интервалов из таблицы 1, по формулам (5), (7), (9) получаем вид оператора связи спинов Ni с электрическим полем в расчете на один ион Ni:

$$\begin{split} H_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{Ni}} &= d_{1}^{\mathrm{Ni}} \left(S_{+}^{2} + S_{-}^{2}\right) E_{z} + i d_{2}^{\mathrm{Ni}} \left(S_{+}^{2} - S_{-}^{2}\right) E_{z}, \quad (13) \end{split}$$
 где  $d_{1}^{\mathrm{Ni}} = 0.00114 \, \mathrm{a.u.}, \ d_{2}^{\mathrm{Ni}} = -0.00115 \, \mathrm{a.u.}$ 

Умножив эти значения на число ионов никеля  $(N=2.54\cdot 10^{21}\,\mathrm{cm}^{-3})$ , соответствующих антиферромагнитно упорядоченной подрешетке спинов, в позициях 4b, получаем коэффициенты макроскопической электрической поляризации  $P_1=d_1^\mathrm{Ni}N=24.4\mu C/m^2$ ,  $P_2=d_2^\mathrm{Ni}N=-24.7\mu C/m^2$ .

Максимальное значение макроскопической электрической поляризации в (Ni, Cu) $B_2O_4$ , зарегистрированное в работе [7], равно  $3.5\mu C/m^2$  для концентрации никеля  $2.7\,\%$ .

Таким образом, мы убеждаемся, что рассмотренный нами механизм вполне объясняет происхождение связи спинов иона никеля с электрическим полем.

Что касается механизма Аримы [10], то его можно оценить следующим образом: в формулах [10] так же, как и в (5), (7), (9) фигурирует параметр спинорбитальной связи, умноженный на квадрат коэффициента перед антисвязывающей орбиталью ( $\lambda_{\sigma} \sim 0.2$ ). При этом вместо энергии возбуждения иона Ni в формулах (5), (7), (9) будет фигурировать энергия переноса заряда из 2p-оболочки кислорода в 3d-оболочку никеля (меди), а это примерно  $80000 \, \text{сm}^{-1}$  [18]. Кроме того, в формулах Аримы [10] не принимается во внимание фактор усиления действия

электрического поля на орбитальный момент 3d-электрона, связанный с нечетным кристаллическим полем. Суммируя сказанное, приходим к выводу, что параметр связи спина с электрическим полем по механизму Аримы примерно на 2-3 порядка меньше измеренного в (Ni, Cu)B $_2$ O $_4$  и может быть отброшен не только в случае (Ni, Cu)B $_2$ O $_4$ , но и в других оксидах с незаполненными 3d-оболочками.

Как отмечалось выше, связь спинов меди с электрическим полем по механизмам (5), (7), (9) отсутствует. Этот вывод соответствует результатам работы [19], в которой магнитоэлектрическая связь в  ${\rm CuB_2O_4}$  не была обнаружена, хотя для этого предпринимались специальные исследования. Позже в работе [20] сообщалось, что электрическая поляризация в  ${\rm CuB_2O_4}$  вдоль оси c кристалла возникает, если приложить внешнее магнитное поле в плоскости ab.

Из (11) видно, что индукция магнитного поля  ${\bf B}$ , лежащая в плоскости ab, индуцирует электрическую поляризацию вдоль оси c кристалла. Перепишем (11), используя аналогичные (13) обозначения:

$$H_{\text{eff}}^{\text{Cu}} = d_1^{\text{Cu}} \left[ S_+ B_+ + S_- B_- \right] E_z + i d_2^{\text{Cu}} \left[ S_- B_- - S_+ B_+ \right] E_z, \tag{14}$$

где  $d_1^{\mathrm{Cu}}=3.9\cdot 10^{-8}$  а.u.,  $d_2^{\mathrm{Cu}}=2.8\cdot 10^{-8}$  а.u. Коэффициенты макроскопической электрической поляризации в  $\mathrm{CuB_2O_4}$ , индуцированной внешним магнитным полем в плоскости ab равны:  $P_1^{\mathrm{Cu}}=d_1^{\mathrm{Cu}}N=0.0008\mu C/T\cdot m^2$ ,  $P_2^{\mathrm{Cu}}=d_2^{\mathrm{Cu}}N=0.0006\mu C/T\cdot m^2$ . Таким образом, поляризация может проявиться лишь в сильных магнитных полях порядка  $10\,T$ , либо при допировании  $\mathrm{CuB_2O_4}$  редкоземельными ионами с большими магнитными моментами, как это происходит в кристаллах  $\mathrm{DyCrO_4}$  [21].

6. Заключение. В настоящем письме предложен механизм магнето-электрической связи спинов Ni<sup>2+</sup> с внешним электрическим полем в (Ni, Cu)B<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, обусловленный совместным действием нечетного кристаллического поля и спин-орбитального взаимодействия. Показано, что упорядочение спинов никеля в плоскости ав кристалла при антиферромагнитном упорядочении или под действием внешнего магнитного поля индуцирует электрическую поляризацию вдоль оси c кристалла. Оцененное значение электрической поляризации соответствует по порядку величины имеющимся экспериментальным данным. Оценена связь спинов ионов меди в CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> с электрическим и магнитными полями. Очевидно, что описанная нами схема расчета применима для широкого круга магнетиков, в которых магнитные ионы находятся в позициях без центра инверсии.

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики "БАЗИС".

- 1. Y. Tokura, Science 312, 1481 (2006).
- S.W. Cheong and M. Mostovoy, Nat. Matter 6, 13 (2007).
- 3. D. Khomskii, Physics 2, 20 (2009).
- A. P. Pyatakov and A. K. Zvezdin, Phys. Usp. 55, 557 (2012).
- Y. Tokura, S. Seki, and N. Nagaosa, Rep. Prog. Phys. 77, 076501 (2014).
- D. Shuai, L. Jun-Ming, C. Sang-Wook, and R. Zhifeng, Adv. Phys. 64, 519 (2015).
- N. D. Khanh, N. Abe, K. Kubo, M. Akaki, M. Tokunaga,
   T. Sasaki, and T. Arima, Phys. Rev. B 87, 184416 (2013).
- H. Katsura, N. Nagaosa, and A. V. Balatsky, Phys. Rev. Lett. 95, 057205 (2005).
- A. Sergienko and E. Dagotto, Phys. Rev. B 73, 094434 (2006).

- 10. T. Arima, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 073702 (2007).
- 11. W.B. Mims, The Linear Electric Field Effect in Paramagnetic Resonance, Clarendon, Oxford (1976).
- 12. M. Martinez-Ripoll, S. Martínez-Carrera, and S. García-Blanco, Acta Crystallogr. B **27**, 677 (1971).
- B. Z. Malkin, in Modern Problems in Condensed Matter Sciences, ed. by A. A. Kaplyanskii and R. M. Macfarlane, Elsevier, Amsterdam (1987), v. 21, ch. 2, p. 13.
- R. V. Pisarev, A. M. Kalashnikova, O. Schöps, and L. N. Bezmaternykh, Phys. Rev. B 84, 075160 (2011).
- 15. В. В. Меньшенин, ЖЭТФ 151, 326 (2017).
- 16. М.В. Еремин, ЖЭТФ 156, 1084 (2019).
- 17. M. V. Eremin, Phys. Rev. B 100, 140404 (2019).
- J. Simonetti and D. S. McClure, Phys. Rev. B 16, 3887 (1977).
- G. Nénert, L.N. Bezmaternykh, A.N. Vasiliev, and T.T.M. Palstra, Phys. Rev. B 76, 144401 (2007).
- S. Toyoda, N. Abe, and T. Arima, Phys. Rev. B 93, 201109(R) (2016).
- 21. M. V. Eremin, Phys. Rev. B 102, 104107 (2020).

# Новый политип $NbS_3$ , квазиодномерного проводника с высокотемпературной волной зарядовой плотности<sup>1)</sup>

 $C. \Gamma. Зыбцев^+, H. Ю. Табачкова^{*\times}, B. Я. Покровский^{+2)}, C. А. Никонов^+, A. А. Майзлах^+, <math>C. B. Зайшев-Зотов^+$ 

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

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

<sup>×</sup> Национальный Исследовательский Технологический Университет (НИТУ), 119049 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 июня 2021 г. После переработки 2 июня 2021 г. Принята к публикации 7 июня 2021 г.

Синтезирован новый политип NbS $_3$ -квазиодномерного проводника с высокотемпературными волнами зарядовой плотности (ВЗП). Исследования в просвечивающий электронный микроскоп (ПЭМ) при комнатной температуре показали, что из двух сверхструктур, существующих в изученной ранее моноклинной фазе, наблюдается лишь одна, с периодом вдоль цепочек, близким к (1/0.352)b. Помимо этого, наблюдается новое несоизмеримое искажение решетки с периодом, близким к 2b. Транспортные свойства исследованных образцов находятся в согласии с результатами исследования сверхструктуры. Постоянные основной решетки несколько отличаются от соответствующих параметров, установленных для изученной ранее моноклинной фазы. Предположительно, новую фазу можно считать промежуточной между двумя основными известными фазами NbS $_3$  – моноклинной и триклинной. При этом ее свойства можно объяснить в рамках модели, согласно которой элементарную ячейку моноклинной фазы можно рассматривать как результат наложения ячеек триклинной фазы.

DOI: 10.31857/S1234567821130085

Введение. Трихалькогениды металлов V группы,  $MX_3$  (M = Ta, Nb, X = S, Se), интересны, прежде всего, тем, что являются квазиодномерными проводниками, в которых, в результате переходов Пайерлса, образуются волны зарядовой плотности (ВЗП) [1]. Волны зарядовой плотности возникают в результате конденсации свободных электронов в коллективное диэлектрическое состояние благодаря электронфононному взаимодействию. В одномерной модели Пайерлса период ВЗП определяется заполнением зоны проводимости и равен  $\pi/k_F$ , где  $k_F$  – фермиевский импульс. Образцы этих материалов представляют собой нитевидные кристаллы – вискеры, которые имеют цепочечную кристаллическую структуру, причем атомные цепочки связаны силами ван-дер-Ваальса и, как правило, образуют двумерные слои, между которыми межцепочечная связь еще слабее, чем внутри слоев (см., например, [2]).

Свойства соединений  $MX_3$  и волн зарядовой плотности в них весьма многообразны.  $NbSe_3$ , наиболее

исследованное соединение этого типа, известно тем, что в нем впервые наблюдалось скольжение ВЗП. В NbSe3 наблюдаются два фазовых перехода с образованием двух ВЗП, при  $T_{P1}=145\,\mathrm{K}$  и  $T_{P2}=59\,\mathrm{K}$ , причем, ниже  $T_{P2}$ , наряду с двумя ВЗП, остаются свободные электроны. Хорошо изучено и соединение  $\mathrm{TaS}_3$ , имеющее два политипа. В моноклинной фазе этого соединения также образуются две ВЗП, при  $T_{P1}=240\,\mathrm{K}$  и  $T_{P2}=160\,\mathrm{K}$ , но ниже  $T_{P2}$ , свободных электронов не остается. В ромбической фазе  $\mathrm{TaS}_3$  образуется единственная ВЗП при температуре  $\mathrm{220\,K}$ , ниже которой электронный спектр также полностью диэлектризуется.

Свойства NbS<sub>3</sub> отличаются особым многообразием. Во-первых, NbS<sub>3</sub> кристаллизуется в двух фазах – триклинной (NbS<sub>3</sub>-I) и моноклинной (NbS<sub>3</sub>-II), причем обсуждается вопрос и о существовании и других фаз [3]. Во-вторых, в рамках каждой из фаз свойства варьируются, что обусловлено отклонением от стехиометрии, дефектной структурой, и, возможно, другими, еще не установленными параметрами. В-третьих, в одном образце могут сосуществовать несколько ВЗП. Так, в низкоомных образцах II фазы три ВЗП (ВЗП-0, ВЗП-1 и ВЗП-2) образуются

 $<sup>^{1)}</sup>$ См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала.

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup>e-mail: vadim.pokrovskiy@mail.ru

при  $T_{P0} = 460 \,\mathrm{K}$ ,  $T_{P1} = 360 \,\mathrm{K}$  и  $T_{P2} = 150 \,\mathrm{K}$ , соответственно [4]. Все три ВЗП могут скользить в постоянном электрическом поле и синхронизироваться внешним ВЧ-СВЧ полем. Скольжение ВЗП-1 отличается высокой когерентностью [4], что является одной из отличительных характеристик NbS<sub>3</sub>-II [1].

Еще одна особенность  $NbS_3$ -II заключается в том, что периоды  $B3\Pi$ -0 и  $B3\Pi$ -1 близки к утроенной постоянной решетки вдоль цепочек (период  $B3\Pi$ -2 неизвестен), в то время как периоды  $B3\Pi$  в других соединениях  $MX_3$  примерно соответствуют четырехкратной соизмеримости. По-видимому, столь существенные различия в свойствах этих, казалось бы, изоэлектронных соединений, коренятся во взаимном расположении атомов халькогена [5,6]. В зависимости от межатомного расстояния атомы S или S6 могут быть изолированы друг от друга или образовывать связанные пары. Соответственно, один валентный электрон атома халькогена может принадлежать либо зоне проводимости, либо локализованной связи.

Элементарная ячейка NbS<sub>3</sub>-II содержит четыре пары тригональных призматических колонн (идентичных цепочек Nb, окруженных атомами серы) параллельных оси b, что и определяет возможность образования нескольких ВЗП в этой фазе [2]. Двумерные слои параллельны плоскости ав. В проекции на эту плоскость на каждый период решетки вдоль оси а приходится 2 цепочки Nb, что хорошо видно в просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) высокого разрешения в режиме сканирования [2]. Соответственно, в проекции на плоскость bc на каждый период решетки приходится 4 цепочки. Из-за многочисленных дефектов упаковки (ДУ) [2,7–10] изображения в ПЭМ в плоскости вс могут быть сильно размыты, однако структура NbS<sub>3</sub>-II в этой плоскости хорошо видна в сканирующем туннельном микроскопе  $[2,10]^{3}$ .

Хотя связь ВЗП в NbS<sub>3</sub>-II с электронными состояниями, из которых они образуются, качественно описана [11], существующая картина не охватывает всего многообразия свойств NbS<sub>3</sub>-II. Например, в [4,11] показано, что ВЗП-2 образуется только в низкоомных образцах из электронов, связанных с вакансиями серы, которые действуют как доноры. В то же время, образцы с таким же удельным сопротивлением можно получить отжигом в инертном газе, но ВЗП-2 в них при этом не образуется. Встречаются

и другие особенности, наблюдающиеся в отдельных образцах. Так, в [12] представлен образец NbS<sub>3</sub>-II, на температурной зависимости проводимости которого наблюдается особенность вблизи 300 K, указывающая на еще один переход с образованием ВЗП.

Свойства образцов NbS<sub>3</sub>-I также существенно зависят от условий синтеза, однако структура этого соединения практически не вызывает вопросов. Элементарная ячейка содержит всего две цепочки Nb, являющиеся структурно-эквивалентными [1]. NbS<sub>3</sub>-I при всех температурах остается в диэлектрическом состоянии, что связывают с удвоением периода решетки вдоль оси b, параллельной оси вискеров. Это удвоение понижает симметрию структуры с моноклинной сингонии до триклинной [13]. Такую сверхструктуру можно рассматривать как специальный случай ВЗП, скольжение которой принципиально невозможно из-за двукратной соизмеримости ВЗП с решеткой.

В данной работе сообщается о синтезе образцов  $NbS_3$  с ранее не наблюдавшимися свойствами. Транспортные исследования свидетельствуют об образовании в них ВЗП-0 и отсутствии ВЗП-1 при комнатной температуре. Электронограммы согласуются с этим заключением и, кроме того, выявляют новое структурное упорядочение, с периодом, примерно соответствующим удвоению вдоль оси b. По-видимому, синтезированные образцы, хотя и относятся к фазе II, можно рассматривать как переходные между фазами I и II.

Синтез. Широкомасштабные исследования NbS<sub>3</sub>-II стали возможны сравнительно недавно благодаря определению условий роста этой фазы [14]. До этого в большинстве экспериментальных работ сообщалось о синтезе образцов триклинной фазы, среди которых в некоторых случаях встречались отдельные вискеры фазы II [15]. Согласно [14], кристаллы NbS<sub>3</sub>-II вырастают из газовой фазы смеси Nb и S с небольшим избытком серы при T = 700 - 720 °C и градиенте температуры  $\sim 2.5 \, \mathrm{K/cm}$ . I фаза вырастает при более низкой температуре, 680°C и ниже. Высокоомные NbS<sub>3</sub>-II вырастали ближе к горячему концу ампулы, низкоомные – ближе к холодному. Данные работы [14] были использованы при синтезе образцов в американской группе [3]. Несмотря на расхождения в постоянных решетки поперек цепочек и в обозначении осей, авторы [3] также наблюдали удвоение периода решетки (6.75 Å) вдоль цепочек в образцах, синтезированных при более низких температурах (NbS<sub>3</sub>-IV). В образцах, выращенных при более высоких T (NbS<sub>3</sub>-V), удвоения не наблюдалось (период 3.36 Å).

 $<sup>^{3)}</sup>$ Нам удалось наблюдать изображения цепочек, в том числе, ДУ, в плоскости bc также и в ПЭМ, см. дополнительный материал.

С 2008 года в ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН было выращено более 10 партий  ${\rm NbS_3}$  с целью получения образцов II фазы с контролируемыми свойствами. Тем не менее, более точную по сравнению с [14] информацию о воспроизводимых условиях синтеза разных "подфаз" получить пока не удалось. Образцы, исследовавшиеся в настоящей работе, были обнаружены в двух ростовых партиях, в зонах ампул, где встречались как низкоомные, так и высокоомные образцы с обычными свойствами.

**Транспортные свойства.** Образцы, о структуре которых речь пойдет ниже, были отобраны по транспортным свойствам. На рисунке 1 представле-

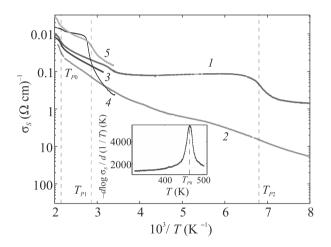


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости удельной проводимости трех аномальных образцов (# 1–3), обычного (# 4) и представляющего собой смесь фаз (# 5). На вставке — температурная зависимость логарифмической производной сопротивления образца # 3. Пунктирными линиями отмечены значения  $T_{P0} = 465 \; \mathrm{K}, T_{P1} = 350 \; \mathrm{K} \; \mathrm{u} \; T_{P2} = 147 \; \mathrm{K}.$  Размеры образцов: # 1 —  $31 \; \mathrm{mkm} \times 0.011 \; \mathrm{mkm}^2; \; # 2 \; - \; 58 \; \mathrm{mkm} \times 0.12 \; \mathrm{mkm}^2; \; # 3 - 138 \; \mathrm{mkm} \times 0.11 \; \mathrm{mkm}^2; \; # 4 - 21 \; \mathrm{mkm} \times 0.01 \; \mathrm{mkm}^2; \; # 5 - 130 \; \mathrm{mkm} \times 0.05 \; \mathrm{mkm}^2$ 

ны температурные зависимости удельной проводимости  $\sigma_s$  пяти образцов. На всех образцах наблюдается выраженная особенность  $\sigma_s(T)$  при  $T_{P0}\approx 465~{\rm K}.$  Измерения ниже комнатной температуры показали, что на образце #1 (низкоомном) при  $T_{P2}=147~{\rm K}$  наблюдается переход с образованием ВЗП-2, а на образце #2 (высокоомном) – нет, в согласии с [4].

Общее свойство образцов 1-3 – отсутствие перехода при  $T_{P1} \approx 360 \, \mathrm{K}$  с образованием ВЗП-1. На рисунке 1 его примерное положение обозначено пунктирной линией. Этот переход наблюдается на огромном большинстве исследованных образцов NbS<sub>3</sub>-II, поэтому обнаружение образцов без ВЗП-1 явилось весьма неожиданным результатом. Исследование нели-

нейной проводимости таких аномальных образцов показало, что движение ВЗП-0 в них можно наблюдать от  $T_{P0}$  до комнатной температуры, как минимум [16].

На рисунке 1 в качестве примера приведена также зависимость  $\sigma_s(T)$  для одного из обычных образцов (#4). В таких образцах скольжение ВЗП-0 можно наблюдать только выше  $T_{P1}$ , причем это достаточно сложно ввиду относительно небольшой величины проводимости ВЗП-0 [16]<sup>4)</sup>. На зависимости  $\sigma_s(T)$  образца #5 (рис. 1) особенность вблизи  $T_{P1}$  наблюдается, однако ее величина меньше, чем у образца #4. Наблюдалось скольжение ВЗП-0 и ВЗП-1. Ниже будет показано, что образец № 5 является смесью обычной и аномальной фаз.

Структурные свойства. Фрагмент образца #3 после окончания транспортных исследований был перенесен на сетку для структурных исследований в ПЭМ JEM-2100 при комнатной температуре. На рис. 2а представлено одно из изображений, на котором видны как структурные, так и сверхструктурные рефлексы. Период решетки вдоль цепочек, b = 3.3 Å, соответствует данным [1, 2, 7, 15, 17]. Однако период вдоль оси a, 8.6–8.8 Å, заметно меньше, чем в обычных кристаллах, с двумя ВЗП при комнатной температуре: согласно [1] a = 9.9 Å, согласно [2] – 9.65 Å<sup>5)</sup>.

Продольная компонента сверхструктурных рефлексов близка к  $0.36b^*$ , а вдоль оси  $a^*$  рефлексы сдвинуты на полпериода обратной решетки, что соответствует известному значению волнового вектора ВЗП-0,  $q_0=(0.5a^*,0.352b^*,0)$  [1, 2, 7, 15, 17]. В отличие от электронограмм обычных образцов, на которых волны зарядовой плотности проявляются в виде пар сателлитов с  $b^*$ -компонентами  $0.352b^*$  и  $0.298b^*$  (рис. 2b), рефлексы, соответствующие  $q_1=(0.5a^*,0.298b^*,0)$ , не наблюдаются. Таким образом, ВЗП-1 отсутствует, что соответствует результатам транспортных исследований (рис.  $1)^6$ ).

Кроме рефлексов  $q_0$ , на рис. 2 видны пары сверхструктурных рефлексов вблизи  $0.5b^*$ , которые соот-

 $<sup>^{4)}</sup>$ При этом особенность в области  $T_{P0}$  на  $\sigma_s(T)$  также не очень заметна (рис. 1), что можно объяснить шунтированием образца свободными электронами, конденсирующимися в ВЗП-1 при  $T_{P1}$  [16].

<sup>&</sup>lt;sup>5)</sup>Наши исследования в JEM-2100 дали значения а несколько ниже, но, во всех случаях, больше, чем в аномальном образце.

 $<sup>^{6)}</sup>$ В принципе, нельзя было исключить альтернативные варианты, например, отсутствии ВЗП-0, а не ВЗП-1 в аномальных образцах. Зависимости, представленные на рис. 2 можно было бы объяснить более высоким значением температуры перехода  $T_{P1}$  в аномальных образцах. Однако в этом случае на электронограммах были бы видны рефлексы, соответствующие  $q_1 = 0.298b^*$ .

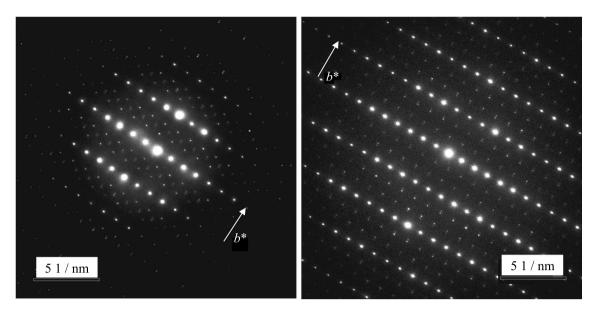


Рис. 2. Электронограммы в плоскости ab, полученные: (a) – на аномальном (#3) и (b) – обычном образце  $NbS_3$ -II

ветствуют новой несоизмеримой структуре  $0.477b^*$  и ранее не наблюдались в  ${\rm NbS_3}$ . Близость соответствующего искажения решетки к удвоению вдоль оси b указывает на связь структур аномальной фазы и фазы І. Обращает также на себя внимание, что внутри "дублета" расстояние между рефлексами составляет около  $0.051b^*$ , примерно такое же, как между сателлитами  $q_1$  и  $q_0$  в нормальных образцах фазы II.

Таким образом, исчезновение ВЗП-1 сопровождается появлением новой ВЗП, период которой примерно на 5% превышает 2b. Хотя отклонение периода ВЗП от двукратной соизмеримости с решеткой снимает запрет на скольжение этой ВЗП, на образцах #1–3 (при комнатной температуре и выше) мы наблюдали нелинейную проводимость, связанную только со скольжением ВЗП-0 [16].

В одной из ростовых партий, где были найдены аномальные образцы, мы нашли вискер, на электронограммах которого видны рефлексы, соответствующие всем трем сверхструктурам: центральные пары 0.477b\*, а также пары  $q_0$  и  $q_1$ . Изображения в ПЭМ показали, что этот образец состоит из доменов обычной и аномальной фаз (см. Дополнительный материал, рис. S3). Этим можно объяснить относительно малую величину особенности  $\sigma_s(T)$  в области  $T_{P1}$  (рис. 1).

**Обсуждение.** Для начала отметим, что аномальные свойства обнаруженных нами образцов нельзя объяснить отклонением состава от стехиометрического. Как показали транспортные исследования (рис. 1), среди аномальных могут встречаться как образцы с переходом при  $T_{P2}$ , так

и без него. Ранее было установлено, что переход при  $T_{P2}$  с образованием ВЗП-2 происходит в низкоомных образцах, отличающихся пониженным содержанием серы [4,11]. Таким образом, среди аномальных могут быть образцы с разной концентрацией вакансий серы.

Отсутствие ВЗП-1 в аномальных образцах может быть связано с пониженной концентрацией в них свободных электронов. Период решетки вдоль оси a в этих образцах несколько меньше, чем в обычных, и, вероятно, атомы S расположены ближе друг к другу. Согласно [5,6], число связанных друг с другом атомов оказывается больше, чем в обычных образцах NbS<sub>3</sub>-II. Соответственно, свободных электронов может оказаться недостаточно для их конденсации в ВЗП-1 [11].

Сложнее объяснить появление нового упорядочения с  $q_b = 0.477b^*$ . Возможно, ключ к разгадке содержится в работе [9], где показано, что элементарную ячейку NbS<sub>3</sub>-II, состоящую из 8 цепочек, можно представить как комбинацию четырех ячеек NbS<sub>3</sub>-I, каждая из которых содержит 2 цепочки Nb. В результате такого наложения постоянная решетки cоказывается примерно в 4 раза больше, чем у фазы І. Напомним, что в направлении c цепочки связаны слабее всего [2]. Можно предположить, что в аномальной фазе эти пары цепочек связаны друг с другом еще слабее, что приближает ее по свойствам к фазе І. Можно ожидать, что у аномальных образцов постоянная решетки c больше, чем у обычных. Данное предположение, по-видимому, подтверждается электронограммой в плоскости bc, полученной на образце #5 (рис. S3a). Полученное значение  $c=21.7\,\text{Å}$  почти на  $20\,\%$  больше, чем в обычных образцах,  $c=18.3\,\text{Å}$  [1]<sup>7)</sup>. Таким образом, "аномальные" образцы NbS<sub>3</sub>-II, можно считать промежуточными по структуре между фазами I и II. (Пример электрононограммы I фазы в плоскости ab приведен на рис. S4 дополнительного материала.).

Таким образом, в настоящей работе продемонстрировано существование новой фазы соединения NbS3, в которой при комнатной температуре отсутствует ВЗП-1, но есть упорядочение  $0.477b^*$ . Постоянная решетки новой фазы в направлении цепочек Nb  $b=3.3\,\text{Å}$  в пределах точности эксперимента не отличается от величины b для обычных образцов, но, по-видимому, значение  $a=8.6-8.8\,\text{Å}$ , заметно меньше, а  $c=21.7\,\text{Å}$  – заметно больше, чем для обычных кристаллов. При этом среди аномальных встречаются как образцы с переходом при  $T_{P2}$ , так и без него.

Авторы благодарят за поддержку Российский фонд фундаментальных исследований (гранты 20-02-00827 и 20-32-90231).

- 1. P. Monceau, Adv. Phys. 61, 325 (2012).
- E. Zupanic, H. J. P. van Midden, M. van Midden,
   S. Sturm, E. Tchernychova, V. Ya. Pokrovskii,
   S. G. Zybtsev, V. F. Nasretdinova, S. V. Zaitsev-Zotov,
   W. T. Chen, W. W. Pai, J. C. Bennett, and A. Prodan,
   Phys. Rev. B 98, 174113 (2018).
- M. A. Bloodgood, P. Wei, E. Aytan, K. N. Bozhilov, A. A. Balandin, and T. T. Salguero, APL Mater. 6, 026602 (2018).
- S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, V. F. Nasretdinova et al. (Collaboration), Phys. Rev. B 95, 035110 (2017).
- 5. A. Meerschaut, J. Phys. (France) 44, C3-1615 (1983).
- 6. A. Meerschaut and J. Rouxel, in Crystal Chemistry and

- Properties of Materials with Quasi-One-Dimensional Structures, ed. by J. Rouxel, by D. Reidel Publishing Company, Dordrecht (1986), p. 205.
- T. Cornelissens, G. van Tendeloo, J. van Landuyt, and S. Amelinckx, Phys. Stat. Sol. (a) 48, K5 (1978).
- 8. T. Iwazumi, M. Izumi, K. Uchinokura, R. Yoshizaki, and E. Matsuura, Physica B **143**, 255 (1986).
- A. Prodan, A. Budkowski, F.W. Boswell,
   V. Marinkovič, J.C. Bennett, and J.M. Corbett,
   J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 4171 (1988).
- W. Wu. Pai, M. W. Chu, W. T. Chen, V. Ya. Pokrovskii, S. V. Zaitsev-Zotov, S. G. Zybtsev, V. F. Nasretdinova, M. D. Ustenko, E. Zupanič, H. J. P. van Midden, M. van Midden, S. Sturm, A. Prodan, E. Tchernychova, and J. C. Bennett, Труды XXII Международного симпозиума "Нанофизика и наноэлектроника" 1, 285, Нижний Новгород, Издательство Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского (2018).
- S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, V. F. Nasretdinova, S. V. Zaitsev-Zotov, V. V. Pryadun, E. S. Kozlyakova, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, W. W. Pai, and D. Starešinić, Phys. Rev. B 99, 235155 (2019).
- 12. S.G. Zybtsev, V.Ya. Pokrovskii, V.F. Nasretdinova, and S.V. Zaitsev-Zotov, Appl. Phys. Lett. **94**, 152112 (2009).
- 13. J. Rijnsdorp and F. Jellinek, J. Solid State Chem. 25, 325 (1978).
- В. Я. Покровский, С. Г. Зыбцев, М. В. Никитин, И. Г. Горлова, В. Ф. Насретдинова, С. В. Зайцев-Зотов, УФН 183, 33 (2013).
- Z. Z. Wang, P. Monceau, H. Salva, C. Roucau, L. Guemas, and A. Meerschaut, Phys. Rev. B 40, 11589 (1989)
- S.G. Zybtsev, V.Ya. Pokrovskii, V.F. Nasretdinova, S.V. Zaitsev-Zotov, E. Zupanič, M. van Midden, and W.W. Pai, J. Alloys Compd. 854, 157098 (2021).
- 17. F. W. Boswell and A. Prodan, Physica B 99, 361 (1980).

 $<sup>^{7)}</sup>$ Из электронограмм обычных образцов в плоскости bc нами получено значение c, такое же как приведено в [1].

### Two-impurity scattering in quasi-one-dimensional systems<sup>1)</sup>

A. S. Ioselevich<sup>+\*2</sup>, N. S. Peshcherenko<sup>\*2</sup>

<sup>+</sup>Condensed-matter physics laboratory, National Research University Higher School of Economics, 101000 Moscow, Russia

L.D. Landau Institute for Theoretical Physics, 119334 Moscow, Russia

Submitted 8 June 2021 Resubmitted 8 June 2021 Accepted 10 June 2021

DOI: 10.31857/S1234567821130097

In quasi-one-dimensional systems with low concentration of impurities the quantization of transverse electronic motion is essential and the conductivity demonstrates van Hove singularities when the Fermi level  $E_F$ approaches a bottom of some transverse quantization subband  $E_N$ . In our previous work [1, 2] we have demonstrated that for the case of a conducting tube of radius R with weak disorder potential present on its surface, the scattering at the central part of each singularity is suppressed by single impurity non-Born effects. However, single-impurity treatment of scattering breaks down at  $|\varepsilon| \sim \varepsilon_{\min} = (n/\pi)^2$ , where  $\varepsilon = 2m^*R^2(E_F - E_N)$ ,  $m^*$  is effective electron mass,  $n = n_2(2\pi R)^2$  is dimensionless concentration of point-like repulsing impurities. n and dimensionless scattering amplitude  $\lambda$  are assumed to be small:  $n, \lambda \ll 1$ . For simplicity, in the present paper we consider only the case of repulsing impurities  $\lambda > 0$  and develop a theoretical description of multi-impurity effects in resistivity for  $|\varepsilon| \lesssim \varepsilon_{\min}$ . We show that these effects are effectively reduced to just two-impurity ones.

Scattering rate  $\tau_{mk}^{-1}$  for state with longitudinal momentum k in an m-th subband of transversal quantization is related to corresponding self-energy  $\Sigma_{mk}(\varepsilon)$ :  $\tau_{mk}^{-1} = -2\text{Im }\{\Sigma_{mk}\}$ . The current-carrying states from ("nonresonant") subbands with  $m \neq N$  are semiclassical, therefore the self-energies are formally additive:

$$\Sigma_{mk} = \sum_{i} \Sigma_{mk}^{(i)}, \quad \Sigma_{mk}^{(i)} \equiv \Sigma^{(i)} \left( E = \varepsilon_m + k^2 / 2m^* \right).$$

Our aim is to account for all scattering processes within the resonant subband (m = N) exactly while for nonresonant subband  $(m \neq N)$  processes perturbative treat-

ment is sufficient. For perturbative scattering amplitude we have:

$$\tilde{V}_{m_{1},m_{2}}^{(i)} = V_{m_{1},m_{2}}^{(i)} + V_{m_{1},N}^{(i)} G_{\varepsilon}(z_{i}, z_{i}) V_{N,m_{2}}^{(i)} \equiv 
\equiv \frac{\tilde{\lambda}_{i}}{\pi^{2}} e^{i\phi_{i}(m_{1}-m_{2})}, \quad \tilde{\lambda}_{i} = \lambda \left\{ 1 + \frac{\lambda}{\pi^{2}} G_{\varepsilon}(z_{i}, z_{i}) \right\}.$$
(1)

Here  $G_{\varepsilon}(z_i, z_i)$  is the exact multi-impurity Green function of a strictly one-dimensional problem. In order to take into account multiple scattering, we solve the following Dyson equation:

$$\begin{split} \frac{\tilde{\Lambda}^{(i)(\text{ren})}}{\pi^2} &= \frac{\tilde{\lambda}^{(i)}}{\pi^2} + \frac{\tilde{\lambda}^{(i)}}{\pi^2} g_{\varepsilon}(0) \frac{\tilde{\Lambda}^{(i)(\text{ren})}}{\pi^2}, \\ g_{\varepsilon}(0) &= \sum_{m \neq N} g_{\varepsilon}^{(m)}(0) \approx -i\pi^2, \quad g_{\varepsilon}^{(m)}(0) = -\pi i \varepsilon_m^{-1/2}, (2) \end{split}$$

where  $g_{\varepsilon}^{(m)}(0)$  is the free one-dimensional Green function in the m-th subband. The solution of (2) reads:

$$\tilde{\Lambda}_{i}^{(\text{ren})} = \lambda (q_{i}^{-1} + 1 + i\lambda)^{-1},$$
(3)

$$q_i = -\left[ (\lambda/\pi^2) G_{\varepsilon}(z_i, z_i) \right]^{-1} - 1. \tag{4}$$

In order to proceed we need to evaluate  $G_{\varepsilon}(z_i, z_i)$ . One-dimensional Green function satisfies the following Schroedinger equation:

$$\left\{-\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{d^2}{dz^2} + U(z) - \varepsilon\right\}G(z, z_i) = -\delta(z - z_i), \quad (5)$$

$$U(z) = \lambda/\pi^2 \sum_j \delta(z - z_j). \quad (6)$$

However, for  $|\varepsilon| \ll \varepsilon_{\rm nB}$  one can show that it is enough to consider only 3 impurities:

$$U(z) \to \overline{U}(z) = \lambda/\pi^2 \sum_{j=i,i\pm 1} \delta(z-z_j).$$
 (7)

Taking into account more distant impurities leads to only small corrections to  $\operatorname{Re} q_i$  and, at the same time,

<sup>1)</sup>Supplementary materials are available for this article at DOI: ???? and are accessible for authorized users.

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup>e-mail: iossel@itp.ac.ru; peshcherenko@itp.ac.ru

to dramatic suppression of  $\operatorname{Im} q_i$ . Therefore, for  $q_i$  we have:  $q_i = q_i^{(+)} + q_i^{(-)}$ , where

$$q_i^{(\pm)} \approx (k/4\lambda) \cot k \left[ L_i^{\pm} + 1/4\lambda \right], \quad k = 2\pi\sqrt{\varepsilon},$$
  
 $L_i^{(+)} = z_{i+1} - z_i, \quad L_i^{(-)} = z_i - z_{i-1}.$  (8)

Averaging over impurities positions, for resistivity  $\rho(\varepsilon)$  we arrive at the following result:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = -\frac{1}{\lambda^2} \operatorname{Im} \langle \Lambda^{(\text{ren})} \rangle_{L^{(\pm)}} = 
= \int_0^\infty \frac{\exp\{-n(L^{(+)} + L^{(-)})\} n^2 dL^{(+)} dL^{(-)}}{([q(L^{(+)}) + q(L^{(-)})]^{-1} + 1)^2 + \lambda^2}, \quad (9)$$

where  $\rho_0 = (4\pi/e^2 E_F) n(\lambda/\pi)^2$  is resistivity away from van Hove singularity. In principle, (9) together with (8) solve our problem: what is left is only to perform a double integration in (9) (see numerical results at Fig. 1). Below we do it analytically in different energy domains.

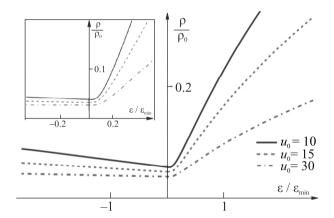


Fig. 1. (Color online) Plot of the total resistivity  $\rho(\varepsilon)$  for  $\lambda=0.2$  (main plot) and  $\lambda=0.05$  (inset). In both cases three values of  $u_0=\lambda/n$  are used:  $u_0=10,15,30$ 

For  $\varepsilon > 0$  quasistationary states confined between pairs of adjacent inpurities are present in the resonant subband, and for not very low  $\varepsilon$  the principal contribution to  $\rho(\varepsilon)$  comes from resonant scattering at these states. The corresponding resonance condition is  $kL = \pi p$ , where  $p = 1, 2, \ldots$  and L is either  $L_i^{(+)}$  or  $L_i^{(-)}$ . As a result, we obtain:

$$\frac{\rho_{\text{res}}}{\rho_0} = \frac{\pi n}{2\lambda^2} \sum_{p=1}^{\infty} e^{-nL_p} = \frac{\pi n}{2\lambda^2} \left[ \exp\left(\frac{n}{2\sqrt{\varepsilon}}\right) - 1 \right]^{-1}.$$
(10)

However,  $\rho_{\rm res}(\varepsilon)$  vanishes at  $\varepsilon \to 0$  and the finite contribution to  $\rho(\varepsilon=0)$  has non-resonant character. The most important nonresonant contribution  $\rho_{\rm twin}$  comes

from anomalously small  $L_i^{(+)}$  or  $L_i^{(-)}$ :  $L^{(\pm)} \sim 1/\lambda \ll 1/n$ . For  $\rho_{\rm twin}$  we have:

$$\frac{\rho_{\text{twin}}}{\rho_0} \approx 2n \int_0^\infty \frac{e^{-nL} dL}{(4\lambda L + 2)^2} = \frac{n}{4\lambda}.$$
 (11)

Why the scattering at twin impurities is dominant at low energy? There is no special enhancement for the twin impurities scattering at low  $\varepsilon$ , but single-impurity scattering ampitude  $\Lambda_i^{({\rm ren})}$  is suppressed by non-Born effects for  $\varepsilon \to 0$  [2]. This screening effect is, however, gradually destroyed, as a pair of impurities approach each other.

However, at the first glance this observation is counter-intuitive since the closer impurities are, the more their pair resembles a solitary "composite impurity", scattering at which is expected to be suppressed. The resolution to this paradox is as follows. Let us consider transitions between states from  $m, m' \neq N$  bands due to scattering at a twin pair. In this case, the scattering cross-section component that describes coherent scattering at 2 impurities constituting the pair is proportional to  $e^{ik_{mm'}L}$ , where  $L=|z_i-z_j|$  and typical momentum transfer  $k_{mm'}$  in a multi-channel system is large:  $k_{mm'} \sim N \gg 1$ . This contribution vanishes after averaging over L and, therefore, twin pair of impurities could be thought of as a "coherent" object for the processes within resonant subband but it is "incoherent" for scattering processes between states from currentcarrying nonresonant subbands.

To conclude, we have studied the behavior of  $\rho(\varepsilon)$  in a tube in the vicinity of a van Hove singularity. We have shown that in the range of energies  $-(1/4)(\varepsilon_{\min}\varepsilon_{nB})^{1/2} < \varepsilon < \varepsilon_{\min} \ln^{-2} \lambda$  the resistivity is dominated by scattering at rare "twin" pairs of close defects. The predicted effect is characteristic for multichannel systems, it can not be observed in strictly one-dimensional one.

This work was supported by Basic Research Program of The Higher School of Economics and by the Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics "Basis".

The authors are indebted to I. S. Burmistrov and P. M. Ostrovsky for valuable comments.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021130038

A.S. Ioselevich and N.S. Peshcherenko, JETP Lett. 108(12), 825 (2018).

A. S. Ioselevich and N. S. Peshcherenko, Phys. Rev. B 99, 035414 (2019).

# Модель для описания релаксации квантовомеханических систем с близко лежащими уровнями энергий<sup>1)</sup>

 $\mathit{M. B. Boвченкo}^{+*2}$ ,  $\mathit{B. IO. Шишков}^{+*\times}$ ,  $\mathit{A. A. 3ябловский}^{+*\times}$ ,  $\mathit{E. C. Андрианов}^{+*\times}$ 

+ Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 31 мая 2021 г. После переработки 9 июня 2021 г. Принята к публикации 9 июня 2021 г.

Существующие в настоящее время марковские модели релаксации квантовомеханических систем применимы либо в приближении, когда разность между собственными частотами много больше скоростей релаксации (глобальный подход), либо много меньше их (локальный подход). В данной работе предлагается модель для описания релаксации в системах, где существуют собственные частоты, разность между которыми близка к скоростям релаксаций. Показано, что в таком случае в управляющем уравнении на матрицу плотности появляются коэффициенты, которые в представлении взаимодействия явно зависят от времени. На примере двух взаимодействующих осцилляторов получены уравнения на числа заполнения мод системы. Показано, что в пределе малых по сравнению со скоростями релаксации разностей собственных частот числа заполнения в разработанном подходе асимптотически совпадают с числами заполнения в локальном подходе, а в случае больших разностей собственных частот — с числами заполнения в глобальном подходе.

DOI: 10.31857/S1234567821130103

1. Введение. В последнее время активно исследуются задачи о релаксации квантовых систем. Помимо фундаментального интереса, они также представляют практический интерес в связи с развитием технологий и возможностью манипулировать объектами на микро- и наномасштабах. В качестве примера можно привести спектроскопию одиночных молекул [1–4], спектроскопию на основе гигантского комбинационного рассеяния (SERS) [3, 5-7], управление квантовыми объектами, например, с помощью плазмонных пинцетов [8–10], и пр. В таких случаях некоторая выделенная система (атом, молекула и т.д.), динамика которой представляет интерес, взаимодействует с окружением (или резервуаром), которое, хотя и влияет на исследуемый объект, непосредственного интереса не представляет. Если учитывать степени свободы как исследуемого объекта, так и резервуара, то вместе они образуют единую эрмитову систему, и, в нерелятивистском приближении, ее динамика может быть описана уравнением Шредингера. Однако в общем случае такая единая эрмитова система обладает большим числом степеней свободы,

В некоторых практически важных случаях можно исключить переменные резервуара в предположении, что состояние резервуара не меняется (приближение Борна), и получить локальное по времени уравнение (приближение Маркова) [11–13]. После такого исключения можно получить уравнение с зависящими от времени осциллирующими слагаемыми (управляющее уравнение Блоха-Редфилда [14]). Однако, такое уравнение все еще остается достаточно сложным и требует дальнейшего упрощения [15, 16].

Существуют два основных способа, которые позволяют упростить полученное уравнение. Первый способ применяется тогда, когда точно известны собственные состояния системы, и разность между собственными частотами системы много больше характерных скоростей затухания. В таком случае зависящие от времени коэффициенты в управляющем уравнении являются быстро осциллирующими, и их можно усреднить по времени (full secular approximation) [11, 13, 17]. В результате получается управляющее уравнение на матрицу плотности системы (управляющее уравнение Горини–Косаковского–Сударшана—

<sup>\*</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики, 125412 Москва, Россия

 $<sup>^{</sup> imes}$  Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 127055 Москва, Россия

поэтому исследование ее динамики не представляется возможным.

В некоторых практически важных случаях можно исключить, переменные резервуара в предполо-

 $<sup>^{1)}</sup>$ См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала

 $<sup>^{2)}</sup>$ e-mail: vovchenko@phystech.edu

Линдблада) [18, 19]. Такой подход называют глобальным. Можно показать, что глобальный подход гарантирует выполнение начал термодинамики [20–22].

В случае, когда разность между собственными частотами сравнима или меньше скоростей затухания, точность решения, полученного в рамках глобального подхода, может быть недостаточной [23, 24]. Например, это может иметь место при слабом взаимодействии между подсистемами с одинаковыми собственными частотами, когда расщепление уровней пропорционально константе связи. В таком случае, глобальный подход не выявляет наблюдаемых в эксперименте осцилляций заселенностей состояний подсистем [25]. Помимо того, что глобальный подход не описывает некоторые экспериментально наблюдаемые эффекты, для его применения нужно знать собственные состояния системы [12, 17, 26]. В случае, когда система состоит из большого количества взаимодействующих подсистем, например, атомов, молекул или кубитов, точное нахождение собственных состояний затруднительно.

Второй способ упрощения исходного уравнения называется локальным подходом и не требует точного нахождения собственных состояний системы. Локальный подход является предпочтительным, когда система состоит из большого числа подсистем. Сначала рассматриваются невзаимодействующие подсистемы, собственные состояния которых известны, и выводятся релаксационные операторы для каждой подсистемы в отдельности. Затем предполагается, что в случае взаимодействующих подсистем релаксационные операторы остаются такими же, как и для невзаимодействующих подсистем [22, 24]. При этом релаксационные операторы не учитывают изменения собственных значений энергии за счет взаимодействия между подсистемами. Из общих соображений ясно, что такой подход может быть применим только тогда, когда соответствующие константы связи между подсистемами малы по сравнению со скоростями релаксаций.

Таким образом, как локальный, так и глобальный подходы неприменимы в том случае, когда константа связи между подсистемами сравнима со скоростями релаксации. Однако в последние время активно исследуются именно такие системы, где константы связи сравнимы со скоростями релаксации, так как для них находится большое количество приложений, например, в задачах фотоники [27], сенсорики [28, 29], лазерной физики [30–32] и химии [33, 34]. Отдельный интерес представляет особая точка в пространстве параметров (обычно констант связи и скоростей релаксаций), в которой несколько собственных час-

тот и собственных состояний становятся одинаковыми [35, 36]. Отметим, что локальный подход предсказывает существование особой точки, в которой расщепление спектра происходит пороговым образом. В свою очередь, в глобальном подходе особая точка полностью отсутствует. Однако, обе модели выходят за границы своей применимости именно вблизи особой точки, поскольку вблизи особой точки скорости релаксации сравнимы с расщеплением уровней [24, 26]. В этой связи интерес представляет построение модели, которая, во-первых, была бы применима вблизи особой точки, и, во-вторых, в предельном случае большой константы связи воспроизводила бы глобальный подход, а в пределе слабой константы связи — локальный.

Настоящая статья посвящена построению модели релаксации систем, в которых скорости релаксации сравнимы с константой связи между подсистемами. Показано, что в этом случае в управляющем уравнении на матрицу плотности появляются коэффициенты, которые в представлении взаимодействия явно зависят от времени. На примере двух взаимодействующих осцилляторов получены управляющее уравнение и уравнения на числа заполнения мод системы. Показано, что в пределе малой по сравнению со скоростью релаксации константы связи разработанная модель асимптотически совпадает с локальным подходом, а в случае большой константы связи — с глобальным.

2. Управляющее уравнение в частично секулярном приближении. Рассмотрим динамику полной системы, состоящей из двух компонент: выделенной системы S (далее просто система) и резервуаров R. До тех пор, пока явно рассматриваются степени свободы системы и резервуара, задача является эрмитовой, и ее динамика описывается уравнением фон Неймана [37] на матрицу плотности:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i \left[ \hat{\rho}(t), \hat{H}_S + \hat{H}_{SR} + \hat{H}_R \right]. \tag{1}$$

Здесь  $\hat{H}_S$  — гамильтониан системы,  $\hat{H}_R$  — гамильтониан резервуаров,  $\hat{H}_{SR} = \lambda \hat{S} \hat{R}$  — гамильтониан взаимодействия системы и резервуаров, где  $\lambda$  предполагается малым параметром по сравнению с собственными частотами системы. Для исключения степеней свободы резервуаров удобно перейти в представление взаимодействия

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t} \hat{\tilde{\rho}}(t) e^{i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}.$$
 (2)

Тогда уравнение (1) примет вид

$$\frac{\partial \hat{\hat{\rho}}}{\partial t} = i[\hat{\hat{\rho}}, \hat{\tilde{H}}_{SR}], \quad \hat{\tilde{H}}_{SR} = \lambda \hat{\tilde{S}} \hat{\tilde{R}}, \tag{3}$$

Письма в ЖЭТФ том 114 вып. 1-2 2021

$$\hat{\tilde{S}}(t) = e^{i\hat{H}_{S}t}\hat{S}e^{-i\hat{H}_{S}t}, \quad \hat{\tilde{R}}(t) = e^{i\hat{H}_{R}t}\hat{R}e^{-i\hat{H}_{R}t}.$$
 (4)

Применяя теорию возмущений по параметру  $\lambda$  и формально интегрируя (1), в первом и втором порядке теории возмущений получаем (детали вычислений см. в [12]):

$$\hat{\hat{\rho}}_1(t_0 + \Delta t) = i \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt_1 \left[ \hat{\hat{\rho}}_0(t_0), \hat{\hat{S}}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1) \right]$$
 (5)

$$\hat{\tilde{\rho}}_2(t_0 + \Delta t) = \tag{6}$$

Далее будем предполагать (приближение Борна), что резервуар находится в тепловом равновесии во все моменты времени матрица плотности имеет вид  $\hat{\rho}_R(t) = \hat{\rho}_R^{th} =$  $\exp\left(-\hat{H}_R/T\right)/Tr_R\left(\exp\left(-\hat{H}_R/T\right)\right)$ , а матрица плотности всей системы представима в виде  $\hat{
ho}(t) = \hat{
ho}_S(t)\hat{
ho}_R^{th}$  (применимость такого приближения обсуждается ниже). Тогда можно вычислить след по переменным резервуара. В результате в выражениях (5) и (6) появятся слагаемые типа  $Tr_R\left(\hat{\rho}_R^{th}\tilde{R}(t_1)\right)$ . Для многих видов резевуаров  $Tr_R\left(\hat{\hat{\rho}}_R^{th}\hat{R}(t_1)\right)=0$ . К таким резервуарам относится, например, резервуар свободного электромагнитного поля, а также различные дефазирующие резервуары. В таком случае  $\tilde{\rho}_1(t) = 0.$ 

Далее необходимо вычислить явную зависимость  $\hat{S}(t)$  от времени. Это заведомо можно сделать, если известны собственные состояния  $|k\rangle$  и собственные частоты  $\omega_k$  гамильтониа  $\hat{H}_S$ . Тогда можно записать:

$$\hat{\hat{S}}(t) = e^{i\hat{H}_S t} \hat{S} e^{-i\hat{H}_S t} = \sum_{k,m} e^{i\Delta\omega_{km} t} \hat{S}_{km}, \qquad (7)$$

где  $\hat{S}_{km}=\langle k|\hat{S}|m\rangle|k\rangle\langle m|$ , и  $\Delta\omega_{km}=\omega_k-\omega_m$ . Выражение (6) преобразуется в

$$\sum_{k',m',k,m} \hat{S}_{k'm'} \hat{\hat{\rho}}_0(t_0) \hat{S}_{km} \times$$
(8)

$$\times \int\limits_{t_0}^{t_0+\Delta t} dt_1 e^{i(\Delta \omega_{km}+\Delta \omega_{k'm'})t_1} \int\limits_{t_0-t_1}^0 d\tau TR(\tau) e^{i\Delta \omega_{k'm'}\tau},$$

где  $\tau=t_2-t_1$ , и  $TR(\tau)=Tr(\hat{\tilde{\rho}}_R^{th}\hat{R}(t_2)\hat{R}(t_1))$  – корреляционная функция резервуара.

Чтобы приближение Борна было справедливым, необходимо, чтобы интервал интегрирования,  $\Delta t$ ,

был много больше характерного времени установления равновесия в резервуаре  $\gamma_R^{-1}$ . В противном случае выделение системы из резервуара необосновано. В приближении Борна нижний предел интегрирования в последнем интеграле в (8) можно устремить к бесконечности:

$$\int_{t_0 - t_1}^{0} d\tau T R(\tau) e^{i\Delta\omega_{k'm'}\tau} \simeq \int_{-\infty}^{0} d\tau T R(\tau) e^{i\Delta\omega_{k'm'}\tau} =$$

$$= \int_{0}^{\infty} d\tau T R(\tau) e^{-i\Delta\omega_{k'm'}\tau} \equiv G_{+} \left(\Delta\omega_{k'm'}\right), \tag{9}$$

где  $G_+(\omega)$  — одностороннее преобразование Фурье корреляционной функции резервуара. Аналогично определяется и  $G_-(\omega)$  (см. до материал).

С другой стороны, чтобы описывать динамику затухания системы, необходимо, чтобы интервал  $\Delta t$  был меньше характерных времен затухания системы  $\gamma^{-1}$ :  $\Delta t \ll \gamma^{-1}$ . Таким образом, мы получаем ограничение на интервал интегрирования  $\Delta t$ :  $\gamma_R^{-1} \ll \Delta t \ll \gamma^{-1}$ . Далее будем предполагать, что условие  $\gamma_R^{-1} \ll \gamma^{-1}$  выполняется, и возможно одновременно применить приближение Борна и с хорошей точностью описать релаксацию системы. Во многих ситуациях такое соотношение действительно имеет место. Так, величину  $\gamma_R^{-1}$  можно оценить как  $\hbar/kT$  [38], где T — температура резервуара. Для оптического диапазона при комнатной температуре имеем  $\hbar/kT \sim 10^{-14}\,\mathrm{c}$ . В свою очедерь, характерные времена релаксаций лежат в диапазоне  $10^{-9}-10^{-13}\,\mathrm{c}$ .

В приближении (9) первый интеграл в (8) можно вычислить явно:

$$\int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt_1 e^{i(\Delta \omega_{km} + \Delta \omega_{k'm'})t_1} =$$

$$= e^{i(\Delta \omega_{km} + \Delta \omega_{k'm'})t_0} \frac{e^{i(\Delta \omega_{km} + \Delta \omega_{k'm'})\Delta t} - 1}{i(\Delta \omega_{km} + \Delta \omega_{k'm'})}.$$
(10)

Если предположить, что  $\Delta t \gg 1/\Delta \omega$ , то правая часть в (10) является быстро осциллирующей и переходит в  $\delta_{\omega_{km},-\omega_{k'm'}}\Delta t$ , где  $\delta_{\alpha,\beta}$  – символ Кронекера. Важно, что (10) в таком случае становится пропорциональным  $\Delta t$ . Использование такого приближения в (10) и последующая его подстановка в (8) и затем в (6) позволяет получить разностное уравнение вида  $\Delta \rho(t_0)/\Delta t = L[\rho(t_0)]$ , где L - релаксационный оператор, который содержит скорости затухания  $\gamma$ . Поскольку рассматриваются времена  $\Delta t \ll \gamma^{-1}$ , полученное разностное уравнение заменяют дифференциальным, которое носит на-

звание управляющее уравнение в форме Горини–Косаковского-Сударшана-Линдблада [18, 19]. Временная производная в этом уравнении иногда называется "крупнозернистой" производной.

Однако собственные частоты системы могут быть сравнимы или меньше  $\gamma$ , и обозначенное ранее требование  $\gamma_R^{-1} \ll \Delta t \ll \gamma^{-1}$  может быть несовместимо с требованием  $\Delta t \gg 1/\Delta \omega$ . Слагаемые в (8), для которых  $\Delta \omega^{-1} \sim \Delta t$  или  $\Delta \omega^{-1} \gg \Delta t$ , уже нельзя считать быстро осциллирующими.

Практически важными являются ситуации, когда система состоит из взаимодействующих подсистем. Предположим, что характерная константа связи  $\Omega$ между ними много меньше собственных частот подсистем  $\omega$ . В этом случае всевозможные разности собственных частот  $\Delta \omega$  можно разделить на большие, порядка собственных частот  $\omega$  невзаимодействующих подсистем, и малые, порядка константы связи Ω. Поступим следующим образом: выберем интервал интегрирования  $\Delta t$  таким образом, чтобы выполнялось условие  $\omega^{-1} \ll \Delta t \ll \Omega^{-1}$ . Тогда, если  $\Delta \omega \sim \omega$ , выражение (10) переходит в  $\delta_{\omega_{km},-\omega_{k'm'}}\Delta t$ , а если  $\Delta\omega\sim\Omega$ , то в  $e^{i(\Delta\omega_{km}+\Delta\omega_{k'm'})t_0}\Delta t$ . В обоих случаях получаются выражения, пропорциональные  $\Delta t$ . Тогда, после подстановки таких разложений (10) в (8), а затем в (6), получится выражение, пропорциональное  $\Delta t$ . В итоге получается разностное уравнение вида  $\Delta \hat{\rho}_S(t_0)/\Delta t = L[t_0, \hat{\rho}_S]$ , однако теперь релаксационный супероператор будет содержать осциллирующие слагаемые вида  $e^{i\Omega t_0}$ . Такой подход можно назвать частично секулярным подходом.

Подчеркнем, что в данном рассмотрении не накладывается никакого ограничения на соотношение между скоростями релаксаций и константой связи. Единственное требование, которому необходимо удовлетворить при таком рассмотрении, это выполнение для собственных частот невзаимодействующих подсистем соотношения  $\omega^{-1} \ll \gamma^{-1}, \Omega^{-1}$ .

Рассмотрим данный подход на примере двух связанных осцилляторов с одинаковыми собственными частотами ( $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ ), каждый из которых взаимодействует со своим резервуаром. Гамильтониан системы и резервуаров имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_{SR} + \hat{H}_R,\tag{11}$$

$$\hat{H}_{S} = \omega \hat{a}_{1}^{\dagger} \hat{a}_{1} + \omega \hat{a}_{2}^{\dagger} \hat{a}_{2} + \Omega(\hat{a}_{1}^{\dagger} \hat{a}_{2} + \hat{a}_{2}^{\dagger} \hat{a}_{1}), \tag{12}$$

$$\hat{H}_{SR} = \lambda \sum_{k} \gamma_{k} (\hat{a}_{1}^{\dagger} + \hat{a}_{1}) (\hat{e}_{1k}^{\dagger} + \hat{e}_{1k}) + \lambda \sum_{m} \gamma_{m} (\hat{a}_{2}^{\dagger} + \hat{a}_{2}) (\hat{e}_{2m}^{\dagger} + \hat{e}_{2m}) = \lambda \hat{S}_{1} \hat{R}_{1} + \lambda \hat{S}_{2} \hat{R}_{2}, \tag{13}$$

$$\hat{H}_R = \sum_k \omega_{1k} \hat{e}_{1k}^{\dagger} \hat{e}_{1k} + \sum_m \omega_{2m} \hat{e}_{2m}^{\dagger} \hat{e}_{2m}. \tag{14}$$

Гамильтониан  $\hat{H}_S$  описывает систему двух взаимодействующих осцилляторов с константой связи  $\Omega$ . Гамильтониан  $\hat{H}_R$  описывает два резервуара гармонических осцилляторов с наборами частот  $\omega_{1k}$  и  $\omega_{2m}$ . Каждый из резервуаров взаимодействует только с одним из осцилляторов системы. Гамильтониан  $\hat{H}_{SR}$  описывает взаимодействие между системой и резервуарами,  $\gamma_{k,m}$  — соответствующие константы связи,  $\lambda$  — параметр взаимодействия.

Отметим, что  $\hat{H}_S$  диагонализуется преобразованием  $\hat{b} = (\hat{a}_1 + \hat{a}_2)/\sqrt{2}, \ \hat{c} = (\hat{a}_1 - \hat{a}_2)/\sqrt{2},$ 

$$\hat{H}_S = (\omega + \Omega)\hat{b}^{\dagger}\hat{b} + (\omega - \Omega)\hat{c}^{\dagger}\hat{c},\tag{15}$$

которое сохраняет коммутационные соотношения  $[\hat{b},\hat{b}^{\dagger}]=[\hat{c},\hat{c}^{\dagger}]=1,\,[\hat{b},\hat{c}^{\dagger}]=[\hat{b},\hat{c}]=0.$ 

Полагая  $\Omega \ll \omega$  и применяя описанную выше процедуру исключения переменных резервуара, получаем (см. доп. материалы)

$$\begin{split} \frac{\partial \hat{\hat{\rho}}_S(t)}{\partial t} &= -\left( (I)_t - (II)_t + (III)_t - (IV)_t \right) - \\ &- \left( (1) \rightarrow (2), \ \hat{c} \rightarrow -\hat{c}, \ \hat{c}^\dagger \rightarrow -\hat{c}^\dagger \right), \ \text{где} \end{split} \tag{16}$$

$$(I)_{t} = \frac{1}{2}\hat{\rho}_{S} \left(\hat{b}\hat{b}^{\dagger}G_{1-}(\omega+\Omega) + \hat{b}^{\dagger}\hat{b}G_{1-}(-(\omega+\Omega)) + \hat{b}\hat{c}^{\dagger}G_{1-}(\omega+\Omega)e^{-i2\Omega t} + \hat{b}^{\dagger}\hat{c}G_{1-}(-(\omega+\Omega))e^{i2\Omega t} + \hat{c}\hat{b}^{\dagger}G_{1-}(\omega-\Omega)e^{i2\Omega t} + \hat{c}\hat{b}^{\dagger}G_{1-}(\omega-\Omega)e^{i2\Omega t} + \hat{c}\hat{c}\hat{b}^{\dagger}G_{1-}(\omega-\Omega) + \hat{c}^{\dagger}\hat{c}G_{1-}(-(\omega-\Omega))\right),$$

$$(17)$$

$$(II)_{t} = \frac{1}{2} \Big( \hat{b} \hat{\tilde{\rho}}_{S} b^{\dagger} G_{1-} (-(\omega + \Omega)) + \hat{b}^{\dagger} \hat{\tilde{\rho}}_{S} \hat{b} G_{1-} (\omega + \Omega) +$$

$$+ \hat{b} \hat{\tilde{\rho}}_{S} \hat{c}^{\dagger} G_{1-} (-(\omega - \Omega)) e^{-i2\Omega t} + b^{\dagger} \hat{\tilde{\rho}}_{S} \hat{c} G_{1-} (\omega - \Omega) e^{i2\Omega t} +$$

$$+ \hat{c} \hat{\tilde{\rho}}_{S} b^{\dagger} G_{1-} (-(\omega + \Omega)) e^{i2\Omega t} + \hat{c}^{\dagger} \hat{\tilde{\rho}}_{S} \hat{b} G_{1-} (\omega + \Omega) e^{-i2\Omega t} +$$

$$+ \hat{c} \hat{\tilde{\rho}}_{S} \hat{c}^{\dagger} G_{1-} (-(\omega - \Omega)) + \hat{c}^{\dagger} \hat{\tilde{\rho}}_{S} \hat{c} G_{1-} (\omega - \Omega) \Big),$$

$$(18)$$

$$(III)_{t} = \frac{1}{2} \left( \hat{b} \hat{b}^{\dagger} G_{1+}(\omega + \Omega) + \hat{b}^{\dagger} \hat{b} G_{1+}(-(\omega + \Omega)) + \hat{b} \hat{c}^{\dagger} G_{1+}(\omega - \Omega) e^{-i2\Omega t} + \hat{b}^{\dagger} \hat{c} G_{1+}(-(\omega - \Omega)) e^{i2\Omega t} + \hat{c} \hat{b}^{\dagger} G_{1+}(\omega + \Omega) e^{i2\Omega t} + \hat{c}^{\dagger} \hat{b} G_{1+}(-(\omega + \Omega)) e^{-i2\Omega t} + \hat{c} \hat{c}^{\dagger} G_{1+}(\omega - \Omega) + \hat{c}^{\dagger} \hat{c} G_{1+}(-(\omega - \Omega)) \right) \hat{\rho}_{S},$$
(19)

$$(IV)_{t} = \frac{1}{2} \Big( \hat{b}\hat{\rho}_{S}\hat{b}^{\dagger}G_{1+}(-(\omega+\Omega)) + \hat{b}^{\dagger}\hat{\rho}_{S}\hat{b}G_{1+}(\omega+\Omega) + \\ + \hat{b}\hat{\rho}_{S}\hat{c}^{\dagger}G_{1+}(-(\omega+\Omega))e^{-i2\Omega t} + \hat{b}^{\dagger}\hat{\rho}_{S}\hat{c}G_{1+}(\omega+\Omega)e^{i2\Omega t} + \\ + \hat{c}\hat{\rho}_{S}\hat{b}^{\dagger}G_{1+}(-(\omega-\Omega))e^{i2\Omega t} + \hat{c}^{\dagger}\hat{\rho}_{S}\hat{b}G_{1+}(\omega-\Omega)e^{-i2\Omega t} + \\ + \hat{c}\hat{\rho}_{S}\hat{c}^{\dagger}G_{1+}(-(\omega-\Omega)) + \hat{c}^{\dagger}\hat{\rho}_{S}\hat{c}G_{1+}(\omega-\Omega) \Big). \tag{20}$$

Выражение ((1)  $\rightarrow$  (2),  $\hat{c} \rightarrow -\hat{c}$ ,  $\hat{c}^{\dagger} \rightarrow -\hat{c}^{\dagger}$ ) во второй строке (16) означет, что нужно записать выражение ((I) $_t$  – (II) $_t$  + (III) $_t$  – (IV) $_t$ ) с соотвествующими заменами индексов и операторов. Коэффициенты  $G_{1,2\pm}(\omega)$  – односторонние фурье-образы корреляционных функций резервуаров  $TR_{R_1}(\tau)$  и  $TR_{R_2}(\tau)$  (см. доп. материалы).

**3.** Уравнения на заселенности мод. Из уравнения (16) можно получить уравнения на средние значения операторов  $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}$ ,  $\hat{c}^{\dagger}\hat{c}$ ,  $\hat{b}^{\dagger}\hat{c}$ ,  $\hat{c}^{\dagger}\hat{b}$ . Они имеют вид (см. доп. материалы):

$$\frac{\partial \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{b} \rangle}{\partial t} = \lambda^{2} \left( \frac{G_{1}(\omega + \Omega) + G_{2}(\omega + \Omega)}{2} + 2A \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{b} \rangle + (B + C) \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{c} \rangle + (\tilde{B} - \tilde{C}) \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{b} \rangle \right), \quad (21)$$

$$\begin{split} \frac{\partial \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{c} \rangle}{\partial t} &= \lambda^{2} \left( \frac{G_{1}(\omega - \Omega) + G_{2}(\omega - \Omega)}{2} + \right. \\ &+ 2\tilde{A} \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{c} \rangle + (B - C) \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{c} \rangle + (\tilde{B} + \tilde{C}) \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{b} \rangle \right), \end{split} \tag{22}$$

$$\begin{split} &\frac{\partial \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{c} \rangle}{\partial t} = i2\Omega \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{c} \rangle + \lambda^{2} \left( \frac{G_{1-}(\omega + \Omega) + G_{1+}(\omega - \Omega)}{2} - \frac{G_{2-}(\omega + \Omega) + G_{2+}(\omega - \Omega)}{2} + (\tilde{B} + \tilde{C}) \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{b} \rangle + \right. \\ &+ (\tilde{B} - \tilde{C}) \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{c} \rangle + (A + \tilde{A}) \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{c} \rangle \right), \end{split} \tag{23}$$

$$\frac{\partial \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{b} \rangle}{\partial t} = -i2\Omega \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{b} \rangle + \lambda^{2} \left( \frac{G_{1-}(\omega - \Omega) + G_{1+}(\omega + \Omega)}{2} - \frac{G_{2-}(\omega - \Omega) + G_{2+}(\omega + \Omega)}{2} + (B - C) \langle \hat{b}^{\dagger} \hat{b} \rangle + (B + C) \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{c} \rangle + (A + \tilde{A}) \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{b} \rangle \right), \tag{24}$$

где константы A и  $\tilde{A}$  зависят от полных фурьеобразов и определяют вклад супероператоров Линдблада в релаксацию, а константы B и  $\tilde{B}$ , C и  $\tilde{C}$  зависят от односторонних фурье-образов и определяют вклад релаксационных операторов вида  $2\hat{F}_1\hat{\rho}_S\hat{F}_2-\hat{\rho}_S\hat{F}_2\hat{F}_1-\hat{F}_2\hat{F}_1\hat{\rho}_S$  с  $\hat{F}_1\neq\hat{F}_2$ .

Основное отличие полученных уравнений от аналогичных уравнений глобального подхода состоит в том, что в правой части присутствует связь между собственными модами. В свою очередь, в глобальном подходе этой связи нет, и система представляет собой четыре независимых уравнения (см. доп. материалы).

Результаты моделирования уравнений (21)—(24) представлены на рис. 1—5. На рисунках 1—3 представлены зависимости стационарных средних значений обозначенных операторов от  $\Omega$ , вычисленные в различных подходах: разработанный, глобальный и локальный. На рисунках 4 и 5 показана динамика релаксации системы в различных подходах. В качестве функций фурье-образов были взяты [12]:

$$G_{j}(\tilde{\omega}) = \begin{cases} \gamma_{j}(|\tilde{\omega}|)n_{j}(|\tilde{\omega}|), & \text{при } \tilde{\omega} > 0, \\ \gamma_{j}(|\tilde{\omega}|)(n_{j}(|\tilde{\omega}|) + 1), & \text{при } \tilde{\omega} < 0, \end{cases}$$
(25)

где j=1,2 – номер резервуара,  $\gamma_j(\tilde{\omega})=q_j\tilde{\omega}^3,\ q_j$  – константы, а  $n_j(\tilde{\omega})=1/(\exp(\tilde{\omega}/T_j)-1)$  – числа заполнения.

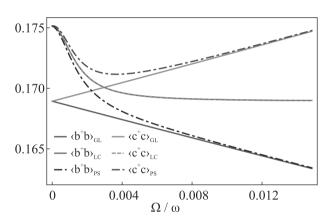


Рис. 1. (Цветной онлайн) Средние числа заполнения симметричной,  $\langle \hat{b}^{\dagger}\hat{b}\rangle$ , антисимметричной  $\langle \hat{c}^{\dagger}\hat{c}\rangle$  мод, вычисленные в различных подходах.  $T_1=0.55\omega,\ T_2=0.5\omega,\ q_1=1\omega^{-2},\ q_2=2\omega^{-2},\ \lambda^2=0.001.$  GL – глобальный подход, LC – локальный подход, PS – частично секулярный подход

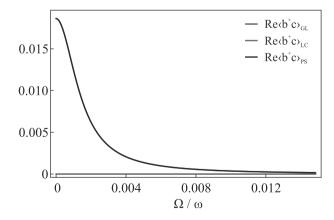


Рис. 2. (Цветной онлайн) Действительная часть величины  $\langle \hat{b}^{\dagger}\hat{c}\rangle$ , вычисленная в различных подходах. Параметры те же, что и на рис. 1

На рисунке 1 изображены средние числа заполнения симметричной и антисимметричной мод. Видно, что между локальным и глобальным подходами наблюдаются различия в пределе малых и больших  $\Omega$ . Разработанный подход до определенной константы связи совпадает с локальным подходом, а после нее асимптотически стремится к глобальному. Это связано с тем, что при малых константах связи для фурьеобразов корреляционных функций резервуара имеем  $G_{\pm}(\omega \pm \Omega) \approx G_{\pm}(\omega)$  и система уравнений (21)–(24) переходит в систему уравнений локального подхода (см. дополнительный материал). При большой константе связи имеем  $B, C \sim \gamma_1, \gamma_2 \ll \Omega$  (для выполнения этого условия необходимо, чтобы плотность состояний резервуаров имела не слишком большую производную в точке  $\omega$ ), т.е. потоки энергии между осцилляторами главным образом определяются константой связи О. В этом случае уравнения разработанного и глобального подходов начинают совпадать.

На рисунке 2 изображена действительная часть среднего значения оператора  $\langle \hat{b}^{\dagger} \hat{c} \rangle$ , которая имеет смысл энергии взаимодействия симметричной и антисимметричной мод. Отметим, что этой энергии взаимодействия не было в исходном гамильтониане системы, она возникла за счет взаимодействия с резервуарами. В локальном и разработанном подходах эти энергии взаимодействия совпадают и являются отличными от нуля, в то время как в глобальном подходе энергия взаимодействия между симметричной и антисимметричной модами тождественно равна нулю, если в начальный момент времени она равна нулю.

Из рисунка 3 видно, что мнимые части  $\langle \hat{b}^{\dagger}\hat{c} \rangle$  ведут себя сходным образом: локальный подход совпадает с разработанным, а глобальный подход дает тождественный нуль, если в начальный момент времени  $\langle \hat{b}^{\dagger}\hat{c} \rangle = 0$ .

На рисунках 4 и 5 показана динамика энергии осцилляторов и потока энергии между осцилляторам при  $\Omega=0.04$ . Данное значение константы связи выбрано для того, чтобы сделать отличия подходов в динамике более выраженными. Разработанный и локальный подходы выявляют осцилляции в средних заселенностях осцилляторов, которые появляются из-за разницы скоростей затухания в различные резервуары. Глобальный подход данных осцилляций не выявляет и дает экспоненциальный закон падения заселенностей осцилляторов. Стоит отметить, что локальный подход переоценивает заселенности осцилляторов. Также из рис. 5 видно, что действительные части интерференционных слагаемых осцилляторов разработанного и глобального подходов совпа-

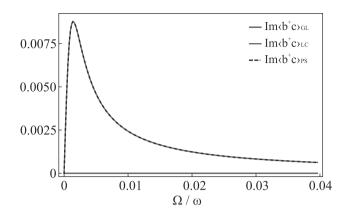


Рис. 3. (Цветной онлайн) Мнимая часть величины  $\langle \hat{b}^{\dagger}\hat{c} \rangle$ , вычисленная в различных подходах. Параметры те же, что и на рис. 1

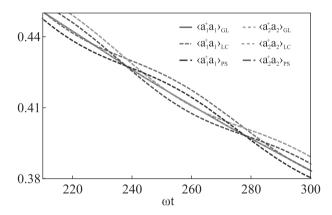


Рис. 4. (Цветной онлайн) Динамика чисел заполнения осцилляторов,  $\langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \rangle$  и  $\langle \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \rangle$ . Параметры те же, что и на рис. 1 и  $\Omega=0.04$ 

дают. Однако в локальном подходе действительная часть этих интерференционных слагаемых затухает экспоненциально (см. доп. материалы). Мнимые части интерференционных слагаемых ведут себя прямо

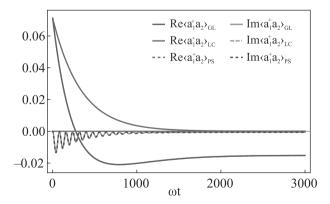


Рис. 5. (Цветной онлайн) Динамика величины  $\langle \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_2 \rangle$ , вычисленная в различных подходах. Параметры те же, что и на рис. 4

противоположно, а именно, они отличны от нуля и совпадают для разработанного и локального подходов, а глобальный подход дает тождественный ноль, если в начальный момент времени мнимая часть интерференционного слагаемого равна нулю.

Выводы. В настоящей работе разработана модель релаксации взаимодействующих систем, которая применима при произвольном соотношении между скоростью релаксации и константами связи между подсистемами. Таким образом, она может способствовать лучшему помиманию динамики системы вблизи особой точки. Более того, разработанная модель описывает осцилляции средних чисел заполнения осцилляторов, которые имеют место в эксперименте и воспроизводятся в локальном подходе. В пределе малых констант связи разработанная модель асимптотически совпадает с локальным подходом, а при большой константе связи она воспроизводит результаты глобального подхода, если плотность состояний имеет не слишком большую производную.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант # 20-72-10057.

Е. С. Андрианов и А. А. Зябловский благодарит фонд развития теоретической физики и математики "Базис".

- Ph. Tamarat, A. Maali, B. Lounis, and M. Orrit, J. Phys. Chem. A 104, 1 (2000).
- 2. W. E. Moerner, J. Phys. Chem. B 106, 910 (2002).
- 3. J. A. Dieringer, R. B. Lettan, K. A. Scheidt, and R. P. van Duyne, J. Am. Chem. Soc. **129**, 16249 (2007).
- N. Tallarida, L. Rios, V. A. Apkarian, and J. Lee, Nano Lett. 15, 6386 (2015).
- D. Cialla, A. März, R. Böhme, F. Theil, K. Weber, M. Schmitt, and J. Popp, Anal. Bioanal. Chem. 403, 27 (2012).
- F. Benz, M. K. Schmidt, A. Dreismann, R. Chikkaraddy,
   Y. Zhang, A. Demetriadou, C. Carnegie, H. Ohadi,
   B. De Nijs, R. Esteban, J. Aizpurua, and
   J. J. Baumberg, Science 354, 726 (2016).
- A. Lombardi, M. K. Schmidt, L. Weller, W. M. Deacon, F. Benz, B. de Nijs, J. Aizpurua, and J. J. Baumberg, Phys. Rev. X 8, 011016 (2018).
- Y. Zhang, C. Min, X. Dou, X. Wang, H.P. Urbach, M.G. Somekh, and X. Yuan, Light Sci. Appl. 10, 1 (2021).
- T. Shoji and Y. Tsuboi, J. Phys. Chem. Lett. 5, 2957 (2014).
- Y. Zhao, A. A. E. Saleh, and J. A. Dionne, Acs Photonics 3, 304 (2016).
- 11. H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press, N.Y. (2002).

- 12. V. Yu. Shishkov, E. S. Andrianov, A. A. Pukhov, A. P. Vinogradov, and A. A. Lisyansky, Phys.-Uspekhi **62**, 510 (2019).
- 13. A. Rivas and S.F. Huelga, *Open quantum systems*, Springer, Berlin (2012).
- V. May and O. Kühn, Charge and energy transfer dynamics in molecular systems, John Wiley & Sons, Mörlenbach (2008).
- 15. E. Mozgunov and D. Lidar, Quantum 4, 227 (2020).
- F. Nathan and M. S. Rudner, Phys. Rev. B 102, 115109 (2020).
- 17. E.B. Davies, Commun. Math. Phys. 39, 91 (1974).
- V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. 17, 821 (1976).
- 19. G. Lindblad, Commun. Math. Phys. 48, 119 (1976).
- V. Yu. Shishkov, E.S. Andrianov, A.A. Pukhov, A.P. Vinogradov, and A.A. Lisyansky, Phys. Rev. E 98, 022132 (2018).
- H. Spohn and J. L. Lebowitz, Adv. Chem. Phys. 38, 109 (1978).
- 22. R. Kosloff, Entropy 15, 2100 (2013).
- J. O. González, L. A. Correa, G. Nocerino, J. P. Palao,
   D. Alonso, and G. Adesso, Open Syst. Inf. Dyn. 24, 1740010 (2017).
- A. Rivas, A. D. K. Plato, S. F. Huelga, and M. B. Plenio, New J. Phys. 12, 113032 (2010).
- M. Cattaneo, G.L. Giorgi, S. Maniscalco, and R. Zambrini, New J. Phys. 21, 113045 (2019).
- A.S. Trushechkin and I.V. Volovich, Europhysics Letters 113, 30005 (2016).
- 27. M.-A. Miri and A. Alu, Science **363**, (2019).
- 28. J. Wiersig, Phys. Rev. A 93, 033809 (2016).
- W. Chen, Ş. K. Özdemir, G. Zhao, J. Wiersig, and L. Yang, Nature 548, 192 (2017).
- A. A. Zyablovsky, E.S. Andrianov, and A. A. Pukhov, Sci. Rep. 6, 1 (2016).
- I. V. Doronin, A. A. Zyablovsky, E. S. Andrianov, A. A. Pukhov, and A. P. Vinogradov, Phys. Rev. A 100, 021801 (2019).
- I. V. Doronin, A. A. Zyablovsky, and E. S. Andrianov, Opt. Express 29, 5624 (2021).
- 33. N. Nefedkin, E. Andrianov, and A. Vinogradov, J. Phys. Chem. C  $\bf 124$ , 18234 (2020).
- B. Munkhbat, M. Wersäll, D. Baranov, T. J. Antosiewicz, and T. Shegai, Sci. Adv. 4 eaas9552 (2018).
- 35. W.D. Heiss, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 45, 444016 (2012).
- F. Minganti, A. Miranowicz, R. W. Chhajlany, and F. Nori, Phys. Rev. A 100, 062131 (2019).
- L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Course of theoretical physics. V. 5: Statistical Physics, part 1, Elsevier, Exeter (2013).
- 38. H. J. Carmichael, Statistical methods in quantum optics 1: master equations and Fokker-Planck equations, Springer, Berlin (1999).

### РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

### ПИСЬМА

 $\boldsymbol{B}$ 

## ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

#### том 114

Выпуск 2 25 июля 2021

Журнал издается под руководством Отделения физических наук РАН

Главный редактор В. М. Пудалов Заместители главного редактора Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией И.В.Подыниглазова

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница http://www.jetpletters.ru

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

<sup>©</sup> Российская академия наук, 2021

<sup>©</sup> Редколлегия журнала "Письма в ЖЭТФ" (составитель), 2021

# Экспериментальное исследование оптического кубита на квадрупольном переходе 435 нм в ионе $^{171}{\rm Yb}^+$

И. В. Заливако $^{+1}$ ), И. А. Семериков $^+$ , А. С. Борисенко $^+$ , М. Д. Аксенов $^+$ , К. Ю. Хабарова $^{+*}$ , Н. Н. Колачевский $^{+*}$ 

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

\*Российский квантовый центр, 121205 Москва, Россия

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

Ультрахолодные ионы являются одной из наиболее перспективных платформ для реализации квантовых вычислений и позволяют достигать рекордных значений времени когерентности, достоверности операций подготовки, считывания, а также однокубитных и двухкубитных операций. В данной работе мы предлагаем и экспериментально исследуем кодирование квантовой информации в оптическом кубите на базе квадрупольного перехода  $^2S_{1/2}(F=0,m_F=0) \rightarrow ^2D_{3/2}(F=2,m_F=0)$  в ионе  $^{171}{\rm Yb}^+$  на длине волны 435.5 нм, в перспективе имеющего преимущества перед аналогичными системами с точки зрения масштабирования количества кубитов и их чувствительности к флуктуациям магнитного поля. В работе представлено сравнение предлагаемого оптического кубита в иттербии с другими наиболее распространенными типами ионных кубитов, а также приведены экспериментальные результаты по проведению однокубитной операции Паули-Х. Достоверность операции составила 96 % после коррекции на опибку подготовки и считывания и ограничивается температурой иона.

DOI: 10.31857/S1234567821140019

1. Введение. Значительный интерес к области квантовых вычислений со стороны как ведущих научных организаций, так и коммерческих компанийгигантов стимулирован ожиданием прорыва в области эффективного решения квантовыми вычислителями и симуляторами ряда NP-задач, недоступных для классических компьютеров. В случае создания достаточно производительного и достоверного квантового вычислителя, открываются возможности эффективного решения задач оптимизации и логистики [1], поиска по неупорядоченным базам данных [2], криптоанализа [3], поиска новых материалов и лекарств. Ведущими странами запущены государственные программы по акселерации исследований в сфере квантовых технологий, в то время как компании Google [4], IBM [5], Intel [6] и Microsoft ведут собственные исследования по созданию квантовых компьютеров. Все существующие на сегодняшний день физические платформы обладают рядом специфических для каждой из них ограничений (например, время когерентности, масштабирование, достоверность и пр.), что стимулирует исследования по поиску новых физических систем и соответствующих протоко-

Одной из перспективных физических платформ для реализации квантового вычислителя является кодирование квантовой информации в электронных состояниях ионов, захваченных в радиочастотную ловушку Пауля [7]. Достоинством таких систем является идентичность кубитов, высокая степень изоляции квантовой системы от внешних полей и сильное кулоновское взаимодействие между частицами для выполнения двухкубитных операций. Продемонстрированы высокоточные методы подготовки квантовых состояний кубитов, их считывания и проведения операций при помощи световых или микроволновых полей. Экспериментально достигнутое время когерентности ионных кубитов составляет 1 ч [8], эффективность подготовки и считывания 99.93 % [9], достоверность однокубитной операции 99.9999 % [9]. Достоверность двухкубитной операции достигает 99.9% [10], при том, что каждый из кубитов может быть напрямую перепутан с каждым в линейной цепочке ионов за одну операцию. Эти значения являются рекордными для всех существующих на сегодняшний день платформ. Реализован одиннадцатикубитный универсальный квантовый вычислитель на ионах, к которому предоставляется облачный до-

лов, позволяющих улучшить характеристики вычислителей.

<sup>1)</sup>e-mail: zalivakoiv@lebedev.ru

ступ [11], продемонстрировано рекордное значение квантового объема 512 (для сверхпроводящих компьютеров IBM - 64 [5]).

Основной нерешенной проблемой ионных квантовых компьютеров является задача увеличения числа кубитов до нескольких сотен и более (масштабирование). Текущие подходы дают возможность создавать ионные регистры размером 50–100 кубитов [12], однако дальнейшее масштабирование, судя по всему, потребует применения иных подходов к хранению, адресации и перепутыванию ионов, которые тоже активно исследуются [13–15].

Одним из важных направлений является поиск перспективных способов кодирования квантовой информации в ионах, позволяющих улучшить существующие характеристики. Это может быть как поиск новых элементов или изотопов [16], так и поиск новых способов кодирования информации [17, 18]. В данной работе нами экспериментально исследовано кодирование кубитов при помощи квадрупольного перехода  $^2S_{1/2}(F=0,m_F=0) \rightarrow ^2D_{3/2}(F=2,m_F=0)$  в ионе  $^{171}\mathrm{Yb}^+$ . Проанализированы преимущества и недостатки использования данного перехода, выполнено сравнение с другими известными способами кодирования, и представлены первые результаты по экспериментальной реализации однокубитной операции на данном переходе.

2. Оптический кубит в ионе иттербия на **длине волны 435 нм.** Ион <sup>171</sup>Yb<sup>+</sup> сегодня является одним из наиболее широко используемых для квантовых вычислений. Так, в универсальном квантовом вычислителе с 11 ионами [11], кубиты были закодированы в подуровнях сверхтонкой структуры основного состояния  $^{171}{\rm Yb}^+$  (расщепление  $12.6\,\Gamma\Gamma$ ц). Такие кубиты носят название микроволновых кубитов. В свою очередь, оптические ионные кубиты были реализованы на  ${}^{40}\mathrm{Ca}^+$  (длина волны 729 нм), с их помощью австрийской группой был реализован 14кубитный универсальный квантовый компьютер [19]. Также ранее были исследованы оптические кубиты в  $^{88}{
m Sr}^+$  [20]. В данной работе нами исследован оптический электрический квадрупольный переход в ионе  $^{171}{
m Yb}^+$  на длине волны  $435.5\,{
m Hm}$  (см. рис. 1) как кандидат для реализации оптических кубитов. Ранее на этом переходе нами был реализован стандарт частоты на одиночном ионе иттербия [21], что обеспечило уверенный задел по реализации методов охлаждения иона, а также возбуждения узкого перехода и считывания квантовой информации.

Несмотря на то, что оптические кубиты обладают меньшими временами когерентности по сравнению с микроволновыми (для последних нет ограничения на

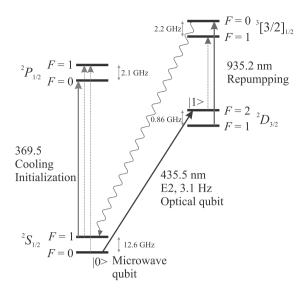


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема уровней иона  $^{171}{
m Yb}^+$ . Микроволновый кубит реализуется на сверхтонких подуровнях F=0,1 основного состояния на частоте 12.6 ГГц. Оптический кубит (данная работа) реализуется на переходе E2 (435.5 нм). Остальные уровни задействованы в процессе лазерного охлаждения и считывания квантовой информации. Пунктирными линиями обозначены переходы, возбуждаемые модуляционными боковыми частотами лазеров, при включении соответствующих электрооптических модуляторов

 $T_1$ , связанного с временем жизни верхнего уровня), они обладают рядом существенных достоинств. Так, оптические кубиты демонстрируют большую достоверность подготовки (метод оптической накачки [22]) и считывания квантовых состояний (метод квантовых скачков [7]), поскольку использующиеся для кодирования уровни сильно разнесены по энергии. При этом явления нерезонансного возбуждения, ограничивающие достоверность считывания микроволновых кубитов, оказываются несущественны. Индивидуальная адресация оптических кубитов также оказывается значительно более простой и эффективной по сравнению с микроволновыми. Для манипуляции квантовым состоянием оптического кубита достаточно лишь одного лазерного пучка, в то время как для возбуждения вынужденного рамановского перехода между кубитными состояниями микроволнового кубита и перепутывания электронного и колебательного квантовых состояний частиц требуется два несонаправленных лазерных пучка [23]. Это становится существенным при решении задачи масштабирования квантовых вычислителей, поскольку снижаются требования к оптическому доступу к ионам и к соответствующей конфигурации ионной ловушки. В случае использования оптических кубитов значительно уменьшается требуемое количество лазерных импульсов для проведения неадиабатических двухкубитных квантовых операций [24] при той же целевой достоверности. Это также является одним из перспективных путей к масштабированию вычислителей и увеличения скорости операций, поскольку в случае операций с использованием одного лазерного пучка не происходит дифракции Капицы-Дирака волнового пакета частицы на стоячей волне интенсивности излучения, которая возникает при интерференции рамановских пучков в случае микроволновых кубитов [24]. Уменьшение числа лазерных импульсов при этом ведет к повышению достоверности операции. Помимо перечисленного, для манипуляции оптическими кубитами чаще всего используются лазерные источники видимого или ближнего инфракрасного диапазона, благодаря чему значительно увеличивается возможность использования доступных лазеров и оптических компонентов. В то же время возбуждение микроволновых переходов требует мощных лазерных источников в ультрафиолетовом или коротковолновом видимом диапазоне, что вызывает ряд экспериментальных трудностей.

Меньшее время когерентности по сравнению с микроволновыми кубитами при этом не является основным ограничивающим фактором для оптических кубитов, поскольку соответствующий предел, накладываемый временем жизни уровней, остается на несколько порядков выше, чем у конкурирующих платформ [25, 26]. При этом преимущества с точки зрения масштабируемости могут полностью компенсировать этот недостаток за счет механизимов коррекции ошибок. В большинстве созданных прототипов ионных квантовых компьютеров (не рекордсменов) время когерентности составляет несколько сотен миллисекунд [23] и является величиной того же порядка, что и теоретический предел времени когерентности оптических кубитов. Обычно время когерентности определяется другими факторами, такими как, например, флуктуации магнитного поля.

Переход между кубитными состояниями  $|0\rangle = {}^2S_{1/2}(F=0,m_F=0)$  и  $|1\rangle = {}^2D_{3/2}(F=2,m_F=0)$  имеет длину волны 435.5 нм и естественную ширину линии 3.1  $\Gamma$ ц [27], что соответствует времени жизни возбужденного состояния 53 мс. Для возбуждения этого перехода используются коммерчески доступные диодные лазеры с нелинейным удвоением частоты, достигающие выходной мощности в 1.5 Вт. Спектральная линия лазера должна быть обужена с помощью внешнего резонатора до уровня  $< 100 \, \Gamma$ ц. Этого достаточно для проведения как адиабатических, так и неадиабатических квантовых операций.

Важно, что на этой длине волны становится доступно использование акустооптических компонентов из теллурида (ТеО 2), которые обладают существенно большим акустооптическим эффектом, чем компоненты из кристаллического кварца, использующиеся при рамановском возбуждении микроволнового кубита ультрафиолетовым излучением (355–369 нм). Это на порядок увеличивает угол отклонения лазерного пучка и существенно расширяет возможность адресации длинных цепочек ионов (до 100 и более). Инициализация квантового состояния |0 осуществляется оптической накачкой на длине волны 369 нм, продемонстрированная ранее другими группами, достоверность составляет 99.7 % [23]. Считывание осуществляется методом квантовых скачков на длине волны 369 нм подобно тому, как это делается в стандартах частоты [21].

За исключением времени когерентности, оптическое кодирование квантовой информации в ионе иттербия фактически ничем не уступает микроволновому, предлагая определенные преимущества с точки зрения адресации и масштабирования. По сравнению с хорошо исследованным и зарекомендовавшим себя оптическим кубитом на базе <sup>40</sup>Ca<sup>+</sup> на длине волны 729 нм, оптический кубит в  $^{171}{\rm Yb}^+$  имеет значительно меньшую чувствительность частоты перехода к магнитному полю за счет использования подуровней с нулевым магнитным квантовым числом  $(52\,\Gamma \text{ц/мкТл}$  при поле смещения  $500\,\text{мкТл}$  для оптического кубита в иттербии против 5600 Гц/мкТл в кальции). Относительно широкая естественная линия перехода в <sup>171</sup>Yb<sup>+</sup> является преимуществом при реализации быстрых квантовых гейтов, при этом большая масса иттербия приводит к меньшим нагревам частиц за счет флуктуации электрических полей в области локализации ионов. Недостатком предлагаемого оптического кубита в <sup>171</sup>Yb<sup>+</sup> по сравнению с <sup>40</sup>Ca<sup>+</sup> является меньшее предельное время когерентности, определяемое временем жизни возбужденного уровня  $(53\,\mathrm{Mc}\ \mathrm{B}\ ^{171}\mathrm{Yb^{+}}\ \mathrm{против}\ 1.2\,\mathrm{c}\ \mathrm{B}$  $^{40}Ca^{+}$ ).

3. Экспериментальное исследование оптического кубита в ионе  $^{171}{\bf Yb}^+$ . Экспериментальная демонстрация однокубитных операций проводилась с использованием линейной ионной ловушки Пауля с секулярными частотами  $\{\omega_x, \omega_y, \omega_z\} = 2\pi \times \{970, 950, 300\}$  кГц (см. рис. 2). Одиночный ион  $^{171}{\bf Yb}^+$  загружался в ловушку методом фотоионизации из теплового атомарного пучка. Загрузка выполнялась реже одного раза в день, что обеспечивается большим временем жизни иона (в основном определяется уровнем вакуума). Перед каждым экс-

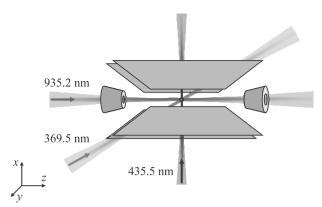


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема линейной ловушки Пауля, использующейся для захвата ионов. Охлаждение и инициализация кубита производится при помощи лазера на длине волны 369.5 нм, а перекачка — на длине волны 935.2 нм. Охлаждающий пучок направлен таким образом, чтобы эффективно охлаждать все моды колебаний. Пучок адресации кубита на 435.5 нм направлен перпендикулярно оси ловушки

периментом производилась подготовительная последовательность операций. Сначала реализовывалось доплеровское охлаждение иона при помощи лазерных пучков на длинах волн 369 и 935 нм. Во избежание пленения населенности на незадействованных в охлаждении сверхтонких подуровнях пучок на длине волны 369 нм модулировался по фазе при помощи электро-оптического модулятора (ЭОМ) на частоте  $14.7\,\Gamma\Gamma$ ц, а  $935\,\text{нм}$  – на частоте  $3.07\,\Gamma\Gamma$ ц. При охлаждении накладывается постоянное магнитное поле 500 мкТл для разрушения темных состояний, возникающих за счет эффекта когерентного пленения населенности [28]. После охлаждения, выключалась модуляция на частоте 14.7 ГГц и с помощью другого ЭОМа, установленного в том же пучке, накладывалась модуляция на частоте 2.1 ГГц. Это приводит к инициализации кубита в состояние  $|0\rangle$  за время около  $5\,\mathrm{mkc}$ .

Манипуляция квантовым состоянием кубита осуществлялась при помощи излучения высокостабильной лазерной системы на длине волны 435.5 нм, основанной на диодном лазере с внешним резонатором на длине волны 871 нм. Частота излучения стабилизирована относительно компактного высокодобротного оптического резонатора из стекла ULE со сверхнизким коэффициентом теплового расширения, а затем удвоена при помощи волоконного генератора второй гармоники [29]. Спектральная ширина лазерного излучения составляет менее 30 Гц (на основании наблюдаемой линии при спектроскопии квадрупольного перехода в иттербии). Формирование импульсов излучения для проведения квантовых операций осу-

ществлялось при помощи акустооптического модулятора (AOM). Излучение лазера фокусировалось с помощью линзы на ион, диаметр перетяжки составлял около 50 мкм. Юстировка пучка проводилась путем максимизации частоты осцилляций Раби на кубитном переходе.

Считывание состояния кубита осуществлялось по сигналу флуоресценции иона под действием охлаждающего излучения. Излучение лазера на длине волны 369 нм модулировалось на частоте 14.7 ГГц, при этом модулятор перекачивающего излучения 935 нм выключался во избежание накачки населенности из состояния  $|1\rangle$  в  $|0\rangle$  и искажения результатов измерения. В состоянии |0 ион эффективно рассеивает фотоны, собираемые при помощи асферической линзы на фотоэлектронный умножитель. В свою очередь, если ион находится в состоянии |1\,, флуоресценция отсутствует и регистрируются только фотоны засветки или темновые отсчеты детектора. Состояние кубита при этом определяется путем сравнения количества зарегистрированных фотонов с заранее выбранным пороговым значением. Описанная процедура проецирует состояние иона на базис состояний  $(|0\rangle, |1\rangle)$ , что соответствует процессу измерения. На рисунке 3 представлена гистограмма количества

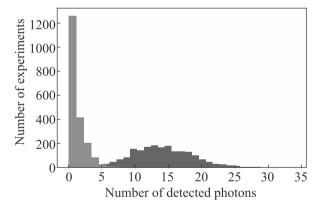


Рис. 3. (Цветной онлайн) Гистограммы количества зарегистрированных отсчетов в случае измерения кубита в состоянии  $|0\rangle$  (синий цвет) и при блокированной флуоресценции иона (имитация состояния  $|1\rangle$ , оранжевый цвет). Время считывания единичного измерения составляет 5 мс

регистрируемых фотонов (время считывания 5 мс) в двух случаях: сразу после инициализации кубита в состояние  $|0\rangle$  и сразу после инициализации в  $|0\rangle$  при выключенном пучке перекачки 935 нм. Выключение перекачки приводит к прекращению флуоресценции и позволяет измерить сигнал засветки и темновых отсчетов независимо от достоверности операции пе-

ревода кубита из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|1\rangle$  (фотоэлектронный умножитель не чувствителен к излучению на длине волны 935 нм, поэтому засветкой от этого лазера можно пренебречь). Данное измерение позволяет нам оценить достоверность инициализации подготовки и считывания квантового состояния установки в 98 % при пороговом значении в 5 фотонов (рис. 4), если пренебречь при этой оценке нерезонансными эффектами перекачки.

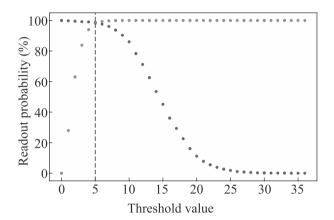


Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментальная достоверность считывания кубита в состоянии  $|0\rangle$  (синий цвет) и  $|1\rangle$  в зависимости от выбранного порогового значения. Красной пунктирной линией обозначено оптимальное значение порога

Основными экспериментально реализуемыми однокубитными операциями на ионах являются вращения на произвольные углы по осям X или Y, которые лежат в экваториальной плоскости сферы Блоха. Для этого необходимо обеспечить взаимодействие двухуровневой системы иона с электромагнитным полем, резонансным с кубитным переходом. В случае микроволновых кубитов взаимодействие происходит с магнитной компонентой поля, в случае оптических - с электрической компонентой (или ее градиентом, как в случае квадрупольного перехода). При этом угол поворота вектора состояния на сфере Блоха определяется произведением частоты Раби на длительность лазерного импульса, а ось поворота - фазой электромагнитного поля относительно собственной фазы двухуровневой системы. Наша экспериментальная установка позволяет производить вращения состояния кубита на произвольные углы вокруг осей X или Y путем формирования соответствующих световых импульсов при помощи АОМ. На рисунке 5 представлен график осцилляций Раби, зарегистрированных на переходе  ${}^2S_{1/2}(F=0,m_F=$  $=0) \rightarrow {}^{2}D_{3/2}(F=2,m_{F}=0)$  в одиночном ионе  $^{171}{
m Yb}^+$ . При измерении каждой точки ион инициали-

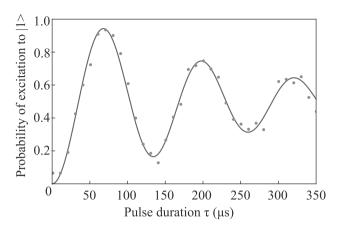


Рис. 5. (Цветной онлайн) Осцилляции Раби на кубитном переходе  $|0\rangle \to |1\rangle$  (435.5 нм), соответствующие вращению вектора состояния кубита на сфере Блоха относительно оси X в экваториальной плоскости на угол, пропорциональный длитепльности импульса  $\tau$ . Синяя линия – аппроксимация данных подгоночной кривой, параметры которой соответствуют количеству колебательных квантов в радиальных модах ловушки, равному n=25

зировался в состояние  $|0\rangle$  (как было описано выше), далее осуществлялось возбуждение кубитного перехода лазерным импульсом определенной длительности  $\tau$ , затем производилось считывание.

Достоверность операции Паули-Х, соответствующая  $\pi$ -импульсу на этом графике (68 мкс), составляет 94 % без корректировки на достоверность подготовки и считывания. Если учитывать неидеальность процессов подготовки и считывания, достоверность собственно самой операции составляет 96 %. Затухание осцилляций Раби, которое ограничивает достоверность операции в данном эксперименте, связано с тепловым движением иона в направлении вдоль пучка адресации и определяются фактором Дебая-Уоллера [30]. Это подтверждается тем, что количество наблюдаемых осцилляций до затухания к уровню 1/е не зависит собственно от частоты Раби (при длительностях  $\pi$ -импульса менее 1 мс). В случае, если затухание происходило бы из за флуктуаций магнитного поля, ситуация была бы другой и при повышении частоты Раби наблюдалось бы больше периодов. Для интерпретации экспериментальных данных была разработана теоретическая модель, учитывающая распределение иона по колебательным состояниям ловушки п. Помимо достоверности, аппроксимация позволяет определить среднее количество фононов в модах колебаний иона, имеющих проекцию на направление лазерного пучка адресации. В нашем случае это – радиальные моды, поскольку лазерный пучок направлен перпендикулярно оси ловушки. Данное значение составило  $\bar{n}=25$  фононов, что соответствует колебательной температуре 1.3 мК. Отметим, что доплеровский предел лазерного охлаждения в нашем случае соответствует  $\bar{n}=10$  фононов. Соответственно, ион находится близко к доплеровскому пределу и охлаждение хорошо оптимизировано за счет аккуратной компенсации микродвижений. Это открывает возможность дальнейшего глубокого охлаждения до основного колебательного состояния [31, 32], что требуется для реализации двухкубитных операций.

4. Заключение. Исследована возможность использования квадрупольного оптического перехода  ${}^{2}S_{1/2}(F = 0, m_{F} = 0) \rightarrow {}^{2}D_{3/2}(F = 2, m_{F} = 0)$ в одиночном ионе  $^{171}{\rm Yb}^+$  на длине волны  $435.5\,{\rm HM}$ для задач квантовых вычислений. Предложенный метод кодирования квантовой информации наследует практически все достоинства микроволнового кубита в <sup>171</sup>Yb<sup>+</sup>, который на сегодняшний день широко используется в наиболее успешных прототипах квантовых компьютеров. Предложенный оптический кубит обладает рядом преимуществ, главными из которых является удобство адресации (требуется один лазерный пучок, есть возможность адресовать более 100 ионов в линейных цепочках), а также большая достоверность неадиабатических квантовых операций (в перспективе). В свою очередь, по сравнению с используемым оптическим кубитом на <sup>40</sup>Ca<sup>+</sup> данный тип кодирования обладает на несколько порядков меньшей чувствительностью к магнитным полям. В данной работе была создана экспериментальная установка, на которой продемонстрированы процедуры инициализации и считывания оптического кубита в <sup>171</sup>Yb<sup>+</sup> с достоверностью 98 %, а также однокубитная операция Паули-Х с достоверностью 96 % (после коррекции на подготовку и считывание). Достоверность подготовки и считывания на данный момент ограничена эффективностью сбора фотонов флуоресценции и может быть увеличена заменой асферической линзы на широкоапертурный объектив. Достоверность однокубитной операции определяется тепловым движением иона и будет существенно увеличена после охлаждения до основного колебательного состояния. Таким образом, продемонстрированы основные характеристики оптического кубита в ионе иттербия и подготовлен эксперимент для реализации двухкубитных операций, который планируется выполнить в ближайшее время.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках гранта #19-32-90103.

- 1. A. Ajagekar and F. You, Energy 179, 76 (2019).
- L.K. Grover, in Proceedings of the Twenty-eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing, Association for Computing Machinery, N.Y. (1996), p. 212.
- 3. P.W. Shor, in *Proceedings of 35th Annual Symposium* on Foundations of Computer Science, IEEE, Santa Fe (1994), p. 124.
- F. Arute, K. Arya, R. Babbush et al. (Collaboration), Nature 574, 505 (2019).
- P. Jurcevic, A. Javadi-Abhari, L.S. Bishop et al. (Collaboration), Quantum Science and Technology 6, 25020 (2021).
- G. G. Guerreschi and J. Park, Quantum Science and Technology 3, 045003 (2018).
- 7. D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe, and D. Wineland, Rev. Mod. Phys. **75**, 281 (2003).
- P. Wang, C. Y. Luan, M. Qiao, M. Um, J. Zhang, Y. Wang, X. Yuan, M. Gu, J. Zhang, and K. Kim, Nat. Commun. 12, 1 (2021).
- T. P. Harty, D. T. Allcock, C. J. Ballance, L. Guidoni, H. A. Janacek, N. M. Linke, D. N. Stacey, and D. M. Lucas, Phys. Rev. Lett. 113, 2 (2014).
- J. P. Gaebler, T. R. Tan, Y. Lin, Y. Wan, R. Bowler, A. C. Keith, S. Glancy, K. Coakley, E. Knill, D. Leibfried, and D. J. Wineland, Phys. Rev. Lett. 117, 1 (2016).
- K. Wright, K.M. Beck, S. Debnath et al. (Collaboration), Nat. Commun. 10, 1 (2019).
- J. Zhang, G. Pagano, P.W. Hess, A. Kyprianidis,
   P. Becker, H. Kaplan, A. V. Gorshkov, Z. X. Gong, and
   C. Monroe, Nature 551, 601 (2017).
- J.M. Pino, J.M. Dreiling, C. Figgatt, J.P. Gaebler, S.A. Moses, M.S. Allman, C.H. Baldwin, M. Foss-Feig, D. Hayes, K. Mayer, C. Ryan-Anderson, and B. Neyenhuis, http://arxiv.org/abs/2003.01293 (2020).
- M. Bock, P. Eich, S. Kucera, M. Kreis, A. Lenhard, C. Becher, and J. Eschner, Nat. Commun. 9, 1998 (2018).
- 15. A. K. Ratcliffe, R. L. Taylor, J. J. Hope, and A. R. Carvalho, Phys. Rev. Lett. **120**, 1 (2018).
- D. Hucul, J. E. Christensen, E. R. Hudson, and W. C. Campbell, Phys. Rev. Lett. 119, 100501 (2017).
- 17. P. J. Low, B. M. White, A. A. Cox, M. L. Day, and C. Senko, Phys. Rev. Research **2**, 033128 (2020).
- V. E. Zobov, V. P. Shauro, and A. S. Ermilov, JETP Lett. 87, 334 (2008).
- 19. I. Pogorelov, T. Feldker, C.D. Marciniak et al. (Collaboration), PRX Quantum 2, 020343 (2021).
- N. Akerman, N. Navon, S. Kotler, Y. Glickman, and R. Ozeri, New J. Phys. 17, 113060 (2015).

- I. A. Semerikov, K. Y. Khabarova, I. V. Zalivako, A. S. Borisenko, and N. N. Kolachevsky, Bull. Lebedev Phys. Inst. 45, 337 (2018).
- W. Happer, Rev. Mod. Phys. 44, 169 (1972).
- 23. S. Debnath, N. M. Linke, C. Figgatt, K. A. Landsman, K. Wright, and C. Monroe, Nature **536**, 63 (2016).
- J. Mizrahi, B. Neyenhuis, K.G. Johnson, W.C. Campbell, C. Senko, D. Hayes, and C. Monroe, Applied Physics B: Lasers and Optics 114, 45 (2014).
- A. Somoroff, Q. Ficheux, R. A. Mencia, H. Xiong, R. V. Kuzmin, and V. E. Manucharyan, arXiv preprint arXiv:2103.08578 (2021).
- H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran,
   T. T. Wang, S. Ebadi, H. Bernien, M. Greiner,
   V. Vuletić, H. Pichler, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett.
   123, 170503 (2019).
- 27. C. Tamm, D. Engelke, and V. Bühner, Phys. Rev. A -

- Atomic, Molecular, and Optical Physics **61**, 534051 (2000).
- 28. D. J. Berkeland and M. G. Boshier, Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics 65, 13 (2002).
- I. V. Zalivako, I. A. Semerikov, A. S. Borisenko, M. D. Aksenov, P. A. Vishnyakov, P. L. Sidorov, N. V. Semenin, A. A. Golovizin, K. Y. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, Quantum Electron. 50, 850 (2020).
- D. J. Wineland, C. Monroe, W. M. Itano, D. Leibfried,
   B. E. King, and D. M. Meekhof, J. Res. Natl. Inst. Stand.
   Technol. 103, 259 (1998).
- 31. C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, S. R. Jefferts, W. M. Itano, D. J. Wineland, and P. Gould, Phys. Rev. Lett. **75**, 4011 (1995).
- 32. L. A. Akopyan, I. V. Zalivako, K. E. Lakhmanskiy, K. Y. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, JETP Lett. **112**, 585 (2020).

### Переход-спутник резонансного дублета атома ${\bf Na}$ в смеси с ${\bf CF}_4$

В. А. Алексеев $^{+1}$ , А. А. Пастор $^*$ , П. Ю. Сердобинцев $^*$ , Т. А. Вартанян $^+$  Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

\*Санкт-Петербургский государственный университет, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 июня 2021 г. После переработки 25 июня 2021 г. Принята к публикации 25 июня 2021 г.

В спектре возбуждения резонансной люминесценции атомов Na в смеси с CF4 обнаружен переходспутник резонансного дублета, отвечающий процессу одновременного возбуждения атома на частоте резонансного перехода  $\mathrm{Na}(^2\mathrm{S}_{1/2} \to {}^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2})$  и сталкивающейся с ним молекулы на частоте основного тона ИК-активной  $v_3$ -моды с энергией кванта  $1283\,\mathrm{cm}^{-1}$ ,  $\mathrm{Na}(^2\mathrm{S}_{1/2}) + \mathrm{CF}_4(v_3 = 0) + hv \to \mathrm{Na}(^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}) + \mathrm{CF}_4(v_3 = 1)$ . Показано, что возникновение оптической связи между верхним и нижним состояниями этого асимптотически ( $R_{\mathrm{Na-CF}_4} \to \infty$ ) запрещенного перехода может быть объяснено в рамках модели, учитывающей поляризацию атома в поле молекулы и взаимодействие дипольного момента перехода  $\mathrm{CF}_4(v_3 = 1 \to v_3 = 0)$  с дипольными моментами электронных переходов в атоме. Результаты расчетов в рамках данной модели находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом. Отмечено, что  $\mathrm{CF}_4$  может представлять интерес в качестве компонента рабочих сред лазеров на переходах атомов щелочных металлов с диодной накачкой (DPAL).

DOI: 10.31857/S1234567821140020

**1. Введение.** Процессы парного оптического возбуждения двух сталкивающихся атомов одним фотоном,

$$A(G) + B(G) + hv \rightarrow A(E) + B(E),$$

где G, E обозначают, соответственно, основное и возбужденное состояния, были предметом ряда исследований ([1] и ссылки в этой работе). Данный процесс является одним из проявлений более общего процесса, когда две частицы одновременно изменяют свои состояния в результате поглощения или излучения фотона. В частности, хорошо изучены [1] процессы типа

$$A(R) + B(G) + hv \rightarrow A(E) + B(E),$$

где R — резонансное состояние, возбуждаемое независимым источником (радиационные столкновения, лазерно-индуцированный перенос энергии), впервые рассмотренные в работе [2].

Исследования спектров смесей атомарных газов с  $\mathrm{CF}_4$  выявили замечательную способность этой молекулы индуцировать переходы-спутники на комбинированных частотах, отвечающих энергиям состояний атома, увеличенных на энергию кванта ИК активной  $v_3$ -моды  $\mathrm{CF}_4$  (1283 см $^{-1}$ , что приблизительно соответствует максимуму Q-ветви),

$$A(G) + CF_4(v_3 = 0) + hv \rightarrow A(E) + CF_4(v_3 = 1).$$

Особенно благоприятной является ситуация, когда энергия этого перехода близка к энергии одного из резонансных переходов в атоме,  $A(G) + hv \rightarrow A(R)$ , и при этом состояние A(E) связано с A(R) разрешенным оптическим переходом. При выполнении этих условий верхнее состояние перехода спутника A(E) $CF_4(v_3 = 1)$  располагается вблизи резонансного состояния A(R)  $CF_4(v_3=0)$  и связано с ним дипольдипольным взаимодействием (ДДВ), обусловленным дипольными моментами (ДМ) переходов  $A(R \leftrightarrow E)$ и  $\mathrm{CF}_4(v_3=1\leftrightarrow v_3=0)$ . Приобретаемая в результате ДДВ, примесь резонансного состояния обеспечивает оптическую связь с основным состоянием A(G) $CF_4(v_3=0)$ . Отметим, если переход  $A(R\leftrightarrow E)$  разрешен, то переход  $A(G \leftrightarrow E)$  запрещен по правилам отбора. В дальнейшем состояния атома, переходы в которые из основного состояния запрещены, будут обозначаться DF (dipole-forbidden).

Иллюстрацией сказанного выше является переход

$$Na(3s^2S_{1/2}) + CF_4(v_3 = 0) + hv \rightarrow$$
  
  $\rightarrow Na(3d^2D_{3/2.5/2}) + CF_4(v_3 = 1).$ 

Состояния  $Na(3d^2D_{3/2,\,5/2})$  оптически связаны с резонансными состояниями  $Na(4p^2P_{1/2,\,3/2})$ , расположенными  $\sim 1100\,\mathrm{cm^{-1}}$  выше  $Na(3d^2D_{3/2,\,5/2})$ . Таким образом, состояния  $Na(3d^2D_{3/2,\,5/2})\mathrm{CF}_4(v_3=1)$  и  $Na(4p^2P_{1/2,\,3/2})\mathrm{CF}_4(v_3=0)$  располагаются сравни-

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: vadim-alekseev@mail.ru

тельно близко,  $\sim 180\,\mathrm{cm}^{-1}$ , и связаны между собой взаимодействием ДМ переходов  $\mathrm{Na}(3d^2\mathrm{D}_{3/2,\,5/2}\leftrightarrow 4p^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2})$  и  $\mathrm{CF}_4(v_3=1\leftrightarrow v_3=0)$ . Данный переход-спутник наблюдался в спектре смеси  $\mathrm{Na}$  с  $\mathrm{CF}_4$  в газовой ячейке [3], а также в эксперименте со скрещенными пучками [4]. При этом основная доля атомов  $\mathrm{Na}(3d^2\mathrm{D}_{3/2,\,5/2})$  регистрировалась вблизи нулевого угла рассеяния, что свидетельствует о возбуждении атома при больших значениях прицельного параметра столкновения, таких, что отклонение от начальной траектории мало.

Многочисленные примеры спутников наблюдались в спектрах смесей Хе с СГ4 в области вакуумного ультрафиолета [5]. Спутники резонансных переходов (SRT) существенно отличаются по форме и интенсивности от спутников запрещенных переходов (SDFT), а также от спутников переходов в высоколежащие резонансные состояния (SHRT). Типичный SDFT (SHRT) представляет собой узкую полосу (FWHM  $\sim 10-20\,{\rm cm}^{-1}$ ), расположенную вблизи асимптотической энергии, равной сумме энергий атома и  $v_3$ -кванта, тогда как SRT – широкая полоса (FWHM  $\sim 400\,{\rm cm}^{-1}$ ), крылья которой похожи по форме на крылья уширенного давлением "родительского" резонансного перехода. Отметим, что SRT первого резонансного перехода Хе впервые наблюдался в [6].

Различие по форме SRT от SDFT и SHRT объясняется различием в расстояниях между атомом и молекулой,  $R_{\text{A-CF}_4}$ , при которых происходят переходы: SDFT и SHRT отвечают переходам при сравнительно больших  $R_{A-CF_4}$ , при которых потенциалы основного и возбужденного состояний мало отличаются от соответствующих асимптотических значений при стремлении  $R_{\text{A-CF}_4}$  к бесконечности и могут считаться приблизительно параллельными. Как следствие этого, переходы при разных  $R_{\text{A-CF}_4}$ имеют близкие энергии, их интенсивности складываются, что дает узкую полосу с максимумом вблизи длины волны, соответствующей асимптотическому значению энергии перехода при бесконечном расстоянии между частицами. В свою очередь, SRT отвечают переходам при меньших  $R_{\text{A-CF}_4}$ , при которых характер взаимодействия в основном и возбужденном состояниях существенно различен. Как следствие этого, потенциалы располагаются не параллельно, переходы при разных  $R_{\text{A-CF}_4}$  имеют различные энергии, что дает спектрально широкую полосу. Отметим, что интенсивность SRT существенно ниже по сравнению с SDFT - в максимуме полосы различие может достигать 4-х порядков (различие интегральных интенсивностей на порядок меньше).

Спутники всех трех типов (SRT, SDFT и SHRT) наблюдались в спектрах смесей Xe с  $C_2F_6$  [5]. Энергия кванта ИК активной  $v_{10}$ -моды  $C_2F_6$ , которая индуцирует эти переходы, весьма незначительно отличается от  $v_3$  моды  $CF_4$ :  $v_3-v_{10}=1283-1250=33\,\mathrm{cm}^{-1}$ . Отметим также, что спутники, аналогичные по форме SRT Xe, наблюдались в спектрах смесей Kr с  $CF_4$  и  $C_2F_6$  [5].

Как показали недавние исследования [7], CF<sub>4</sub> индуцирует спутники нижнего резонансного дублета атомов тяжелых щелочных металлов (ШМ).

$$A(ns^2S_{1/2} + CF_4(v_3 = 0) + hv \rightarrow$$
  
 $\rightarrow A(np^2P_{1/2,3/2}) + CF_4(v_3 = 1),$  (1)

где  $A=K,\,Rb,\,Cs.$  Однако эти спутники существенно отличаются от SRT Xe и Kr: их интенсивность приблизительно на два порядка выше, а форма – спектрально узкая полоса с FWHM  $\sim 30\,{\rm cm}^{-1}$  – близка к SDFT и SHRT в спектрах смеси Xe с CF<sub>4</sub>.

В данной работе представлены результаты исследования спектров возбуждения резонансной люминесценции атома Na в смеси с CF<sub>4</sub>. Аналогично случаю тяжелых ЩМ, в спектре обнаружен спутник, отвечающий процессу (1) (A = Na). Однако в отличие от тяжелых ЩМ, спутник дублета Na представляет собой сравнительно широкую полосу, FWHM  $\sim$  $\sim 400\,\mathrm{cm}^{-1}$ , похожую на SRT Xe и Kr. Весьма вероятно, что этот спутник значительно слабее аналогичных переходов в спектрах тяжелых ЩМ (абсолютная величина сечения поглощения неизвестна, так как этот переход удалось наблюдать только в спектре возбуждения люминесценции). Согласно приведенным выше аргументам, большая спектральная ширина свидетельствует о том, что переходы происходят не на больших расстояниях  $R_{A-CF_4}$ , при которых потенциалы верхнего  $Na(3p^2P_{1/2,3/2})CF_4(v_3=1)$  и нижнего  $Na(3s^2S_{1/2})CF_4(v_3=0)$  состояний располагаются параллельно друг другу, а при более тесном сближении между частицами.

В отличие от состояний  $A(DF)CF_4(v_3=1)$ , состояния  $A(R)CF_4(v_3=1)$  не могут быть связаны ДДВ с резонансными состояниями  $A(R)CF_4(v_3=0)$ . Это справедливо в любом порядке теории возмущений. Действительно, ДДВ может связывать  $A(R)CF_4(v_3=1)$  с  $A(DF)CF_4(v_3=0)$ , которые в свою очередь могут быть связаны только с другими состояниями типа  $A(R)CF_4(v_3=1)$ . Как показано в данной работе, если учесть поляризацию атома в поле молекулы, ДДВ может привести к появлению

примесей резонансных состояний во втором порядке теории возмущений. Результаты расчетов в рамках этой модели удовлетворительно согласуются с экспериментом.

Эксперимент. Оптическая кювета изготавливалась из кварцевой трубки диаметром 30 мм и имела длину  $\sim 100\,\mathrm{mm}$ . K торцам трубки припаивалась окна. К краю одного из окон припаивалась трубка диаметром ~ 6 мм с переходом кварц-молибденовое стекло для подсоединения к вакуумной системе. В трубку помещались кусочки металлического натрия, после чего кювета подсоединялась к вакуумной системе. После откачки и обезгаживания металл перегонялся в кювету. Для предотвращения конденсации металла на окнах кюветы их температура поддерживалась выше температуры боковых стенок. Далее кювета наполнялась CF<sub>4</sub> или Ar до давления 0.8 атм при комнатной температуре и запаивалась. Отметим, что спектры смесей Na с Ar неоднократно исследовались ранее ([8] и ссылки). В данной работе спектр этой смеси измерялся для сравнения.

Печка для нагревания кюветы была изготовлена из медной трубки. Торцы трубки были закрыты фланцами с кварцевыми окнами. В средней части трубки имелось отверстие для регистрации люминесценции. Остальная поверхность обматывалась стеклотканью, поверх которой наматывалась нихромовая проволока.

Для возбуждения люминесценции использовался лазер на красителях (Quantel TDL-90) с накачкой излучением третьей гармоники Nd:YAG лазера (Quantel, YG 980E-10). В отличие от предыдущих экспериментов с тяжелыми ЩМ [5], чувствительности портативного спектрометра оказалось недостаточной для регистрации люминесценции Na. В данной работе люминесценция регистрировалась фотоумножителем ФЭУ-28, установленным за выходной щелью монохроматора Jobin-Yvon. Для дополнительной защиты от рассеянного излучения лазера, перед входным окном фотоумножителя устанавливался интерференционный фильтр с максимумом полосы пропускания на длине волны 592 нм и шириной 10 нм.

**Результаты и обсуждения.** На рисунке 1 представлены спектры возбуждения люминесценции смесей Na с CF<sub>4</sub> и (для сравнения) с Ar. Измерения проводились при температуре газовой смеси  $T=272\pm3\,^{\circ}\mathrm{C}$ . Концентрация атомов в насыщенном паре Na при этой температуре составляет [Na] =  $9.1\times10^{13}\,\mathrm{cm}^{-3}$  (расчет согласно [9]).

Как можно видеть из рис. 1, в спектре смеси с  $\mathrm{CF}_4$  присутствуют полоса  $SD_1D_2$ , максимум которой

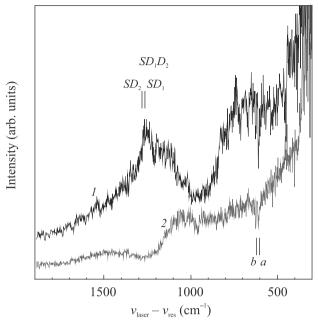


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры возбуждения люминесценции атомов Na  $^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$  на голубом крыле дублета Na  $(3s^2\mathrm{S}_{1/2}\to 4p^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2})$  при лазерном возбуждении смесей Na с (1) CF4 и (2) Ar  $(n_{\mathrm{CF}_4}=n_{\mathrm{Ar}}=1.9\times10^{19}\,\mathrm{cm}^{-3})$  при температуре  $T=272\,^{\circ}\mathrm{C}$ . Энергия отсчитывается от перехода Na  $(3s^2\mathrm{S}_{1/2}\to 3p^2\mathrm{P}_{1/2})$  (линия  $\mathrm{D}_1$ ). Положение SD1 и SD2 соответствуют энергиям состояний Na  $3p^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$ , увеличенных на энергию  $v_3$  кванта CF4  $(1283\,\mathrm{cm}^{-1})$ . Провал в спектрах, совпадающий с a и b, вероятно, обусловлен лазерным возбуждением атомов Na  $^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$  в вышележащие состояния Na  $4d^2\mathrm{D}_{3/2,\,5/2}$ : положения a и b соответствуют энергиям переходов Na  $(3p^2\mathrm{P}_{1/2}\to 4d^2\mathrm{D}_{3/2})$  и Na  $(3p^2\mathrm{P}_{3/2}\to 4d^2\mathrm{D}_{3/2,\,5/2})$ , соответственно (различие энергий состояний  $^2\mathrm{D}_{3/2}$  и  $^2\mathrm{D}_{5/2}$  составляет всего  $0.025\,\mathrm{cm}^{-1}$ )

располагается вблизи энергий резонансных состояний  $\mathrm{Na}(^2P_{1/2,\,3/2})$ , увеличенных на энергию  $v_3$ -кванта  $\mathrm{CF}_4$ . Как отмечалось во Введении, аналогичные переходы-спутники вблизи асимптот  $\mathrm{A}(^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2})+$  +  $\mathrm{CF}_4(v_3=1)$  были обнаружены в спектрах смесей тяжелых ЩМ с  $\mathrm{CF}_4$  [5]. С учетом этого, полосу  $SD_1D_2$  можно уверенно отнести к процессу парного возбуждения (1) ( $\mathrm{A}=\mathrm{Na}$ ).

Отметим, что в спектре поглощения при тех же условиях эксперимента полоса  $SD_1D_2$  не наблюдается вследствие недостаточной чувствительности. Попытка увеличить концентрацию атомов Nа посредством увеличения температуры оказалась неудачной вследствие химической нестабильности смеси при дальнейшем нагревании кюветы.

Представляет интерес сравнить форму спутников разных резонансных переходов. Как можно видеть из рис. 2, полоса  $SD_1D_2$  (рис. 2a) существенно ши-

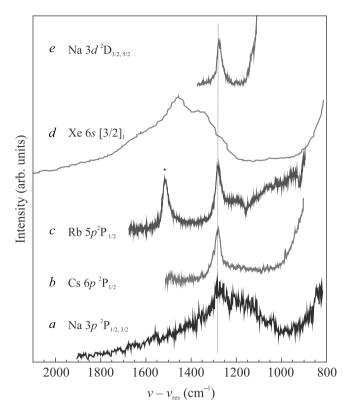


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спутники резонансных переходов: a — Na  $(3s^2{\rm S}_{1/2}\to 3p^2{\rm P}_{1/2,\,3/2})$  (эта работа); b — Cs  $(6s^2{\rm S}_{1/2}\to 6p^2{\rm P}_{1/2})$  и c — Rb  $(5s^2{\rm S}_{1/2}\to 5p^2{\rm P}_{1/2,3/2})$ ; d — Xe  $(5p^6\,{}^1{\rm S}_0\to 5p^5s^3{\rm P}_1)$  [5]. Энергия отсчитывается от соответствующего резонансного состояния  $(^2{\rm P}_{1/2}$  в случае Na и Rb). e — Спутник дипользапрещенного перехода Na  $(3s^2{\rm S}_{1/2}\to 3d^2{\rm D}_{3/2,\,5/2})$  [3]. Энергия отсчитывается от Na  $(3d^2{\rm D}_{3/2,5/2})$ . Вертикальная линия соответствует энергии  $v_3$  кванта молекулы  ${\rm CF}_4$   $(1283\,{\rm cm}^{-1})$ 

ре спутников дублетов Rb и Cs (рис. 2b, c). С другой стороны, полоса  $SD_1D_2$  имеет сходство с SRT Xe и Kr. Для сравнения на рис. 2d показан SRT Xe.

Для сравнения на рис. 2е также показан спектр SDFT  $\operatorname{Na}(3s^2\operatorname{S}_{1/2}\to 3d^2\operatorname{D}_{3/2,5/2})$  (см. Введение). Спектр представляет собой узкую полосу, что объясняется дальнодействующим характером ДДВ, которое индуцирует этот переход. Как отмечалось во Введении, в отличие от состояний  $\operatorname{A}(DF)\operatorname{CF}_4(v_3=1)$ , смешивание состояний  $\operatorname{A}(R)\operatorname{CF}_4(v_3=1)$  с резонансными состояниями  $\operatorname{A}(R)\operatorname{CF}_4(v_3=0)$  не может быть следствием только ДДВ. Как показано ниже, появление "резонансной" примеси может быть объяснено поляризацией атома в поле молекулы.

В электрическом поле резонансные состояния  ${}^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$  приобретают примеси DF состояний  ${}^2\mathrm{S}_{1/2}$  и  ${}^2\mathrm{D}_{3/2,\,5/2}$ , причем примеси ближайших по энергии состояний имеют наибольшие весовые коэффициенты

и соответственно дают основной вклад в обсуждаемые ниже эффекты. Так, в случае первого резонансного дублета Na, к этой группе состояний относятся  $3s^2S_{1/2}$  (основное состояние),  $4s^2S_{1/2}$  и  $3d^2D_{3/2,5/2}$ . Энергии этих состояний и дипольные моменты переходов между ними представлены в табл. 1; там же, для сравнения, приводятся данные для соответствующих состояний Cs. Как показывают оценки, эффект от включения вышележащих состояний весьма мал. Отметим также, что ДМ переходов между соответствующими парами уровней Na и Cs различаются не более, чем на 20%. Это справедливо также для К, и Rb. С другой стороны, энергии некоторых из этих переходов могут различаться в несколько раз (табл. 1). Как показывает расчет (см. ниже), в результате этого интенсивности спутников резонансного дублета Na и Cs различаются более, чем на порядок ( $\sim 40$  раз).

В первом порядке теории возмущений волновая функция (ВФ) резонансного состояния в электрическом поле может быть представлена в виде суммы невозмущенных ВФ атома (ВФ и энергии резонансных состояний обозначаются индексами k, l и диполь-запрещенных состояний индексами m, n).

$$\psi^{I}(R_k) = \psi(R_k) + \sum_{n} a_{kn} \psi(DF_n),$$

где  $a_{kn} \ll 1$  – весовые коэффициенты, явный вид которых обсуждается ниже.

Волновые функции квазимолекулы ACF<sub>4</sub> могут быть представлены в виде произведения ВФ атома и колебательных ВФ молекулы. В первом приближении могут быть использованы колебательные ВФ нулевого порядка (невозмущенные). Таким образом, для ВФ верхнего состояния перехода-спутника и ВФ верхнего состояния резонансного перехода можно записать

$$\psi^{I}(R_{k}, M_{1}) = \psi(R_{k})\chi(M_{1}) + \sum_{n} a_{kn}\psi(DF_{n})\chi(M_{1}),$$
  
$$\psi^{I}(R_{l}, M_{0}) = \psi(R_{l})\chi(M_{0}) + \sum_{m} a_{lm}\psi(DF_{m})\chi(M_{0}).$$
(2)

Матричный элемент ДДВ этих состояний имеет вид

$$\langle \psi^{I}(R_{k}, M_{1})|V_{dd}|\psi^{I}(R_{l}, M_{0})\rangle =$$

$$= \sum_{n} a_{kn} \frac{\mu_{nl}\mu_{M}}{R^{3}} + \sum_{n} a_{lm} \frac{\mu_{mk}\mu_{M}}{R^{3}}.$$
(4)

Запишем также ВФ основного состояния

$$\psi^{I}(G, M_0) = \psi(G)\chi(M_0) + \sum_{k} a_{Gk}\psi(R_k)\chi(M_0), \quad (5)$$

где  $a_{Gk} \ll 1$  – весовые коэффициенты.

Нижнее состояние	Энергия, см <sup>-1</sup>	Верхнее состояние	Энергия, см <sup>-1</sup>	Энергия перехода, см <sup>-1</sup>	$\mu$ , a.e.					
Na атом										
$3s_{1/2}$	0	$3p_{1/2}$	16956	16956	3.5					
$3s_{1/2}$	0	$3p_{3/2}$	16973	16973	5.0					
$3p_{1/2}$	16956	$3d_{3/2}$	29173	12217	6.8					
$3p_{1/2}$	16956	$4s_{1/2}$	25740	8784	3.6					
$3p_{3/2}$	16973	$3d_{3/2}$	29173	12200	3.1					
$3p_{3/2}$	16973	$3d_{5/2}$	29173	12200	9.2					
$3p_{3/2}$	16973	$4s_{1/2}$	25740	8767	5.1					
·	Сѕ атом									
$6s_{1/2}$	0	$6p_{1/2}$	11178	11178	4.5					
$6s_{1/2}$	0	$6p_{3/2}$	11732	11732	6.3					
$6p_{1/2}$	11178	$5d_{3/2}$	14499	3321	7.1					
$6p_{1/2}$	11178	$7s_{1/2}$	18536	7358	4.2					
$6p_{3/2}$	11732	$5d_{3/2}$	14597	2865	3.2					
$6p_{3/2}$	11732	$5d_{5/2}$	14597	2865	9.7					
$6p_{3/2}$	11732	$7s_{1/2}$	18536	6804	6.5					

**Таблица 1.** Энергии и дипольные моменты некоторых оптических переходов атомов Na и Cs [10] (для облегчения сравнения значения энергий округлены до целых)

Как можно видеть, взаимодействие ДМ переходов  $A(R_{l(k)} \leftrightarrow DF_{n(m)})$  и  $CF_4(v_3=0 \leftrightarrow v_3=1)$  связывает второе слагаемое в (2) с первым слагаемым в (3) и – наоборот – первое слагаемое в (2) со вторым слагаемым в (3). В результате этого взаимодействия верхнее состояние перехода-спутника приобретает примеси состояний  $\psi(R_l)\chi(M_0)$  и  $\psi(DF_m)\chi(M_0)$ , которые оптически связаны, соответственно, с первым и вторым слагаемыми в (5). Однако вкладом второго канала можно пренебречь, так как второе слагаемое в (5) является малой добавкой.

Диполь-дипольное взаимодействие связывает верхнее состояние перехода-спутника с обоими состояниями дублета. В результате ДМ спутника  $SD_k$  (k=1,2) является суммой двух слагаемых пропорциональных ДМ переходов  $D_1$  и  $D_2$  ( $\mu_1$  и  $\mu_2$ , соответственно):

$$\mu_{SDk} = \langle \psi^{II}(G, M_0) | er | \psi^{II}(R_k, M_1) \rangle \approx b_{k1} \mu_1 + b_{k2} \mu_2,$$
(6)

где

$$b_{kl} = \sum_{n} a_{kn} \frac{\mu_{nl} \mu_M}{|E_k + hv_3 - E_l| R^3}.$$
 (7)

С учетом того, что  $\mu_2/\mu_1 \approx \sqrt{2}$ , соотношение (6) можно записать в виде

$$\mu_{SDk} \approx \mu_1 (b_{k1} + \sqrt{2}b_{k2}). \tag{8}$$

Сечение поглощения пропорционально квадрату ДМ перехода:  $\sigma = C\mu^2/\lambda$ , где  $\lambda$  – длина волны перехода

и C – коэффициент, зависящий от выбора единиц. С учетом этого

$$\frac{\sigma_{SD1}}{\sigma_{SD2}} = \left(\frac{\mu_{SD1}}{\mu_{SD2}}\right)^2 \frac{\lambda_{SD2}}{\lambda_{SD1}} = \left(\frac{b_{11} + \sqrt{2}b_{12}}{b_{11} + \sqrt{2}b_{12}}\right)^2 \frac{\lambda_{SD2}}{\lambda_{SD1}}.$$
(9)

Это соотношение может быть использовано для расчета относительных интенсивностей спутников, если известны значения коэффициент квазиов  $a_{kn}$ , входящих в (7). Заметим в связи с этим следующее.

При смешивании в электрическом поле весовые коэффициенты в разложении волновой функции пропорциональны отношению  $\mu_{k-n}/|E_n-E_k|$ , где  $\mu_{k-n}$  – дипольный момент перехода  $A(R_k\leftrightarrow DF_n)$ , а разность в знаменателе – энергия этого перехода [11]. Отношение (9) не будет зависеть от параметров, характеризующих электрическое поле молекулы, если эти параметры входят как сомножители в формулу для  $a_{kn}$ . Например, если смешивание волновых функций атома обусловлено полем октупольного момента, которым обладает молекула  $CF_4$  [12], тогда

$$a_{kn} = \frac{\Theta \mu_{k-n}}{|E_n - E_k| R^5},$$

где  $\Theta$  — октупольный момент и R — расстояние между атомом и молекулой. Очевидно, что  $\Theta$  при подстановке в (9) сокращается (это также относится к  $\mu_M$ ).

Таким образом, если (9) не зависит от параметров, характеризующих электрическое поле молекулы, можно оценить относительные интенсивности

спутников. Расчет дает  $\sigma_{SD1}/\sigma_{SD2}=2.8, 1.5, 1.1$  и 1.0 для Cs, Rb, K и Na соответственно, что удовлетворительно согласуется с экспериментом [7],  $\sigma_{SD1}/\sigma_{SD2}=2.3$  для Cs и  $\approx 1.0$  для Rb и K (для Na экспериментальное значение отсутствует, так как  $SD_1$  и  $SD_2$  не наблюдаются как отдельные полосы вследствие близости их энергий).

Отметим, что основной причиной значительного различия интенсивностей спутников дублета Сs является фактор отстройки от резонанса  $|E_k+hv_3-E_l|$  в знаменателе (7), величина которого равна  $hv_3$  для  $b_{11}$  и  $b_{22}$ ,  $hv_3-\Delta$  для  $b_{12}$  и  $hv_3+\Delta$  для  $b_{21}$ , где  $\Delta=E(^2\mathrm{P}_{3/2})-E(^2\mathrm{P}_{1/2})=554$ , 238, 58 и 17 см $^{-1}$  для Cs, Rb, K и Na, соответственно. В случае атомов K и Na величина  $\Delta$  существенно меньше  $hv_3$  и почти не влияет на величину отстройки. В меньшей степени это справедливо и для Rb. В случае Cs  $\Delta$  составляет уже почти половину кванта  $hv_3$  и, как следствие этого, верхнее состояние  $SD_1$  оказывается в  $hv_3/(hv_3-\Delta)\approx 1.8$  раза ближе к резонансному состоянию по сравнению с верхним состоянием  $SD_2$ .

Используя (8), можно также получить следующее соотношение сечений спутника  $SD_1$  перехода  $D_1$  разных атомов

$$\frac{\sigma_{SD_1}^{A1}}{\sigma_{SD_1}^{A2}} = \left(\frac{\mu_{SD_1}^{A1}}{\mu_{SD_1}^{A2}}\right)^2 \frac{\lambda_{SD_1}^{A2}}{\lambda_{SD_1}^{A1}}.$$
 (10)

Для пары Сs и Rb расчет достаточно хорошо согласуется с экспериментом,  $\sigma(SD_1^{\mathrm{Cs}})/\sigma(SD_1^{\mathrm{Rb}})=6.7$  и  $\approx 6$ , соответственно (однако возможно и случайное совпадение – как отмечается в [7], экспериментальные погрешности могут быть весьма велики в силу причин технического характера). Для спутников К и Na расчет дает  $\sigma(SD_1^{\mathrm{Cs}})/\sigma(SD_1^{\mathrm{A}})=20$  и 44 соответственно. Экспериментальные данные отсутствуют, так как спутники К и Na наблюдались только в спектрах возбуждения. Как отмечалось во Введении, большая спектральная ширина спутника свидетельствует о малой интенсивности. С этой точки зрения, расчетное значение  $\sigma(SD_1^{\mathrm{Cs}})/\sigma(SD_1^{\mathrm{Na}})$  отвечает ожиданиям.

Заключение. В спектре возбуждения люминесценции Na В смеси с СГ₄ обнаружен переход-спутник, отвечающий одновременному возбуждению атома и молекулы на переходах  $Na(3s^2S_{1/2} \rightarrow 3p^2P_{1/2,3/2}) \text{ if } CF_4(v_3 = 0 \rightarrow v_3 = 1),$ соответственно. Наблюдаемый спутник существенно отличается по спектральной ширине от аналогичных спутников тяжелых ЩМ: FWHM  $\approx 400^{-1}$  и  $30 \, \text{cm}^{-1}$ , соответственно. Большая спектральная ширина свидетельствует о том, что оптическая связь между верхним  $Na(3p^2P_{1/2,3/2})CF_4(v_3 = 1)$  и нижним  ${
m Na}(3s^2S_{1/2}){
m CF}_4(v_3=0)$  состояниями переходаспутника является результатом взаимодействия, эффективность которого сравнительно мала в области расстояний  $R_{
m Na-CF_4}$ , при которых потенциалы этих состояний приблизительно параллельны.

Показано, что при учете поляризации атома в поле молекулы, ДМ спутников резонансных переходов может быть объяснен во втором порядке теории возмущений взаимодействием ДМ перехода  $\mathrm{CF}_4(v_3=1\leftrightarrow v_3=0)$  с ДМ электронных переходов в атоме. Результаты расчетов в рамках этой модели находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом и объясняют относительные интенсивности спутников резонансных переходов разных атомов. Представляет интерес дальнейшее развитие предложенной модели и, в частности, расчеты абсолютных сечений переходов-спутников.

В заключение отметим, что исследования смесей ЩМ с  $CF_4$  могут представлять прикладной интерес в контексте оптимизации рабочих сред лазеров на переходах атомов ЩМ с накачкой излучением диодных лазеров (см. обзор [13] и ссылки). В частности,  $CF_4$  может представлять интерес как альтернатива  $CH_4$  в качестве компонента рабочей смеси, ускоряющего процесс передачи заселенности между резонансными состояниями  $^2P_{1/2}$  и  $^2P_{3/2}$ , что имеет ключевое значение для эффективности этого типа лазеров.

Исследование спектров смесей Na с  $CF_4$  и Ar было выполнено на оборудовании Ресурсного центра "Физические методы исследования поверхности" СПбГУ.

Данная работа была поддержана грантом университета ИТМО #59.06.04-05/08-19.

<sup>1.</sup> J. Szudy and W. E. Baylis, Phys. Rep. 266, 127 (1996).

<sup>2.</sup> Л. И. Гудзенко, С. И. Яковленко, ЖЭТФ **62**, 1686 (1972).

V. A. Alekseev and N. Schwentner, Chem. Phys. Lett. 463, 47 (2008).

<sup>4.</sup> V. A. Alekseev, J. Grosser, O. Hoffmann, and F. Rebentrost, J. Chem. Phys. 129, 201102 (2008).

V. A. Alekseev and N. Schwentner, J. Chem. Phys. 135, 044313 (2011).

В. А. Алексеев, Н. К. Бибинов, И. П. Виноградов, Оптика и спектроскопия 73, 269 (1992).

V. A. Alekseev, A. A. Pastor, A. S. Pazgalev, P. A. Petrov, P. Yu. Serdobintsev, and T. A. Vartanyan, JQSRT 258, 107339 (2021).

N.F. Allard and J.F. Kielkopf, Rev. Mod. Phys. 54, 1103 (1982).

C. B. Alcock, V.P. Itkin, and M.K. Horrigan, Can. Metall. Quart. 23, 309 (1984).

- A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader and NIST ASD Team (2020), NIST Atomic Spectra Database (version 5.8) [Online]. Available: https://physics.nist.gov/asd [Mon May 31, 2021]; National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD; DOI: https://doi.org/10.18434/T4W30F.
- 11. N. Ryde, Atoms and molecules in electric fields, Almqvist & Wiksell International, Stockholm (1976).
- S. Brode, Ch. Kolmel, H. Schiffer, and R. Ahlrichs,
   Phys. Chem. 155, 23 (1987).
- 13. G.A. Pitz and M.D. Anderson, Appl. Phys. Rev. 4, 041101 (2017).

# Отсутствие неустойчивости тангенциального разрыва для вихревых блинов

 $\mathcal{A}$ . С. Агафонцев $^{+*1}$ , Е. А. Кузнецов $^{*\times\circ}$ , А. А. Майлыбаев $^{\nabla}$ 

 $^+$ Институт океанологии им. П. П. Ширшова РАН, 117997 Москва, Россия

\*Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

 $^{ imes}$  Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

 $^{\circ}$  Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия

 $^{
abla}$ Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada – IMPA, 22460-320 Rio de Janeiro, Brazil

Поступила в редакцию 17 июня 2021 г. После переработки 24 июня 2021 г. Принята к публикации 24 июня 2021 г.

В рамках трехмерных несжимаемых уравнений Эйлера исследуются области высокой завихренности в виде блинов, возникающие при зарождении развитой гидродинамической турбулентности. Показано, что у этих областей имеется внутренняя структура, состоящая из трех вихревых слоев. Такая слоеная структура вместе с законом автомодельной эволюции блина препятствуют развитию неустойчивости Кельвина–Гельмгольца.

DOI: 10.31857/S1234567821140032

1. Согласно классическим работам Колмогорова и Обухова [1, 2] в режиме развитой гидродинамической турбулентности при больших числах Рейнольдса Re > 1 флуктуации завихренности на масштабе l из инерционного интервала ведут себя как  $\langle \delta \omega \rangle \propto \varepsilon^{1/3} l^{-2/3}$ , т.е. расходятся при  $l \to 0$ ; здесь  $\varepsilon$  – темп диссипации энергии в единице объема. При этом время T перекачки энергии из больших масштабов в малые конечно и зависит только от  $\varepsilon$  и внешнего – большого – масштаба  $L: T \propto L^{2/3} \varepsilon^{-1/3}$ . Таким образом, теория Колмогорова-Обухова указывает на возможность формирования коллапса обращения завихренности в бесконечность в некоторой точке пространства за конечное время, и этот процесс в инерционном интервале масштабов может быть изучен с помощью гидродинамики Эйлера. По-видимому, впервые этот вопрос был поднят в классической работе Л. Онзагера 1949 г. [3]; см. историю этого вопроса в статье [4] и книге [5]. В настоящее время проблема существования коллапсов является одной из центральных в теории развитой гидродинамической турбулентности. Одним из наиболее обсуждаемых типов коллапса являются сжимающиеся вихревые листы (блины) [6], которые впервые наблюдались в численных экспериментах [7].

На вихревом блине тангенциальная компонента скорости испытывает скачок  $\Delta V$  на малой толщине блина  $\ell_1$ . Если предположить, что на большом времени этот скачок остается конечным, а толщина блина стремится к нулю, то такое течение переходит в разрыв скорости, подверженный неустойчивости Кельвина—Гельмгольца (КГ) [8]. Инкремент этой неустойчивости  $\gamma$  линейно растет с увеличением волнового числа k вдоль разрыва,  $\gamma = k\Delta V/2$ . Неустойчивость должна насыщаться при больших k, если толщина  $\ell_1$  конечна, так что максимум инкремента может быть оценен как  $\gamma_{\rm max} \sim \Delta V/\ell_1$ . Отметим, что вихревые блины обсуждались недавно в контексте развитой гидродинамической турбулентности в работе [9].

В серии численных экспериментов [9–11] мы исследовали эволюцию областей высокой завихренности в рамках несжимаемых уравнений Эйлера. Было показано, что эти области представляют собой сжимающиеся блинообразные структуры и течение вблизи них описывается локально новым точным автомодельным решением уравнений Эйлера, которое состоит из сдвигового течения и асимметричного растягивающего потока. Отметим, что впервые структуры блинного типа наблюдались в гидродинамике Эйлера в численных экспериментах М. Brachet et al. [7]. В отличие от этой работы нами было показано, что экспоненциальный рост максимума завих-

<sup>1)</sup>e-mail: dmitrij@itp.ac.ru

ренности  $\omega_{\rm max}=\max |\pmb{\omega}|\propto e^{\beta_2 t}$  и экспоненциальное уменьшение толщины блина  $\ell_1\propto e^{-\beta_1 t}$  характеризуются существенно различными показателями,  $\beta_2/\beta_1\approx 2/3$ , что приводит к скейлинговому закону колмогоровского типа,

$$\omega_{\text{max}} \propto \ell_1^{-2/3}.\tag{1}$$

Этот закон подтверждается численно для большинства блинов; кроме того, в [13] нами были приведены аналитические аргументы в пользу скейлинга (1) в рамках представления вихревых линий [14]. Число блинообразных структур растет со временем, и их вклад в спектр энергии оказывается определяющим. В частности, для некоторых начальных условий [11, 15] мы наблюдали формирование Колмогоровского спектра  $E_k \propto k^{-5/3}$  и степенных скейлингов для продольных и поперечных структурных функций скорости в полностью безвязком течении.

С учетом экспоненциального роста максимума завихренности и экспоненциального уменьшения толщины блина, максимум инкремента неустойчивости  $K\Gamma$  для блинообразной структуры должен характеризоваться экспоненциальной зависимостью от времени,

$$\gamma_{\rm max} \sim \Delta V / \ell_1 \simeq \omega_{\rm max} \propto e^{\beta_2 t},$$
 (2)

что, казалось бы, указывает на двойное экспоненциальное усиление возмущения. Однако в численных экспериментах [10-13,15] мы не наблюдали неустойчивости такого типа.

В данной работе мы приведем аргументы, объясняющие этот факт. В частности, мы покажем, что неустойчивость  $K\Gamma$  подавляется автомодельным сдвиговым течением на блине. Кроме того, блинообразные области высокой завихренности имеют тонкую внутреннюю структуру, состоящую из трех вихревых слоев, что также может препятствовать развитию неустойчивости  $K\Gamma$ .

2. Рассмотрим эволюцию блинообразных областей высокой завихренности в рамках несжимаемых уравнений Эйлера, которые в безразмерном виде записываются как

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\nabla p, \quad \text{div } \mathbf{v} = 0,$$
 (3)

где  $\mathbf{v}$  — поле скорости и p — давление. Как было показано в [12], течение вблизи блина хорошо описывается следующим точным решением уравнений Эйлера,

$$\mathbf{v}(\mathbf{x},t) = -\omega_{\text{max}}\ell_1 f\left(\frac{x_1}{\ell_1}\right) \mathbf{n}_3 + \begin{pmatrix} -\beta_1 x_1 \\ \beta_2 x_2 \\ \beta_3 x_3 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$p = -\frac{\beta_1 x_1^2}{2} - \frac{\beta_2 x_2^2}{2} - \frac{\beta_3 x_3^2}{2},\tag{5}$$

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}, t) = \omega_{\text{max}} f'\left(\frac{x_1}{\ell_1}\right) \mathbf{n}_2. \tag{6}$$

Здесь  $\omega = \mathbf{rot} \, \mathbf{v}$  — поле завихренности,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  и  $\beta_3$  — произвольные константы такие, что — $\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 = 0$ , временные функции  $\omega_{\max} = \omega_0 e^{\beta_2 t}$  и  $\ell_1 = h_0 e^{-\beta_1 t}$  описывают эволюцию максимума завихренности и толщины блина, и  $f(\xi)$  — произвольная гладкая функция, максимум первой производной которой находится в нуле,  $\max f'(\xi) = f'(0) = 1$ . Решение (4)—(5) записано в декартовой системе координат, начало которой находится в максимуме завихренности, ось  $x_1$  перпендикулярна блину, и ось  $x_2$  сонаправлена с вектором завихренности; оно имеет бесконечную энергию и описывает возникающие в численных экспериментах блинообразные структуры только локально.

Решение (4)–(5) не накладывает ограничений на соотношение констант  $\beta_2/\beta_1$ , которое задает степенной скейлинг  $\omega_{\rm max} \propto \ell_1^{-\beta_2/\beta_1}$ . Однако, как было показано нами в работах [10, 11], большинство блинов следуют скейлингу (1), соответствующему соотношению  $\beta_2/\beta_1=2/3$ ; см. также [13].

3. В отношении возможной неустойчивости блинообразных структур высокой завихренности, вопервых, следует отметить, что задача об их устойчивости не решена до настоящего времени, так как решение (4)–(5) существенно отличается от стационарного течения в виде разрыва скорости. В частности, оно имеет стационарный растягивающий и сжимающийся сдвиговый потоки; также, оно является сильно вырожденным [13]. Эти особенности могут способствовать стабилизации течения.

Важно также, что согласно уравнению (4) изменение тангенциальной скорости на толщине блина пропорционально  $\omega_{\max}\ell_1$ , и в случае  $\beta_1 > \beta_2$  (в частности, это верно для скейлинга (1), когда  $\beta_2 = 2\beta_1/3 > 0$ ) это произведение экспоненциально убывает,  $\omega_{\max}\ell_1 \to 0$ . Это означает, что решение (4)—(5) на большом времени не переходит в разрыв скорости, так как скачок тангенциальной скорости на блине стремится к нулю.

Во-вторых, в численных экспериментах [10—13, 15] мы не видим никаких характерных признаков неустойчивости КГ. В численном моделировании использовались псевдоспектральный метод Рунге–Кутты четвертого порядка точности, в ко-

тором пространственные производные считаются с помощью быстрого преобразования Фурье, и адаптивная пространственная решетка, которая автоматически подстраивается на основании анализа Фурье-спектра решения, наилучшим образом разрешая перпендикулярное направление главного блина завихренности [10]. При использовании этих методов энергия  $E = (1/2) \int \mathbf{v}^2 d\mathbf{x}^3$  и спиральность  $\Omega = \int (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{v}) d\mathbf{x}^3$  сохраняются с относительной точностью  $10^{-11}$ , и численные эксперименты, проведенные на существенно разных решетках, идеально сходятся друг с другом [11]. Кроме того, эксперименты, в которых используется прямое численное интегрирование уравнений Эйлера, очень хорошо сходятся с экспериментами в представлении вихревых линий [13]. Последнее обстоятельство важно с точки зрения точности и контроля численного моделирования, так как представление вихревых линий является результатом частичного интегрирования уравнений Эйлера, в котором инварианты Коши сохраняются вдоль каждой траектории вихревых линий [14].

Наиболее точные эксперименты были проведены в работах [12, 13], где для двух разных начальных течений  $I_1$  и  $I_2$  были использованы решетки с общим числом узлов  $2048^3$ . К финальному времени глобальный максимум завихренности показал рост в 12.2 и 7.6 раза соответственно, разрешение собственного направления решетки, наиболее близкого к перпендикулярному направлению главных блинов, составило более 4000 точек, и толщина главных блинов, определяемая на полувысоте завихренности, соответствовала всего 10–12 узлам решетки. Как показано в [12], во время эволюции главный блин остается параллельным самому себе и явление закручивания, характерное для неустойчивости К $\Gamma$ , отсутствует.

В терминах решения (4)–(5), развитие неустойчивости КГ должно приводить к появлению резких градиентов компоненты скорости  $v_1$ , перпендикулярной плоскости блина, вдоль продольного направления блина  $x_3$ . Но, как показано на рис. 1, для главного блина, развивающегося из начального течения  $I_1$ , компонента  $v_1$  близка к нулю и практически не меняется вдоль оси  $x_3$  даже в финальное время эксперимента. Наличие резких градиентов  $v_1$  вдоль  $x_3$ означало бы возбуждение высоких гармоник в поле скорости, соответствующих направлению  $k_3$ . В этом случае, в силу соотношения  $|\boldsymbol{\omega}(\mathbf{k})| = |\mathbf{k}| \cdot |\mathbf{v}(\mathbf{k})|$  между Фурье-образами полей скорости  $\mathbf{v}(\mathbf{k})$  и завихренности  $\omega(\mathbf{k})$ , верного для несжимаемого течения, завихренность также должна иметь высокие гармоники вдоль направления  $k_3$ . Однако в работе [10] пока-

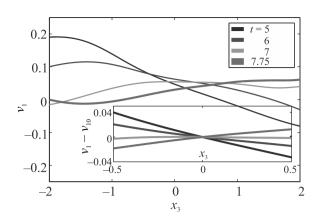


Рис. 1. (Цветной онлайн) Компонента скорости  $v_1$  вдоль оси  $x_3$  в разные моменты времени, в собственных координатах блина, соответствующих решению (4)–(5). Вставка показывает зум зависимости ( $v_1-v_{10}$ ) от  $x_3$ , где  $v_{10}$  – значение первой компоненты скорости  $v_1$  при  $x_3=0$ . Данные взяты для главного блина, развивающегося в численном эксперименте [12]

зано, что в поле завихренности возбуждены высокие гармоники, соответствующие только перпендикулярному направлению блина  $k_1$ , но не продольному  $k_3$ .

Для других блинообразных структур высокой завихренности, развивающихся из начального течения  $I_1$ , были получены аналогичные результаты. Численные эксперименты, проведенные в [13] для начального течения  $I_2$ , а также в [11, 15] для нескольких десятков случайных начальных течений на решетках с общим числом узлов  $1024^3$ , также не выявили никаких признаков неустойчивости КГ.

В-третьих, в случае наличия неустойчивости, коэффициент усиления  $\Theta(k,t)$  гармоники возмущения k за время t должен вести себя как

$$\log \Theta(k,t) \propto k \int_0^t \Delta V(\tau) \, d\tau. \tag{7}$$

Здесь мы предполагаем, что инкремент неустойчивости пропорционален скачку тангенциальной компоненты скорости и волновому числу,  $\gamma \propto k \Delta V$ . С учетом скейлинга (1) скачок скорости экспоненциально убывает со временем,  $\Delta V \propto \omega_{\rm max} \ell_1 \propto \ell_1^{1/3} \propto \infty$   $e^{-\beta_1 t/3} \to 0$ . Таким образом, гармоники возмущения растут медленнее, чем экспоненциально, и на большом времени коэффициент усиления насыщается,

$$\lim_{t \to +\infty} \left[ \log \Theta(k, t) \right] \propto \frac{k}{\beta_1}. \tag{8}$$

Следовательно, если в начальном течении высокие гармоники не возбуждены (что соответствует сценарию зарождения развитой гидродинамической тур-

булентности), то из-за ограниченности коэффициента усиления (8) они останутся малыми. Эффективно это означает отсутствие неустойчивости.

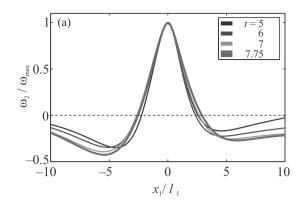
Отметим, что в формуле (2) экспоненциально растущий максимум инкремента неустойчивости  $\gamma_{\rm max}$  действует на постоянно растущую гармонику  $k \sim 1/\ell_1$ , т.е. эта формула не описывает динамику какой-либо заданной гармоники возмущения. Напротив, следует ожидать, что растягивающие компоненты потока, действующие в плоскости блина [см. уравнение (4)], приводят к уменьшению волнового числа со временем для каждого возмущения.

В-четвертых, тонкая структура блина, задаваемая в модели (4)–(5) функцией  $f(\xi)$  и определяющая скачок тангенциальной компоненты скорости,

$$\Delta V = \omega_{\text{max}} \ell_1 [f(-a) - f(a)], \tag{9}$$

между точками  $x_1 = \pm a \ell_1$ , также может препятствовать развитию неустойчивости КГ. Растягивающее поле скорости  $(-\beta_1 x_1, \beta_2 x_2, \beta_3 x_3)^T$  антисимметрично по отношению к отражению координат  $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$ . Поэтому естественно предположить, что функция  $f(\xi)$ также может быть антисимметричной. Отметим, что к решению (4)-(5) можно добавить произвольно зависящую от времени скорость  $(0, V_2(t), V_3(t))^T$ , что приведет лишь к появлению дополнительных членов в давлении; следовательно, мы можем выбрать f(0) = 0. В простейшем варианте антисимметрии  $f(\xi)$ , в предположении, что эта функция убывает на бесконечности,  $\lim_{\xi \to \pm \infty} f(\xi) = 0$ , ее производная  $f'(\xi)$  является симметричной с максимумом в точке  $\xi = 0$  и при этом имеет два отрицательных "сателлита". Практически такие зависимости для функций  $f'(\xi)$  и  $f(\xi)$  представлены на рис. 2 для главного блина, развивающегося из начального течения  $I_1$ . На рисунке 2 для разных моментов времени показаны зависимости от  $x_1/\ell_1$  для нормированной второй компоненты завихренности  $\omega_2/\omega_{\rm max}$  [соответствует функции  $f'(\xi)$ ] и нормированной третьей компоненты скорости  $(v_3 - v_{30})/\omega_{\text{max}}\ell_1$  [соответствует  $-f(\xi)$ ]; здесь  $v_{30}$  – значение третьей компоненты скорости  $v_3$ при  $x_1 = 0$ . Аналогичные зависимости наблюдаются для других блинов и других начальных течений.

Отметим, что, как следует из рис. 2, на расстояниях порядка десяти толщин блина  $x_1/\ell_1 \sim 10$  автомодельный режим эволюции течения еще нельзя считать установившимся. Поэтому нормированные скорость и завихренность на таких расстояниях плохо соответствуют функциям  $f(\xi)$  и  $f'(\xi)$ . Мы считаем, что подобное поведение связано с тем, что, как было показано в [10, 12], блинообразные структуры являются слабо искривленными, отклоняясь от плоско-



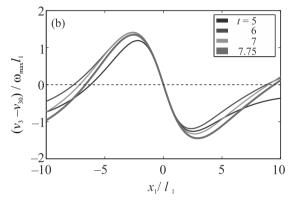


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) — Нормированная вторая компонента завихренности  $\omega_2/\omega_{\rm max}$  и (b) — нормированная третья компонента скорости  $(v_3-v_{30})/\omega_{\rm max}\ell_1$  как функции  $\xi=x_1/\ell_1$  в разные моменты времени, в собственных координатах блина, соответствующих решению (4)–(5); здесь  $v_{30}$  — значение третьей компоненты скорости  $v_3$  при  $x_1=0$ . Черные пунктирные линии показывают нуль. Данные взяты для главного блина, развивающегося в численном эксперименте [12]

сти на расстояния, много большие толщины блина. Это приводит к воздействию разных сегментов блина друг на друга через "промежуточное" течение, что может препятствовать установлению автомодельного режима на промежуточных расстояниях между автомодельным блином на  $x_1 \sim \ell_1$  и неавтомодельной областью на  $|x_1| \gg \ell_1$ .

Таким образом, блинообразные области имеют тонкую слоеную структуру, состоящую из ярко выраженного центрального максимума завихренности и двух практически симметричных сателлитов с противоположно направленной завихренностью. Как отмечено выше, такая слоеная структура может свидетельствовать в пользу локализованности функции  $f(\xi)$ , что, в свою очередь, должно приводить к обращению скачка скорости (9), измеренного на многих толщинах блина  $a\gg 1$ , в нуль, т.е. препятствовать развитию неустойчивости КГ.

4. В настоящей работе рассмотрена возможность возникновения неустойчивости Кельвина-Гельмгольца на блинообразных структурах высокой завихренности, развивающихся в рамках трехмерных несжимаемых уравнений Эйлера. Показано, что такая неустойчивость не возникает в численных экспериментах, что может быть связано как с автомодельной эволюцией сдвигового течения на вихревом блине, так и с наличием у блина тонкой структуры. В частности, скачок тангенциальной компоненты скорости на блине исчезает со временем как кубический корень из толщины блина,  $\Delta V \propto \ell_1^{1/3} \rightarrow 0$ , и поэтому на больших временах структуры такого типа не переходят в тангенциальные разрывы. Также показано, что блин имеет тонкую слоеную структуру, состоящую из ярко выраженного центрального максимума завихренности и двух практически симметричных сателлитов с противоположно направленной завихренностью. Наличие такой слоеной структуры свидетельствует в пользу локализованности функции  $f(\xi)$  в решении (4)–(5), что также должно приводить к отсутствию существенного скачка тангенциальной компоненты скорости и, следовательно, способствовать подавлению неустойчивости Кельвина-Гельмгольца.

Работа Д. С. Агафонцева и Е. А. Кузнецова была поддержана Российским научным фондом (грант 19-72-30028).

Моделирование проводилось в Новосибирском суперкомпьютерном центре (НГУ), а анализ результатов – в дата-центре ІМРА (Рио-де-Жанейро). Д. С. Агафонцев благодарит ІМРА за поддержку во время визитов в Бразилию. Работа

А. А. Майлыбаева осуществлялась при поддержке Национального совета по научно-техническому развитию (CNPq, гранты 303047/2018-6 и 406431/2018-3, Бразилия).

- 1. А. Н. Колмогоров, ДАН СССР **30**, 301 (1941).
- 2. А. М. Обухов, ДАН СССР 32, 22 (1941).
- 3. L. Onsager, Statistical hydrodynamics, Il Nuovo Cimento (1943–1954), 6, 279 (1949).
- 4. G. L. Eyink and K. R. Sreenivasan, RMP 78, 87 (2006).
- 5. U. Frisch, *Turbulence: the legacy of A.N. Kolmogorov*, Cambridge University Press, Cambridge (1999).
- 6. P.G. Saffman, J. Fluid Mech. 106, 49 (1981).
- M. E. Brachet, M. Meneguzzi, A. Vincent, H. Politano, and P. L. Sulem, Phys. Fluids A 4, 2845 (1992).
- 8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Гидродинамика, Теоретическая физика, 3-е изд., перераб., Наука, М. (1986), т. VI [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Fluid Mechanics, Elsevier, Oxford (2013), v. 6].
- 9. A. Migdal, Int. J. Mod. Phys. A **36**(05), 2150062 (2021).
- D. S. Agafontsev, E. A. Kuznetsov, and A. A. Mailybaev, Phys. Fluids 27, 085102 (2015).
- 11. Д.С. Агафонцев, Е.А. Кузнецов, А.А. Майлыбаев, Письма в ЖЭТФ **104**, 695 (2016).
- 12. D. S. Agafontsev, E. A. Kuznetsov, and A. A. Mailybaev, J. Fluid Mech. **813**, R1 (2017).
- D. S. Agafontsev, E. A. Kuznetsov, and A. A. Mailybaev, Phys. Fluids 30, 095104 (2018).
- Е. А. Кузнецов, В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ 67, 1015 (1998).
- 15. Д.С. Агафонцев, Е.А. Кузнецов, А.А. Майлыбаев, Письма в ЖЭТФ **110**, 106 (2019).

# Особенности разрушения сверхизоляторного состояния импульсным напряжением в пленках NbTiN

 $\mathcal{A}$ . Е. Дураков $^{+*}$ , И. А. Деребезов $^{+}$ , В. М. Винокур $^{\times}$ , А. Ю. Миронов $^{+1}$ )

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

\*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

× Terra Quantum AG, St. Gallerstrasse 16A, CH-9400 Rorschach, Switzerland

Поступила в редакцию 25 апреля 2021 г. После переработки 10 июня 2021 г. Принята к публикации 10 июня 2021 г.

Исследовано разрушение сверхизоляторного состояния импульсными сигналами напряжения в тонких пленках NbTiN. Обнаружено запаздывание разрушения сверхизоляторного состояния от фронта импульса. Определено время восстановления и время разрушения сверхизоляторного состояния.

DOI: 10.31857/S1234567821140044

Переход сверхпроводник-изолятор (SIT) в тонких разупорядоченных пленках является объектом теоретических и экспериментальных исследований на протяжении уже нескольких десятилетий [1–18]. Характерной особенностью этого перехода является возникновение сверхизоляторного состояния [6] при низких температурах, дуального сверхпроводящему. На данный момент его существование считается установленным в пленках TiN [7] и NbTiN [17]. Отметим, что аналогичные температурные и магнитополевые зависимости сопротивления также наблюдаются в пленках InO [8, 13], однако их авторы предпочитают использовать термин finite temperature insulator и утверждать о его принципиальном отличии от сверхизоляторного состояния. Сверхизоляторное состояние характеризуется критическим магнитным полем  $B_{cr}$ , пороговым напряжением  $V_{th}$ , критической температурой разрушения порогового напряжения  $T_c$ . В некоторых случаях удается идентифицировать температуру зарядового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса  $T_{\rm BKT}$ , при которой ожидается переход между сверхизоляторным и просто изоляторным состояниями. При этом наблюдается три варианта реализации сверхизолятора: 1) ярко выраженное гиперактивационное поведение и веер вольтамперных зависимостей (ВАХ) типа Березинского-Костерлица-Таулесса (ВКТ) (пленки TiN [7] и NbTiN [14]); 2) ярко выраженное гиперактивационное поведение и "перегревный" веер ВАХ (пленки NbTiN [17] и, условно, InO [8, 13]; 3) изме-

В данной работе впервые представлены результаты экспериментального исследования импульсного отклика сверхизоляторных пленок Nb<sub>0.67</sub>Ti<sub>0.33</sub>N. Пленки были выращены методом атомарно-слоевого осаждения при температуре 350 °C. Толщина пленок составляла d = 8 нм. Исследование низкотемпературных свойств проводилось на образцах, изготовленных методом фотолитографии в виде холловских мостиков с минимальной шириной до 50 мкм (контакт #1 на вставке рис. 1). Дополнительно был исследован образец с локальным сужением до 5 мкм (контакт # 2 на вставке рис. 1). Расстояние между потенциометрическими контактами составляло 450 мкм, расстояние между токовыми контактами – 2.5 мм. Низкотемпературные эксперименты проводились в криостате растворения <sup>3</sup>He/<sup>4</sup>He, оснащенном измерительными RF-линиями. Для измерения сопротивления структуры использовалась двухточечная схема подключения при переменном напряжении  $V \sim 100\,\mathrm{mkB}$  низкой частоты  $f = 1\,\Gamma$ ц, использующая усилитель тока SR570 и синхронный фазовый детектор SR830. Число квадратов определялось из сравнения измерений температурной зависи-

нение активационной энергии и ВКТ-подобный веер ВАХ (пленки NbTiN (данная статья)). Отметим, что особенности поведения вольтамперных зависимостей и само существование зарядового перехода ВКТ при этом остаются наиболее интенсивно обсуждаемыми темами для научных дискуссий. В результате вопрос о конкретном механизме и кинетики возникновения/разрушения сверхизоляторного состояния на сегодняшний день является открытым.

<sup>1)</sup>e-mail: mironov@isp.nsc.ru

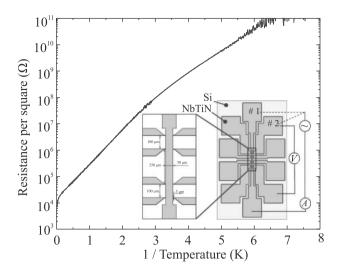


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурная зависимость сопротивления пленки NbTiN. На вставке изображен образец и схема измерений

мости сопротивления по двухточечной и четырехточечной схеме в диапазоне температур 4.2-77 К. Соответствующая температурная зависимость показана на рисунке 1 в аррениусовских координатах. Температурные зависимости, полученные на контактах #1 и 2, совпадали с точностью до погрешности измерений. Вольтамперные зависимости измерялись с помощью фемтоамперметра Keithley 6430. Для определения отклика системы на импульсное напряжение использовался генератор Agilent 81150A, высокоскоростной усилитель тока Femto HCA с полосой пропускания 0-2 МГц и осциллограф Tektronix DPO 7354С. Для проверки работоспособности измерительной схемы при комнатной температуре были измерены времена спада\подъема при протекании тока через резистор 100 МОм, составившие 100 нс (соответствующая емкость измерительной схемы не более  $1\,\Phi\Phi$ ), а также полное время релаксационных процессов в схеме (500 нс). Таким образом, при изучении эффектов, проявляющихся на временах в разы больших 500 нс, влиянием измерительной схемы можно пренебречь.

На рисунке 2 представлены вольтамперные зависимости для первого образца. Наблюдается ярко выраженное пороговое поведение зависимостей, т.е. при напряжениях меньше порогового  $V_{th}$  и при сверхнизких температурах ток, протекающий через образец, является неизмеримо малым, а при превышении порогового напряжения ток скачком изменяется на несколько порядков величины и образец переходит в резистивное состояние. Пороговое напряжение составляет  $V_{th}=174~{\rm MB}$  при 20 мK, при этом, как и

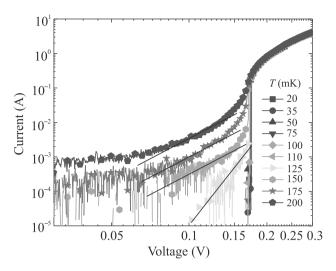


Рис. 2. (Цветной онлайн) Вольтамперные зависимости при различных температурах. Образец #1

во всех предыдущих работах [7, 8, 17], наблюдается слабый гистерезис порогового напряжения. При повышении температуры наблюдается уменьшение порогового напряжения. Кроме того, возникает степенное поведение тока при напряжениях меньших порогового, которое при превышении температуры  $T_{
m BKT} pprox 125\,{
m mK}$  сменяется на линейное. При этом наблюдается резкое изменение наклона вольтамперных зависимостей в области напряжений 0.1–0.15 В (показано на рис. 2 сплошными линиями). Более точное указание температуры  $T_{\rm BKT}$  не представляется возможным, поскольку сопротивление образца при таких температурах и малых напряжениях превышает 1 ТОм, что находится за пределами возможностей измерительной установки. Полное подавление порогового напряжения происходит при температуре  $T_c \approx 150 \,\mathrm{mK}$ . В случае образца #2 наблюдаются аналогичные зависимости с чуть меньшим пороговым напряжением  $V_{th} = 171 \,\mathrm{mB}$ . Отметим, что такое поведение вольтамперных зависимостей полностью аналогично наблюдаемым ранее в пленках TiN [7] и NbTiN [17]. В случае пленок InO [8] не обнаружено степенного поведения вольтамперных зависимостей, что может быть связано с большой разницей между  $T_c$  и  $T_{\rm BKT}$  в InO. В интервале температур  $T_{\rm BKT}$ - $T_c$ , т.е. где еще есть пороговое напряжение, но вольтамперные зависимости уже линейны при слабом напряжении, во всех трех системах экспериментальные данные хорошо согласуются с "перегревной" моделью [9].

После определения критических параметров образцов было проведено изучение отклика системы на импульсное напряжение, немного превышающее кри-

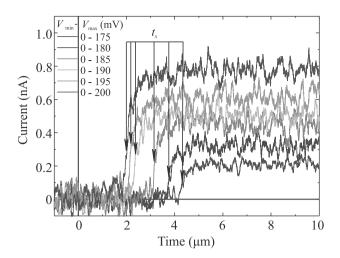


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость тока от времени после возникновения напряжения амплитудой  $V_{\rm max}$  при температуре 20 мК. Образец #1

тическое. Вкратце результаты данного исследования представлены на рис. 3-5. На всех рисунках показаны результаты усреднения по десяти тысячам измерений. На всех рисунках наблюдается существенный высокочастотный шум, связанный с отсутствием каких-либо фильтров в измерительной схеме. На рисунке 3 изображены временные зависимости протекающего через образец тока при возникновении напряжения амплитудой  $V_{\rm max}$  от 175 до 200 мВ при температуре 20 мК. За нулевую точку принят момент подачи импульса напряжения. Время нарастания импульса напряжения от 0 до  $V_{\rm max}$  составляло  $2.5\,{\rm Hc}.$ Релаксационные процессы в измерительной схеме составляли 0.5 мкс (на рис. 3-6 не показаны). Несмотря на возникновение на образце напряжения свыше порогового, в первые несколько микросекунд через систему не протекает никакого измеримого тока, при этом наблюдается ровно такой же уровень шума, как и при нулевом напряжении. Измеримый ток появляется через время  $t_s=3.9\,\mathrm{mkc}$  при  $V_{\mathrm{max}}=175\,\mathrm{mB}$  и далее в течение  $t_c = 1$  мкс выходит на насыщение. Отметим, что при увеличении напряжения  $V_{\mathrm{max}}$  время возникновения импульса тока  $t_s$  уменьшается, при этом время выхода тока на насыщение  $t_c$  практически не меняется. По-видимому, время  $t_c$  обусловлено емкостными и резистивными характеристиками в резистивном состоянии. Время восстановления сверхизоляторного состояния, как показано на рис. 4, составляет примерно 5 мкс и слабо зависит от величины напряжения. При этом в первый момент времени в течение 0.4 мкс происходит релаксация измерительной схемы и ток резко падает, поскольку данная релаксация наблюдается на любых сопротивлениях,

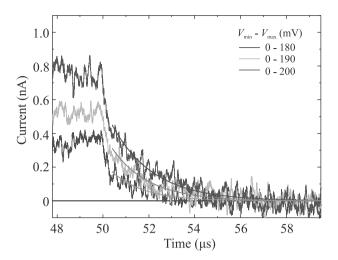


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость тока от времени после исчезновения напряжения на 50-й мкс амплитудой  $V_{\rm max}$  при температуре 20 мК. Сплошными линиями показан экспоненциальный спад тока после исчезновения напряжения. Образец # 1

а не только на исследуемых образцах, мы не приводим ее анализ. Далее, начиная с  $50.4\,\mathrm{mkc}$ , наблюдается экспоненциальное уменьшение тока с постоянной времени, увеличивающейся от  $1.4\,\mathrm{дo}\ 1.8\,\mathrm{mkc}$  с увеличением напряжения. Заметим, что увеличение постоянной времени не согласуется с уменьшением сопротивления при увеличении напряжения. Возможно, емкость систем также зависит от приложенного напряжения. Величина емкости составляет не более  $40\,\mathrm{ф\Phi}$ , но все же не менее чем на порядок превышает емкость измерительной схемы. Альтернативным вариантом является отсутствие связи между наблюдаемым временем и резистивно-емкостными характеристиками образца, подробнее мы поговорим об этом в заключении.

Как показано на рис. 5, во втором образце переход из сверхизоляторного в резистивное состояние при воздействии импульсного напряжения происходит в два этапа. Сначала, через время  $t_{s1}$ , немногим больше  $t_s$  первого образца возникает небольшой, но все же измеримый ток, быстро достигающий своего насыщения. Далее, в момент времени  $t_{s2}$ , втрое превышающего  $t_s$ , происходит окончательное разрушение сверхизоляторного состояния и система переходит в резистивное состояние с сопротивлением, аналогичным образцу #1. Зависимость времени  $t_{s2}$  от напряжения показана на вставке на рис. 5. Хотя полученную зависимость можно аппроксимировать степенной функцией с показателем степени -5, его величина заставляет усомниться в такой аппроксимации и требует дальнейших проверочных эксперимен-

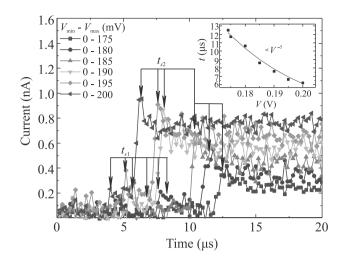


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость тока от времени после возникновения напряжения амплитудой  $V_{\rm max}$  при температуре 20 мК. Образец # 2. На вставке символами приведена зависимость времени сдвига переднего фронта импульса  $(t_{s2})$  от напряжения. Сплошной линией показана степенная функция  $\propto V^{-5}$ 

тов. Отличительной особенностью второго образца является возникновение локального максимума тока при окончательном разрушении сверхизоляторного состояния, не характерное для обычной RC-цепочки. Возможно, такое поведение обусловлено процессами, проходящими в области локального сужения образца. Время восстановления сверхизоляторного состояния второго образца меньше, чем первого и составляет около 3 мкс. В то же время поведение временной зависимости тока, также как и для первого образца, не имеет особенностей на масштабах времен свыше времени релаксации схемы. Постоянная времени составляет 1-1.2 мкс. Поскольку погрешность определения постоянной времени около 0.1 мкс, можно считать, что для этого образца она не зависит от величины напряжения.

Далее была изучена температурная эволюция временного сдвига момента разрушения сверхизоляторного состояния. Для наглядности на рис. 6 эта эволюция приведена для образца #2. Обнаружено, что времена  $t_{s1}$  и  $t_{s2}$  не зависят от температуры вплоть до  $T_{\rm BKT}$ . При превышении  $T_{\rm BKT}$  сначала исчезает скачкообразное поведение временной зависимости тока при  $t_{s1}$ , сменяясь на плавный рост тока. Далее, скачкообразное поведение при  $t_{s2}$  и локальный максимум тока также исчезают при преодолении температуры  $T_c$  и временная зависимость тока окончательно приходит к стандартному для RC-цепочки виду. Отметим, что окончательное исчезновение особенностей происходит не при температу-

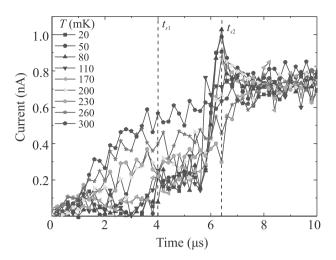


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость тока от времени после возникновения напряжения амплитудой  $200 \,\mathrm{mB}$  при различных температурах. Штриховыми линиями отмечены времена  $t_{s1}$  и  $t_{s2}$ . Образец #2

ре  $T_{\rm BKT}$ , а при температуре смены наклона температурной зависимости сопротивления в аррениусовских координатах (см. рис. 1), составляющей примерно 300 мК для обоих образцов. Время восстановления сверхизоляторного состояния, а также резистивного при высоких температурах, не зависит от температуры и составляет 3 мкс для второго образца.

Рассмотрим возможные причины подобного поведения тока в системе.

Первым вариантом является показанное на рис. 7 представление нашего образца в виде R(R||C)R цепочки: где R1 и R3 – контактные сопротивления,

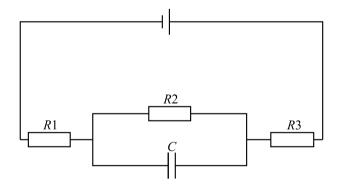


Рис. 7. Схематичное представление образца в виде R(R||C)R цепочки. R1 и R3 – контактные сопротивления, R2 – сопротивление образца, C – емкость образца

а R2 и C — сопротивление и емкость образца. При этом как минимум R2 зависит от напряжения. Тогда при подаче импульса напряжения первоначально R2 будет иметь высокое сопротивление, а при зарядке C до некоторого порогового напряжения

перейдет в низкоомную фазу. Однако данная схема имеет ряд недостатков. Во-первых, первоначальный импульс тока, возникающий в данной схеме, больше или порядка установившегося после зарядки конденсатора. При этом затухать этот ток, в зависимости от условий эксперимента и исследуемого образца, должен в течение десятка микросекунд. В то же время измеримого тока в этих областях в эксперименте не наблюдается. Второй недостаток во многом является следствием первого – для того чтобы получить начальный импульс тока, хотя бы сравнимый со стационарным, необходимо иметь контактное сопротивление величиной в несколько десятков МОм. Такого контактного сопротивления ни в одной из работ, посвященных исследованиям перехода сверхпроводник-изолятор, продемонстрировано не было. Третий возникающий недостаток – для обеспечения зависящего от напряжения времени сдвига сигнала контактные сопротивления также должны зависеть от напряжения. Само по себе это не является невозможным, напротив, при величине в несколько десятков МОм это вполне ожидаемо. Однако три подгоночных функции от напряжения резко снижают достоверность такой симуляции.

Второе объяснение может быть получено из микроскопических свойств самого изолятора. Хорошо известно, что в любом изоляторе, независимо от его наименования, существуют положительно и отрицательно заряженные квазичастицы. При этом они могут образовывать диполи, которые, в свою очередь, могут самостоятельно выстраиваться в какомлибо порядке. Предположим, что при низких температурах такие диполи в изоляторе с куперовским спариванием выстраиваются в некую энергетически выгодную решетку. Причем свойства полученного состояния зависят от конкретной структуры такой решетки. Поскольку структура энергетически выгодна, то изменение параметров решетки крайне затруднено, что, в свою очередь, приводит к существенному увеличению сопротивления. При этом подаваемое на систему напряжение стремится разрушить эту решетку и развернуть диполи в соответствии с приложенным полем. Соответственно, в такой картине пороговому напряжению отвечает поле, при котором поддержание решетки становится энергетически невыгодным. Отметим, что выстраивание диполей - процесс далеко не всегда мгновенный и в отдельных случаях может занимать даже часы. В том случае, если незначительные нарушения поляризационной решетки не приводят к существенному увеличению тока, может возникнуть наблюдаемая нами картина: в первые микросекунды ток еще неизмеримо мал, далее, при накоплении критического числа дефектов скачком увеличивается до сравнимого со стационарным значения. Таким образом, наблюдаемое нами смещение переднего фронта импульса может быть связано со временем поляризации изолятора и составлять несколько процентов от него.

Таким образом, в ходе проведенных исследований отклика сверхизоляторных систем на импульсное возникновение напряжения выяснено, что для разрушения сверхизоляторного состояния необходимо несколько микросекунд. При этом данное время слабо зависит от температуры, однако быстро уменьшается при увеличении амплитуды напряжения. Обнаружено, что локальные сужения пленки оказывают существенное влияние на данное время и вид временной зависимости тока. Предложены объяснения полученных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант # 18-72-10056. Авторы благодарны Т. Прослье (Т. Proslier) за предоставленные для экспериментов исходные пленки.

- 1. A. I. Shal'nikov, Nature (London) 142, 74 (1938).
- M. Strongin, R.S. Thompson, O.F. Kammerer, and J.E. Crow, Phys. Rev. B 1, 1078 (1970).
- 3. A. Gold, Phys. Rev. A 33, 652 (1986).
- H. S. J. van der Zant, F. C. Fritschy, W. J. Elion, L. J. Geerligs, and J. E. Mooij, Phys. Rev. Lett. 69, 2971 (1992).
- A. M. Goldman and N. Marković, Phys. Today 51(11), 39 (1998).
- A. Krämer and S. Doniach, Phys. Rev. Lett. 81, 3523 (1998).
- V. M. Vinokur, T. I. Baturina, M. V. Fistul, A. Y. Mironov, M. R. Baklanov, and C. Strunk, Nature 452, 613 (2008).
- M. Ovadia, B. Sacépé, and D. Shahar, Phys. Rev. Lett. 102, 176802 (2009).
- B. L. Altshuler, V. E. Kravtsov, I. V. Lerner, and I. L. Aleiner, Phys. Rev. Lett. 102, 176803 (2009).
- 10. В. Ф. Гантмахер, В. Т. Долгополов, УФН **180**, 1 (2010).
- 11. M.V. Feigelman, L.B. Ioffe, V.E. Kravtsov, and E. Cuevas, Ann. Physics **325**, 1390 (2010).
- 12. A. M. Goldman, Int. J. Mod. Phys. B 24, 4081 (2010).
- M. Ovadia, D. Kalok, I. Tamir, S. Mitra, B. Sacepe, and D. Shahar, Sci. Rep. 5, 13503 (2015).
- A. Yu. Mironov, D. M. Silevitch, T. Proslier, S. V. Postolova, M. V. Burdastyh, A. K. Gutakovskii, T. F. Rosenbaum, V. V. Vinokur, and T. I. Baturina, Sci. Rep. 8, 4082 (2018).

- M. C. Diamantini, C. A. Trugenberger, and V. M. Vinokur, Communications Physics 1, 77 (2018).
- 16. M. C. Diamantini, C. A. Trugenberger, and V. M. Vinokur, Topological gauge theory of the superconductor-insulator transition, in Topological Phase Transitions and New Developments, World Scientific, Singapore (2019).
- M. V. Burdastyh, S. V. Postolova, I. A. Derbezov, A. Gaisler, M. C. Diamantini, C. A. Trugenberger, V. M. Vinokur, and A. Yu. Mironov, JETP Lett. 109, 795 (2019).
- M. C. Diamantini, S. V. Postolova, A. Yu. Mironov,
   L. Gammaitoni, C. Strunk, C. A. Trugenberger, and
   V. M. Vinokur, Communications Physics 3, 142 (2020).

## О долинной намагниченности монослоев дихалькогенидов переходных металлов

 $\Pi$ . И. Магарилл<sup>+\*</sup>, А. В. Чаплик<sup>+\*1</sup>)

<sup>+</sup>Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН им. А.В.Ржанова, 630090 Новосибирск, Россия

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

Поступила в редакцию 12 июня 2021 г. После переработки 12 июня 2021 г. Принята к публикации 13 июня 2021 г.

Показано, что собственная намагниченность монослоя дихалькогенидов переходных металлов (ДХПМ), вычисленная в рамках двухзонной модели, существенно зависит от граничных условий на волновую функцию электронов даже при макроскопических размерах образца. Для узкого кольца из монослоя дихалькогенидов переходных металлов установлено существование эффекта насыщения намагниченности: магнитный момент единицы длины окружности кольца стремится к постоянному значению при неограниченном возрастании линейной концентрации электронов.

DOI: 10.31857/S1234567821140056

Введение. Равновесные характеристики макроскопических систем не зависят от свойств их поверхности (границы в двумерном случае) в термодинамическом пределе. На этом утверждении основан обычный в теории твердого тела выбор граничных условий для волновых функций из соображений удобства вычислений - периодические условия Борна-Кармана для решений в виде бегущих волн элементарных возбуждений (электронов, фононов и т.д.). Вклад поверхности (границы) в объемные свойства мал по параметру, равному числу монослоев (цепочек элементарных ячеек) в любом направлении образца. Известно также, что орбитальная намагниченность макроскопических систем с мобильными электронами, помещенных в магнитное поле, в существенной части определяется вкладом поверхностных токов, который не мал, поскольку эти токи обтекают макроскопически большое сечение образца. Подчеркнем, что речь идет об индуцированном диамагнетизме; собственной (intrinsic) намагниченности у обычных полупроводников нет.

Иная ситуация реализуется в моноатомных слоях дихалькогенидов переходных металлов (ДХПМ). В условиях термодинамического равновесия орбитальный магнитный момент также отсутствует, но лишь благодаря компенсации двух противоположных по знаку вкладов, происходящих от электронов двух неэквивалентных долин. Однако благодаря селективности фотопоглощения при круговой поляри-

зации света равенство заселенностей долин может нарушаться, и тогда собственная намагниченность становится наблюдаемым эффектом. Этой теме посвящено довольно много работ [1–9].

Двумерный электронный газ в монослое ДХПМ описывается модельным гамильтонианом, предложенным D. Xiao et al. в работе [9]:

$$\hat{H} = \gamma \boldsymbol{\sigma}_{\tau} \hat{\mathbf{p}} + \frac{\Delta}{2} \sigma_z; \quad \boldsymbol{\sigma}_{\tau} = (\tau \sigma_x, \sigma_y). \tag{1}$$

Здесь  $\Delta$  – ширина запрещенной зоны,  $\gamma$  – межзонная скорость (параметр материала),  $\hat{\mathbf{p}}$  – оператор двумерного импульса,  $\sigma_{x,y}$  – матрицы Паули,  $\tau=\pm 1$  – долинный индекс,  $\hbar=1$ . Мы написали упрощенный вариант модели, в котором пренебрегается спинорбитальным расщеплением зон; учет его не меняет принципиально результаты, лишь делает формулы несколько более громоздкими. Авторы цитированных работ вычисляют орбитальную намагниченность в приближении невзаимодействующих электронов и показывают, что для корректного решения задачи необходимо учитывать вклад кривизны (фазы) Бэрри (Berry curvature, Berry phase). Последняя определяется интегралом по k-пространству от выражения, содержащего периодические блоховские амплитуды волновой функции электрона в кристалле. В рамках двухзонной модели D. Xiao et al. роль этих амплитуд играют не зависящие от координат коэффициенты при множителе  $\exp i \mathbf{kr}$  в компонентах спинорных собственных функций гамильтониана (1). Ни в одной из указанных выше работ граничные условия (ГУ) на волновые функции не толь-

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: chaplik@isp.nsc.ru

ко не обсуждаются, но даже не упоминаются. Однако из вычислений суммы по состояниям в полной намагниченности можно заключить, что авторы по умолчанию пользуются обычными периодическими условиями Борна–Кармана.

В настоящем письме мы покажем на точно решаемых примерах, что собственная орбитальная намагниченность монослоя ДХПМ существенно зависит от ГУ на волновые функции при любом размере образца. В случае одномерного кольца эта величина нетривиально зависит от N — числа частиц в системе: насыщение при  $N \to \infty$ . Минимальная двухзонная модель позволяет получить ответ прямым вычислением среднего значения оператора магнитного момента, что значительно упрощает выкладки.

Прямоугольный образец с нулевыми ГУ. Нормированные на единицу собственные функции гамильтониана (1) имеют вид:

$$\psi_{1} = A_{nm} \sin\left(\frac{\pi nx}{L_{x}}\right) \sin\left(\frac{\pi my}{L_{y}}\right);$$

$$\psi_{2} = \frac{A_{nm}\gamma}{\Delta/2 + E} \left(\frac{-i\tau\pi n}{L_{x}}\cos\left(\frac{\pi nx}{L_{x}}\right)\sin\left(\frac{\pi my}{L_{y}}\right) + \frac{\pi m}{L_{y}}\sin\left(\frac{\pi nx}{L_{x}}\right)\cos\left(\frac{\pi my}{L_{y}}\right)\right);$$

$$A_{nm} = \sqrt{\frac{2}{L_{x}L_{y}}(1 + \frac{\Delta}{2|E_{nm}|})},$$
(2)

где  $L_x, L_y$  — размеры образца, n, m = 1, 2, ... Одноэлектронный спектр не зависит от  $\tau$ :

$$E_{nm}^{(\mu)} = \mu \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \gamma^2 (\frac{\pi^2 n^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2 m^2}{L_y^2})}.$$
 (3)

Здесь  $\mu=\pm 1$  – зонный индекс,  $\mu=+1$  и  $\mu=-1$  соответствуют зоне проводимости и валентной зоне.

Учитывая, что оператор скорости, соответствующий (1), есть  $\gamma \sigma_{\tau} = \gamma(\tau \sigma_{x}, \sigma_{y})$ , получаем для *z*-компоненты оператора магнитного момента выражение:

$$\hat{M}_z = e\gamma(x\sigma_y - \tau y\sigma_x)/(2c). \tag{4}$$

Его среднее с функциями (2) дает магнитный момент состояния (n, m):

$$M_{nm}^{(\tau,\mu)} = \frac{e\gamma^2\tau}{2cE_{--}^{\mu}}.$$
 (5)

Полная однодолинная намагниченность образца  $M_{\mathrm{tot}}^{(\tau)} = \sum_{nm} M_{nm}^{(\tau)} f(E_{nm})$ , где  $f(E_{nm})$  – фермиевские числа заполнения.

$$M_{\text{tot}}^{(\tau)} = \frac{e\gamma^2\tau}{2c} \sum_{nm} \frac{f(E_{nm})}{E_{nm}}.$$
 (6)

Считая  $L_{x,y}$  большими величинами, перейдем от сумм по n,m к интегралам и получим для нулевой температуры

$$M_{\text{tot}}^{(\tau)} = e\tau L_x L_y (E_F - \Delta/2)/(2\pi c), \tag{7}$$

что совпадает с результатом [6], полученным более сложной процедурой, учитывающей вклад кривизны Бэрри. При малой концентрации электронов в зоне проводимости, когда  $E_F - \Delta/2 \ll \Delta$ , можно во всех членах суммы положить  $E_{nm} \approx \Delta/2$  и получить для намагниченности простой результат: один эффективный магнетон Бора на электрон, так как  $\gamma^2/\Delta = 1/(2m^*)$ ,  $m^*$  – эффективная масса.

Нулевые ГУ для гамильтониана (1) рассмотрены нами лишь как модель, допускающая точное решение (хотя они и обеспечивают отсутствие тока частиц, вытекающих из образца). Более реалистичные ГУ для системы, описываемой матричным гамильтонианом типа (1), были предложены Бэрри и Мондрагоном в работе [10] для фермионов с нейтринным спектром. Более общий вид ГУ исследован в серии работ В. А. Волкова, Т. Н. Пинскер, В. В. Еналдиева и И. В. Загороднева [11–14]; результаты изложены в книге [15]. Точное решение с такими ГУ возможно для диска и излагается в следующем разделе.

Диск монослоя ДХПМ. В цилиндрических координатах  $x = r \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \varphi$  имеем для компонент волновой функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$ :

$$\left(\frac{\Delta}{2} - E\right)\psi_1 - i\gamma e^{-i\tau\varphi} \left(\tau \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\psi_2 = 0;$$

$$-i\gamma e^{i\tau\varphi} \left(\tau \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\psi_1 - \left(\frac{\Delta}{2} + E\right)\psi_2 = 0. \quad (8)$$

Решения системы (8), регулярные при r = 0:

$$\psi_1 = A \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} J_m(\kappa r);$$

$$\psi_2 = A \frac{e^{i(m+\tau)\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{i\gamma\kappa}{E + \Delta/2} J_{m+\tau}(\kappa r),$$
(9)

где  $\kappa^2 = (E^2 - \Delta^2/4)/\gamma^2$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ ,  $J_m$  — функция Бесселя. Нормировочный коэффициент A дается формулой:

$$\frac{1}{A^2} = \frac{1}{\kappa^2} \int_0^{\kappa R} \left[ J_m^2(z) + \left( \frac{\gamma \kappa}{E + \Delta/2} \right)^2 J_{m+\tau}^2(z) \right] z dz, \tag{10}$$

где R — радиус диска.

Для *z*-проекции момента и его среднего значения в некотором квантовом состоянии получаем

$$\hat{M}_z = \frac{e\gamma r}{2c} \begin{vmatrix} 0 & -ie^{-i\tau\varphi} \\ ie^{i\tau\varphi} & 0 \end{vmatrix}; \tag{11}$$

$$(M_z)_m^{\tau} = \frac{e\gamma^2}{c \kappa^2} \frac{A^2}{E + \Delta/2} \int_0^{\kappa R} J_m(z) J_{m+\tau}(z) z^2 dz.$$
(12)

Интеграл в (12) может быть выражен аналитически при произвольном верхнем пределе, что позволяет точно решить задачу для различных  $\Gamma$ У.

В случае нулевого ГУ  $\psi_1(R)=0$ , т.е.  $J_m(\kappa R)=0$ , легко показать, что парциальный магнитный момент  $(M_z)_{n,m}^{\tau}$  (здесь n – радиальное квантовое число) выражается такой же формулой, что и для прямоугольника (см. (5)). Спектр  $E_{nm}$  следует из ГУ, т.е.  $(\kappa R)_{nm}$  равно любому положительному корню m-й функции Бесселя. Поскольку при макроскопических размерах плотность состояний  $\nu(E)$  для прямоугольника и диска одна и та же, то и полный однодолинный момент, пропорциональный  $\int dE \nu(E) f(E)/E$ , будет одинаковым.

Перейдем к случаю ГУ Бэрри-Мондрагора. Его конкретный вид для круглого диска можно получить простым и наглядным способом. Пусть монослой ДХПМ граничит со средой, описываемой тем же гамильтонианом (1), но обладающей большой запрещенной зоной  $\Delta_1 \gg \Delta$ , причем  $\Delta$  на шкале энергий лежит целиком "внутри"  $\Delta_1$ . Последнее нужно для того, чтобы обеспечить нулевое значение нормальной к границе компоненты тока в любой точке этой границы. "Сшивая" решения в областях r < R и r > R при r = R и устремляя затем  $\Delta_1$  к бесконечности, находим требуемое ГУ и уравнение на спектр  $E_{nm}$ :

$$J_m(\kappa R) = \tau \sqrt{\frac{E - \Delta/2}{E + \Delta/2}} J_{m+\tau}(\kappa R). \tag{13}$$

При малой концентрации электронов, когда  $E_F$  —  $-\Delta/2 \ll \Delta$ , множитель  $\sqrt{(E-\Delta/2)/(E+\Delta/2)}$  в правой части (13) мал для всех заполненных состояний, и мы возвращаемся к случаю нулевого ГУ с результатом один эффективный магнетон на частицу.

Пусть теперь концентрация электронов не мала в указанном выше смысле. При большом размере диска большинство частиц находится в состояниях с большими квантовыми числами n,m, величина  $\kappa R$  велика, т.е. можно заменить бесселевы функции их асимптотическим выражением  $J_m(\kappa R) \approx \sqrt{2/(\pi\kappa R)}\cos(\kappa R - m\pi/2 - \pi/4)$ . Несколько длинное, но простое вычисление приводит в этом случае к следующему выражению для магнитного момента состояния (n,m):

$$(M_z)_{n,m}^{(\tau)} = -\frac{e\gamma^2}{c\Delta}(m + \tau \sin^2(x))\cos(2x),$$
  
 $x = \kappa_{n,m}R - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4}.$  (14)

Таким образом, магнитный момент состояния (m,n) является быстро осциллирующей функцией радиуса диска. Если экспериментировать с набором большого числа одинаковых (по процедуре приготовления) дисков, то из-за неизбежных флуктуаций радиуса наблюдаемым будет усредненное по малому интервалу  $\delta R \ll R$  значение полного момента. Из (14) следует, что оно равно:  $(M_z)_{\rm tot}^{(\tau)} = \tau \mu_B^* N^{(\tau)}/4$ , где  $N^{(\tau)}$  – число электронов в диске в долине  $\tau$ .

Итак, становится очевидным существенное влияние ГУ на намагниченность макроскопической системы. При ГУ (13) магнитный момент на единицу площади равен  $\mu_B^* n_s/4$ , где  $n_s$  – поверхностная концентрация электронов. При нулевых ГУ та же величина определяется формулой (6) (как уже сказано, в этом случае результаты для прямоугольника и диска совпадают). Выразив  $E_F$  через  $n_s$  для спектра (3), получим зависимость намагниченности от концентрации:

$$\frac{(M_z)_{\rm tot}^{(\tau)}}{S} = \frac{\tau e}{2\pi c} \left( \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + 2\pi \gamma^2 n_s} - \frac{\Delta}{2} \right), \quad (15)$$

S — площадь образца.

**Одномерное кольцо.** Здесь волновую функцию и энергию удобно записать, вводя квантовое число  $j=m+\tau/2,\ j=\pm 1/2,\pm 3/2...$ :

$$\left(\frac{\Delta}{2} - E\right)\psi_1 - \frac{\gamma}{R}e^{-i\tau\varphi}\frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi}\psi_2 = 0;$$

$$\frac{\gamma}{R}e^{i\tau\varphi}\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi}\psi_1 - \left(\frac{\Delta}{2} + E\right)\psi_2 = 0.$$
(16)

Тогда:

$$\psi_1 = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} e^{i(j-\tau/2)\varphi}, \quad \psi_2 = \frac{b}{\sqrt{2\pi}} e^{i(j+\tau/2)\varphi},$$

$$b = a \frac{i\gamma}{R} \frac{j-\tau/2}{\Delta/2 + E_i}; \quad E_j^2 = \frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2(j^2 - 1/4)}{R^2}.$$

Матрица магнитного момента дается (11) с r=R, и для парциального момента j-го состояния мы получаем:

$$(M_z)_j^{(\tau)} = \frac{e\gamma^2}{c} \frac{(j - \tau/2)(E_j + \Delta/2)}{(E_j + \Delta/2)^2 + (j - \tau/2)^2\gamma^2/R^2}.$$
 (17)

Используя четность  $E_j$  по j и комбинируя слагаемые с j и -j, находим полную намагниченность 1D кольца:

$$(M_z)_{\text{tot}}^{(\tau)} = -\sum_{j>0} \frac{\tau e \gamma^2 \Delta f(E_j)}{c(\Delta^2 + 4\gamma^2 j^2 / R^2)} =$$

$$= -\frac{\tau e \gamma R}{2c} \sum_{j=1/2}^{j_{\text{max}}} \frac{\delta f(E_j)}{\delta^2 + j^2},$$
(18)

Письма в ЖЭТФ том 114 вып. 1-2 2021

где  $\delta=\Delta R/(2\gamma),\ j_{\rm max}=(N^{(\tau)}-1)/2,\ N^{(\tau)}$  — число электронов на одну проекцию спина в долине  $\tau$ . Для всех известных ДХПМ параметр  $\delta$  довольно большой при реалистичных радиусах кольца R (в  $MoS_2$  при R=100 нм  $\delta\simeq 250$ ). При этом все члены в сумме меняются медленно, и мы можем заменить суммирование на интегрирование, что дает:

$$(M_z)_{\text{tot}}^{(\tau)} = -\tau \mu_B^* \delta \arctan(\frac{j_{\text{max}}}{\delta}). \tag{19}$$

Два режима, описываемые формулой (19), показывают специфические особенности намагниченности узкого кольца ДХПМ. При малом числе частиц  $N \ll \delta$  получаем  $(M_z)_{\rm tot}^{(\tau)} = -\tau \mu_B^* N^{(\tau)}/2$  – вдвое меньше, чем в рассмотренных выше двумерных образцах. При большом числе частиц  $N^{(\tau)} \gg \delta$  наступает насыщение намагниченности:

$$\frac{(M_z)_{\text{tot}}^{(\tau)}}{2\pi R} = -\frac{\tau \mu_B^* \Delta}{8\gamma},\tag{20}$$

т.е. магнитный момент на единицу длины окружности кольца не зависит от линейной концентрации  $n_l$ . Характерная величина линейной концентрации, с которой начинается режим насыщения, равна  $\Delta/2\pi\gamma$ и весьма велика для типичных ДХПМ, например, для  $MoS_2 \ n_l \sim 10^7 \, {\rm cm}^{-1}$ . Однако в щелевом графене  $(gapped\ graphene)$  величина  $\Delta$  зависит от свойств подложки или от легирования и может быть существенно меньше, чем в ДХПМ, а параметр  $\gamma$  примерно на порядок больше. Если  $\Delta \sim 0.1 \, \mathrm{sB}$ ,  $\gamma \approx 3 \cdot 10^8 \, \mathrm{cm/c}$  для  $n_l$ , получается оценка  $10^5 \,\mathrm{cm}^{-1}$ . Например, для кольца с  $R=100\,\mathrm{Hm}$  это всего 6--7 электронов на кольцо (при этом  $\delta = 2.7$ , но сумма в (18) уже достаточно хорошо аппроксимируется интегралом: численный расчет показал, что расхождение составляет 5.5 % для  $j_{\text{max}} = 7/2$ ). Разумеется, для наблюдения эффекта необходимо нарушить равенство заселенностей долин так, чтобы в одной из них реализовался эффект насыщения, а в другой  $n_l$  оставалась еще малой.

Заключение. Мы рассмотрели три точно решаемых примера и нашли собственную намагниченность монослоя ДХПМ в рамках минимальной двухзонной модели, которой эти материалы обычно описываются. Основной результат состоит в демонстрации существенной зависимости однодолинной намагниченности образца от ГУ даже в термодинамическом пределе (конечно, предполагается баллистический характер движения электронов). Роль ГУ в

этой проблеме, насколько нам известно, не обсуждалась до сих пор в литературе.

Установлена необычная зависимость намагниченности одномерного кольца ДХПМ от числа электронов: насыщение при больших линейных концентрациях. Все результаты получены прямым вычислением среднего значения оператора магнитного момента, причем нигде не возникало трудности, связанной с присутствием в этом операторе координаты г (см., например, [7]). Интегралы по площади "бесконечной" системы дают конечные значения при использовании должным образом нормированных волновых функций. Более сложная процедура, требующая учета вклада кривизны Бэрри, дает совпадающий с нашим результат в единственном случае, когда сравнение возможно. Для диска и кольца соответствующие расчеты в литературе отсутствуют.

Работа была поддержана Российским научным фондом (грант #17-12-01039).

- G. Sundaram and Q. Niu, Phys. Rev. B 59, 14915 (1999).
- D. Xiao, J. Shi, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. 95, 137204 (2005).
- T. Thonhauser, D. Ceresoli, D. Vanderbilt, and R. Resta, Phys. Rev. Lett. 95, 137205 (2005).
- D. Ceresoli, T. Thonhauser, D. Vanderbilt, and R. Resta, Phys. Rev. B 74, 024408 (2006).
- J. Shi, G. Vignale, D. Xiao, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. 99, 197202 (2007).
- D. Xiao, W. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. 99, 236809 (2007).
- T. Thonhauser, Int. J. Mod. Phys. B 25(11), 1429 (2011).
- M. Tahir, A. Manchon, and U. Schwingenschlogl, Phys. Rev. B 90, 125438 (2014).
- D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, Phys. Rev. Lett. 108, 196802 (2012).
- M. V. Berry and R. J. Mondragon, Proc. R. Soc. London, Ser. A 412, 53 (1987).
- 11. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ФТТ 23, 1756 (1981).
- 12. V.V. Enaldiev, I.V. Zagorodnev, and V.A. Volkov, Pis'ma v ZhETF  ${\bf 101},~94~(2015).$
- 13. В. В. Еналдиев, В. А. Волков, Письма в ЖЭТФ  $\mathbf{104}$ , 806 (2016).
- 14. В. А. Волков, В. В. Еналдиев, ЖЭТФ 149, 702 (2017).
- 15. В. А. Волков, В. В. Еналдиев, И. В. Загороднев, Электронные поверхностные состояния в полупроводниках и полуметаллах, Физматкнига, М. (2018).

6

## Структурная релаксация и колебательные свойства поверхности с точечными дефектами

 $\Gamma$ .  $\Gamma$ . Русина<sup>+1)</sup>, С. Д. Борисова<sup>+1)</sup>, Е. В. Чулков\*

+Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, 634021 Томск, Россия

\*Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 15 июня 2021 г. После переработки 19 июня 2021 г. Принята к публикации 21 июня 2021 г.

Представлены результаты теоретического исследования локальных структурных изменений и вибрационных характеристик поверхности (001) ГЦК металла в присутствии точечных дефектов (вакансия/адатом). Показано влияние размера вакансионного дефекта и положения в нем адатома на характер структурной релаксации и фононные состояния поверхности. Определена наиболее динамически стабильная конфигурация в комплексе точечных дефектов "вакансия/адатом". Анализ проводился на основе данных по равновесной атомной конфигурации, локальной плотности фононных состояний и поляризации локализованных колебательных мод. Все расчеты проводились с использованием межатомных потенциалов, получаемых в рамках метода погруженного атома.

DOI: 10.31857/S1234567821140068

Представления о дефектности атомной и электронной структуры поверхности лежат в основе описания процессов физико-химических взаимодействий с участием поверхности твердых тел. Даже в относительно небольших количествах поверхностные дефекты могут влиять на электронные, магнитные, механические свойства поверхности и играть преобладающую роль во многих поверхностных процессах [1-5]. Высокая чувствительность современных технологий в субмикронном масштабе способствовала возможности разработки новых современных материалов с уменьшенной размерностью, в которых поверхностные явления играют определяющую роль. Понимание и контроль характеристик дефектов в широком классе современных наноструктур вполне могут стать ключом к прорывам в важнейших областях науки и техники. Например, аккуратными манипуляциями распределением и концентрацией вакансий и адатомов на поверхности можно управлять широким набором свойств низкоразмерных материалов [1, 6, 7]. Основная трудность для интенсивного развития "дефектной" инженерии поверхности связана с визуализацией точечных дефектов [2]. Однако, благодаря исследованию влияния, которое точечные дефекты оказывают на свойства поверхности, становится возможным определение их положения, разме-

ров и концентрации [2, 8–10]. Одним из возможных способов обнаружения и описания точечных дефектов является исследование локальных изменений фононного спектра поверхности, поскольку изменение силового взаимодействия вокруг вакансии или адатома отражается на колебаниях поверхностных атомов, ближайших к дефекту [11–13, 16]. И, хотя вопросы влияния точечных дефектов на фононы появились в фокусе интересов сравнительно давно [13, 14], однако в настоящее время акцент сместился в сторону влияния дефектов на фононы в наноразмерных объектах. Интенсивное исследование этого вопроса началось относительно недавно, что, безусловно, связано с развитием сверхчувствительных экспериментальных методов исследования атомной структуры и поверхностных фононов (таких как сканирующая туннельная микроскопия в комбинации с неупругой электронной туннельной спектроскопией) [15–17], а также с появлением более совершенных методов теоретического исследования. Пример успешного сочетания эксперимента и модельных теоретических расчетов в исследовании локальных динамических характеристик дефектной поверхности продемонстрирован в работах [17, 16]. Использование модельного подхода в данном случае является оправданным, так как для расчетов требуются ячейки больших размеров, содержащие сотни атомов, что при ab initio pac-

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: rusina@ispms.tsc.ru; svbor@mail.ru

четах приводит к значительным временным и компьютерным затратам.

Целью настоящей работы является исследование равновесной атомной и фононной структуры поверхности (001) ГЦК металла при наличии на ней комплексов точечных дефектов (вакансия/адатом). В качестве материала подложки выбрано серебро, а адсорбатом является натрий, в силу своего выраженного влияния на поверхностные свойства металлов (значительная разница атомных радиусов и масс, перенос заряда в подложку, изменение работы выхода и пр.). Для достижения поставленной цели были проведены расчеты атомной релаксации поверхности, распределения локальной плотности колебательных состояний, в зависимости от размеров вакансионного "кластера" и положения адатома в нем.

Для определения равновесной кристаллической структуры и вибрационных свойств поверхности с точечными дефектами в работе использовались потенциалы межатомного взаимодействия, полученные в рамках метода погруженного атома [18]. Метод хорошо себя зарекомендовал в исследованиях структурных и динамических характеристик поверхностей с адатомами [19-21]. Оптимизация структуры проводилась методом молекулярной динамики при нулевой температуре, с использованием скоростной схемы Верлета (временной шаг  $h = 1 \cdot 10^{-14}$  c) [22]. Поверхность Ад(001) моделировалась 31-слойной пленкой, а размеры двумерной элементарной ячейки выбирались в соответствии с величиной точечного дефекта:  $(4 \times 4)$  для моновакансии, а  $(6 \times 6)$  для 4х и 9-ти атомного вакансионного "кластера". Собственные значения частот колебаний и векторов поляризации рассчитывались из динамической матрицы. Локальная плотность колебательных состояний (LDOS – local density of states) определялась проекцией этих собственных значений на интересующий атом в направлениях X, Y, Z. Количество атомов, входящих в расчетную ячейку, варьировалось от 496 до 900.

Рассчитанные значения вертикальной релаксации идеальной поверхности Ag(001)  $\Delta_{12}=-1.9\,\%$ ,  $\Delta_{23}=-0.02\,\%$  находятся в хорошем согласии с данными эксперимента  $\Delta_{12}=-1.5\,\%$ ,  $\Delta_{23}=0.1\,\%$  [24] и DFT расчета  $\Delta_{12}=-2.1\,\%$ ,  $\Delta_{23}=+0.10\,\%$  [25]. Латеральная релаксация данной поверхности отсутствует. В отличие от идеальной поверхности Ag(001), наличие в поверхностном слое моновакансии или вакансионного "кластера" приводит к появлению латеральной релаксации в приповерхностных слоях. На рисунке 1a—3a на верхней панели представлены геометрические модели поверхности Ag(001) с разным

размером вакансионного "кластера" и направления латеральных смещений атомов. Схемы вертикальной релаксации, с затуханием на 4 приповерхностном слое, показаны на нижней панели.  $Ag_s$ ,  $Ag_{s-1}$ ,  $Ag_{s-2}$ обозначают слои от поверхности и далее вглубь пленки. В каждом слое атомы можно разделить на две группы: І - группа это атомы, ближайшие к границе вакансии (NN – nearest neighbors), II группа – все остальные атомы слоя. Из рисунков 1–3 видно, что латеральные смещения атомов I группы в Ag<sub>s</sub> и  $Ag_{s-1}$  слоях имеют противоположные направления, что создает локальные области деформаций: растягивающих в  $Ag_s$  и сжимающих в  $Ag_{s-1}$  слоях. Увеличение размеров вакансии приводит к расширению области локальных деформаций в  $Ag_s$  и  $Ag_{s-1}$  слоях, а также вовлечению в этот процесс  $Ag_{s-2}$  слоя. При вертикальной релаксации имеют место два процесса: локальная релаксация в окрестности дефекта и планарная релаксация. Это приводит к разной величине вертикальных смещений атомов I и II групп и, как следствие, к появлению коробления  $\delta_z$  атомной структуры в  $Ag_{s-1}$  и  $Ag_{s-2}$  слоях. Для всех размеров вакансионного дефекта максимальное коробление характерно для  $Ag_{s-2}$  слоя и  $\delta_z = 0.04 \,\text{Å}$ ,  $\delta_z = 0.07 \,\text{Å}$  и  $\delta_z = 0.08, \text{Åсоответственно}$  для 1, 4, 9 атомных вакансий. Значения вертикальной релаксации приведены в табл. 1. Как видно из таблицы,

**Таблица 1.** Вертикальная релаксация поверхности Ag(001) с n-вакансионными "кластерами"  $(n=1,\ 4,\ 9)$ . Положительные (отрицательные) значения у  $\Delta_{ij}$  (%) означают расширение (сжатие) межплоскостных растояний,  $\Delta^v_{ij}$  – для атомов слоя вблизи вакансии и  $\Delta_{ij}$  - для всех остальных атомов слоя

Поверхность	$\Delta_{12}$	$\Delta^v_{12}$	$\Delta_{23}$	$\Delta^v_{23}$	$\Delta_{34}$	$\Delta^{v}_{34}$
+1 вакансия	-2.0	-4.7	-0.8	+1.0	-0.1	+0.5
+4 вакансия	-1.8	-5.4	-0.3	+0.9	-0.2	+0.6
+9 вакансия	-1.6	-5.6	-0.1	+0.4	-0.4	+0.9

релаксация  $Ag_s$  слоя для I группы атомов более чем в  $\sim 2$  раза превышает релаксацию II группы атомов. Общим является знакопеременный характер релаксации поверхности с 4-х и 9-ти атомными вакансиями. Такой осциллирующий характер вертикальной релаксации свойственен для вицинальных поверхностей ГЦК металлов и отражает появление моноатомной ступени на границе вакансионного "кластера" [26].

Элементарным ячейкам  $(4 \times 4)$  и  $(6 \times 6)$  соответствуют двумерные зоны Бриллюэна  $(3\mathrm{B})$ , которые меньше  $3\mathrm{B}$  исходной ячейки  $(1 \times 1)$  в 16 и 36 раз соответственно. Это приводит к многократным отражениям дисперсионных кривых в точку в  $\bar{\Gamma}$ , а так-

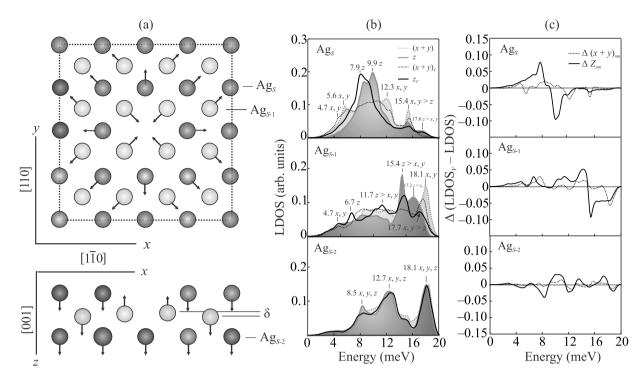


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) — Геометрическая модель поверхности Ag(001) с моновакансией и релаксационные смещения ближайших атомов. Верхняя панель — латеральные смещения, нижняя панель — вертикальные смещения. Расчетная ячейка обозначена пунктирной линией. (b) — LDOS поверхности Ag(001) с моновакансией в сравнении с LDOS бездефектной поверхности (окрашенная область). (c) — Разность  $\Delta(LDOS_v\text{-}LDOS)$  для ближайших к дефекту атомов при конкретном значении энергии колебаний

же в симметричные точки  $\bar{X}$  и  $\bar{M}$  новой ЗБ. Следствием таких отражений является размытие локализованных мод и трудность выделения новых состояний, инициированных вакансиями. Поэтому для анализа локальных изменений в фононной структуре поверхности Ag(001) наиболее информативными являются расчеты локальной плотности колебательных состояний бездефектной поверхности (LDOS) и поверхности с вакансиями (LDOS $_v$ ), а также их разностной плотности ΔLDOS. Соответствующие LDOS представлены на рис. 1b, с. Как видно из рис. 1b наличие одиночной вакансии в  $Ag_s$  слое не приводит к кардинальным изменениям в полной LDOS. Все локализованные состояния сохраняются и только для рэлеевской моды (Rayleigh mode - RW) характерно снижение энергии и локализации на 2.0 мэВ и  $\sim 10-15\%$  соответственно. Также наблюдается увеличение амплитуды низкочастотных поверхностных Х, У-колебаний, что приводит к снижению их частоты на  $\sim 0.4$  мэВ. Наиболее наглядно локальные изменения в фононной структуре, вносимые дефектом, представлены в ΔLDOS (см. рис.с). При расчете ΔLDOS учитывались колебательные состояния только ближайших к n-вакансионному "кластеру" атомов. Как можно видеть из рис. 1c, для  $Ag_s$  слоя ста-

новится более выраженной разница в степени локализации X, Y-колебаний, распространяющихся в области запрещенных частот объемного фононного спектра. В низкочастотной области, при 4.7 мэВ, обнаруживается продольный резонанс, гибридизованный с вновь появившимися низкочастотными Zколебаниями атомов  $Ag_{s-1}$  слоя. Наиболее заметные изменения наблюдаются в  $\Delta LDOS Ag_{s-1}$  слоя. Для высокочастотных колебаний характерна делокализация (уменьшение на 45 %) и низкочастотный сдвиг на  $\sim 0.5\,{\rm MpB}$ . Кроме того, в  ${\rm Ag}_{s-1}$  слое появляется новое состояние дипольного типа с энергией 6.7 мэВ, которое определяется совместными Z-колебаниями ближайших к вакансии атомов с  $Ag_s$ ,  $Ag_{s-1}$  и  $Ag_{s-2}$ слоев. В  $\Delta$ LDOS для  $Ag_{s-2}$  слоя все состояния сохраняют свою энергию, поляризацию и имеется лишь незначительная делокализация продольных колебаний.

Полная LDOS и  $\Delta$ LDOS для поверхности с 4-х атомным вакансионным "кластером" представлены на рис. 2b, с. В полной LDOS для  $Ag_s$  слоя сохраняется низкочастотный сдвиг RW и продольных X,Y-колебаний, распространяющихся в плоскости поверхности вдоль [110] направления. В  $\Delta$ LDOS наиболее заметные изменения наблюдаются в  $Ag_{s-1}$  слое.

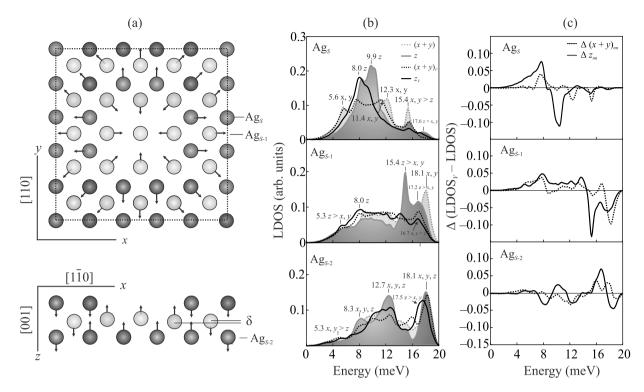


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а)–(с) – То же, что на рис. 1, но для 4-х атомного вакансионного "кластера"

Локализация высокочастотных Z-колебаний снижается на  $\sim 72\,\%$  вследствии гибридизации с XYколебаниями атомов с  $Ag_s$  и  $Ag_{s-2}$  слоев. В отличие от поверхности с моновакансией, в  $\Delta LDOS$ Ад<sub>8-2</sub> слоя наблюдается частотный сдвиг и снижение локализации всех Z-поляризованных колебаний. Совместные вертикальные колебания атомов с  $Ag_s$  и  $Ag_{s-1}$  слоев становятся более локализованными и приобретают псевдорэлеевский характер. При этом атомы  $Ag_{s-1}$  слоя смещаются строго в сагиттальной плоскости с ZY поляризацией, а атомы  $\mathrm{Ag}_s$  слоя имеют выраженную Z-поляризацию. При энергии 3.7 мэВ появляется новое, дважды вырожденное состояние, с взаимно меняющейся X и Yполяризацией. Оно максимально локализовано в Ags и  $Ag_{s-2}$  слоях и определяется различием во взаимодействии продольных колебаний атомов в окрестности формирующихся ступени и террасы с вертикальными колебаниями атомов  $Ag_{s-1}$  слоя.

LDOS и  $\Delta$ LDOS для поверхности с 9-ти атомным вакансионным "кластером" представлены на рис. 3b, с. Сравнение с LDOS и  $\Delta$ LDOS поверхности с 1- и 4-х атомными вакансиями показывает, что при увеличении размеров вакансионного дефекта энергия RW возрастает на 1.6 мэВ. В  $Ag_{s-1}$  слое локализация псевдорэлеевских колебаний усиливается, а локализация высокочастотных XY- и Z-колебаний

снижается на  $\sim 70\,\%$ . В  ${\rm Ag}_{s-2}$  энергетическая область всех колебаний сужается, вследствие частотного сдвига низкочастотных XY-колебания на +1 мэВ и высокочастотных Z-колебаний на -0.9 мэВ, что отражает усиление внутрислоевого взаимодействия.

Значения латеральной и вертикальной релаксации поверхностных слоев Ag(001), в зависимости от размера вакансионного "кластера" и положения в нем Na, приведены в табл. 2. Анализ данных показал, что адатом Na качественно не меняет характера латеральной релаксации поверхности Ag(001) с вакансиями. Однако величина смещения ближайших соседей в  $Ag_s$  слое увеличивается на порядок, а при положении Na в центре 9-ти атомной вакансии области растяжения и сжатия теперь наблюдаются внутри  $Ag_{s-1}$  слоя. Что касается вертикальной релаксации, то адсорбция адатома Na в моновакансию практически нивелирует влияние адатома Na на вертикальную релаксацию идеальной подложки. Значение  $\Delta_{12}^{\mathrm{def}}$  снижается с -6.1 до  $-0.4\,\%$ , а в  $\mathrm{Ag}_{s-1}$  слое  $\Delta_{23}^{\mathrm{def}}$  меняет знак. В общем случае адсорбция Na в вакансионный дефект не оказывает заметного влияния на величину и знак вертикальной релаксации поверхности Ag(001). За исключением положения Na в центре 9-ти атомной вакансии. В этом случае значения  $\Delta_{12}$  увеличиваются в 2 раза. Присутствие адатома Na также не приводит к значительным измене-

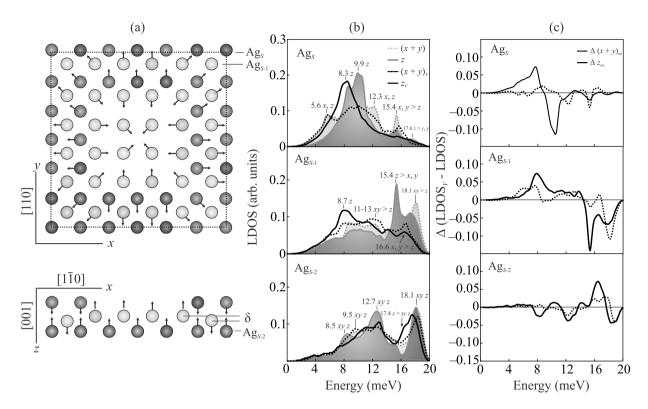


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а)-(с) – То же, что на рис. 1, но для 9-ти атомного вакансионного "кластера"

**Таблица 2.** Латеральная и вертикальная релаксация в S и S-1 слоях Ag(001) в присутствии адатома Na и вакансий. Символы (1-NN) и (2-NN) обозначают первых и вторых ближайших соседей. Положительные (отрицательные) значения латеральной  $d_{xy}$  (Å) и вертикальной релаксации  $\Delta_{ij}$  (%) означают увеличение (уменьшение) межатомных/межслоевых растояний.  $\Delta_{ij}^{\rm def}$  – для атомов слоя вблизи дефекта и  $\Delta_{ij}$  – для всех остальных атомов слоя. Na<sup>1</sup> и Na<sup>2</sup> – положение адатома в угловом и центральном положении в 9-ти атомном вакансионном "кластере" соответственно

Латеральная релаксация, $d_{xy}$							
Слои			$Na_{1v}$	$Na_{4v}$	$Na_{9v}^1$	$Na_{9v}^2$	
$S_{(1-NN)}$			+0.17	+0.12	+0.14	+0.13	
$S_{(2-NN)}$			-0.02	-0.03	-0.05	-0.10	
$S-1_{(1-NN)}$			+0.04	+0.07	+0.08	+0.08	
$S-1_{(2-NN)}$			+0.01	-0.04	-0.04	+0.01	
Вертикальная релаксация							
	$\Delta_{12}$	$\Delta_{12}^{ m def}$	$\Delta_{23}$	$\Delta_{23}^{\mathrm{def}}$	$\Delta_{34}$	$\Delta_{34}^{ m def}$	
$\mathrm{Na}/id$	-1.6	-6.1	+0.2	+1.8	-0.3	+0.4	
$\mathrm{Na}/\mathrm{1}v$	-2.0	-0.4	+0.4	-1.3	-0.3	+1.1	
$\mathrm{Na}/4v$	-2.8	-0.9	+0.8	-2.3	-0.2	+0.6	
$Na^1/9v$	-2.1	-0.9	+0.4	-2.7	-0.1	+0.5	
$Na^2/9v$	-4.0	0.0	+0.7	-3.4	-0.2	+0.6	

ниям величины коробления  $\delta_z$  в  $\mathrm{Ag}_s$  и  $\mathrm{Ag}_{s-1}$  слоях подложки. Например, соответствующие  $\delta_z$  для  $\mathrm{Na}$  в 4-х атомном вакансионном "кластере" равны  $0.04\,\mathrm{\mathring{A}}$ 

и 0.06 Åсоответственно. Для 9-ти атомной вакансии существуют два равновесных положения адсорбции Na - угловое (на границе дефекта) с незначительным энергетическим преимуществом в  $\sim 0.36$  эВ и в центре вакансионного "кластера". При этом для Na в центре 9-ти атомной вакансии максимальное коробление структуры  $\delta_z=0.12$  Å наблюдается в  $\mathrm{Ag}_{s-1}$  слое, в то время как для Na в угловом положении, величина коробления в  $\mathrm{Ag}_{s-1}$  слое равна  $\delta_z=0.07$  Å.

На рисунке 4 показаны LDOS для системы Ад(001) с адатомом Na, осажденным в вакансионный дефект. В случае адсорбции на идеальную поверхность в LDOS для Na (рис. 4, закрашенная область) имеются два локализованных пика, соответствующих фундаментальным модам колебаний адатома на поверхности (001) ГЦК металлов. Первый пик при 4.7 мэВ – это FT-мода (frustrated translations mode) несостоявшихся трансляций, которая всегда гибридизована с Z-колебаниями атомов  $Ag_{s-1}$  слоя подложки. Второй пик при 20.9 мэВ – дипольно-активная Z-мода (strength mode), определяемая гибридизацией вертикальных колебаний адатома и атомов подложки с  $Ag_s$  и  $Ag_{s-1}$  слоев. Аналогичные моды, локализованные на адатоме, были экспериментально обнаружены при осаждении атомов Си на идеальную поверхность Ag(001) в работе [16].

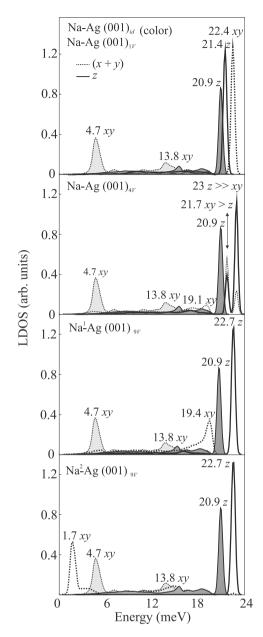


Рис. 4. (Цветной онлайн) LDOS адатома Na адсорбированного в n-вакансионный "кластер" (n=1,4,9)на поверхности Ag (001) в сравнении с LDOS адатома Na, адсорбированного на бездефектную поверхность Ag (001) (закрашенная область). Для 9-ти атомной вакансии представлены LDOS для двух равновесных положений адсорбции: 1- в углу вакансионного "кластера"; 2- в его центре

При адсорбции Na в моновакансию происходит изменение характера продольных XY-колебаний адатома. Гибридизация с Z-колебаниями атомов подложки с  $\mathrm{Ag}_{s-1}$  и  $\mathrm{Ag}_{s-2}$  слоев приводит к их высокочастотному сдвигу и распространению выше границы объемных колебаний атомов подлож-

ки. В LDOS им соответствует локализованный пик при энергии  $22.4 \,\mathrm{m}$ эВ. При этом энергия Zполяризованных колебаний (S-мода) Na возрастает лишь на 0.5 мэВ. Это кардинально отличается от случая осаждения адатома Си в моновакансию. В этом случае нет выраженных индивидуальных колебаний адатома, все колебания имеют смешанный характер и влияние вакансии проявляется лишь общим повышением плотности колебаний всей системы [16]. При адсорбции в 4-х атомный вакансионный "кластер" вновь происходит изменение характера колебаний адатома Na. Из-за разницы взаимодействия с атомами  $Ag_s$  и  $Ag_{s-1}$  слоев, формирующими моноатомную ступень, FT-мода адатома расщепляется. В высокочастотной области теперь имеются два пика, которые определяются XYZ-колебаниями Na с разной степенью локализации вдоль направлений X, Y, Z. При этом колебательное состояние Na с максимальной энергией 23 мэВ имеет преимущественно Z-поляризацию. В отличие от случая с вакансией, присутствие Na не приводит к низкочастотному сдвигу RW. В  $Ag_{s-1}$  и  $Ag_{s-2}$  слоях подложки появляются вертикальные оптические колебания, которые образуют с Z-колебаниями Na дипольно-активную моду и располагаются выше области объемных колебаний при 23 мэВ. Такие выраженные индивидуальные колебания адатома Na отличаются от случая адсорбции Си в 4-х атомной вакансии на Ag(001). Как и в случае адсорбции в моновакансию, колебания адатома Си интегрированы в коллективные колебания подложки, что отражается увеличением их плотности [16].

При осаждении Na в угловое положение 9-ти атомной вакансии вновь происходит изменение положения FT-моды. Ее энергия понижается и в LDOS ей соответствует пик при 19.4 мэВ. При этом энергия Sмоды изменяется незначительно и соответствующий ей пик обнаруживается при 22.7 мэВ. Положение Na в центре 9-ти атомной вакансии приводит к росту амплитуды продольных колебаний адатома и в LDOS им соответствует пик при энергии 1.7 мэВ. Глубоко проникая в область объемных колебаний, они инициируют в  $Ag_{s-1}$  и  $Ag_{s-2}$  слоях подложки появление нового низкочастотного Z-состояния с энергией  $1.7 \,\mathrm{m}$ эВ. При этом значение энергии S-моды остается постоянным и равно 22.7 мэВ. Аналогичное поведение продольных колебаний наблюдалось при положении адатома Си в центре 9-ти атомной вакансии на поверхности Ag(001), только с менее выраженным низкочастотным сдвигом продольной FT-моды.

Таким образом, результаты расчетов релаксации и локальной плотности колебательных состо-

яний идеальной поверхности Ад (001) и поверхности с точечными дефектами (вакансия/адатом) показали зависимость этих характеристик от размеров вакансионного дефекта и положения адатома Na в нем. С увеличением размера вакансии релаксация поверхности Ад (001) приобретает характер, свойственный вицинальным поверхностям ГЦК металлов, и коробление атомной структры приповерхностных слоев возрастает. Для всех рассмотренных размеров вакансионного "кластера" энергия продольных вырожденных X, Y-колебаний в  $Ag_s$  слое снижается и происходит их расщепление из-за разного характера взаимодействия ближайших к дефекту атомов с  $Ag_s$  и  $Ag_{s-1}$  слоев. Общим также является делокализация всех высокочастотных X,Y,Z-колебаний, с максимальной делокализацией  $\sim 70\,\%$  в  ${\rm Ag}_{s-1}$  слое и низкочастотный сдвиг рэлеевской моды.

При адсорбции Na в моновакансию или в положение вблизи границы вакансионного дефекта, происходит кратное увеличение энергии FT-моды адатома. Увеличение размера вакансии приводит к расщеплению вырожденных X, Y-колебаний из-за разного характера взаимодействия с атомами подложки вдоль направлений [110] и [111], параллельных краю формирующейся ступени и плоскости террасы, соответственно. При этом энергия S-моды адатома слабо зависит от размеров вакансионного "кластера" и от положения адатома в нем. Анализ локальных структурных и фононных изменений, а также расчет энергии адсорбции показал, что наиболее динамически стабильной является конфигурация Na в моновакансии. Энергия адсорбции Na в моновакансию составила  $E_{\rm ads} = -5.2\,{\rm 9B}$ , в сравнении с  $E_{\rm ads} = -4.4\,{\rm 9B}$ и  $E_{\rm ads} = -3.3\,{
m sB}$  для 4-х и 9-ти атомной вакансии, соответственно.

Для всех размеров вакансионного "кластера" колебательные состояния Na сохраняют индивидуальный локализованный характер. Сравнение с результатами, полученными в работе [16], показало, что метод фононной визуализации поверхностных вакансий может быть наиболее эффективно использован при осаждении адатомов металла с атомными и структурными характеристиками, максимально отличными от материала подложки и позволяющими сохранять индивидуальный характер колебаний в системе.

Работа выполнена в рамках Госзадания для ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2019-0032.

Авторы выражают признательность С.В.Еремееву за конструктивные замечания и помощь при подготовке рукописи.

- K. Oura, M. Katayama, A. V. Zotov, V. G. Lifshits, and A. A. Saranin, Structural Defects at Surfaces, Springer, Berlin, Heidelberg (2003), p. 195.
- G. Li, G. R. Blake, and T. T. M. Palstra, Chem. Soc. Rev. 46, 1693 (2017).
- P. Ehrhart, Atomic Defects in Metals in Springer Materials, ed. by H. Ullmaier, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991), v. 25.
- A. Jangizehi, F. Schmid, P. Besenius, K. Kremer, and S. Seiffert, Soft Matter 16, 10809 (2020).
- A. du Plessis, I. Yadroitsava, and I. Yadroitsev, Mater. Des. 187, 108385 (2020).
- K. F. McCarty, J. A. Nobel, and N. C. Bartelt, Nature 412, 622 (2001).
- 7. J. Spitaler and S. K. Estreicher, Frontiers in Materials 5, 70 (2018).
- D. Yu. Biryukov, A. F. Zatsepin, and V. S. Kortov, Glass Physics and Chemistry 27, 337 (2001).
- 9. Y. Uchida and G. Lehmpfuhl, Surf. Sci. 243, 193 (1991).
- E. H. H. Fouad, J. Yujie, and W. Meishan, Sci. World J. 243, 490853 (2014).
- Yu. N. Devyatko and S. V. Rogozhkin, Vacuum 56, 279 (2000).
- V. Adamyan and V. Zavalniuk, J. Phys. Condens. Matter 23, 015402 (2010).
- D. Walton, Phonon-Defect Interaction, in Point Defects in Solids. Semiconductors and Molecular Crystals, ed. by J. H. Crawford and L. M. Slifkin, Plenum Press, N.Y. (1975), v. 2, ch. 5, p. 393.
- C. T. Walker and R. O. Pohl, Phys. Rev. 131, 1433 (1963).
- T. Altfeder, K. A. Matveev, and A. A. Voevodin, Phys. Rev. Lett. 109, 166402 (2012).
- K. Volgmann, H. Gawronski, Ch. Zaum, G. G. Rusina, S. D. Borisova, E. V. Chulkov, and K. Morgenstern, Nat. Commun. 5, 5089 (2014).
- L. Vitali, S. D. Borisova, G. G. Rusina, E. V. Chulkov, and K. Kern, Phys. Rev. B 81, 153409 (2010).
- S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, Phys. Rev. B 33, 7983 (1986).
- S. D. Borisova, S. V. Eremeev, G. G. Rusina,
   V. S. Stepanyuk, P. Bruno, and E. V. Chulkov,
   Phys. Rev. B 78, 075428 (2008).
- 20. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е.В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **100**, 261 (2014) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **100**, 237 (2014)].
- 21. Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **109**, 621 (2019) [G. G. Rusina, S. D. Borisova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **109**, 600 (2019)].
- 22. L. Verlet, Phys. Rev. 159, 98 (1967).
- 23. R. A. Johnson, Phys. Rev. B 39, 12554 (1989).
- H. Li, J. Quimn, Y.S. Li, D. Tian, F. Jona, and P.M. Marcus, Phys. Rev. B 43, 7305 (1991).
- 25. R. Heid and K.-P. Bohnen, Phys. Rep. 387, 151 (2003).
- Yu. Sklyadneva, G. G. Rusina, and E. V. Chulkov, Surf. Sci. 377-379, 313 (1997).

### Спин-флоп переход в пироборате $Co_2B_2O_5$

 $H.\,B.\,K$ азак $^{+1}$ ),  $H.\,A.\,Б$ ельская $^{+*}$ ,  $E.\,M.\,М$ ошкина $^{+}$ ,  $Л.\,A.\,С$ оловьев $^{\times}$ ,  $E.\,B.\,Е$ ремин $^{+*\circ}$ ,  $C.\,F$ 0. Гаврилкин $^{\nabla}$ ,  $C.\,\Gamma$ 0. Овчинников $^{+\circ}$ 

<sup>о</sup>Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

 $\nabla$  Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 11999 1 Москва, Россия

> Поступила в редакцию 21 июня 2021 г. После переработки 22 июня 2021 г. Принята к публикации 22 июня 2021 г.

Монокристаллы кобальтового пиробората  $Co_2B_2O_5$  получены методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава. Измерения порошковой рентегновской дифракци выявили триклинную симметрию  $P\overline{1}$  с параметрами решетки a=3.1666(7) Å, b=6.1543(6) Å, c=9.2785(12) Å,  $\alpha=104.240(5)^\circ$ ,  $\beta=90.841(14)^\circ$ ,  $\gamma=92.064(16)^\circ$ , V=175.10(5) ų. Магнитные свойства изучены в интервале температур 4.2–300 K и магнитных полях до 90 кЭ путем измерения статической намагниченности и молярной теплоемкости. Обнаружен переход в антиферромагнитное состояние,  $T_N=45$  K. В сильных магнитных полях образец испытывает спин-флоп переход.

DOI: 10.31857/S123456782114007X

Введение. В последенее время бораты и оксибораты переходных металлов активно иссследуются на предмет использования в качестве источников Li-(LIBs) и Na- (SIBs) ионных батарей [1, 2, 3]. Многообразие полианионных комплексов, построенных из плоскотреугольных  $(BO_3)^{3-}$  и/или тетраэдрических  $(BO_4)^{5-}$  групп, открывает возможность получения новых материалов, обладащих неординарными магнитными, оптическими, магнито-оптическими и магнито-электрическими свойствами. Наиболее изученными являются бораты со структурами кальцита  $Me^{3+}BO_3$  [4–6], варвикита  $Me^{2+}Me^{3+}BO_4$  [7–10], людвигита  $Me_2^{2+}Me^{3+}BO_5$  [11-14] и хантита  $Me_4^{3+}(BO_3)_4$ [15–17], где  $Me^{2+}$ ,  $Me^{3+} = 3d$  и 4f ионы. Магнитные трансформации, связанные с упорядочением различных спиновых подсистем, структурные и электронные переходы, сопровождающиеся зарядовым упорядочением, спин-переориентационные переходы, вызванные проявлением сильной магнитокристаллической анизотропии, а также эффекты фрустраций магнитных взаимодействий широко исследовались в данных материалах на протяжении нескольких десятилетий.

Вместе с тем, пиробораты с общей формулой  $Me_2^{2+}B_2O_5$  исследованы гораздо хуже. Источниками магнетизма в данных материалах являются двухвалентные ионы переходных металлов. На сегодняшний день получены и частично изучены пиробораты на основе Мп [18, 19], Со [19] и Fe [20, 21]. Установлено, что гомометаллические пиробораты Mn<sub>2</sub>B<sub>2</sub>O<sub>5</sub>,  $Co_2B_2O_5$  и  $Fe_2B_2O_5$  являются низкотемпературными антиферромагнетиками, с температурами Нееля  $T_N = 24,45$  и 70 K, соответственно. Пиробораты кристаллизуются в триклинной симметрии  $P\overline{1}$ . Металлические ионы занимают две кристаллографически неэквивалентные позиции М1 и М2 (позиции 2і по Вайкоффу), находящиеся в центре кислородных октаэдров (рис. 1). Через общие ребра октаэдры объединяются в ряд М1-М2-М2-М1 и распространяются вдоль короткого кристаллографического направления, формируя ленты. Ленты объединяются в трехмерный каркас посредством тригональных групп В1О3 и В2О3, конденсированных в полианионный комплекс  $(B_2O_5)^{4-}$ .

С точки зрения магнетизма, наиболее изученным является марганцевый пироборат. В  ${\rm Mn_2B_2O_5}$  полевая зависимость намагниченности M(H) демонстрирует каскад спин-переориентационных переходов в

<sup>&</sup>lt;sup>+</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук", 660036 Красноярск, Россия

<sup>\*</sup>Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева, 660037 Красноярск, Россия

У Институт химии и химической технологии Сибирского отделения РАН Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук", 660036 Красноярск, Россия

<sup>1)</sup>e-mail: nat@iph.krasn.ru

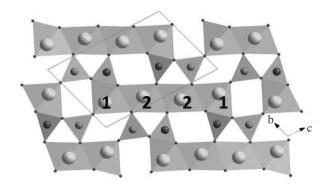


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кристаллическая структура пиробората  $Co_2B_2O_5$ . Цифрами показаны кристаллографически неэквивалентные позиции кобальта. Зеленые и синие треугольники показывают неэквивалентные позиции бора B1 и B2

интервале полей 20– $50\,\mathrm{k}$ Э. Низкополевой спин-флоп переход ( $H_{sf}=25\,\mathrm{k}$ Э) был приписан переориентации магнитных моментов  $\mathrm{Mn^{2+}}$  по всему объему. Спиновая конфигурация  $\mathrm{Mn_2B_2O_5}$ , предложенная на основе расчета распределения электронной плотности с помощью метода максимальной энтропии [22], показала распределение электронной плотности в областях между лентами. Согласно предложенной модели, все копланарные ленты в  $\mathrm{Mn_2B_2O_5}$  являются ферромагнитными, а антиферромагнитное поведение обусловлено антипараллельной магнитной ориентацией между соседними лентами.

Данная работа посвящена исследованию кобальтового пиробората  $Co_2B_2O_5$ . Впервые его кристаллическая структура была изучена в работе [23] и далее детально решена в работе [24]. Влияние магнитного ( ${
m Co^{2+}} 
ightarrow {
m Mn^{2+}}$ ) и немагнитного ( ${
m Co^{2+}} 
ightarrow {
m Zn^{2+}}$ ) замещений на кристаллическую структуру изучено в работах [25, 26], соответвенно. Частичное замещение ионов кобальта на марганец приводит к увеличению параметров решетки и объема в соответствии с ионными радиусами  $r(\text{Co}^{2+}) = 0.745 \,\text{Å}$  и  $r(\text{Mn}^{2+}) = 0.83 \,\text{Å}$  [27]. По нашим данным имеется только одна работа [19], посвященная изучению магнитных и электронных свойств кобальтового пиробората, в которой приведены данные магнитной восприимчивости, измеренной в поле 10 кЭ. Эффективный магнитный момент, определенный из подгонки высокотемпературной части восприимчивости, найден равным  $4.96\,\mu_B$  на ион  $\mathrm{Co}^{2+}$ . Край оптического поглощения  $\sim 4.15\, {\rm pB}$  был определен из спектров диффузного отражения. Поведение намагниченности  $Co_2B_2O_5$  в магнитном поле осталось не исследованным. Тем не менее, по аналогии с марганцевым пироборатом можно ожидать, что Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> будет демонстрировать индуцированные полем спинпереориентационные переходы.

Синтез образцов и экспериментальные методики. Монокристаллы Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> были получены с помощью раствор-расплавного метода в режиме спонтанной кристаллизации. Соотношение компонентов исходной системы имело следующий вид:  $Bi_2Mo_3O_{12}: 1.08Na_2B_4O_7: 4.82CoO: 0.8B_2O_3.$ Раствор-расплав готовился путем последовательного сплавления исходных окислов в платиновом тигле  $(V = 100 \,\mathrm{cm}^3)$  при температуре  $T = 1100 \,\mathrm{^{\circ}C}$ . Приготовленный раствор-расплав гомогенизировался в течение 3 ч при температуре наплавления  $T = 1100\,^{\circ}\text{C}$ . После этапа гомогенизации температура в печи сначала понижалась быстро, со скоростью  $dT/dt = 100\,^{\circ}{\rm C/y}$ , до  $T = 880\,^{\circ}{\rm C}$ , затем медленно, со скоростью dT/dt = 4 °C/сут. Через 48 часов тигель извлекался из печи, раствор-расплав выливался. Монокристаллы отделяли травлением в 20%-ном водном растворе азотной кислоты. Образцы имели форму плоских удлиненных призм розово-сиреневого цвета, вытянутых вдоль короткого кристаллографического направления (а) с поперечным сечением в форме параллелограмма. Типичные размеры образцов  $0.01 \times 0.5 \times 1.0 \,\mathrm{mm}^3$ .

Рентген-дифракционный анализ проводился с помощью порошкового дифрактометра PANalyticalX'PertPRO (СоК $\alpha$ , Нидерланды), съемка выполнялась в интервале углов  $2\theta = 5-100^{\circ}$ . Уточнение параметров кристаллической решетки выполнено по полному профилю дифрактограммы с применением метода минимизации производной разности [28].

Измерения статической намагниченности и теплоемкости проведены в интервале температур 4.2—300 К и в магнитных полях до 90 кЭ с использованием коммерческой платформы PPMS Quantum Design (Красноярский региональный центр коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН и Центр коллективного пользования Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН). Для магнитных измерений был отобран монокристалл массой 0.43 мг. Внешнее магнитное поле было ориентировано параллельно оси кристалла (вставка к рис. 2). Измерения проводись в двух режимах: охлаждение во внешнем магнитном поле (FC) и нулевом магнитном поле (ZFC). Измерения теплоемкости выполнены на монокристаллических образцах общей массой 2 мг.

**Результаты.** Измерения рентгеновской дифракции показали, что полученные образцы кристаллизуются в триклинной симметрии  $P\overline{1}$ . Параметры решетки  $a=3.1666(7)\,\text{Å},\ b=6.1543(6)\,\text{Å},\ c=$ 

	$n_{\mathrm{Co}^{2+}}/\mathrm{ф.ед.}$	$\chi_0[\Gamma \mathrm{c}\;\mathrm{cm}^3/\mathrm{моль}]$	$C$ [Гс см $^3$ К/моль]	$\theta \left[ \mathrm{K} \right]$	$\mu_{ ext{eff}}\left[\mu_B/ ext{ф.ед.} ight]$	$\mu_{\mathrm{eff}} \left[ \mu_B / \mathrm{Co}^{2+} \right]$
$Co_3BO_5^*$ [29]	2	$1.3 \pm 0.3 \cdot 10^{-3}$	$4.0 \pm 0.1$	$11 \pm 2$	$5.7 \pm 0.1$	4.0
$Co_{5/3}Nb_{1/3}BO_5$ [30]	1.67	$1.6 \pm 0.2 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \pm 0.1$	$-8.9 \pm 2.4$	$5.5 \pm 0.1$	4.3
$Co_3B_2O_6$ [31]	3	$1.8 \pm 0.9 \cdot 10^{-3}$	$7.8 \pm 0.5$	$-60.4 \pm 8.3$	$7.9 \pm 0.2$	4.6
$\text{Co}_2\text{B}_2\text{O}_5^{**}$	2	$1.5 \pm 0.3 \cdot 10^{-3}$	$6.0 \pm 0.1$	$27.9 \pm 1.6$	$6.9 \pm 0.1$	4.9

Таблица 1. Магнитные параметры кобальтовых боратов, определенные из подгонки высокотемпературной восприимчивости

<sup>\*\*</sup>Данная работа.

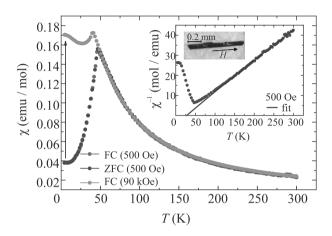


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости магнитной восприимчивости монокристалла  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$ , измеренные в магнитных полях 500 9 и  $90\,\mathrm{k}$  9. Стрелка показывает возрастание магнитного момента в сильном магнитном поле. На вставке показана зависимость обратной магнитной восприимчивости от температуры в поле 500 9 (символы) и обработка по закону Кюри–Вейсса (1) (сплошная линия). Фото монокристалла пиробората  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$ . Направление внешнего магнитного поля показано стрелкой

= 9.2785(12) Å,  $\alpha$  =  $104.240(5)^{\circ}$ ,  $\beta$  =  $90.841(14)^{\circ}$ ,  $\gamma$  =  $92.064(16)^{\circ}$ , V = 175.10(5) Å<sup>3</sup> находятся в хорошем согласии с ранее опубликованными данными [19, 23, 24].

На рисунке 2 приведены температурные зависимости магнитной восприимчивости  $\chi(T)=M/H$ , измеренные в магнитных полях 500 Э и 90 кЭ. Видно, что FC и ZFC кривые накладываются друг на друга во всем температурном интервале, показывая четкий максимум вблизи  $T_N=46\,\mathrm{K}$ . Найденная температура антиферромагнитного перехода близка к доложенной в работе [19]. Ниже температуры перехода намагниченность быстро уменьшается, приближаясь к значению, наблюдаемому при комнатной температуре. Подобное поведение присуще антиферромагнетику в случае, когда внешнее поле направлено вдоль оси антиферромагнетизма  $(\chi_{\parallel})$ . Магнитная восприимчивость  $\chi_{\parallel}$  (4.2 K) = 0.04 Гс см<sup>3</sup>/моль для монокри-

сталла в два раза меньше  $\chi_{
m poly}$ , найденной в поликристаллическом образце [19], что свидетельствует о наличии магнитной анизотропии в исследуемом пироборате. В сильном магнитном поле (90 кЭ) аномалия, связанная с магнитным переходом, попрежнему хорошо определена, но смещена в низкие температуры  $\sim 40 \, \mathrm{K}$ . При переходе через  $T_N$  восприимчивость слегка уменьшается и затем медленно растет ниже  $T = 25 \, \text{K}$ . Такое поведение  $\chi(T)$  отражает сильно нелинейную зависимость магнитного момента от поля. Резкое различие в поведении кривых  $\chi(T)$  в магнито-упорядоченной фазе, измеренных в сильном и слабом полях, типично для антиферромагнетика, испытывающего спин-переориентационный переход. Таким образом, в магнитном поле 90 кЭ восприимчивость характерна для спин-флоп фазы  $(\chi_{\perp})$ , когда вектор антиферромагнетизма ориентируется перпендикулярно внешнему полю.

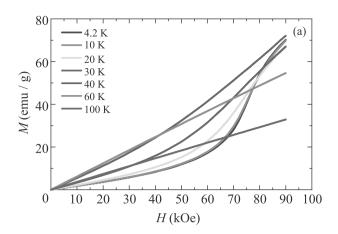
Применив подход, который ранее был использован для анализа магнитной восприимчивости кобальтовых оксиборатов [29–31], мы обработали температурную зависимость магнитной восприимчивости  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$  модифицированным законом КюриВейсса:

$$\chi(T) = \chi_0 + \frac{C}{T - \theta},\tag{1}$$

где  $\chi_0$  – температурно-независимый терм, C – постоянная Кюри–Вейсса,  $\theta$  – парамагнитная температура Кюри. Обработка в интервале 150–300 К дает удовлетворительный результат с параметрами, приведенными в табл. 1. Величина магнитного момента, приходящегося на один ион  $\mathrm{Co}^{2+}$ , равная 4.9  $\mu_B$ , предполагает высокоспиновое состояние с небольшим орбитальным вкладом и хорошо согласуется с экспериментально обнаруженными значениями для иона  $\mathrm{Co}^{2+}$  (S=3/2) в октаэдрическом окружении [29–34].

Признаки спин-флоп перехода четко обнаруживаются на полевых зависимостях намагниченности (рис. 3а). В полях ниже  $30 \, \mathrm{k}$  Э имеет место линейный вклад. Вблизи  $H_{sf} = 75 \, \mathrm{k}$  Э намагниченность испытывает скачок и далее, выше  $80 \, \mathrm{k}$  Э, более медленный рост. Наблюдаемое магнитное поведение указы-

 $<sup>^*</sup>$ Предполагается, что ионы  $\mathrm{Co}^{3+}$  находятся в низко-спиновом состоянии (S=0) и не дают вклада в магнитный момент.



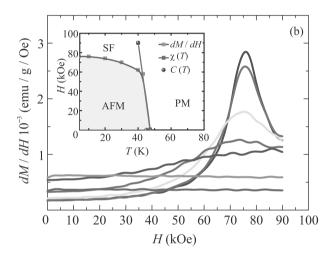


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) — Изотермы намагниченности монокристалла  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$ , измеренные в интервале  $4.2\text{--}100\,\mathrm{K}$ . (b) — Полевая зависимость первой производной  $\partial M/\partial H$ . На вставке: фазовая диаграмма  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$ . Границы фазы определены из данных магнитной восприимчивости  $\chi(T)$ , производной  $\partial M/\partial H(H)$  и теплоемкости C(T). AFM, SF и PM — антиферромагнитная, спин-флоп и парамагнитная фазы, соответственно

вает на процесс переориентации магнитных моментов ионов  $\mathrm{Co^{2+}}$  и переход типа спин-флоп. На производной  $\partial M/\partial H$  данный переход проявляется в виде интенсивного максимума при  $H_{sf}$  (рис. 3b). Измерения обратного хода не выявили гистерезис во всем интервале полей. Спин-флоп переход в  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$  значительно растянут по полю по сравнению с  $\mathrm{Mn_2B_2O_5}$  и в полях  $\sim 90$  к $\ni$  процесс спиновой переориентации еще не завершен. С ростом температуры аномалия, связанная со спин-флоп переходом, размывается и смещается в область малых полей (вставка к рис. 3b).

Температурная зависимость молярной теплоемкости  $\mathrm{Co}_2\mathrm{B}_2\mathrm{O}_5$  приведена на рис. 4. Основной осо-

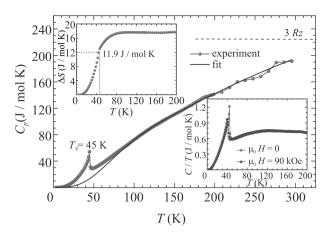


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурная зависимость молярной теплоемкости  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$  (символы), измеренная в нулевом магнитноим поле. Сплошная линия — фононный вклад, расчитанный в приближении Дебая—Эйнштейна. Верхняя вставка — энтропия как функция температуры. Пунктиром показана энтропия, выделяющаяся при магнитном переходе,  $\Delta S_m(T_{N1})$ . Нижняя вставка показывает смещение магнитной аномалии во внешнем магнитном поле

бенностью, наблюдаемой в  $C_p(T)$  при  $\mu_0 H = 0$ , является аномалия  $\lambda$ -типа при  $T_N = 45 \,\mathrm{K}$ , указывающая на фазовый переход второго рода. В магнитном поле λ-аномалия размывается и смещается в сторону более низких температур, так что сингулярность при фазовом переходе идентифицируется при 40 К для  $\mu_0 H = 90 \,\mathrm{k} \Theta$  (нижняя вставка к рис. 4). При комнатной температуре удельная теплоемкость  $C_p$  не достигает термодинамического предела решеточного вклада в энтропию  $3Rz = 224.37 \, \text{Дж/моль K}$ , где R – универсальная газовая постоянная, а z- количество атомов на формульную единицу. Для оценки аномального вклада в теплоемкость фононный вклад  $C_{\mathrm{latt}}$  был обработан, используя приближение Дебая– Эйнштейна. В обработку были включены интервалы температур вдали от области аномалии. Полученная температура Дебая  $\Theta_D = 428 \pm 20 \, \mathrm{K}$  находится в хорошем согласии с величинами, найденными для других родственных боратов: 493 K (Co<sub>3</sub>BO<sub>5</sub> [29]), 356 K  $(Co_{1.67}Nb_{0.33}BO_4 [30]), 299 K (Mn_2BO_4 [9]), 360 K$  $(V_2BO_4 [10]).$ 

Обсуждение. В работе [22], была проведена оценка энергий обменных взаимодействий  $|J|=1.85\cdot 10^{-16}\,\mathrm{эрr/ион}$  и магнито-кристаллической анизотропии  $D=2.15\cdot 10^{-17}\,\mathrm{эрr/ион}$  для пиробората  $\mathrm{Mn_2B_2O_5}$ . Подобные оценки для  $\mathrm{Co_2B_2O_5}$  дают значения  $|J|=8.28\cdot 10^{-16}\,\mathrm{эрr/ион}$  и  $D=4.33\cdot 10^{-17}\,\mathrm{эрr/ион}$ . Таким образом, при замене иона  $\mathrm{Mn^{2+}}$  ионом  $\mathrm{Co^{2+}}$  происходит усиление как об-

менных, так и анизотропных взаимодействий. Это согласуется с увеличением температуры магнитного перехода в  $Co_2B_2O_5$  по сравнению с  $Mn_2B_2O_5$ . Усиление магнито-кристаллической анизотропии в Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> является ожидаемым, поскольку одноионная анизотропия иона Co<sup>2+</sup> значительно больше, чем  ${\rm Mn^{2+}}$ . Для иона  ${\rm Mn^{2+}}$  с электронной конфигурацией  $3d^5$  угловой момент равен нулю ( $S=5/2,\,L=0$ ) и это приводит к тому, что он обладает малой одноионной анизотропией. В то же время, основное состояние иона Co<sup>2+</sup>, находящегося в искаженном октаэдрическом поле, с учетом спин-орбитального взаимодействия можно описать двумя крамерсовскими дублетами, разделенными примерно  $100 \, \text{cm}^{-1}$ . При высоких температурах система ведет себя как эффективный спин S=3/2 с небольшим орбитальным вкладом, который дает эффективный момент  $\sim 4.9~\mu_B$ . При низких температурах заселяется самый нижний крамерсовский дублет. Орбитальный вклад от ближайшего уровня приводит к большой анизотропии в значении д-фактора, если симметрия кристаллического поля отличается от кубической. Действительно, анализ локальных искажений на металлических узлах Со1 и Со2 в Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> показал, что ионы кобальта находятся в центре сильно искаженных кислородных октаэдров [21, 24].

Аномальная энтропия достигает насыщения при  $100\,\mathrm{K}$  и составляет  $17.6\pm0.2\,\mathrm{Дж/моль}\,\mathrm{K}$  (верхняя вставка к рис. 4). Величина энтропии в точке магнитного перехода  $\Delta S_m(T_N)=11.9\pm0.2\,\mathrm{Дж/моль}\,\mathrm{K}.$  В теории среднего поля величина аномальной энтропии, связанная с установлением дальнего порядка  $n_{\mathrm{Co}^{2+}}=2$  магнитных ионов  $\mathrm{Co}^{2+},$  обладающих спиновым магнитным моментом S, определяется соотношением  $\Delta S_m=n_{\mathrm{Co}^{2+}}\cdot R\cdot \ln{(2S+1)}.$  Экспериментальное значение полной энтропии, приходящейся на один ион равно  $\Delta S_{\mathrm{ion}}/R=0.719,$  которое хорошо согласуется с величиной  $\Delta S_{\mathrm{ion}}/R=\ln{2}=0.692,$  связанной с упорядочением иона  $\mathrm{Co}^{2+},$  основным состоянием которого является крамеросовский дублет (S=1/2).

Обработка экспериментальных данных магнитной восприимчивости без учета параметра  $\chi_0$  приводит к значениям  $\theta=18\pm1\,\mathrm{K}$  и  $C=6.62\pm0.02\,\mathrm{\Gamma c\,cm^3/mol}$  , что соответствует эффективному магнитному моменту  $\mu_{\mathrm{eff}}=5.15~\mu_B/\mathrm{Co^{2+}}$ . Таким образом, магнитные параметры, полученные при измерениях на монокристалле, показывают небольшое увеличение по сравнению с теми, что определены ранее на поликристаллическом образце тем же путем:  $\theta=+7.7\,\mathrm{K}$  и  $\mu_{\mathrm{eff}}=4.96~\mu_B/\mathrm{Co^{2+}}$  [19]. Причиной этого может быть магнитная анизотропиия, прису-

щая данным боратом, которая неизбежно вызывает зависимость магнитных параметров от ориентации внешнего поля относительно осей кристалла [29–31]. Примером такого поведения является кобальтовый людвигит  $Co_3BO_5$ , в котором температура  $\theta$ , найденная при измерениях вдоль трех кристаллографических направлений, отличается как по абсолютной величине, так и по знаку. Положительная величина парамагнитной температуры Кюри, найденная как в наших, так и в предыдущих исследованиях Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> и Fe<sub>2</sub>B<sub>2</sub>O<sub>5</sub> [19, 21] указывает на конкуренцию магнитных взаимодействий разного знака. В литературе можно найти примеры подобного поведения, когда антиферромагнитные материалы обладают положительной величиной  $\theta$ . Например, безводные дибромиды, дихлориды ( $Me^{2+}Br_2$  и  $Me^{2+}Cl_2$ ,  $Me^{2+}=Fe$ , Co [35]), и ильмениты ( $Me^{2+}TiO_3$ ,  $Me^{2+} = Fe$ , Co, Ni [36]), в которых магнитные ионы формируют слои гексагонального типа, разделенные слоями немагнитных атомов (галогенидов или  $Ti^{4+}$ ). Эти соединения испытывают антиферромагнитный переход при низких температурах в структуры, в которых магнитные моменты в металлическом слое связаны ферромагнитно, тогда как между слоями связь антиферромагнитная.

Магнитная структура пироборатов также может быть рассмотрена как чередование магнитных слоев, сформированных двухвалентными ионами, и немагнитных слоев, состоящих из атомов бора (рис. 1). В свою очередь, магнитный слой построен из почти гексагонально упорядоченных магнитных ионов внутри ленты. Дальний магнитный порядок по кристаллу достигается за счет антиферромагнитной связи. Это согласуется с наблюдением λ-типа аномалии в измерениях молярной теплоемкости. В тоже время, небольшая, но положительная величина  $\theta$  отражает наличие ферромагнитных взаимодействий. Высокое значение магнитного момента, наблюдаемое при  $4.2\,\mathrm{K}$  в поле  $90\,\mathrm{k}\Theta\ (\sim 2.76\,\mu_B/\mathrm{ф.ед.})$ , которое составляет почти половину от ожидаемой величины насыщения  $M_s = n_{\text{Co}^{2+}} g S \mu_B$ , предполагает, что энергия внешнего магнитного поля становится соизмеримой с энергией магнитного взаимодействия.

Исследование магнитной структуры пиробората  ${\rm Co_2B_2O_5},$  в том числе с применением методов нейтронной дифракции, требует продолжения.

**Выводы.** Монокристаллы кобальтового пиробората получены методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава. Измерения рентгеновской дифракции показали, что материал кристаллизуется в триклинной симметрии  $P\overline{1}$ . Параметры решетки близки к ранее доложенным в литературе. Изме-

рения статической намагниченности и теплоемкости, проведенные в интервале температур 4.2–300 К и в магнитных полях до 90 кЭ, обнаружили, что Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> испытывает переход в антиферромагнитное состояние при  $T_N = 45 \, \mathrm{K}$ . Величина эффективного магнитного момента  $4.9\,\mu_B$  предполагает высокоспиновое состояние ионов Со<sup>2+</sup>. Образец испытывает спин-флоп переход в полях  $H_{sf}(4.2 \,\mathrm{K}) = 75 \,\mathrm{k}$ Э. Анализ магнитных параметров показал, что значительное смещение спин-флоп перехода в Со<sub>2</sub>В<sub>2</sub>О<sub>5</sub> по сравнению с Mn<sub>2</sub>B<sub>2</sub>O<sub>5</sub> происходит вследствие усиления обменных взаимодействий и магнитокристаллической анизотропии. Переход в антиферромагнитное состояние является хорошо-определенным фазовым переходом и проявляется на кривой молярной теплоемкости  $C_p(T)$  в виде  $\lambda$ -аномалии при  $T_N$ . Температура Дебая, определенная в приближении Дебая-Эйнштейна, равна  $\Theta_D = 428 \pm 20 \text{ K}.$ 

Авторы благодарят М.В.Горева за помощь в обсуждении экспериментальных данных теплоемкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований ( РФФИ, # 20-02-00559).

- H. F. J. Glass, Z. Liu, P. M. Bayley, E. Suard, S. H. Bo, P. G. Khalifah, C. P. Grey, and S. E. Dutton, Chem. Mat. 29(7), 3118 (2017).
- H. Chen, B.B. Xu, Q.S. Ping, B.Z. Wu, X.K. Wu, Q.Q. Zhuang, H.L. Wang, and B.F. Wang, Rare Met. 39(9), 1045 (2020).
- V. Pralong, B. Le Roux, S. Malo, A. Guesdon, F. Lainé, J. F. Colin, and C. Martin, J. Solid State Chem. 255, 167 (2017).
- 4. V. A. Sarkisyan, I. A. Troyan, I. S. Lyubutin, A. G. Gavrilyuk, and A. F. Kashuba, JETP Lett. **76**, 664 (2002).
- V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins, G. Nisbet, G. Beutier, Y. O. Kvashnin, V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, Nat. Phys. 10, 202 (2014).
- Н. И. Снегирев, И. С. Любутин, С. В. Ягупов, А. Г. Куликов, В. В. Артемов, Ю. А. Могиленец, М. Б. Стругацкий, Письма в ЖЭТФ 112, 374 (2020).
- J. P. Attfield, A. M. T. Bell, L. M. Rodriguez-Martinez, J. M. Greneche, R. J. Cernik, J. F. Clarke, and D. A. Perkins, Nature 396, 655 (1998).
- 8. R. Norrestam, M. Kritikos, and A. Sjödin, J. Solid State Chem. **114**, 311 (1995).
- 9. N.V. Kazak. M.S. Platunov, Y. V. Knyazev. N. B. Ivanova, O. A. Bayukov, A.D. Vasiliev, L.N. Bezmaternykh, V.I. Nizhankovskii, S. Yu. Gavrilkin, K.V. Lamonova,

- S. G. Ovchinnikov, J. Magn. Magn. Mater. **393**, 316 (2015).
- E. M. Carnicom, K. Górnicka, T. Klimczuk, and R. J. Cava, J. Solid State Chem. 265, 319 (2018).
- 11. P. Bordet and E. Suard, Phys. Rev. B 79, 144408 (2009).
- J. Bartolomé, A. Arauzo, N. V. Kazak, N. B. Ivanova, S. G. Ovchinnikov, Yu. V. Knyazev, and I. S. Lyubutin, Phys. Rev. B 83, 144426 (2011).
- M. S. Platunov, S. G. Ovchinnikov, N. V. Kazak, N. B. Ivanova, V. N. Zabluda, E. Weschke, E. Schierle, and K. V. Lamonova, JETP Lett. 96, 650 (2012).
- C. W. Galdino, D. C. Freitas, C. P. C. Medrano,
   R. Tartaglia, D. Rigitano, J. F. Oliveira,
   A. A. Mendonça, L. Ghivelder, M. A. Continentino,
   D. R. Sanchez, and E. Granado, Phys. Rev. B 100,
   165138 (2019).
- А. К. Звездин, С. С. Кротов, А. М. Кадомцева, Г. П. Воробьев, Ю. Ф. Попов, А. П. Пятаков, Л. Н. Безматерных, Е. Н. Попова, Письма в ЖЭТФ 81, 3350 (2005).
- C. Ritter, A. Vorotynov, A. Pankrats, G. Petrakovskii,
   V. Temerov, I. Gudim, and R. Szymczak, J. Phys.: Condens. Matter 20, 365209 (2008).
- 17. В. Ю. Иванов, А. М. Кузьменко, А. А. Мухин, Письма в ЖЭТФ **105**, 430 (2017).
- J. C. Fernandes, F. S. Sarrat, R. B. Guimar aes, R. S. Freitas, M. A. Continentino, A. C. Doriguetto, Y. P. Mascarenhas, J. Ellena, E. E. Castellano, J-L. Tholence, J. Dumas, and L. Ghivelder, Phys. Rev. B 67, 104413 (2003).
- T. Kawano, H. Morito, and H. Yamane, Solid State Sciences 12, 1419 (2010).
- 20. S.C. Neumair and H. Huppertz, Z. Naturforsch.  $\bf 64b$  491 (2009).
- T. Kawano, H. Morito, T. Yamada, T. Onuma, Sh. F. Chichibu, and H. Yamane, J. Solid State Chem. 182, 2004 (2009).
- F. S. Sarrat, R. B. Guimar×aes, M. A. Continentino, J. C. Fernandes, A. C. Doriguetto, and J. Ellena, Phys. Rev. B 71, 224413 (2005).
- 23. S. V. Berger, Acta Chem. Scand. 4, 1054 (1950).
- J. L. C. Rowsell, N. J. Taylor, and L. F. Nazar, J. Solid State Chem. 174, 189 (2003).
- A. Utzolino and K. Bluhm, Z. Naturforsch. 51b, 912 (1996).
- S. Busche and K. Bluhm, Z. Naturforsch. 50b, 1445 (1995).
- 27. R. D. Shannon, Acta Crystallogr. A 32, 751 (1976).
- 28. L. A. Solovyov, J. Appl. Crystallogr. 37, 743 (2004).
- 29. N.V. Kazak, M.S. Platunov, Yu.V. Knyazev, M.S. Molokeev, M.V. Gorev, S.G. Ovchinnikov, Z.V. Pchelkina, V.V. Gapontsev, S.V. Streltsov, J. BartolomÉ, A. Arauzo, V.V. Yumashev, S.Yu. Gavrilkin, F. Wilhelm, AND A. Rogalev, Phys. Rev. B 103, 094445 (2021).

- N. V. Kazak, N. A. Belskaya, E. M. Moshkina, L. N. Bezmaternykh, A. D. Vasiliev, J. Bartolome, A. Arauzo, D. A. Velikanov, S. Yu. Gavrilkin, M. V. Gorev, G. S. Patrin, and S. G. Ovchinnikov, J. Magn. Magn. Mater. 534, 168056 (2021).
- 31. N. V. Kazak, M. S. Platunov, N. B. Ivanova, Yu. V. Knyazev, L. N. Bezmaternykh, E. V. Eremin, A. D. Vasil'ev, O. A. Bayukov, S. G. Ovchinnikov, D. A. Velikanov, and Ya. V. Zubavichus, JETP. 117, 94 (2013).
- 32. B. Dojer, A. Pevec, F. Belaj, Z. Jagličić, M. Kristl, M. Drofenik, J. Mol. Struct. **1076**, 713 (2014).
- 33. H.-J. Koo, R. K. Kreme, and M.-H. Whangbo, Inorg. Chem. **59**, 18319 (2020).
- 34. Y. M. Oey and R. Cava, Materials Research Bulletin **122**, 110667 (2020).
- 35. M. A. McGuire, Crystals 7, 121 (2017).
- H. Watanabe, H. Yamauchi, and H. Takei, J. Magn. Magn. Mater. 15–18, 549 (1980).

# Нестандартные особенности взаимодействия одиночных люминесцентных центров, сформированных ядрами частичных дислокаций в CdTe и ZnSe, с продольными оптическими фононами<sup>1)</sup>

В. С. Кривобок<sup>2)</sup>, С. Н. Николаев, В. С. Багаев, С. И. Ченцов, Е. Е. Онищенко, А. А. Пручкина Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 мая 2021 г. После переработки 22 июня 2021 г. Принята к публикации 23 июня 2021 г.

С помощью измерений низкотемпературной (5 K) микрофотолюминесценции исследованы отдельные люминесцентные центры, формируемые ядрами частичных дислокаций в пленке CdTe/Si и квантовой яме на основе ZnSe. Показано, что для данных центров характерно заметное взаимодействие с продольными оптическими (LO) фононами, квазиимпульс которых соответствует центру зоны Бриллюэна. В то же время относительные интенсивности LO- и 2LO-фононных повторений на порядок отличаются от величин, предсказываемых формулой Хуанга–Рис, которая описывает интенсивности многофононных LO-повторений для примесных люминесцентных центров. Нестандартное распределение интенсивности фононных повторений приписано изменению кривизны адиабатических потенциалов (дефект частоты), которое возникает за счет неустойчивости структуры связей в дислокационном ядре по отношению к состоянию электронной подсистемы.

DOI: 10.31857/S1234567821140081

1. Введение. Хорошо известно, что в полярных полупроводниках сильное взаимодействие электронной подсистемы люминесцентных центров с продольными оптическими (LO) фононами приводит к появлению в спектрах излучения (поглощения) эквидистантных полос, относительная интенсивность которых описывается формулой, впервые полученной Хуангом и Рис [1]:

$$I_n = \exp(-S)\frac{S^n}{n!},\tag{1}$$

где n — номер фононного повторения, S — фактор Хуанга—Рис. Характерными примерами являются, в частности, различные каналы излучательной рекомбинации, формируемые точечными дефектами при низких температурах — связанные экситоны, донорно-акцепторные пары, изоэлектронные центры и др., см. рис. 1.

Универсальность (1) при описании люминесцентных центров, имеющих разную природу, определяется тем, что данное выражение является следствием принципа Франка–Кондона, примененного к системе, в которой равновесная атомная конфигурация зависит от электронного состояния, см. упрощенную конфигурационную диаграмму на рис. 1с. В рамках

приведенной на рис. 1с иллюстративной модели матричный элемент перехода пропорционален скалярному произведению сдвинутых друг относительно друга волновых функций двух гармонических осцилляторов. Простые вычисления этого скалярного произведения при условии, что начальное состояние соответствует основному колебательному подуровню n = 0, а кривизна адиабатического потенциала не меняется в процессе перехода ( $\beta = \beta_1 = \beta_2$ ), приводят к формуле (1) с фактором Хуанга—Рис  $S = \frac{a^2 \beta}{2\hbar \omega}$ где а описывает относительный сдвиг минимумов на конфигурационной диаграмме, а  $\hbar\omega$  – энергия фонона. Используя строгий формализм, выражение (1) можно получить для общего случая, если доминирует фрелиховский механизм электрон-фононного взаимодействия [2-5].

В то же время, по крайней мере, для некоторых люминесцентных центров, электронный переход сопровождается изменением кривизны адиабатических потенциалов, см. например, [6]. Данное явление обычно упоминается как "дефект частоты", так как разная кривизна неизбежно приводит к отличию фононных частот в начальном и конечном (электронных) состояниях. Подобная ситуация, характерная для некоторых центров окраски в алмазах [7–9], реализуется в случае, если жесткость/структура связей чувствительна к состоянию электронной подсистемы. Следует отметить, что в современной литературе

 $<sup>^{1)}</sup>$ См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup>e-mail: kolob7040@gmail.com

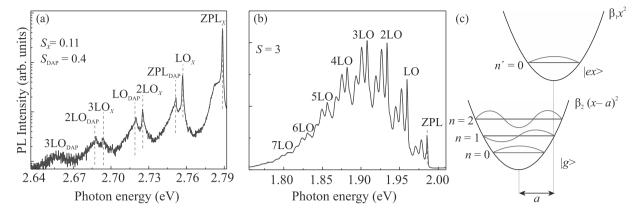


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a), (b) – Примеры типичных спектров низкотемпературной (5 K) фотолюминесценции для центров с различными значениями фактора Хуанга–Рис (S):  $S \sim 0.11$  (экситонно-примесные комплексы в ZnSe, X),  $S \sim 0.4$  (донорно-акцепторные пары ZnSe, DAP),  $S \sim 3$  (примесь кислорода  $O_{Te}$  в ZnTe, (b)). Подробное описание данных спектров приведено в дополнительном материале. (c) – Схема основного и возбужденного состояния в модели Франка–Кондона.  $|g\rangle$  и  $|ex\rangle$  – символизируют основное и возбужденное состояние электронной подсистемы, соответственно

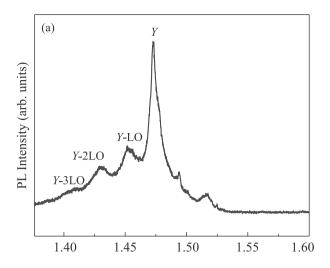
известны теоретические работы, которые рассматривают либо явления, связанные с дефектом частоты, либо явления, связанные со сдвигом на конфигурационной диаграмме [10, 11]. В то же время, насколько нам известно, последовательный теоретический анализ свойств люминесцентных центров учитывающий и частотный дефект, и относительный сдвиг минимумов, до настоящего времени не проводился. Очевидно, что в этом случае интенсивность фононных LO-повторений не будет описываться выражением (1). Это, в частности, хорошо видно на примере приведенной выше иллюстративной модели: скалярные произведения волновых функций двух гармонических осцилляторов теперь зависят не только от a, но и от отношения  $\beta_1/\beta_2$ , описывающего перестройку адиабатических потенциалов.

В данной работе на основе измерений низкотемпературной (5 К) микрофотолюминесценции (МФЛ) исследованы отдельные (квантовые) излучатели, формируемые ядрами частичных дислокаций в кубических полупроводниках CdTe и ZnSe. Установлено, что для данных люминесцентных центров, несмотря на определяющую роль фрелиховского взаимодействия, относительные интенсивности фононных LO-повторений могут приблизительно на порядок отличаться от величин, предсказываемых формулой Хуанга-Рис. Обнаруженные изменения, принципиально отличающие дислокации от точечных дефектов в ZnSe и CdTe, можно описать, если принять во внимание изменение кривизны адиабатических потенциалов. Предпосылки к существованию подобных изменений следуют из недавних ab*initio* расчетов [12], в которых делается вывод о зависимости характера реконструкции связей в дислокационном ядре от состояния электронной подсистемы.

2. Дислокационная люминесценция в CdTe и ZnSe. В данной работе для исследований дислокационной МФЛ были отобраны образцы пленок теллурида кадмия, выращенных на кремнии (CdTe/Si), и квантовые ямы ZnSe/ZnMgSSe. В случае пленок CdTe/Si рассогласование решеток Si и CdTe приводит к пластической релаксации упругих напряжений и формированию частичных дислокаций [13, 14]. Плотность дислокаций находится на уровне  $10^6 \, \text{cm}^{-2}$ . В случае квантовой ямы ZnSe, несмотря на отсутствие заметных признаков релаксации, возможно образование одиночных протяженных дефектов в барьерных слоях за счет частичной релаксации упругих напряжений сжатия  $\varepsilon \sim 3.3 \cdot 10^{-3}$ . Эти дефекты представляют собой полупетли или частичные дислокации, скользящие с поверхности структуры вглубь и пересекающие квантовые ямы. Подробное описание образцов приведено в дополнительном материале. Считается, что среди прочих протяженных дефектов в соединениях  $A_2B_6$  основной вклад в люминесценцию дают 90° частичные дислокации [15-17]. Для измерений фотолюминесценции пленка помещалась в гелиевый криостат. В случае CdTe/Si поверхность образца возбуждалась непрерывным лазерным излучением ( $\lambda = 532\,\mathrm{HM}$ , стабильность мощности < 2%). Диаметр пятна возбуждения на образце составлял ~ 1 мм. При исследовании квантовой ямы ZnSe/ZnMgSSe использовалось лазерное излучение с длиной волны 405 нм. С помощью собирающей линзы излучение люминесценции фокусировалось на входную щель решеточного монохроматора, оснашенного ПЗС матрицей [14]. Однако при "макроскопических" измерениях вклад в люминесценцию дает ансамбль протяженных дефектов, и на увеличение интегральной интенсивности могут влиять различные факторы, такие как влияние других излучательных процессов или взаимодействие с фононами, отличными от продольных оптических. Соответственно, для анализа особенностей электрон-фононного взаимодействия более информативным является исследование люминесценции отдельных излучателей. В данной работе это было реализовано с помощью измерений МФЛ, при которых образец жестко крепился на микровставку с микрообъективом и помещался в криостат. Остальные детали эксперимента были аналогичны процессу измерения фотолюминесценции. Высокое, порядка 1 мкм, пространственное разрешение реализовывалось за счет совмещения увеличенного изображения поверхности образца с плоскостью ПЗС матрицы [14]. Спектральное разрешение было не хуже 0.1 мэВ.

Спектр люминесценции пленки CdTe/Si приведен на рис. 2a. В спектре пленки CdTe/Si доминирует бесфононная линия, связанная с дислокационным излучением (Ү, 1.47 эВ), и серия ее фононных LOповторений [14, 15, 17]. Интегральная интенсивность бесфононной линии примерно на порядок превышает интегральную интенсивность первого фононного повторения (Y-LO), что является типичным случаем для дислокационного излучения CdTe, отвечающего  $S \sim 0.1$  [18]. В то же время, интегральная интенсивность второго фононного повторения (Y-2LO)сопоставима с интегральной интенсивностью Y-LO. Таким образом, в приведенном примере относительные интенсивности бесфононной люминесценции LOи 2LO-фононных повторений не описываются выражением (1). Как будет показано ниже, данная особенность наблюдается и для отдельных люминесцентных соответствующих У линии. Мы связываем данную особенность с изменением кривизны адиабатических потенциалов в процессе оптического перехода.

Следует отметить, что интенсивность одиночных излучателей, связанных с ядрами частичных дислокаций в CdTe/Si, сильно зависит от поляризации света, что позволяет их уверенно выделять на фоне неполяризованного сигнала люминесценции [14, 19, 17]. Максимальная интенсивность МФЛ  $I_{\rm max}$  достигается, если плоскость линейной поляризации, задаваемая вектором  ${\bf E}$  и оптической осью, содержит направление распространения ( ${\bf D}$ ) 90° частич-



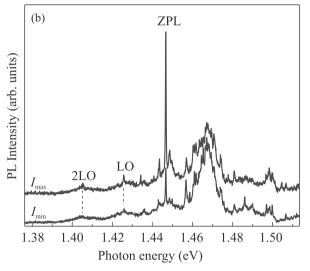
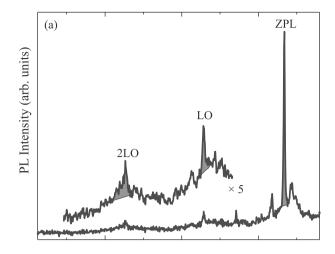


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) — Спектр фотолюминесценции пленки CdTe/Si, содержащей дислокации, записанный при температуре 5 К. (b) — Пример спектра МФЛ отдельного люминесцентного центра, сформированного частичной дислокацией, записанный для двух разных поляризаций. ZPL — обозначает бесфононную линию. Температура 5 К

ной дислокации. Минимальная интенсивность  $I_{\min}$  соответствует ситуации, когда проекция вектора  ${\bf D}$  на плоскость, задаваемую  ${\bf E}$  и оптической осью, минимальна.

На рисунке 2b приведен типичный спектр МФЛ для области дислокационного излучения в двух перпендикулярных поляризациях света. В спектре МФЛ видна узкая бесфононная линия (ZPL,  $1.447\,\mathrm{9B}$ ), соответствующая коротковолновому хвосту Y линии на рис. 2a. Данная линия, быстро гаснущая с температурой (см. допополнительные материалы), представляет собой люминесценцию одиночного цен-



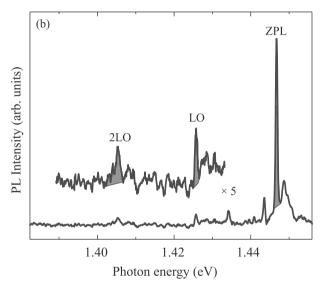


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) — Пример отдельного люминесцентного центра, сформированного частичной дислокацией в пленке CdTe/Si. (b) — Результат вычитания двух спектров на рис. 2b, в котором подавлен неполяризованный люминесцентный фон. ZPL — обозначает бесфононную линию. Температура  $5\,\mathrm{K}$ 

тра, сформированного ядром частичной дислокации. Также регистрируются фононные повторения, соответствующие возбуждению одного (LO,  $1.426\,\mathrm{sB}$ ) и двух (2LO,  $1.405\,\mathrm{sB}$ ) оптических фононов. Соответствующий фрагмент спектра более подробно приведен на рис. За. Энергетические сдвиги между линиями воспроизводят энергию LO фонона CdTe, соответствующего центру зоны Бриллюэна (21 мэВ). Таким образом, заметный вклад других типов фононов исключен. Значение S для одиночного люминесцентного центра, рассчитанное как соотношение соответствующих площадей (см. рис. За), составило  $0.072\,\pm\,0.007$ . В свою очередь, согласно модели Хуанга—

Рис, это означает, что соотношение интегральных интенсивностей между вторым и первым фононным повторением должно быть  $S/2=0.036\pm0.004$ . В то же время, соотношение интенсивностей, измеренное экспериментально, составляет  $0.72\pm0.07$  и, таким образом, более чем на порядок превышает значение, ожидаемое из формулы (1).

Чтобы по возможности устранить вклад фонового сигнала люминесценции, относительные интенсивности фононных повторений были также оценены другим способом. Для этого вклад фонового сигнала МФЛ убирался путем вычитания спектра, соответствующего продольной поляризации  $(I_{\text{max}})$ , из спектра, соответствующего поперечной  $(I_{\min})$ . Результат представлен на рис. 3b. Таким образом, было получено значение  $S=0.067\pm0.007$ . Соотношение интенсивностей LO и 2LO фононных повторений составило  $0.61 \pm 0.06$ . Небольшое отличие от оцененного выше значения  $0.72 \pm 0.07$  может быть связано с влиянием фонового сигнала МФЛ и с изменением степени поляризации для фононных повторений. Тем не менее, отклонения от формулы (1) для описанного люминесцентного центра находятся далеко за пределами данной ошибки. Отклонения от формулы (1), при которых заметно возрастает интенсивность именно 2LO-фононного повторения, мы наблюдали и для других одиночных люминесцентных центров, связанных с дислокациями в CdTe/Si, см. дополнительный материал.

Качественно аналогичная ситуация наблюдается и в случае дислокационной МФЛ ZnSe при температуре 5 К. На рис. 4 приведен типичный спектр излучения отдельной (частичной) дислокации, пересекающей ZnSe квантовую яму, размещенную внутри ZnMgSSe барьеров [20]. В спектре доминирует интенсивная бесфононная линия, соответствующая одиночному люминесцентному центру (ZPL, 2.677 эВ), а также фононные LO-  $(2.645\,\mathrm{9B})$  и 2LO-  $(2.616\,\mathrm{9B})$ повторения. Энергетический сдвиг между линиями  $\sim 31\,{\rm MpB}$  типичен для LO фононов в ZnSe с квазиимпульсом вблизи центра зоны Бриллюэна. При сравнении интегральных интенсивностей фононных повторений оказывается, что значение S, рассчитанное как соотношение площади ZPL линии к площади LO линии (см. рис. 4), составляет  $0.061 \pm 0.002$ . В свою очередь, согласно модели Хуанга-Рис, это означает, что соотношение интенсивностей между вторым и первым фононным повторением должно быть  $S/2 = 0.031 \pm 0.001$ . В то же время, соотношение интенсивностей, измеренное экспериментально, составляет  $0.58\pm0.05$ , что на порядок превышает значение, ожидаемое из формулы (1).

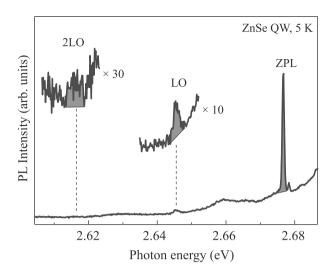


Рис. 4. (Цветной онлайн) Пример отдельного люминесцентного центра, сформированного дислокацией в квантовой яме (QW) на основе ZnSe. ZPL – обозначает бесфононную линию. Температура  $5\,\mathrm{K}$ 

Следует отметить, что с увеличением n линии фононных повторений демонстрируют уширение, см. рис. 4. Тем не менее, величина этого уширения приблизительно соответствует типичным временам жизни LO фононов за счет их ангармонического распада. Поэтому данный эффект не влияет на выводы, сделанные выше.

Таким образом, из представленных экспериментальных данных следует, что для отдельных люминесцентных центров, формируемых ядрами частичных дислокаций в CdTe и ZnSe, наблюдается качественное отличие от формулы Хуанга-Рис, несмотря на доминирующую роль фрелиховского электронфононного взаимодействия.

3. Обсуждение результатов. Исходя из доступных ab-initio расчетов следует, что в СdТе реконструкция связей в ядре частичной дислокации зависит от состояния электронной подсистемы [12] (для ZnSe аналогичные расчеты, насколько нам известно, отсутствуют). Поскольку состояние электронной подсистемы меняется в процессе перехода, можно предположить, что переход в дислокационном ядре сопровождается частичной перестройкой оборванных связей и, следовательно, напряжений в ближайшей окрестности дислокации. В этом случае, адиабатические потенциалы должны иметь разную кривизну, а интенсивность LO-фононных повторений – демонстрировать качественное отклонение от формулы Хуанга-Рис.

Отличия можно наглядно продемонстрировать, используя рассмотренную выше иллюстративную

модель. За счет ее простоты несложно получить относительные интенсивности бесфононного перехода и фононных LO-повторений в случае если  $\beta_1 \neq \beta_2$ . Интенсивности по прежнему будут определяться скалярными произведениями волновых функций двух гармонических осцилляторов, которые теперь зависят не только от параметра a, но и от соотношения кривизны потенциалов  $\gamma = \sqrt{\beta_1/\beta_2}$ . Результаты расчетов соответствующих скалярных произведений приведены в дополнительном материале. Из этих расчетов следует, что если соотношение между интенсивностью первого фононного повторения и бесфононной линией  $I_1/I_0 = S$ , то соотношение интенсивностей между вторым и первым фононным повторением описывается выражением:

$$\frac{I_2}{I_1} = \left(\frac{S}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1-\gamma}{1+\gamma}\right)^2 / S = 
= \frac{S}{2} + \frac{1-\gamma}{1+\gamma} + \frac{1}{2S} \left(\frac{1-\gamma}{1+\gamma}\right)^2.$$
(2)

Из (2) следует, что в системах с малым S, к которым за счет протяженного характера излучающих состояний относятся дислокации [18], при  $\gamma \neq 1$   $I_2/I_1$  существенно отличается от значения S/2, предсказываемого выражением (1). Кроме того, в пределе  $S \ll \left| \frac{1-\gamma}{1+\gamma} \right|$ 

$$\frac{I_2}{I_0} \to \frac{1}{2} \left( \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \right)^2. \tag{3}$$

Таким образом интенсивность второго фононного повторения оказывается вовсе не зависящей от S. В свою очередь, для соотношения интенсивностей третьего и второго фононного повторений можно получить следующее выражение:

$$\frac{I_3}{I_2} = \frac{S}{3} \left( S + 3 \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \right)^2 / \left( S + \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \right)^2. \tag{4}$$

В знаменателе (4) параметр S фигурирует с отличной от нуля добавкой. Поэтому в пределе малых S соотношение  $I_3/I_2 \to 3S$ .

Приведенные выше качественные рассуждения демонстрируют, что в системах с малым значением S действительно возможно аномальное возрастание относительной интенсивности 2LO-фононных повторений (по отношению к интенсивностям LO- и 3LO-) при наличии даже сравнительно небольшого дефекта частоты. По-видимому, именно такая ситуация реализуется в спектрах дислокационной МФЛ, приведенных на рис. 3, 4. В свою очередь, основной причиной заметного изменения кривизны адиабатических

потенциалов, приводящих к дефекту частоты, может быть перестройка оборванных связей в ядрах частичных дислокаций [12].

В целом, полученные результаты создают предпосылки для метода оценки изменения жесткости связей в процессе излучательного перехода, который не требует измерений спектров поглощения/возбуждения люминесценции или риментов с изотопически чистыми материалами [7–9]. Метод состоит в анализе относительных интенсивностей бесфононной полосы, LO- и 2LOфононных повторений, чувствительность которых к локальному изменению жесткости связей вытекает из качественных соображений в рамках принципа Франка-Кондона. Признаком изменения жесткости связей являются заметные отклонения от значений, предсказываемых формулой Хуанга-Рис. Следует отметить, что альтернативной причиной отклонений также могут быть поправки, связанные с ангармонизмом. Для реализации описанного выше подхода необходим последовательный теоретический анализ, учитывающий и дефект частоты, и относительный сдвиг минимумов на конфигурационной диаграмме.

Таким образом, при гелиевых температурах получены спектры излучения отдельных люминесцентных центров, сформированных ядрами частичных дислокаций в CdTe и ZnSe. Показано, что для данных центров характерно заметное взаимодействие с продольными оптическими фононами, приблизительно соответствующими центру зоны Бриллюэна. В то же время, в отличие от точечных дефектов, для люминесцентных центров, сформированных дислокациями, распределение интенсивности между бесфононным переходом и повторениями с участием продольных оптических фононов не описывается формулой Хуанга-Рис. В частности, наблюдается резкое увеличение относительной интенсивности полосы, соответствующей испусканию двух продольных оптических фононов. Обнаруженное увеличение интенсивности приписано изменению кривизны адиабатических потенциалов (дефекту частоты), который возможен за счет неустойчивости структуры связей в дислокационном ядре по отношению к состоянию электронной подсистемы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант #19–32–90176, раздел 2 и Грант #19–02–00952, раздел 3).

Авторы благодарны М.В.Кондрину за плодотворное обсуждение полученных результатов.

- K. Huang and A. Rhys, Proc. R. Soc. London A 204, 406 (1950).
- 2. J. J. Markham, Rev. Mod. Phys. 31(4), 956 (1959).
- 3. K. Huang, Contemp. Phys. **22**(6), 599 (1981).
- A. Alkauskas, M. D. McCluskey, C. G. van de Walle, J. Appl. Phys. 119, 181101 (2016).
- 5. Y. Zhang, J. Semicond. 40(9), 091102 (2019).
- 6. Е.Ф. Шека, УФН **104**(8), 593 (1971).
- E. A. Ekimov, V. S. Krivobok, S. G. Lyapin, P. S. Sherin,
   V. A. Gavva, and M. V. Kondrin, Phys. Rev. B 95(9),
   094113 (2017).
- E. A. Ekimov, P. S. Sherin, V. S. Krivobok, S. G. Lyapin,
   V. A. Gavva, and M. V. Kondrin, Phys. Rev. B 97(4),
   045206 (2018).
- 9. E. A. Ekimov, S. G. Lyapin, K. N. Boldyrev, M. V. Kondrin, R. Khmelnitskiy, V. A. Gavva, T. V. Kotereva, M. N. Popova, Письма в ЖЭТФ **102**(11), 811 (2015).
- 10. T. H. Keil, Phys. Rev. 140(2A), 601 (1965).
- M. de Jong, L. Seijo, A. Meijerink, and F. T. Rabouw, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 16959 (2015).
- K. E. Kweon, D. Aberg, and V. Lordi, Phys. Rev. B 93, 174109 (2016).
- Yu. Sidorov, I. Loshkarev, I. Sabinina, E. Trukhanov, V. Varavin, M. Yakushev, and A. Kolesnikov, Phys. Status Solidi C 13, 425 (2016).
- V. S. Krivobok, S. I. Chentsov, S. N. Nikolaev,
   M. A. Chernopitssky, E. E. Onishchenko,
   A. A. Pruchkina, V. P. Martovitskiy, V. S. Bagaev,
   D. G. Ikusov, D. V. Marin, N. N. Mikhailov, and
   M. V. Yakushev, Appl. Phys. Lett. 115, 232102 (2019).
- U. Hilpert, J. Schreiber, L. Worschech, L. Horing, M. Ramsteiner, W. Ossau, and G. Landwehr, J. Phys.: Condens. Matter 12, 10169 (2000).
- S. Hildebrandt, H. Uniewski, J. Schreiber, and H. Leipner, J. Phys. III 7, 1505 (1997).
- M. Kutrowski, T. Wojtowicz, G. Cywinski, L. V. Titova,
   E. Martin, X. Liu, J. K. Furdyna, and M. Dobrowolska,
   J. Appl. Phys. 97, 013519 (2005).
- 18. P. J. Dean, Phys. Status Solidi A 81, 625 (1984).
- C. Li, J. Poplawsky, Y. Wu, A.R. Lupini, A. Mouti,
   D. N. Leonard, N. Paudel, K. Jones, W. Yin, M. Al-Jassim, Y. Yan, and S. J. Pennycook, Ultramicroscopy
   134, 113 (2013).
- В. С. Кривобок, С. Н. Николаев, С. И. Ченцов, Е. Е. Онищенко, В. С. Багаев, В. И. Козловский, С. В. Сорокин, И. В. Седова, С. В. Гронин, С. В. Иванов, Письма в ЖЭТФ 104, 107 (2016).

### Метастабильные униполярные структуры упругой деформации

 $C. \, B. \, C$ азонов $^{1)}$ 

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

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

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

Поступила в редакцию 7 июня 2021 г. После переработки 22 июня 2021 г. Принята к публикации 23 июня 2021 г.

Исследована возможность формирования локализованных метастабильных структур упругой деформации в неравновесном парамагнитном кристалле. В предположении, что время наблюдения процесса значительно превышает характерные времена фазовой релаксации квантового перехода между зеемановскими подуровнями, но короче времени энергетической релаксации, для относительной упругой деформации получено новое интегро-дифференциальное уравнение параболического типа. Данное уравнение содержит компенсирующие друг друга нелокальные усиление и нелинейность. Найдено решение выведенного уравнения в виде бегущей с постоянной скоростью униполярной локализованной структуры. Полученное решение содержит непрерывный свободный параметр, в качестве которого выбрана временная длительность. При укорочении временной длительности амплитуда метастабильного образования возрастает, а скорость распространения, близкая к линейной скорости звука, уменьшается. Показано, что после прохождения локализованного сгустка деформации среда не возвращается к исходному состоянию.

DOI: 10.31857/S1234567821140093

1. Введение. В настоящее время бурный подъем испытывают исследования, связанные с диссипативными солитонами оптической природы [1–7]. Диссипативные солитоны формируются в результате взаимной компенсации усиления сигнала и необратимых потерь его энергии. Оптические диссипативные солитоны могут найти приложения в информационных системах [2,8], а также в системах механического воздействия на различные микро- и нанообъекты [9, 10].

Одним из плодотворных путей развития нелинейной физической акустики является поиск различных оптико-акустических аналогий [11–15]. На этом пути, особенно после создания лазеров, удалось выявить немало акустических эффектов - аналогов соответствующих нелинейно-оптических явлений. В значительной степени это касается и солитонной тематики. Обнаружения эффектов, связанных с оптическими солитонами, как правило, сопровождались успешными поисками аналогичных солитонов акустической природы [12, 16]. Использование данного подхода позволило предсказать и обнаружить формирование резонансного ультразвукового солитона самоиндуцированной прозрачности в низкотемпера-

турном кристалле, содержащем парамагнитные ионы [17-19].

Одной из тенденций развития современной нелинейной оптики является поиск эффектов взаимодействия с веществом лазерных импульсов все более коротких длительностей [20]. К настоящему времени в лабораторных условиях созданы лазерные импульсы длительностью до одного периода электромагнитных колебаний. В отечественной научной литературе за такими объектами закрепился термин "предельно короткие импульсы" (ПКИ). В англоязычной литературе расхожим является термин "few-cycle pulses". Понятно, что при теоретическом описании взаимодействия ПКИ с веществом перестает быть справедливым стандартное для квазимонохроматических импульсов приближение медленно меняющихся огибающих [21–25].

В самые последние годы все более настойчиво пробивает себе дорогу оптика униполярных импульсов [26, 27]. Такие сигналы содержат всего половину периода электромагнитных колебаний. Здесь взаимодействие с веществом приобретает новые, порой экзотические, особенности [28].

В соответствии с программой поиска оптикоакустических аналогий вышло немало теоретических работ, посвященных нелинейному взаимодействию

<sup>1)</sup>e-mail: sazonov.sergey@gmail.com

предельно коротких акустических импульсов (включая униполярные упругие импульсы) с веществом [29–35].

Естественным следствием развития оптики предельно коротких и униполярных импульсов явились исследования возможностей формирования униполярных диссипативных солитонов оптической природы [2, 36–38].

Диссипативные солитоны формируются в нелинейных средах, обладающих запасом энергии. Можно сказать, что диссипативные солитоны являются результатом баланса между притоком в сигнал данной запасенной энергии и ее необратимым оттоком. Запасенной энергией обладают, в частности, среды с неравновесными населенностями стационарных квантовых состояний. В таких средах могут формироваться униполярные локализованные импульсы, распространяющиеся с постоянными скоростями [39-41]. Об устойчивости таких импульсов можно рассуждать с некоторой долей условности, так как неустойчивы сами неравновесные среды. По этой причине здесь более уместно говорить не о диссипативных солитонах, а о метастабильных локализованных структурах.

Если идти дальше по пути поиска оптикоакустических аналогий, то следует поставить вопрос о возможности формирования метастабильных униполярных структур упругой деформации в твердых телах. Говорить в этом случае об акустических или ультразвуковых солитонах вряд ли уместно, так как спектр таких сигналов очень широк. В зависимости от временной длительности этот спектр способен простираться от нулевой частоты до частот очень далекого ультразвука (включая гигагерцовые и даже субтерагерцовые частоты) [42].

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию возможности формирования униполярных локализованных структур упругой деформации в неравновесном парамагнитном кристалле.

2. Вывод основного уравнения. Следуя работе [43], будем считать, что импульс продольной упругой деформации распространяется вдоль оси x, параллельной одной из осей четвертого порядка кубического кристалла. Вдоль другой оси z четвертого порядка приложено внешнее магнитное поле  $\mathbf{B}$ , вызывающее зеемановские расщепления квантовых состояний примесных парамагнитных ионов  $\mathbf{c}$  эффективным спином S=1. Известно, что ионы  $\mathbf{c}$  таким спином наиболее эффективно взаимодействуют  $\mathbf{c}$  колебаниями кристалла. Спин-фононное взаимодействие обусловлено механизмом ван-Флека [12]. В этом случае градиенты внутрикристаллического

электрического поля, создаваемые полем упругой деформации, вызывают квадрупольные электрические переходы между зеемановскими подуровнями парамагнитных ионов.

Из-за снятия вырождения по проекции эффективного спина происходит зеемановское расщепление квантового состояния парамагнитного иона на три подуровня с  $S_z = 0, \pm 1$ . В принятой выше геометрии распространения продольного упругого импульса спин-фононные переходы вызываются между подуровнями с  $S_z = \pm 1$ , разделенными частотой расщепления  $\omega_Z = 2g\mu_B B/\hbar$ , где  $\mu_B$  – магнетон Бора, g – фактор Ланде,  $\hbar$  – постоянная Планка. При этом средний подуровень с  $S_z = 0$  остается незадействованным. Таким образом, в данном случае динамика квантового состояния эффективного спина аналогична динамике двухуровневого атома во внешнем поле. Как следствие, соответствующие уравнения для элементов матрицы плотности имеют вид [43]

$$\frac{\partial \rho_{-+}}{\partial t} = \left(i\omega_Z - \frac{1}{T_2}\right)\rho_{-+} - i\Omega w,\tag{1}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -i\Omega \frac{\rho_{-+} - \rho_{-+}^*}{2},\tag{2}$$

где  $w=(\rho_{++}-\rho_{--})/2$ ,  $\rho_{++}$  и  $\rho_{--}$  – вероятности населенностей спиновых подуровней с  $S_z=+1$  и  $S_z=-1$  соответственно,  $\rho_{-+}$  и  $T_2$  – соответственно недиагональный элемент матрицы плотности и время необратимой фазовой релаксации рассматриваемого перехода, акустическая частота Раби  $\Omega$  определяется выражением

$$\Omega = \frac{G\varepsilon}{\hbar},\tag{3}$$

 $\varepsilon$  — безразмерная относительная деформация, создаваемая упругим импульсом, G — постоянная спинфононной связи, измеряемая в единицах энергии.

Как и в работе [43], здесь мы пренебрегли продольной релаксацией, характеризуемой временем  $T_1$ , так как считаем, что время  $\Delta t$  наблюдения исследуемого процесса удовлетворяет условию

$$T_2, T_2^* \ll \Delta t \ll T_1, \tag{4}$$

где  $T_2^*$  – характерное время обратимой фазовой релаксации, обусловленной неоднородным уширением.

Для парамагнитных ионов Fe<sup>+</sup> в кристалле MgO при температурах жидкого гелия  $T_2 \sim 10^{-6} \, \mathrm{c}$ ,  $T_2^* \sim 10^{-8} \, \mathrm{c}$ ,  $T_1 \sim 10^{-3} \, \mathrm{c}$  [17]. Поэтому условию (4) удовлетворяет, например, время наблюдения  $\Delta t \sim 10^{-4} \, \mathrm{c}$ , за которое упругий импульс в твердом теле

104 С. В. Сазонов

проходит расстояние  $l\sim a\Delta t$ , где a — линейная скорость звука в кристалле. Взяв  $a\approx 5\cdot 10^5\,{\rm cm/c}$ , будем иметь  $l\sim 50\,{\rm cm}$ .

Для поля деформации упругого импульса справедливо волновое уравнение [43]

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x} = \frac{G^2 n}{2\hbar \rho} \frac{\partial^2}{\partial x} \int_0^\infty g(\omega_Z) (\rho_{-+} + \rho_{-+}^*) d\omega_Z. \tag{5}$$

Здесь  $\rho$  — плотность кристалла, n — концентрация в нем парамагнитных ионов,  $g(\omega_Z)$  — удовлетворяющий условию нормировки контур неоднородного уширения рассматриваемого квантового перехода:

$$g(\omega_Z) = \frac{g(0)}{1 + T_2^{*2} (\omega_Z - \omega_0)^2},\tag{6}$$

 $\omega_0$  — центральная резонансная частота перехода,  $g(0)=rac{2T_2^*}{\pi+2\arctan(\omega_0T_2^*)}.$  Если центральная частота значительно превос-

Если центральная частота значительно превосходит неоднородную ширину соответствующей спектральной линии ( $\omega_0 T + 2 \gg 1$ ), то  $g(0) = T_2^*/\pi$ . Однако в акустике парамагнитных кристаллов встречаются ситуации, когда неоднородная ширина линии сравнима с центральной частотой.

Исключим из базовой системы (1), (2), (4) материальные переменные. Решая уравнение (1), найдем

$$\rho_{-+} = -i \int_{0}^{\infty} \Omega(x, t - \tau) w(x, t - \tau) e^{-(1/T_2 - i\omega_Z)\tau} d\tau.$$
 (7)

Будем считать, что длительность упругого импульса  $au_p \ll \Delta t$  и при этом удовлетворяет условию

$$\tau_p \gg T_2, \ T_2^*. \tag{4a}$$

При приведенных выше параметрах для ионов  ${
m Fe^{2+}}$  в кристалле MgO неравенству (4a) с хорошей точностью можно удовлетворить, положив  $\tau_p \sim 10^{-5}\,{
m c}$ .

Учитывая (4а), заметим, что экспонента в подынтегральном выражении (7) изменяется со временем значительно быстрее, нежели множитель  $\Omega w$ . В этом случае справедливо разложение

$$\Omega(x, t - \tau)w(x, t - \tau) =$$

$$= \Omega(x, t)w(x, t) - \tau \frac{\partial}{\partial t}(\Omega(x, t)w(x, t)) + \dots$$

Ограничившись здесь выписанными членами разложения, отсюда и из (7) получим

$$\rho_{-+} = -i \left[ \frac{T_2}{1 - i\omega_Z T_2} \Omega w - \frac{T_2^2}{(1 - i\omega_Z T_2)^2} \frac{\partial}{\partial t} (\Omega w) \right]. \tag{8}$$

Благодаря левой части неравенства (4) изменение разности населенностей зеемановских подуровней относительно мало. Поэтому при подстановке (8) в (2) ограничимся только первым слагаемым в квадратных скобках (8). Тогда

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{T_2 \Omega^2}{1 + (\omega_Z T_2)^2} w.$$

Полагая в правой части  $w\approx w_{-\infty}$ , где  $w_{-\infty}$  – начальная разность населенностей (при  $t=-\infty$ ), найдем отсюда после интегрирования

$$w = w_{-\infty} \left[ 1 - \frac{T_2}{1 + (\omega_Z T_2)^2} \int_{-\infty}^{t} \Omega^2 dt' \right].$$
 (9)

Примем во втором слагаемом в квадратных скобках (8)  $w \approx w_{-\infty}$ . Тогда после учета (9) в первом слагаемом будем иметь

$$\rho_{-+} = -iw_{-\infty} \left\{ \frac{T_2}{1 - i\omega_Z T_2} \times \right. \tag{10}$$

$$\times \Omega \left[ 1 - \frac{T_2}{1 + (\omega_Z T_2)^2} \int_{-\infty}^{t} \Omega^2 dt' \right] - \frac{T_2^2}{(1 - i\omega_Z T_2)^2} \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right\}.$$

Подстановка (10) в (5) приводит к уравнению

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} - a_0^2 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} = -q \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \Omega \int_{-\infty}^t \Omega^2 dt' + 2 \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right), \quad (11)$$

где  $a_0^2 = a^2(1+\eta)$ ,

$$\eta = w_{-\infty} \frac{G^2 n}{\hbar \rho a^2} T_2^2 \int_0^\infty \frac{\omega_Z g(\omega_Z) d\omega_Z}{1 + (T_2 \omega_Z)^2}$$

$$q = w_{-\infty} \frac{G^2 n}{\hbar \rho} T_2^3 \int_0^\infty \frac{\omega_Z g(\omega_Z) d\omega_Z}{[1 + (T_2 \omega_Z)^2]^2}.$$

В экспериментах по акустическому парамагнитному резонансу обычно выполняются условия  $T_2\gg$  $\gg T_2^*,\ \omega_0 T_2\gg 1$  [17]. Примем также, что  $\omega_0 T_2^*\gg 1$ . В этом случае при учете (6) имеем  $\eta=w_{-\infty}\frac{G^2n}{\hbar\omega_0\rho a^2},$  $q=\frac{\eta}{2\pi}a^2\omega_0 T_2 T_2^*.$ 

Взяв для парамагнитных ионов  ${\rm Fe^{2+}}$  в кубическом кристалле MgO  $G\sim 10^{-14}\,{\rm spr},\ n\sim 10^{19}\,{\rm cm^{-3}},$   $\omega_0\sim 10^{11}\,{\rm c^{-1}},\ \rho\approx 5\,{\rm r/cm^3},\ a\approx 5\cdot 10^5\,{\rm cm/c}$  [12, 17], будем иметь  $\eta\sim 10^{-4}$ . Таким образом, поправка к скорости звука, обусловленная спин-фононным вза-имодействием оказывается весьма малой.

В правой части уравнения (11) содержатся относительно малые слагаемые из разложения (10). Поэтому мы можем использовать приближение однонаправленного распространения вдоль оси x [44], записав

$$\begin{split} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} - a_0^2 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} &= \left( \frac{\partial}{\partial t} - a_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial}{\partial t} + a_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \Omega \approx \\ &\approx 2 \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \Omega}{\partial t} + a_0 \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right). \end{split}$$

Пренебрегая в правой части (11) разницей между  $a_0$  и a, с хорошей точностью положим  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \approx \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ . Тогда, интегрируя (11) по t, получим

$$\frac{\partial \Omega}{\partial x} = -\alpha \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \Omega \int_{-\infty}^{\tau} \Omega^2 d\tau' \right) - \sigma \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \tau^2}, \quad (12)$$

где  $\tau = t - x/a_0$ ,

$$\alpha = \frac{\eta}{4\pi a} \omega_0 T_2 T_2^*, \quad \sigma = 2\alpha. \tag{13}$$

Если парамагнитные ионы находятся в состояниях с инверсной населенностью зеемановских подуровней  $(w_{-\infty}>0)$ , то  $\sigma=2\alpha>0$ . Тогда последнее слагаемое в правой части (12) формально аналогично отрицательной вязкости. В нашем случае можно говорить, что оно описывает нелокальное усиление импульса. Благодаря этому слагаемому на линейной стадии пиковое усиление сопровождается временным сжатием импульса. Передача энергии от парамагнитных ионов к упругому импульсу сопровождается уменьшением инверсии населенностей зеемановских подуровней (см. (9)). Это, в свою очередь, приводит к замедлению процесса усиления и его стабилизации, что описывается первым слагаемым в правой части уравнения (12). Взаимная конкуренция описанных выше механизмов способна привести к формированию локализованной структуры упругой деформации, бегущей с постоянной скоростью. Перейдем к процедуре нахождения этого решения.

3. Обобщенное уравнение Бюргерса и униполярный диссипативный солитон. Умножим уравнение (12) на  $2\Omega$ . Введя при этом безразмерную динамическую переменную

$$\theta = T_2 \int_{-\infty}^{\gamma} \Omega^2 d\tau', \tag{14}$$

после простых математических преобразований и интегрирования по au получим уравнение вида

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} + \beta \theta \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \sigma \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2} =$$

$$= \int_{-\pi}^{\tau} \left[ 2\sigma T_2 \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \tau'} \right)^2 - \beta \left( \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right)^2 \right] \tau', \qquad (15)$$

где  $\beta = \alpha/T_2$ .

Если в (15) пренебречь правой частью, то данное уравнение перейдет в хорошо известное уравнение Бюргерса [45]. По этой причине назовем (15) обобшенным уравнением Бюргерса.

Из (9) и (14) видно, что динамический параметр  $\theta$  определяет изменение разности населенностей зеемановских подуровней. Поэтому можно сказать, что обобщенное уравнение Бюргерса (15) описывает динамику разности населенностей.

Нетрудно видеть, что уравнение (15) имеет решение, схожее по структуре с решением уравнения Бюргерса в виде бегущего фронта:

$$\theta = \frac{\sigma T_2}{\alpha \tau_p} \left[ 1 + \tanh\left(\frac{t - x/v}{\tau_p}\right) \right], \tag{16}$$

где скорость v связана с характерной длительностью  $\tau_p$  фронта соотношением

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{a_0} + \frac{\sigma}{\tau_p}.\tag{17}$$

Из (14) и (16) следует, что

$$\Omega = \pm \frac{1}{\tau_p} \sqrt{\frac{\sigma}{\alpha}} \operatorname{sech}\left(\frac{t - x/v}{\tau_p}\right). \tag{18}$$

Данное выражение, наряду с (17), является решением уравнения (12) в виде локализованного униполярного импульса. Из (18) видно, что знак полярности импульса может быть как положительным (деформация растяжения), так и отрицательным (деформация сжатия).

Так как в нашем случае  $\sigma/\alpha=2$  (см. (13)), то из (18) и (3) для амплитуды упругой деформации импульса имеем  $\varepsilon\sim\hbar/G\tau_p$ . Взяв  $G\sim10^{-14}$  эрг,  $\tau_p\sim10^{-5}\,\mathrm{c}$ , найдем  $\varepsilon_m\sim10^{-8}$ . Для пиковой интенсивности при скорости звука  $a\approx5\cdot10^5\,\mathrm{cm/c}$  и плотности кристалла  $\rho\approx5\,\mathrm{r/cm^3}$  имеем оценку  $I=0.5\rho a^3\varepsilon_m^2\sim10^{-6}\,\mathrm{Br/cm^2}$ .

При описанных выше условиях из определения скорости  $a_0$ , а также из (13) и (17) для скорости распространения униполярного импульса получим

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{a} \left[ 1 + \frac{\eta}{2} \left( \frac{\omega_0 T_2^*}{4\pi} \frac{T_2}{\tau_p} - 1 \right) \right]. \tag{17a}$$

При принятых выше параметрах имеем  $\omega_0 T_2^* \sim 10^3$  и  $\eta \sim 10^{-4}$ . Положив, кроме того,  $T_2/\tau_p \sim 10^{-1}$ , приходим к выводу, что скорость солитона всего на десятые доли процента отличается от линейной скорости звука в кристалле.

106 С. В. Сазонов

Усредняя (9) по контуру неоднородного уширения (6), с учетом (13) и принятых выше приближений получим

$$\langle w \rangle = \int_{0}^{\infty} wg(\omega_Z) d\omega_Z =$$

$$= w_{-\infty} \left\{ 1 - \frac{T_2^*}{4\tau_p} \left[ 1 + \tanh\left(\frac{t - x/v}{\tau_p}\right) \right] \right\}. \tag{19}$$

Таким образом, при условии (4а) изменение разности населенностей зеемановских подуровней, действительно, мало, как это и предполагалось при выводе уравнения (12). Отсюда приходим к выводу, что распространение униполярного импульса упругой деформации (17), (18) сопровождается селективным переходом парамагнитных ионов на основной зеемановский подуровень. Таким образом, состояние среды изменяется после прохождения по ней рассматриваемого импульса, так как импульс необратимо уносит энергию среды.

Диссипативные солитоны, в отличие от консервативных, не обладают непрерывно изменяющимися свободными параметрами. Говоря другими словами, все параметры диссипативного солитона (например, длительность, скорость, амплитуда) жестко определяются коэффициентами уравнения, решением которого является данный диссипативный солитон. В нашем же случае это правило не выполняется: солитоноподобное решение (17), (18) обладает непрерывным свободным параметром. В качестве такого параметра здесь выступает временная длительность импульса. В свою очередь, амплитуда и скорость импульса непрерывно зависят от его длительности. Как видно из (17) и (18), амплитуда импульса возрастает с укорочением его длительности, а скорость уменьшается.

Таким образом, униполярный импульс упругой деформации (17), (18) обладает свойствами как диссипативного (необратимое изменение состояния среды), так и консервативного (существование непрерывного свободного параметра) солитона. Так как сама неравновесная среда на временах  $\Delta t \ll T_1$  после создания инверсной населенности квантовых состояний метастабильна, назовем локализованный импульс (17), (18) метастабильной униполярной структурой.

Формирование данной локализованной структуры происходит за счет взаимной компенсации притока в него энергии из неравновесной среды и необратимой потери энергии за счет процессов релаксации.

Заметим, что решение уравнения Бюргерса, содержащего вязкую диссипацию, в виде бегущего волнового фронта также обладает непрерывным свободным параметром [45]. Так как решение (17), (18) уравнения (12) тесно связано с решением (16), (17) обобщенного уравнения Бюргерса (15), то наличие здесь у диссипативного солитона непрерывного свободного параметра представляется вполне естественным.

4. Заключение. Проведенное в настоящей работе исследование выявляет принципиальную возможность формирования в неравновесном парамагнитном кристалле метастабильного униполярного импульса упругой деформации. Нелокальное линейное усиление, описываемое вторым слагаемым в правой части уравнения (12), ограничивается нелинейным насыщением данного усиления (см. первое слагаемое в правой части (12)). Локальное усиление, присущее квазимонохроматическим сигналам и приводящее на линейной стадии к экспоненциальному росту их амплитуд, приводит к возможности формирования диссипативных солитонов в оптике [46] и в физической акустике [43]. У квазимонохроматических диссипативных солитонов, как и следовало ожидать, нет непрерывных свободных параметров. Поэтому есть основания предполагать, что наличие у найденного здесь униполярного солитона непрерывного свободного параметра обусловлено нелокальным характером усиления и ограничивающих это усиление необратимых потерь. Действительно, временная нелокальность приводит к сохранению памяти об условиях на входе в неравновесную диссипативную среду. Это, в свою очередь, и приводит к наличию непрерывного свободного параметра у решения типа локализованной метастабильной структуры (17), (18) уравнения (12).

Результаты наших исследований по формированию униполярных диссипативных солитонов оптической (электромагнитной) природы в многоуровневых средах с нелокальными усилением и потерями мы планируем опубликовать отдельно.

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

<sup>1.</sup> Н. Н. Розанов, Диссипативные оптические о родственные солитоны, Физматлит, М. (2021).

<sup>2.</sup> С. К. Турицын, Н. Н. Розанов, И. Я. Яруткина, А. Е. Беднякова, С. В. Федоров, О. В. Штырина, М. П. Федорук, УФН **186**, 713 (2016) [S. K. Turitsyn, N. N. Rosanov, I. A. Yarutkina, A. E. Bednyakova, S. V. Fedorov, O. V. Shtyrina, and M. P. Fedoruk, Phys.-Uspekhi **59**, 642 (2016)].

<sup>3.</sup> N. Akhmediev, A. Ankiewicz, J.M. Soto-Crespo, and Ph. Grelu, International Journal of Bifurcation and Chaos 19, 2621 (2009).

- N. A. Veretenov, N. N. Rosanov, and S. V. Fedorov, Phys. Rev. Lett. 117, 183901 (2016).
- С.В. Федоров, Н.Н. Розанов, Н.А. Веретенов, Письма в ЖЭТФ 107, 342 (2018) [S.V. Fedorov, N.N. Rosanov, N.A. Veretenov, JETP Lett. 107, 327 (2018)].
- V. E. Lobanov, O. V. Borovkova, and B. A. Malomed, Phys. Rev. A 90, 053820 (2014).
- V.E. Lobanov, N.M. Kondratiev, and I.A. Bilenko, Opt. Lett. 46, 2380 (2021).
- 8. Н. Н. Розанов, Диссипативные оптические солитоны. От микро- к нано- и атто-, Физматлит, М. (2011).
- 9. D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, Письма в ЖЭТФ **111**, 303 (2020) [D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, JETP Lett. **111**, 268 (2020)].
- 10. D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, Письма в ЖЭТФ **112**, 79 (2020) [D. A. Dolinina, A. S. Shalin, and A. V. Yulin, JETP Lett. **112**, 71 (2020)].
- Ф. В. Бункин, Ю. А. Кравцов, Г. А. Ляхов, УФН
   149, 391 (1986) [F. V. Bunkin, Yu. A. Kravtsov, and G. A. Lyakhov, Sov. Phys.-Uspekhi 29, 607 (1986)].
- 12. В. А. Голенищев-Кутузов, В. В. Самарцев, Н. К. Соловаров, Б. М. Хабибуллин, *Магнитная квантовая акустика*, Наука, М. (1977).
- 13. У.Х. Копвиллем, В.Д. Корепанов, ЖЭТФ **41**, 211 (1961) [U.Kh. Kopvillem and V.D.'Korepanov, JETP **41**, 211 (1961)].
- 14. C. Kittel, Phys. Rev. Lett. 6, 449 (1961).
- 15. E.B. Tucker, Phys. Rev. Lett. 6, 547 (1961).
- 16. В.Э. Гусев, А.А. Карабутов, *Лазерная оптоакусти- ка*, Наука, М. (1991).
- 17. N.S. Shiren, Phys. Rev. B 2, 2471 (1970).
- 18. Г. А. Денисенко, ЖЭТФ **60**, 2270 (1971) [G. A. Denisenko, JETP **33**, 1220 (1971)].
- 19. В.В. Самарцев, Б.П. Смоляков, Р.З. Шарипов, Письма в ЖЭТФ **20**, 644 (1974) [V.V. Samartsev, В.Р. Smolyakov, and R.Z. Sharipov, JETP Lett. **20**, 296 (1974)].
- F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. 81, 163 (2009).
- 21. Э. М. Беленов, П. Г. Крюков, А. В. Назаркин, А. Н. Ораевский, А. В. Усков, Письма в ЖЭТФ **47**, 442 (1988) [Е. М. Belenov, P. G. Kryukov, A. V. Nazarkin, A. N. Oraevskii, and A. V. Uskov, JETP Lett. **47**, 523 1988].
- Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, Письма в ЖЭТФ 51, 252 (1990) [E. M. Belenov and A. V. Nazarkin, JETP Lett. 51, 288 (1990)].
- 23. С. А. Козлов, С. В. Сазонов, ЖЭТФ **111**, 404 (1997) [S. A. Kozlov and S. V. Sazonov, JETP **84**, 221 (1997)].
- H. Leblond, S.V. Sazonov, I.V. Mel'nikov,
   D. Mihalache, and F. Sanchez, Phys. Rev. A: Atomic,
   Molecular, and Optical Physics 74, 063815 (2006).

- H. Leblond and D. Mihalache, Phys. Rep. **523**, 61 (2013).
- 26. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **110**, 9 (2019) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. A. Shimko, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **110**, 15 (2019)].
- 27. Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ 113, 636 (2021).
- 28. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, М. О. Жукова, А. Н. Цыпкин, Н. Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **113**, 237 (2021) [R. М. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, M. O. Zhukova, A. N. Tcypkin, and N. N. Rosanov, JETP Lett. **113**, 242 (2021)].
- 29. С.В. Воронков, С.В. Сазонов, ЖЭТФ **120**, 269 (2001) [S.V. Voronkov and S.V. Sazonov, JETP **93**, 236 (2001)].
- А. А. Заболотский, Письма в ЖЭТФ 76, 709 (2002)
   [А. А. Zabolotskii, JETP Lett. 76, 607 (2002)].
- 31. A. A. Zabolotskii, Phys. Rev. E 67, 066606 (2003).
- 32. A. V. Gulakov and S. V. Sazonov, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 1733 (2004).
- S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Phys. Rev. E 73, 056614 (2006).
- S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, J. Phys. A: Math., Nucl. Gen. 40, F551 (2007).
- 35. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Romanian Reports in Physics **72**, 508 (2020).
- 36. V. V. Kozlov and N. N. Rosanov, Phys. Rev. A: Atomic, Molecular, and Optical Physics 87, 043836 (2013).
- 37. V. V. Kozlov, Phys. Rev. A: Atomic, Molecular, and Optical Physics **56**, 1607 (1997).
- 38. М.В. Архипов, Р.М. Архипов, А.А. Шимко, И. Бабушкин, Н.Н. Розанов, Письма в ЖЭТФ **109**, 657 (2019) [М.V. Arkhipov, R.M. Arkhipov, A.A. Shimko, I.V. Babushkin, and N.N. Rosanov, JETP Lett. **109**, 634 (2019)].
- 39. С.В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **53**, 400 (1991) [S.V. Sazonov, JETP Lett. **53**, 420 (1991)].
- 40. S. V. Sazonov, J. Phys: Condens. Matter 7, 175 (1995).
- 41. А. Ю. Пархоменко, С. В. Сазонов, ЖЭТФ **114**, 1595 (1998) [A. Yu. Parkhomenko and S. V. Sazonov, JETP **87**, 864 (1998)].
- С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ 96, 281 (2012)
   [S. V. Sazonov, JETP Lett. 96, 263 (2012)].
- 43. С.В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **113**, 612 (2021) [S.V. Sazonov, JETP Lett. **113**, 592 (2021)].
- 44. P. J. Caudrey, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and R. K. Bullough, J. Phys. A: Math. Theor. 6, L53 (1973).
- 45. Дж. Уизем, Линейные и нелинейные волны, Мир, М. (1977) [G.B. Whitham, Linear and Nonlinear Waves, John Wiley & Sons, Inc., N.Y. (1974)].
- 46. S.V. Sazonov, Phys. Rev. A: Atomic, Molecular, and Optical Physics 103, 053512 (2021).

#### СВЧ-отклик квантового точечного контакта

 $B.\,A.\,$  Ткаченко $^{+*},\,A.\,C.\,$  Ярошевич $^{+1}),\,3.\,$  Д. Квон $^{+*},\,O.\,A.\,$  Ткаченко $^{+},\,E.\,E.\,$  Родякина $^{+*},\,A.\,B.\,$  Латышев $^{+*}$ 

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

\*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 23 июня 2021 г. После переработки 23 июня 2021 г. Принята к публикации 24 июня 2021 г.

Впервые исследован СВЧ-фотокондактанс короткого (100 нм) квантового точечного контакта на основе высокоподвижного двумерного электронного газа в диапазоне частот 2–3 ГГц. Обнаружены гигантский фотокондактанс в туннельном и отрицательный в открытом режиме. На основе численного моделирования показано, что такой отклик на облучение является результатом вынужденных колебаний потенциала седловой точки квантового точечного контакта и приложенного к нему измерительного напряжения.

DOI: 10.31857/S123456782114010X

Квантовый точечный контакт (КТК), вошедший в обиход физики низкоразмерных электронных систем более 30 лет назад, является объектом мезоскопики, давно ставшим предметом многочисленных статей, обзоров и учебников [1–8]. Однако, как ни удивительно, почти вся литература по КТК была до последнего времени сосредоточена на исследованиях открытого состояния субмикронного контакта, когда кондактанс  $G \geq 2e^2/h$  и наблюдается его квантование. Ситуация изменилась принципиальным образом, когда при облучении субтерагерцовым и терагерцовым излучением коротких (100 нм) КТК был обнаружен гигантский (до 2 порядков) рост туннельного кондактанса [9, 10], вызванный фотонностимулированным транспортом [10, 11], и стало актуальным экспериментальное и теоретическое исследование высокочастотного отклика КТК [12].

В настоящей работе впервые представлены результаты экспериментального и теоретического изучения фотоотклика коротких (100 нм) КТК под воздействием излучения СВЧ — диапазона (от 2 до  $2.5\,\Gamma\Gamma$ ц) при переходе от туннельного к открытому режиму. Ее целью было исследование отклика КТК при относительно низкой частоте облучения f, когда соблюдается условие  $\omega\tau\ll 1$ , ( $\omega=2\pi f,\,\tau$  — время туннелирования через барьер) [13] и изменение кондактанса КТК в основном определяется средним по времени коэффициентом прохождения  $\overline{D}(E)$  через адиабатически колеблющийся барьер [14]. Обнаружены рост кондактанса КТК на несколько порядков при увеличении интенсивности облучения и

параллельный ход зависимостей  $\log G$  от затворного напряжения  $V_g$  при  $G \ll G_0$  ( $G_0 = 2e^2/h$ ), т.е. в туннельном режиме. При  $G > G_0/4$  знак фотокондактанса меняется на противоположный, т.е. кондактанс при СВЧ-облучении не растет, а понижается. Показано, что такое поведение хорошо описывается теоретическим расчетом кондактанса КТК, в основе которого лежит предположение о сфазированных вынужденных колебаниях потенциала седловой точки и измерительного напряжения под воздействием СВЧ-излучения.

В качестве экспериментальных образцов в работе были использованы КТК, изготовленные с помощью электронной литографии на основе двумерного электронного газа (ДЭГ) с концентрацией электронов  $(3-4) \cdot 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$ , подвижностью  $(2-3) \times$  $\times 10^5 \, {\rm cm}^2/{\rm Bc}$  и соответствующей длиной свободного пробега (2–3) мкм. Описание технологии их изготовления дано в работах [10, 12]. Как и ранее, исследовались КТК двух конфигураций: с непрерывным и расщепленным затвором. Они размещались в двух частях одного и того же холловского мостика (см. вставку к рис. 1). СВЧ-излучение подводилось к холловской структуре сбоку по коаксиальному кабелю, который располагался в нескольких мм от исследуемой структуры, а экран кабеля был заземлен вместе с одним из токовых контактов к ДЭГ. Кондактанс измерялся с использованием стандартной схемы фазочувствительного детектирования на частотах 2-6 Гц и при величинах измерительного тока 0.001–10 нА. На рисунке 1 представлены зависимости темнового кондактанса КТК от затворного напряжения с непрерывным и расщепленным затвором

<sup>1)</sup>e-mail: jarosh@isp.nsc.ru

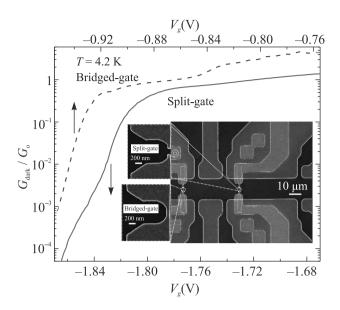


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости темнового кондактанса  $G_{\rm dark}/G_0$  от затворного напряжения  $V_g$  в квантовом точечном контакте со сплошным и расщепленным затворами. На вставке – микрофотография холловского мостика и двух типов КТК: с расщепленным и со сплошным затвором

(пунктирная и сплошная линии, соответственно) при 4.2 К. Видно, что он меняется в широком диапазоне от  $10^{-4}G_0$  (туннельный режим) до  $(1-3)G_0$  (открытый режим) при изменении затворного напряжения от -1 до -0.8 В в KTK с непрерывным затвором и от -1.86 до  $-1.66\,\mathrm{B}$  в КТК с расщепленным затвором. Как и следовало ожидать, модуль порогового напряжения второго оказался почти на 1В выше, чем у первого. Также видно, что область напряжений, при которых происходит переход от туннельного к открытому режиму заметно (в два раза) уже, для КТК с непрерывным затвором. Рисунок 2 представляет зависимости  $G(V_q)$  при облучении КТК СВЧ излучением частотой 2.44 ГГц. Хорошо видно, что под его воздействием в туннельном режиме наблюдается рост кондактанса, достигающий гигантских (отношение  $G_{ph}/G_{\rm dark}$  достигает  $10^4$ ) величин при максимальной мощности (10 мВт) падающего СВЧ излучения, причем под действием облучения наблюдается практически параллельный сдвиг зависимостей  $G(V_q)/G_0$  влево, т.е. с ростом мощности СВЧизлучения происходит, своего рода увеличение эффективного порогового напряжения закрытия КТК (см. рис. 2а, с). Также видно, что при переходе в субпорговый режим  $(0.2G_0 < G < 0.5G_0)$  происходит смена знака фотокондактанса – под действием облучения кондактанс не растет, а падает. Причем подобное поведение, как видно из сравнения рис. 2а и b, наблюдается для обоих типов изученных КТК. Следует обратить внимание на наличие своего рода критической точки — смена знака фотокондактанса происходит приблизительно при одном и том же значении кондактанса и, соответственно, затворного напряжения независимо от мощности излучения. Поведение производных темнового кондактанса и фотокондактанса по затворному напряжению показано на рис. 2b и d. Из них видно, что зависимости  $dG/dV_g$  от  $V_g$  в этом режиме имеют особенности типа пикпровал и осцилляции. Скорее всего, эти особенности связаны с пересечением уровнем Ферми дна одномерных подзон размерного квантования [3, 4, 7] и  $0.7G_0$ -аномалией [6, 15] .

Обсудим теперь полученные результаты на основе сравнительного анализа данных эксперимента с результатами его численного моделирования. Несколько предварительных замечаний. Влияние внешних СВЧ полей на электрон возле КТК подобно влиянию статических электрических полей, т.е. через самосогласованное пространственное распределение зарядов (статическое и колеблющееся с частотой СВЧ поля). Статическое распределение формируется напряжением, подаваемым на затвор и прикладываемым к КТК, а его колебания возникают под действием СВЧ-поля, подаваемого на конец кабеля, который, фактически, представляет собой дополнительный зондовый затвор [16], находящийся под СВЧ-напряжением, но при нулевом статическом, в отличие от [16]. В силу емкостной связи указанного дополнительного затвора с ДЭГ и основным затвором возникают вынужденные колебания подвижных зарядов в изучаемой системе. При расчете, как и прежде [7, 15], использовалась простая форма потенциального барьера для нижней одномерной подзоны

$$(U_0 + A\cos(\omega t)) / -2(x/W) \tag{1}$$

и предполагалось, что величина A сравнима с  $U_0$  —  $E_F$ , где  $U_0$  — высота барьера,  $E_F$  — уровень Ферми, A — амплитуда вынужденных колебаний высоты барьера. В этом случае следует ожидать синфазности вынужденных колебаний напряжения на затворе  $V_g + \Delta V_g \cos(\omega t)$ , потенциала типа (1) и напряжения на потенциометрических контактах  $V_0$  +  $+\delta V\cos(\omega t)$ . Она возникает естественным образом в отличие от управляемого сдвига фазы, возникающего при независимом подведении ВЧ сигналов к токовому контакту и на затвор КТК, либо на зондовый затвор [16—18]. Рассмотрение совместного влияния на электронный транспорт осцилляций тянущего напряжения вокруг средней по t величины  $V_0$ 

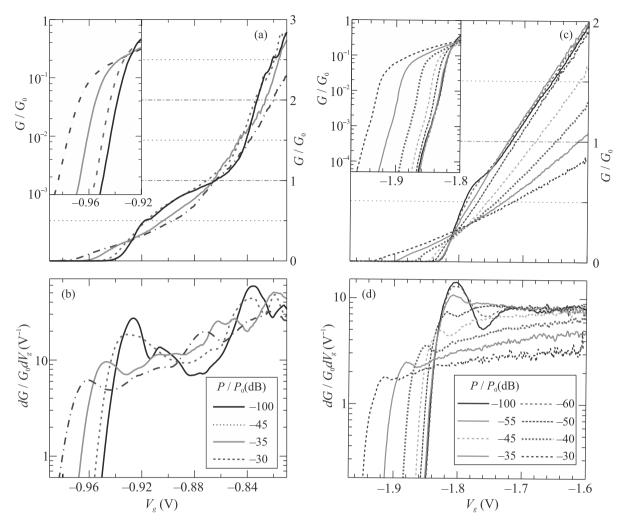


Рис. 2. (Цветной онлайн) Измеренные затворные характеристики кондактанса  $G(V_g)/G_0$  и транскондактанса  $dG(V_g)/G_0 dV_g$  при  $T=4.2\,\mathrm{K}$  для ряда значений СВЧ-мощности  $P/P_0$  в переходе короткого КТК из туннельного в открытый режим: (a), (b) – сплошной затвор, (c), (d) – расщепленный затвор. Тип и цвет линий в каждой паре панелей с общим масштабом по  $V_g$  и на вставках к (a), (c) соответствует указанным  $P/P_0$ 

и осцилляций барьерного потенциала дают возможность более глубокого и широкого рассмотрения поведения кондактанса в сравнении с простым усреднением коэффициента прохождения D [14]. Напряжение на потенциометрических контактах равно  $V_0$ , и, согласно низкотемпературной формуле Ландауэра для случая  $\omega \tau \ll 1$  [16–18], средний по t ток через сужение есть  $\overline{I}/G_0 = \overline{D(E_F,t)V(t)} = \overline{D(E_F,t)V_0} + \overline{D(E_F,t)\cos(\omega t)\delta V}$ . Его можно приравнять к задаваемому измерительному току через КТК. Таким образом, измеряемый кондактанс  $\overline{I}/V$  можно записать как

$$G/G_0 = \overline{D(E_F)} + \overline{D(E_F)\cos(\omega t)}\delta V/V_0, \qquad (2)$$

и его можно рассчитать численно с помощью известных аналитических формул для D [19, 20].

На рисунке 3 показаны результаты таких расчетов в виде зависимостей коэффициента прохождения через КТК от  $(E_F - U_0)$ . В качестве основных параметров КТК брались значения, оцененные из геометрических размеров затворов ( $W = 100 \, \text{нм}$ ) и концентрации электронов в ДЭГ,  $E_F = 25 \,\mathrm{m}$ эВ,  $|U_0 - E_F| \le 5 \,\text{мэВ}, \; A \le 4 \,\text{мэВ}, \;$ причем независимой переменной является не  $E_F$ , как было в [14], а  $U_0$ . Начнем анализ приведенных зависимостей, найденных при учете лишь плавного барьера в нижней подзоне КТК (рис. 3а). Видно, что с ростом амплитуды осцилляций А исходная темновая ступень  $\overline{D}(E_F-U_0)$  сглаживается с сохранением общей точки  $\overline{D}=0.5$  при  $E=U_0$ . Виден рост  $\overline{D}$ на порядки при  $D \ll 0.5$ . Это объясняется экспоненциально сильной зависимостью туннелирования

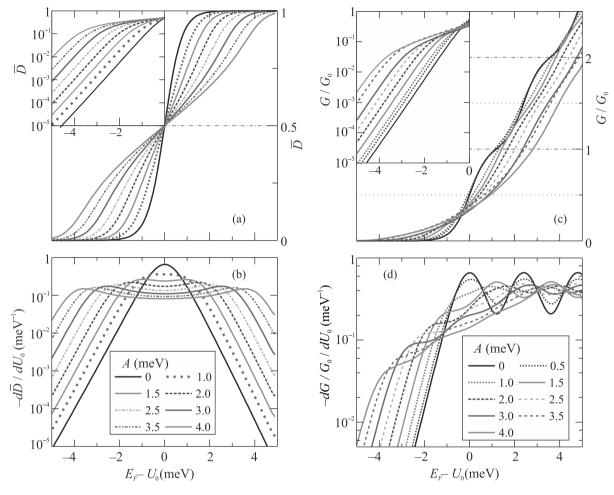


Рис. 3. (Цветной онлайн) Результат расчета по формулам (1), (2) вклада нижней одномерной подзоны в средний по t коэффициент прохождения  $\overline{D}$  при  $\delta V=0$  (a), (b) и полного кондактанса короткого КТК при  $\delta V/V_0=A/|U_0-E_F|_{\rm max}$  (c,d)

и надбарьерного отражения от E для статического барьера [20] и тем, что часть времени барьер (1) является заметно более высоким/низким, чем статический. Также следует отметить, что на зависимости  $\overline{D}(E_F-U_0)$  появляются две плечеподобные особенности, положение которых отвечает условию  $|U_0 - E| \approx A$ . Эти особенности лучше видны на графике  $d\overline{D}/d(E_F-U_0)$  (рис. 3b). Из него видно, что под действием СВЧ мощности происходит раздвоение максимума производной кондактанса по  $U_0$ (появляются две его реплики), когда A становится больше характерной ширины исходного пика в точке  $E_F = U_0$  (рис. 3b). Причиной появления указанных реплик является очень медленное изменение потенциала (1) во времени при высотах барьера  $U_0 \pm A$ . Для состояний с  $E_F = U_0 \pm A$  получается D(t) = 0.5, и это дает в  $\overline{D}(E)$  реплики основной особенности с D = 0.5.

Результаты расчетов  $G(E_F - U_0)$  по формуле (2) с учетом более высоких подзон и СВЧиндуцированных осцилляций тянущего напряжения приведены на рис. 3с. При этом было предположено, что кривизна парабол в седловом потенциале [3] одинакова по x и y, т.е. считалось, что барьеры в подзонах имеют одинаковую форму, и происходят только сдвиги вершин барьеров  $U_n$  в этих подзонах на  $\hbar\omega_y = \hbar\omega_x = 2(U_0E_0)^{1/2}b/W = 2.4$  мэВ,  $E_0 = \hbar^2/2m^*b^2$ , b = 1 нм при  $E_F > U_0$  и A = 0. Второе слагаемое в формуле (2) вычислялось в предположении  $\delta V/V_0 = A/|U_0 - E_F|_{\text{max}}$ , поскольку вынужденные осцилляции потенциала и тянущего напряжения вызваны сфазированными колебаниями всех зарядов на затворе и в ДЭГ возле КТК. На расчетных зависимостях хорошо виден ожидаемый результат сильного наложения ступеней коэффициента прохождения  $D_n(E_F-U_n)$  в соседних одномерных подзонах из-за того, что  $\hbar\omega_y=\hbar\omega_x$  [3, 4]. С увеличением A расчет демонстрирует существенное понижение кондактанса КТК при  $E_F-U_0>0$  по сравнению со случаем A=0. На производной  $dG/d(E_F-U_0)$  с увеличением A вместо двух симметричных пиков  $d\overline{D}/d(E_F-U_0)$  (рис. 3b) появляются осцилляции с переворотами фазы (рис. 3d). Аналогичные осцилляции, но менее регулярные видны и в эксперименте (рис. 2c).

Сравнение кривых на рис. 3c и d с зависимостями  $G(Vg)/G_0$  на рис. 2 показывает, что поведение экспериментального фотокондактанса, с поправкой на тот факт, что вместо величины  $(E_F - U_0)$ , которая в эксперименте не измеряется, фигурирует напряжение на затворе КТК, – находится в хорошем согласии с расчетом. Все наиболее важные особенности экспериментального поведения фотокондактанса: параллельный сдвиг зависимостей  $G(Vg)/G_0$  с ростом мощности излучения, смена знака фотокондактанса в субпороговой области и возникновение его осцилляций в открытом режиме – хорошо видны и на расчетных зависимостях  $G(E_F - U_0)/G_0$ . Отсюда можно сделать вывод, что СВЧ-фотопроводимость КТК при адиабатическом прохождении электрона через него ( $\omega \tau \ll 1$ ) определяется вынужденными колебаниями потенциала седловой точки и измерительного напряжения в широком диапазоне величин кондактанса  $(10^{-4}G_0 < G < 3G_0)$  как в туннельном, так и в открытом режиме. Важным с точки зрения прак-

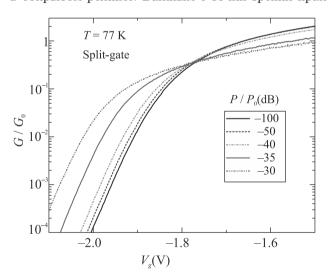


Рис. 4. (Цветной онлайн) Измеренные затворные характеристики кондактанса  $G(V_g)/G_0$  КТК с расщепленным затвором для ряда значений СВЧ-мощности  $P/P_0$  при температуре  $T=77\,\mathrm{K}$ 

тического применения КТК является исследование фотоотклика при азотной температуре. Его резуль-

таты представлены на рис. 4. Они ясно показывают, что качественная картина СВЧ-отклика КТК остается такой же, как и при  $4.2\,\mathrm{K}$  – рост фотокондактанса при облучении в туннельном режиме и смена его знака при переходе в отрытый режим. Важно особо отметить, что заметная чувствительность КТК к излучению сохраняется в туннельном режиме и при азотной температуре (отношение  $G_{ph}/G_{\mathrm{dark}}$  достигает  $10^2$ ).

Таким образом, в данной работе впервые проведено экспериментальное и теоретическое исследование СВЧ-фотокондактанса квантового точечного контакта и показано, что он определяется вынужденными колебаниями седловой точки КТК под воздействием СВЧ-поля как в туннельном, так и в открытом режиме. Также впервые экспериментально изучен СВЧ-фотокондактанс КТК при азотных температурах и продемонстрирована высокая чувствительность его к СВЧ излучению, что делает более перспективным его применение в качестве приемника микроволнового и терагерцового излучения нового типа.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 20-02-00385) и Государственного задания ИФП СО РАН.

B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988).

D. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, L209 (1988).

<sup>3.</sup> M. Büttiker, Phys. Rev. B. 41, 7906 (1990).

M. Reznikov, M. Heiblum, H. Shtrikman, and D. Mahalu, Phys. Rev. Lett. 75, 3340 (1995).

<sup>5.</sup> Y. Imry, *Introduction to mesoscopic physics*, Oxford University Press, N.Y. (1997).

K. J. Thomas, J. T. Nicholls, N. J. Appleyard,
 M. Pepper, M. Y. Simmons, D. R. Mace, W. R. Tribe,
 and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B. 58, 4846 (1998).

O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev, K. S. Pyshkin, R. H. Harrell, E. H. Linfield, D. A. Ritchie, and C. J. B. Ford, J. Appl. Phys. 89, 4993 (2001).

<sup>8.</sup> Н. М. Щелкачев, Я. В. Фоминов, Электрический ток в нано-структурах: кулоновская блокада и квантовые точечные контакты: Учебно-методическое пособие, МФТИ, М. (2010).

A. D. Levin, G. M. Gusev, Z. D. Kvon, A. K. Bakarov, N. A. Savostianova, S. A. Mikhailov, E. E. Rodyakina, and A. V. Latyshev, Appl. Phys. Lett. 107, 072112 (2015).

- M. Otteneder, Z. D. Kvon, O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, A. S. Jaroshevich, E. E. Rodyakina, A. V. Latyshev, and S. D. Ganichev, Phys. Rev. Appl. 10, 0140157 (2018).
- O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, and Z. D. Kvon, JETP Lett. 102, 378 (2015).
- V. A. Tkachenko, Z. D. Kvon, O. A. Tkachenko, A. S. Yaroshevich, E. E. Rodyakinaa, D. G. Baksheev, and A. V. Latyshev, JETP Lett. 113, 331 (2021).
- M. Büttiker and R. Landauer, Phys. Rev. Lett. 49, 1739 (1982).
- 14. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, and D. G. Baksheyev, Siberian Journal of Physics 13, 74 (2018).

- 15. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Письма в ЖЭТФ. **96**, 804 (2012).
- Z. Wang, D. Chen, T. Ota, and T. Fujisawa, Jpn. J. Appl. Phys. 48, 04C148 (2009).
- H. Kamata, T. Ota, and T. Fujisawa, Jpn. J. Appl. Phys. 48, 04C149 (2009).
- T. Fujisawa, K. Nishio, T. Nagase, M. Hashisaka, and K. Muraki, AIP Conf. Proc. 1399, 269 (2011).
- 19. C. Eckart, Phys. Rev. 35, 1303 (1930).
- 20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, М. (1974).

### Текущий авторский указатель томов 109–114 $^{1)}$

Abbad A. <b>112</b> , 387 (364)	Bentata S. <b>112</b> , 313 (290); <b>113</b> , 695 ()		
Abbaoui S. <b>111</b> , 228 (210)	<b>112</b> , 387 (364) Diamantini M. C. <b>109</b> , 8		
Afashokov Yu. Z. <b>112</b> , 797 (753)	Beysengulov N. R. $110$ , 698 (697) Dickmann S. $109$ , 63 (6		
Ajaz M. <b>109</b> , 507 (495)	Blecki J. <b>110</b> , 323 (336)	Dmitriev A. P. <b>113</b> , 132 (127)	
Aleshchenko Y. A. <b>110</b> , 70 (79)	Bobkova I. V. $109$ , $61 (57)$	Dmitriev S. V. <b>111</b> , 483 (409)	
Aleshkin K. $110$ , $727 (711)$	Bobkov A. M. <b>109</b> , 61 (57)	Dmitriev V. V. <b>110</b> , 748 (734);	
AlFiky M. T. <b>111</b> , 10 (8)	Boroun G. R. $114, 3()$	<b>112</b> , 820 (780)	
Ali Q. <b>109</b> , 507 (495)	Bouadjemi B. <b>112</b> , 313 (290);	Dolinina D. A. <b>110</b> , 755 (744);	
Ali Y. <b>109</b> , 507 (495)	<b>112</b> , 387 (364)	Dolinina D. A. <b>111</b> , 303 (268);	
Alsobhi B. O. <b>113</b> , 326 (322)	Boukortt A. <b>111</b> , 228 (210)	<b>112</b> , 79 (71)	
Amata E. <b>110</b> , 323 (336)	Budaev V. <b>110</b> , 323 (336)	Doumi B. <b>112</b> , 617 (568)	
Amusia M. Ya. <b>110</b> , 266 (290)	Burdastyh M. V. <b>109</b> , 833 (795)	Dressel M. <b>110</b> , 70 (79)	
Andjelkovic L. <b>113</b> , 236 (238)	Burmistrov I. S. <b>109</b> , 639 (620)	Drigo L. <b>110</b> , 68 (74)	
Anisimov M. A. $110, 70 (79)$	Burtebaev N. <b>111</b> , 483 (409)	Dukhnenko A. V. $110$ , $70(79)$	
Anisimov V. I. <b>109</b> , 392 (387)	Chen J. <b>112</b> , 119 (117)	Dzaparova I. M. <b>109</b> , 223 (226);	
Arakcheev A. S. <b>109</b> , 254 (261)	Chen Y. Y. <b>110</b> , 235 (254)	<b>112</b> , 797 (753)	
Aristov D. N. <b>113</b> , 729 ()	Cherid S. <b>111</b> , 819 (694)	Dzhappuev D. D. <b>109</b> , 223 (226);	
Aronzon B. A. <b>109</b> , 174 (175)	Chernikova N. Yu. <b>109</b> , 291 (281)	<b>112</b> , 797 (753)	
Artamonov S. A. <b>110</b> , 266 (290)	Chernodubov D. A. <b>112</b> , 112 (106)	Elsherif O. $111, 10(8)$	
Audouard A. <b>110</b> , 68 (74)	Chernyshev B. A. <b>110</b> , 83 (97)	Eltsov V. B. <b>111</b> , 462 (389);	
Aziz Z. <b>112</b> , 313 (290)	Choi JH. <b>109</b> , 129 (131)	<b>111</b> , 707 (600)	
Bakarov A. K. $109$ , $254 (261)$	Christodoulou M. $109$ , $292 (286)$	Esin V. D. <b>109</b> , 751 (715);	
Bao X. H. <b>110</b> , 235 (254)	Chu J. H. <b>113</b> , 131 (120)	Esin V. D. <b>111</b> , 813 (685);	
Baranov M. A. <b>110</b> , 21 (25)	Clark J. W. <b>111</b> , 86 (96);	<b>113</b> , 695 ()	
Barash Yu. S. <b>113</b> , 695 ()	<b>112</b> , 700 (657)	Evlyukhin A. B. $110$ , $21 (25)$	
Barkalov O. I. $111, 524 (456)$	Croitori D. <b>109</b> , 256 (266)	Falcon E. <b>112</b> , 799 (757)	
Baryshnikova K. V. $110$ , $21 (25)$	Danilov A. N. <b>111</b> , 483 (409);	Fedaruk R. $110$ , $435 (441)$	
Baskakov A. O. $111, 524 (456)$	<b>112</b> , 499 (463)	Fedyanin A. A. <b>109</b> , 129 (131);	
Bedran Z. V. $110, 70(79)$	Davydov A. B. <b>109</b> , 174 (175)	<b>110</b> , 757 (750)	
Belavin A. <b>110</b> , 727 (711)	Demyanova A. S. <b>110</b> , 83 (97);	Filipov V. B. $110, 70 (79)$	
Belyaeva T. L. <b>111</b> , 483 (409);	Demyanova A. S. <b>111</b> , 483 (409);	Friesen A. V. <b>111</b> , 147 (129)	
<b>112</b> , 499 (463)	<b>112</b> , 499 (463)	Frizyuk K. $110$ , $21(25)$	
Belyanchikov M. A. $110$ , $70 (79)$	Derbezov I. A. <b>109</b> , 833 (795)	Gaisler A. V. <b>109</b> , 833 (795)	
Benatmane S. <b>111</b> , 819 (694)	Deviatov E. V. <b>109</b> , 176 (185);	Gao G. <b>110</b> , 235 (254)	
Bendeddouche Z. $111$ , $228 (210)$	Deviatov E. V. <b>109</b> , 751 (715);	Garifullin I. A. $113$ , 210 (194)	
Benstaali W. <b>112</b> , 313 (290);	Deviatov E. V. <b>111</b> , 813 (685);	Gasparov V. A. $110$ , $68 (74)$	
<b>112</b> , 387 (364)	Deviatov E. V. <b>113</b> , 390();	Gavrilkin S. Yu. $109$ , $174 (175)$	

 $<sup>^{1)} {\</sup>rm B}$ скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 109(1)–113(5).

Godunov S. I. **109**, 367 (358) **112**, 797 (753) Kukovitsky E. **109**, 479 (465); Goncharov S. A. **110**, 83 (97); Khadzhiev M. M. 109, 223 (226); **113**, 265 (273) **112**, 797 (753) Kulbachinskii V. A. **109**, 174 (175) Goncharov S. A. **111**, 483 (409); Khartsev S. I. 109, 82 (83) **112**, 499 (463) Kurenya A. N. 109, 223 (226); Gorbacheva E. A. 109, 223 (226); Khasanov R. 109, 479 (465) **112**, 797 (753) Khlebnikov S. V. **111**, 483 (409) **112**, 797 (753) Kurilovich P. D. 109, 639 (620) Khodel V. A. 111, 86 (96) Gorbatsevich A. A. 110, 620 (618) Kurilovich V. D. 109, 639 (620) Khokhlov N. A. 109, 174 (175) Gorshunov B. P. 110, 70 (79) Kurosu M. **109**, 254 (261) Khomskii D. I. 109, 826 (786) Grigorenko L. V. 110, 7(5) Kutuzov M. S. **110**, 748 (734): Khrapai V. S. 109, 89 (92) Grishin A. M. 109, 82 (83) **112**, 820 (780) Khusnutdinov N. 110, 170 (183) Gurov Yu. B. 110, 83 (97); Kuzmenko A. P. 109, 174 (175) Kiiamov A. 109, 479 (465) **111**, 483 (409) Lantri T. **112**, 313 (290); Kiiamov A. G. 109, 256 (266) **112**, 387 (364) Haid S. 112, 387 (364) Kivshar Y. S. **109**, 129 (131) Lapushkin S. V. **110**, 83 (97) Hamed A. M. 111, 10(8) Klimenko N. F. 109, 223 (226); Lebed A. G. **110**, 163 (173); Haseeb M. 109, 507 (495) **112**, 797 (753) He X. **112**, 172 (157) Lebed A. G. 111, 249 (239); Klinkhamer F. R. **109**, 369 (364) Houari M. **112**, 313 (290): **113**, 731 () Kochura A. V. 109, 174 (175) **112**, 387 (364) Leevik Y. S. **112**, 700 (657) Kochurin E. 112, 799 (757) Huang D. -J. 109, 826 (786) Legen L. 110, 323 (336) Kolesnikov N. N. 109, 176 (185); Iaparov B. I. 110, 213 (231) Lidvansky A. S. **109**, 223 (226); Kolesnikov N. N. 109, 751 (715); **112**, 797 (753) Inyushkin A. V. 112, 112 (106) Kolesnikov N. N. 111, 813 (685); Ionin A. A. 109, 160 (157) Li H. 110, 323 (336) Kolesnikov N. N. 113, 390(); Likhovid N. A. 114, 4() Ioselevich A. S. 114, 41() **113**, 695 () Ioselevich P. A. 110, 812 (804) Li L. 112, 119 (117) Kolganov N. 111, 623 (519) Irkhin V. Yu. 111, 242 (230) Louko J. 111, 483 (409) Komandin G. A. 110, 70 (79) Lozovik Yu. E. **109**, 627 (606) Iskrenovic P. 113, 236 (238) Komleva E. V. 110, 595 (595) Ismailova A. N. 110, 7(5) Luchkin V. N. 113, 727 () Kompaniets L. A. 112, 482 (444) Luo M. 112, 68 (58) Jansitov D. 111, 483 (409) Kononov A. 109, 176 (185) Japaridze G. S. 110, 266 (290); L'vov V. S. **111**, 462 (389); Konyzheva S. K. 109, 89 (92) **111**, 707 (600) **112**, 700 (657) Korotin D. M. 109, 392 (387) Jin G. **111**, 301 (264) Lysogorskiy Yu. 110, 698 (697) Koshelev K. L. 109, 129 (131) Kachorovskii V. Yu. 113, 729() Lyubin E. V. **110**, 757 (750) Kotikov A. V. 109, 291 (281); Kacimi S. 111, 228 (210) Lyubutina M. V. 111, 524 (456) **111**, 59 (67) Kadiri A. 111, 228 (210) Lyubutin I. S. **111**, 524 (456) Kozak L. 110, 323 (336) Kalinovsky Yu. L. 111, 147 (129) Makarov S. **110**, 21 (25) Krug von Nidda H. -A. 109, Mantsevich V. N. 113, 727 () Kamashev A. A. 113, 210 (194) 256 (266) Marcucci F. 110, 323 (336) Kamenshchik A. Yu. 111, 343 (306); Kruk S. S. 109, 129 (131) Markevich S. A. **110**, 435 (441) **111**, 485 (416) Kudryashov S. I. **109**, 160 (157) Kaptari L. P. 109, 291 (281) Kudzhaev A. U. 109, 223 (226); Maslova N. S. 113, 727 () Karpikov I. S. 109, 223 (226); **112**, 797 (753) Maslov V. A. **111**, 483 (409)

Matouguia M. 112, 387 (364) Ostrovsky P. M. **110**, 812 (804) Seleznev L. V. **109**, 160 (157) Matougui M. 112, 313 (290) Oveshnikov L. N. 109, 174 (175) Semenov A. N. 111, 50 (55) Mavrin B. N. 109, 627 (606) Pallocchia G. 110, 323 (336) Sepper O. **111**, 249 (239) Mavrogordatos Th. K. 112, 304 (274) Panov A. V. **111**, 32 (36) Sergeev V. M. **111**, 483 (409) Medvedev S. A. 111, 524 (456) Pantuev V. S. **110**, 81 (91); Shabara R. M. 113, 326 (322) Melik-Gaykazyan E. V. 109. **114**, 4() Shaginyan V. R. **110**, 266 (290); 129 (131) Park H. -G. **109**, 129 (131) **112**, 700 (657) Mikhailova O. I. 109, 223 (226); Pchelkina Z. V. **110**, 595 (595) Shalin A. S. **110**, 755 (744); **112**, 797 (753) Penionzhkevich Yu. E. 111, 483 (409) Shalin A. S. **111**, 303 (268); Milenkovic M. R. 113, 236 (238) Perminova M. E. 109, 627 (606) **112**, 79 (71) Milichko V. A. **110**, 21 (25) Peshcherenko N. S. **114**, 41 () Shapiro D. S. 109, 641 (622) Mironov A. Yu. 109, 833 (795) Sharma A. S. 110, 323 (336) Petkov V. B. **109**, 223 (226); Mitkin P. G. 113, 446 () **112**, 797 (753) Sharov P. G. **110**, 7(5) Modesto L. 109, 292 (286) Petrov M. **110**, 21 (25) Shchelkunov N. M. 110, 757 (750) Mokaddem A. 112, 617 (568) Pikalov A. **113**, 274 (285) Shen Y. H. **112**, 68 (58) Morozov An. **111**, 623 (519) Pogosov A. G. 109, 254 (261) Shevyrin A. A. 109, 254 (261) Moskvin A. S. 110, 213 (231) Postolova S. V. 109, 833 (795) Shitsevalova N. Yu. **110**, 70 (79) Msezane A. Z. 110, 266 (290); Ptitsyna K. V. 109, 223 (226) Shklyaev A. A. 109, 254 (261) **112**, 700 (657) Rauch J. L. 110, 323 (336) Shorikov A. O. 109, 392 (387) Mukhin I. 110, 21 (25) Remigio A. S. 113, 587() Shreter Yu. G. 112, 112 (106) Muratov A. V. **110**, 70 (79) Remil G. 112, 313 (290) Shubin N. M. 110, 620 (618) Nagaev K. E. 109, 641 (622) Remizov S. V. 109, 641 (622) Shvetsov O. O. 109, 176 (185); Naryshkin Yu. G. 113, 221 (213) Ricard G. 112, 799 (757) **109**, 751 (715) Naumov P. G. 111, 524 (456) Romanenko V. S. 109, 223 (226); Simonov Yu. A. 113, 589 () Nemecek Z. 110, 323 (336) **112**, 797 (753) Skryabin Yu. N. 111, 242 (230) Nikitov S. A. 110, 628 (629) Romodina M. N. 110, 757 (750) Sluchanko N. E. **110**, 70 (79) Nikolic A. S. 113, 236 (238) Roy A. M. **112**, 187 (173); Sobolev Yu. G. 111, 483 (409) Nissinen J. 110, 797 (789) **113**, 263 (265) Soldatov A. A. 110, 748 (734); Nivazov R. A. 113, 729() Rubtsov G. I. 109, 223 (226); **112**, 820 (780) Novikov V. A. 109, 367 (358) 112, 797 (753) Solovyev I. V. **109**, 826 (786); Novoselov D. Y. 109, 392 (387) Rudenko A. A. 109, 160 (157) **112**, 686 (642) Nozdrachev M. 110, 323 (336) Ryshkov N. S. 113, 390() Sonin E. B. 111, 705 (598) Nozik A. A. 110, 81 (91) Safin A. R. 110, 628 (629) Starastsin V. I. 111, 483 (409); Oganov A. R. 109, 392 (387) Safrankova J. 110, 323 (336) **112**, 499 (463) Ogarkova Yu. L. 111, 524 (456) Saiko A. P. **110**, 435 (441) Starchikov S. S. 111, 524 (456) Ogloblin A. A. 110, 83 (97); Sakhin V. 109, 479 (465); Stephanovich V. A. 110, 266 (290) Ogloblin A. A. 111, 483 (409); 113, 265 (273) Streltsov S. V. 109, 826 (786); **112**, 499 (463) Sandukovsky V. G. 110, 83 (97) Okenov A. O. 110, 213 (231) Streltsov S. V. **110**, 595 (595); Orlova N. N. 113, 390() Savin S. 110, 323 (336) 112, 686 (642) Osokin S. A. **110**, 628 (629) Schlueter J. A. 110, 68 (74) Subbotin A. V. **111**, 50 (55)

C 1: . M <b>119</b> and (and)	V 1 21 G E 100 200 (204)	7 V 100 cgg (cro)
Suljagic M. <b>113</b> , 236 (238)	Volovik G. E. <b>109</b> , 369 (364); Zeng X. <b>109</b> , 677 (652)	
Surovtsev E. V. <b>112</b> , 820 (780)	Volovik G. E. <b>109</b> , 509 (499); Zhang C. X. <b>110</b> , 480 (	
Tadjer A. <b>112</b> , 617 (568)	Volovik G. E. <b>109</b> , 705 (682);	Zhang P. <b>109</b> , 291 (281)
Tagirov L. R. <b>109</b> , 256 (266)	Volovik G. E. <b>110</b> , 335 (352); Zhemchugov E. V. <b>109</b> ,	
Talanov Yu. <b>109</b> , 479 (465);	Volovik G. E. <b>110</b> , 797 (789);	Zhezher V Ya. <b>109</b> , 223 (226)
<b>113</b> , 265 (273)	Volovik G. E. <b>111</b> , 441 (368);	Zhezher Ya. V. <b>112</b> , 797 (753)
Taldenkov A. N. <b>112</b> , 112 (106)	Volovik G. E. <b>111</b> , 689 (582);	Zhukova E. S. <b>110</b> , 70 (79)
Tang B. <b>110</b> , 323 (336)	Volovik G. E. <b>112</b> , 539 (505);	Zhukov M. V. <b>110</b> , 7 (5)
Tang Y. Z. <b>110</b> , 235 (254)	Volovik G. E. <b>113</b> , 546 ();	Zhuravleva K. V. <b>112</b> , 797 (753)
Tan Q. <b>109</b> , 677 (652);	<b>113</b> , 624 ()	Zitouni A. <b>112</b> , 313 (290)
Tan Q. <b>111</b> , 301 (264);	Voronenkov V. V. <b>112</b> , 112 (106)	Zograf G. $110$ , $21(25)$
<b>112</b> , 172 (157)	Voronov V. V. <b>110</b> , 70 (79)	Zubarev N. <b>112</b> , 799 (757)
Tayurskii D. A. <b>109</b> , 256 (266);	Vysotsky M. I. <b>109</b> , 367 (358)	Zubkov M. A. <b>110</b> , 480 (487);
<b>110</b> , 698 (697)	Wang C. <b>110</b> , 323 (336)	<b>113</b> , 448 ()
Teitel'baum G. <b>109</b> , 479 (465);	Wang H. $109$ , $677 (652)$ ;	Zuev D. <b>110</b> , 21 (25)
<b>113</b> , 265 (273)	Wang H. <b>111</b> , 301 (264);	Zverev M. V. <b>111</b> , 86 (96)
Temnikov F. V. <b>110</b> , 595 (595)	<b>112</b> , 172 (157)	Абдель-Хафиз М. $110$ , $557 (562)$
Tikhonov E. S. <b>109</b> , 89 (92)	Woods L. M. <b>110</b> , 170 (183)	Абеди С. $110$ , 671 (672)
Timonina A. V. <b>109</b> , 176 (185);	Xu Y. E. <b>113</b> , 131 (120)	Абрамов Н. Н. $110$ , $569 (574)$
Timonina A. V. <b>109</b> , 751 (715);	Yamaguchi H. $109$ , $254 (261)$	Абросимов Н. В. $110$ , 677 (677)
Timonina A. V. <b>111</b> , 813 (685);	Yanin A. F. <b>109</b> , 223 (226);	Авдеев М. В. <b>111</b> , 154 (139)
Timonina A. V. <b>113</b> , 390();	<b>112</b> , 797 (753)	Аверкиев Н. С. $113$ , $52(47)$
<b>113</b> , 695 ()	Yudin A. N. <b>110</b> , 748 (734);	Авосопянц Г. В. <b>111</b> , $646 (543)$
Toneev V. D. <b>111</b> , 147 (129)	<b>112</b> , 820 (780)	Агасян Н. О. <b>111</b> , 219 (201)
Troitsky S. V. <b>109</b> , 223 (226);	Yulin A. V. <b>110</b> , 755 (744);	Агафонцев Д. С. <b>110</b> , 106 (121)
<b>112</b> , 797 (753)	Yulin A. V. <b>111</b> , 303 (268);	Агеев Э. И. <b>109</b> , 301 (298);
Tronconi A. <b>111</b> , 485 (416)	<b>112</b> , 79 (71)	<b>109</b> , 442 (432)
Trugenberger C. A. <b>109</b> , 833 (795)	Zakharov B. G. <b>110</b> , 361 (375);	Агринская Н. В. <b>110</b> , 482 (495)
Trzaska W. H. <b>110</b> , 83 (97);	Zakharov B. G. <b>112</b> , 435 (393);	Азаревич А. Н. <b>109</b> , 152 (150);
Trzaska W. H. <b>111</b> , 483 (409);	<b>112</b> , 723 (681)	Азаревич А. Н. <b>112</b> , 451 (413);
<b>112</b> , 499 (463)	Zakharov M. Y. <b>110</b> , 698 (697)	<b>113</b> , 533 ()
Tsurkan V. <b>109</b> , 256 (266)	Zakharov V. I. <b>113</b> , 446 ()	Айдакина Н. А. <b>113</b> , 96 (86)
Tyurin G. P. <b>111</b> , 483 (409)	Zakhvalinskii V. S. <b>109</b> , 174 (175)	Акмаев М. А. <b>112</b> , 650 (607)
Unatlokov I. B. <b>112</b> , 797 (753)	Zakhvataev V. E. <b>112</b> , 482 (444)	Акопян Л. А. <b>112</b> , 626 (585)
Ushakov A. V. <b>112</b> , 686 (642)	Zaoui A. <b>111</b> , 228 (210)	Аксенов С. В. <b>110</b> , 126 (140);
Vagizov F. G. <b>109</b> , 256 (266)	Zarembo K. <b>110</b> , 147 (155);	<b>111</b> , 321 (286)
Vardanyan T. <b>111</b> , 343 (306)	<b>111</b> , 173 (157)	Аладышкин А. Ю. <b>109</b> , 789 (755)
Venturi G. <b>111</b> , 485 (416)	Zaslavskii O. B. <b>111</b> , 300 (260);	Албеди С. <b>109</b> , 401 (400)
Vinokur V. M. <b>109</b> , 833 (795)	<b>113</b> , 789 ()	Алексеев А. М. <b>110</b> , 772 (766)
Volovik G. E. <b>109</b> , 10 (8);	Zelenyi L. <b>110</b> , 323 (336)	Алексенский А. Е. <b>111</b> , 375 (338)
, , ,	. , ,	, , ,

```
Алешин А. Н. 109, 30 (28)
                                           Аристов Д. Н 109, 200 (207)
                                                                                       Бабенко П. Ю. 114, 13 ()
Алешин В. И. 109, 209 (213)
                                           Аронин Кобелев А. С. H. П. 113,
                                                                                       Бабиченко В. С. 112, 618 (577)
                                               341 (345)
Алешкин В. Я. 109, 184 (191);
                                                                                       Бабич Л. П. 109, 645 (623)
                                           Артемов В. В. 112, 374 (352)
   112, 541 (508)
                                                                                       Бабунц Р. А. 112, 813 (774)
                                           Артемьев А. А. 112, 291 (263)
Алхазми М. 109, 496 (482)
                                                                                       Бабушкин И. 109, 657 (634)
                                           Артюх А. А. 109, 481 (472);
Альшиц В. И. 110, 255();
                                                                                       Багаев В. С. 112, 160 (145)
                                           Артюх А. А. 111, 93 (109);
Альшиц В. И. 112, 127 (127);
                                                                                       Баева Э. М. 111, 88 (104)
                                               111, 469 (397)
   113, 678()
                                                                                       Бакаров А. К. 109, 401 (400);
                                           Архипенко М. В. 109, 598 (578);
Аминев Д. Ф. 112, 501 (471)
                                                                                       Бакаров А. К. 110, 62 (68);
                                               113, 763()
Амусья М. Я. 111, 536 (472)
                                                                                       Бакаров А. К. 110, 337 (354);
                                           Архипов М. В. 109, 657 (634);
Амусья М. Я. 109, 355 (347);
                                                                                           112, 54 (45)
                                           Архипов М. В. 110, 9 (15);
Амусья М. Я. 109, 516 (507);
                                                                                       Бакаров А. К. s 112, 475 (437)
                                           Архипов М. В. 111, 586 (484);
Амусья М. Я. 110, 85 (102);
                                                                                       Бакшеев Д. Г. 112, 196 (186);
                                           Архипов М. В. 111, 794 (668);
Амусья М. Я. 111, 12 (18);
                                                                                           113, 328 (331)
                                               113, 237 (242)
Амусья М. Я. 112, 233 (219);
                                                                                       Бакшт Е. X. 109, 584 (564);
                                           Архипов Р. М. 109, 657 (634);
   112, 709 (673)
                                                                                           110, 72 (85)
                                           Архипов Р. М. 110, 9 (15);
Ангел Д. В. 109, 36 (33)
                                                                                       Балагуров А. М. 110, 584 (585)
                                           Архипов Р. М. 111, 586 (484);
                                                                                       Балаев Д. А. 110, 614 (613);
Андреев А. А. 112, 598 (550)
                                           Архипов Р. М. 111, 794 (668);
Андреева М. А. 113, 175 (162)
                                                                                           111, 197 (183)
                                           Архипов Р. М. 113, 237 (242);
Андреев И. В. 109, 685 (663);
                                                                                       Балакин Д. А. 113, 590 ()
                                               113, 636 ()
   113, 740()
                                                                                       Балацкий Д. В. 113, 267 (279)
                                           Арышев А. 109, 809 (771)
Андрейчиков М. А. 110, 633 (635)
                                                                                       Балашов Е. М. 109, 709 (686)
                                           Асадчиков В. Е. 109, 340 (334);
Андрианов А. В. 109, 30 (28);
                                                                                       Балдин A. A. 111, 291 (251)
                                           Асадчиков В. Е. 111, 597 (489);
   109, 821 (781)
                                                                                       Балтенков А. С. 109, 516 (507);
                                           Асадчиков В. Е. 113, 161 (149);
Андрианов Е. С. 112, 725 (688);
                                                                                       Балтенков А. С. 111, 12 (18);
                                               113, 175 (162)
   114, 43()
                                                                                           111, 536 (472)
                                           Астафьев А. А. 109, 294 (292);
Андрюшечкин Б. В. 111, 697 (591)
                                                                                       Балыбин С. H. 109, 729 (695)
                                               110, 456 (464)
Андрющенко П. Д. 110, 700 (702)
                                                                                       Балыкин В. И. 111, 757 (608)
                                           Атанасова П. Х. 110, 736 (722)
Анисимов А. Н. 112, 813 (774)
                                                                                       Банников М. И. 111, 166 (151);
                                           Афанасьев А. Е. 111, 757 (608)
Антипина Л. Ю. 111, 244 (235)
                                                                                       Банников М. И. 112, 263 (246);
                                           Афанасьева Е. Ю. 111, 520 (452)
Антоненко Д. С. 112, 466 (428)
                                                                                           113, 548 ()
                                           Афанасьев В. В. 109, 209 (213)
Антонов Н. Н. 111, 291 (251)
                                                                                       Бантыш Б. И. 111, 615 (512)
                                           Афанасьев В. П. 111, 230 (218)
Антропов А. С. 112, 334 (310)
                                                                                       Барабан И. А. 110, 799 (793)
                                           Афонин А. Г. 113, 223 (226)
Антропов Н. О. 109, 408 (406)
                                                                                       Барабанов А. Л. 110, 222 (242);
                                           Афонин В. В. 109, 797 (762)
                                                                                           112, 343 (323)
Аплеснин С. С. 110, 204 (223);
                                           Афонин Г. В. 109, 473 (460);
   112, 680 (636)
                                                                                       Барабанов А. Ф. 109, 557 (546)
                                               111, 691 (586)
Арбузов А. Б. 112, 493 (457)
                                                                                       Баранов В. Т. 113, 223 (226)
                                           Ахматханов А. Р. 110, 165 (178);
Арбузова Т. И. 111, 186 (172)
                                               112, 644 (602)
                                                                                       Баранов П. Г. 112, 813 (774)
Аристова И. М. 113, 189 (176)
                                           Ашитков С. И. 113, 84 (75);
                                                                                       Барецки Б. 110, 622 (624);
Аристов В. Ю. 113, 189 (176)
                                               113, 311 (308)
                                                                                       Барецки Б. 111, 674 (568);
```

Барецки Б. **112**, 45 (37); **111**, 531 (467) Бражкин В. В. **110**, 602 (603); **112**, 275 (257) Бельская Н. А. 113, 267 (279) Бражкин В. В. **110**, 687 (687); **112**, 787 (745) Баркалова А. С. 112, 88 (84) Бельтюков Я. М. 112, 547 (513) Барнов Е. В. 113, 223 (226) Бреев И. Д. 112, 813 (774) Беляев К. Г. 109, 147 (145) Барсукова М. Г. **111**, 40 (46) Брискина Ч. М. **110**, 750 (739) Бен Хамида Я. 112, 743 (705) Барышников К. А. 111, 820 (703) Бердников Я. А. 110, 579 (581) Бритвич Г. И. **113**, 223 (226) Баскаков А. О. 109, 547 (536) Березуцкий А. Г. 111, 335 (299) Брысев А. П. **111**, 464 (392) Батыршин Э. С. 109, 84 (87); Буасье Г. **109**, 91 (96) Беседин И. C. **110**, 569 (574) **110**, 607 (607) Бугаев А. Л. **109**, 615 (594) Бессас Д. 113, 175 (162) Баулин Р. A. **113**, 175 (162) Бугров А. Н. **113**, 385 () Бир А. С. 110, 348 (364) Бахтизин Р. З. 111, 396 (357) Буздин А. И. **113**, 38 (34); Бисти В. Е. 109, 105 (109) Бацанов С. А. 109, 734 (700) **113**, 102 (92) Бишлер Л. 111, 591 (494) Башаров А. М. 109, 75 (77); Блошкин А. А. **110**, 393 (411); Бузмаков А. В. **113**, 161 (149) Башаров А. М. 109, 699 (676); **113**, 501() Бузовкин А. Б. 111, 509 (442) Башаров А. М. **110**, 505 (517); Бобриков И. А. 110, 584 (585) Булатов М. Ф. 111, 674 (568) Бункин А. Ф. **109**, 598 (578); Башаров А. М. 111, 632 (532); Бовкун Л. С. **109**, 184 (191); **111**, 798 (672) **112**, 541 (508) Бункин А. Ф. 111, 464 (392); Башашин М. В. 110, 736 (722) Бункин А. Ф. **112**, 437 (399); Богацкая А. В. 111, 443 (371) Баюков О. А. 113, 267 (279) Богач А. В. 109, 152 (150); Бункин А. Ф. 113, 435 (); **113**, 763() Бегинин Е. Н. 110, 414 (430); Богач А. В. 112, 451 (413); **110**, 526 (533) **113**, 533 () Буньков Ю. М. 109, 43 (40); Бежанов С. Г. 109, 387 (382); Богданова Н. А. 111, 646 (543) Буньков Ю. М. **111**, 52 (62); Бежанов С. Г. 110, 90 (107); Богданова Т. В. 109, 511 (502) Буньков Ю. М. **112**, 101 (95); **110**, 230 (250) Богданов Ю. И. 111, 615 (512); Буньков Ю. М. **112**, 314 (299); Бекиров А. Р. 112, 361 (341) **111**, 646 (543) **112**, 749 (710) Беккерман А. Д. 109, 511 (502) Богомяков А. С. 109, 258 (270) Бураченко А. Г. 109, 584 (564) Белавин А. 112, 388 (370) Боднарчук Я. В. 113, 797 () Буриков С. А. 111, 625 (525) Белгибаев Т. 109, 36 (33) Божко С. И. 109, 789 (755) Буримов Н. И. **112**, 644 (602) Белинский А. В. 113, 590 () Больгинов В. В. 112, 743 (705) Буслаев П. И. 109, 805 (770) Белов Н. К. 111, 305 (273) Бондаревская А. С. 113, 52 (47) Буслеев Н. И. **110**, 230 (250) Белов П. А. 109, 805 (770) Бордонский Г. С. **111**, 311 (278) Буташин А. В. 109, 629 (610) Белогорлов А. А. 113, 378 () Борисова С. Д. 109, 621 (600); Бутенко А. В. 113, 784() Белозеров Е. И. 112, 516 (485) Бутылкин В. С. **109**, 224 (232) **110**, 190 (211) Белоплотов Д. В. 113, 133 (129) Борман В. Д. 113, 378 () Бушуйкин П. А. **110**, 677 (677) Белотелов В. И. 111, 52 (62); Босак А. А. 110, 30 (37) Быков А. А. **109**, 401 (400); Белотелов В. И. 112, 314 (299); Бочкин Г. А. **112**, 754 (715) Быков А. А. 110, 62 (68); Белотелов В. И. 112, 749 (710); Бояринцев Э. Л. 111, 335 (299) Быков А. А. **110**, 337 (354); **112**, 759 (720) Брагинец Ю. П. 110, 579 (581) Быков А. А. 110, 671 (672); Белых В. В. 112, 650 (607) Брагута В. В. 110, 3(1); Быков А. А. **112**, 54 (45); Белых С. Ф. 109, 511 (502); **112**, 9 (6) **112**, 475 (437)

Бюхнер Б. **110**, 325 (342); Векман А. В. 111, 767 (643) Волокитин А. И. 109, 783 (749); **111**, 388 (350) Великанов Д. А. 111, 197 (183) **110**, 379 (397) Baar A. **110**, 806 (799) Волотовский Р. А. **110**, 700 (702) Веневцев И. Д. 112, 240 (225) Вагизов Ф. Г. 111, 181 (167) Волочаев М. Н. **111**, 815 (690) Вергелес С. С. 111, 509 (442) Вайс Д. 109, 835 (799) Волошин А. Э. 110, 255 () Вернья М. 109, 371 (368) Вайшнене Л. А. 110, 222 (242); Верховский С. В. **109**, 552 (541) Воробьев А. С. **110**, 222 (242); **112**. 343 (323) Ветошко П. М. **111**, 52 (62): **112**, 343 (323) Валидов А. А. 110, 325 (342) Воробьев Н. С. **112**, 774 (734) Ветошко П. М. **112**, 314 (299); Валиулин В. Э. 109, 557 (546) **112**, 749 (710) Воробьев С. И. **110**, 118 (133) Валуев К. А 113, 68 (61) Вещунов И. С. 109, 530 (521) Воронин А. А. **112**, 22 (17); Вальков В. В. 109, 769 (736); Вивек Кумар Сингх 111, 591 (494) **113**. 304 (301) Вальков В. В. 110, 126 (140); Воронин В. В. 109, 634 (615); Виглин Н. А. 110, 248 (273) **111**, 772 (647) Викторов В. А. 111, 291 (251) Воронин В. В. 110, 579 (581); 112, 639 (597) Ванчо П. 112, 328 (305) Вильшанская Е. В. 110, 767 (761); Ваньков А. Б. 110, 268 (296); **113**, 92 (82) Воронов А. А. 112, 759 (720) Ваньков А. Б. 112, 62 (53); Винников Л. Я. **109**, 530 (521) Воронов В. В. 111, 625 (525) **113**, 112 (102) Виноградов А. П. 112, 725 (688) Вохминиев К. 109, 108 (112) Варлачев В. А. 113, 229 (231) Виноградов А. Ю. 110, 421 (436) Врубель И. И. 111, 328 (293) Варнаков С. Н. 110, 155 (166) Вуколов А. В. **109**, 584 (564) Виткалов С. А. 109, 401 (400); Васильев С. Г. 112, 754 (715) **110**, 671 (672) Вуколов В. А. **111**, 295 (255) Васильев А. Н. 113, 450 () Витлина Р. З. **110**, 534 (540) Вуль А. Я. 112, 807 (769) Васильева О. Ф. 111, 579 (477) Витрик О. Б. 110, 759 (755) Вурмель С. **111**, 388 (350) Васильев В. В. 111, 579 (477) Владимирова Г. А. 111, 223 (205) Высотин М. А. 110, 155 (166) Васильев Е. В. 110, 700 (702) Власенко В. А. 111, 475 (403); Высоцкий М. И. 110, 633 (635) Васильев Н. Н. 113, 463 () **112**, 822 (786) Гавриленко В. И 112, 541 (508) Васильев О. А. 111, 435 (363) Власов И. И. 112, 17 (13) Гавриленко В. И. 109, 91 (96); Васильев Р. Б. 109, 375 (372); Вовченко И. В. 114, 43() Гавриленко В. И. 109, 184 (191); **109**, 466 (454) Водолазов Д. Ю. 109, 761 (729) Гавриленко В. И. **109**, 679 (657); Васин А. А. **110**, 456 (464) Волкова З. Н. 109, 245 (252); Гавриленко В. И. 111, 682 (575); Васкан И. С. 109, 12 (12) **109**, 552 (541) **113**, 399 () Вахрушев В. О. 113, 468 () Волков В. В. **112**, 632 (591) Гаврилкин С. Ю. **111**, 166 (151) Введенский Н. В. 110, 449 (457); Волков М. К. 109, 219 (222); Гавричков В. А. **109**, 265 (276); **112**, 81 (77) Волков М. К. 110, 217 (237); **112**, 258 (241) Вдовин Е. Е. 109, 496 (482); Волков М. К. 110, 376 (394); Гаврюшкин П. H. **111**, 160 (145) **113**, 605 () Волков М. К. 112, 493 (457); Гагарский А. M. **110**, 222 (242); Веденеев А. С. 109, 170 (171) **113**, 777 () **112**, 343 (323) Веденеев С. И. 109, 25 (24) Волков М. П. 109, 162 (163) Гадиев Р. M. **110**, 437 (447) Вейко В. П. 109, 301 (298); Волков Ю. О. 109, 340 (334) Гадомский О. Н. 110, 99 (115) Вейко В. П. 109, 442 (432); Волк Т. Р. 113, 797 () Газизов А. Р. 110, 772 (766); **110**, 230 (250) Володин В. А. 109, 371 (368) **113**, 152 (140)

Гайнанов Б. Р. **109**, 540 (529) Геталов А. Л. **110**, 118 (133) Градусов В. А. **114**, 6 () Гайнутдинов Р. В. **113**, 797 () Гижа С. С. **112**, 774 (734) Грановский А. Б. **113**, 527 () Гакович Б. **110**, 90 (107) Гресь В. Н. **111**, 291 (251) Гильманов М. И. **109**, 152 (150); Галеева А. В. 112, 263 (246); **110**, 241 (266) Григорьев А. 110, 569 (574) **113**, 548 () Гимазов И. И. **113**, 450 () Григорьев К. С. 109, 666 (642) Галиев А. Ф. 110, 437 (447) Гинзбург Н. С. 113, 655 () Григорьев М. В. 109, 496 (482) Галимзянов Б. Н. 110, 498 (511) Глазков В. Н. **112**, 688 (647) Григорьев П. Д. **112**, 107 (101) Галимов А. И. 113, 248 (252) Глазов М. М. **113**, 10 (7) Григорьев С. В. 110, 799 (793) Галимов A. P. **113**, 784 () Глазунов А. Л. **111**, 223 (205) Григорьев Т. **111**, 591 (494) Галка А. Г. **110**, 237 (262) Григорьев Ю. В. **109**, 629 (610) Глезер А. М. **113**, 468 () Галкина Е. Г. **110**, 474 (481) Глек П. Б. **112**, 22 (17); Гриценко В. А. 109, 112 (116) Галкина О. 110, 515 (523) **113**, 304 (301) Гришаков К. С. 113, 182 (169) Галль Н. Р. 110, 683 (683); Глушков А. В. 109, 579 (559) Гришаков К. С. 109, 413 (410); Галль Н. Р. **111**, 520 (452); Глушков В. В. 109, 152 (150); **112**, 674 (630) **113**, 595() Глушков В. В. **112**, 451 (413); Гришин М. В. 109, 707 (684) Галоян А. С. 111, 291 (251) **113**, 533 () Гришин М. Я. 109, 447 (437); Галусташвили М. В. 110, 793 (785) Голинская А. Д. 109, 375 (372); Гришин М. Я. **111**, 464 (392); Галынский М. В. **109**, 3(1); **109**, 466 (454) **112**, 437 (399) Галынский М. В. **110**, 645 (646); Головенчиц Е. И. 110, 118 (133); Гришин С. В. **110**, 348 (364) **111**, 826 (709) **113**, 579 () Громилов С. A. **113**, 267 (279) гальперин Ю. М. **112**, 54 (45) Головин И. С. **110**, 584 (585) Громницкая Е. Л. **110**, 602 (603) Ганичев С. Д. 113, 463 () Головцов В. Л. 109, 209 (213) Громов М. О. **109**, 209 (213) Гапиенко В. А. 111, 291 (251) Головчанский И. А 112, 743 (705) Губайдуллин А. Р. 111, 763 (639) Гапиенко Г. C. **111**, 291 (251) Голуб Л. Е. **111**, 19 (24) Губанова Ю. А. **110**, 526 (533) Голубь А. П. **113**, 440 () Гардымова А. П. 109, 487 (478) Губарев С. И. 109, 685 (663) Гарифуллин И. А. 110, 325 (342) Голышев А. А. **109**, 460 (449); Гуда А. А. 109, 615 (594) Гарифьянов Н. Н. 110, 325 (342) **111**, 838 (720) Гудков В. В. 113, 52 (47) Гонзалез-Посада Ф. 109, 91 (96) Гартман А. Д. 112, 730 (693) Гумаров А. И. **110**, 197 (217) Гатин А. К. 109, 707 (684) Гончарова Е. В. 111, 691 (586); Гунбина А. А. 111, 641 (539) **113**, 751 () Гафнер С. Л. 113, 669 () Гуров Ю. Б. **113**, 147 (135) Гафнер Ю. Я. 113, 669 () Горан А. В. 109, 401 (400); Гурулев А. А. 111, 311 (278) Гашков М. А. **113**, 370 () Горан А. В. 110, 337 (354); Гусаков Е. З. 109, 723 (689) Горан А. В. **110**, 671 (672); Герасимов А. А. 109, 209 (213) Гусев А. И. 109, 605 (584); **112**, 475 (437) Герасимов В. В. 110, 677 (677) Гусев А. И. **111**, 190 (176); Горбунов А. В. 110, 260 (284) Герасимов Р. Е. 110, 645 (646) **113**, 733() Горлова И. Г. **110**, 400 (417) Геращенко А. П. 109, 245 (252); Гусева Ю. А. 109, 147 (145); **109**, 552 (541) Горнакова А. С. 111, 674 (568) **113**, 248 (252) Горнаков В. С. 109, 753 (722) Гермов А. Ю. 109, 245 (252); Гусев Г. М. 111, 107 (121) 109, 552 (541) Горяйнов С. В. 111, 230 (218) Гусев Н. С. 111, 370 (333);

Горячук И. О. 111, 789 (663)

**111**, 815 (690)

Гершензон М. Е. 111, 237 (225)

```
Гусихин П. А. 109, 685 (663);
                                           Двуреченский А. В. 110, 393 (411);
                                                                                       Доронин И. В. 112, 725 (688)
Гусихин П. А. 111, 316 (282);
                                           Двуреченский А. В. 113, 58 (52);
                                                                                       Дорофенко А. В. 113, 527 ()
   113, 740 ()
                                               113, 501 ()
                                                                                       Дохликова Н. В. 109, 707 (684)
Гуськов С. Ю. 109, 525 (516);
                                           Девятов И. А. 109, 249 (256)
                                                                                       Дриаев Д. Г. 110, 793 (785)
   111, 149 (135)
                                           Дегтяренко Н. Н. 109, 413 (410);
                                                                                       Дричко И. Л. 110, 62 (68);
Гутаковский А. К. 109, 112 (116);
                                               112, 674 (630)
                                                                                           112, 54 (45)
Гутаковский А. К. 109, 258 (270);
                                           Дедкова А. А. 110, 772 (766)
                                                                                       Дровосеков А. Б. 112, 88 (84)
   109, 734 (700)
                                           Делев В. А. 109, 84 (87);
                                                                                       Дроздов М. Н. 111, 531 (467)
Гушин М. Е. 113, 96 (86)
                                           Делев В. А. 110, 607 (607);
                                                                                       Дружинин А. В. 112, 45 (37)
Давидович М. В. 109, 803 (768);
                                               113, 26 (23)
                                                                                       Дубиков А. В. 112, 644 (602)
   110, 465 (472)
                                           Демин В. А. 111, 469 (397);
                                                                                       Дубинин С. С. 114, 24()
Давыдов М. А. 109, 598 (578);
                                           Демин В. А. 112, 328 (305);
                                                                                       Дубровский А. А. 110, 614 (613)
Давыдов М. А. 112, 437 (399);
                                               112, 379 (357)
                                                                                       Дудкин Г. Н. 113, 229 (231)
Давыдов М. А. 113, 435();
                                           Демишев С. В. 109, 152 (150);
                                                                                       Дулебо А. И. 112, 650 (607)
   113, 763()
                                           Демишев С. В. 110, 241 (266);
                                                                                       Дьячкова И. Г. 111, 597 (489);
д'Акапито Ф. 109, 540 (529)
                                           Демишев С. В. 112, 451 (413);
                                                                                           113, 161 (149)
Далидчик Ф. И. 109, 709 (686)
                                               113, 533 ()
                                                                                       Дюгаев А. М. 112, 107 (101)
Данилов И. В. 110, 602 (603)
                                           Демьянов Б. Ф. 111, 767 (643)
                                                                                       Евдокимов С. В. 113, 291 (289)
Данилов М. В. 112, 484 (452)
                                           Десра В. 109, 91 (96)
                                                                                       Европейцев Е. А. 113, 507()
Данилов П. A. 109, 387 (382);
                                           Дехтярь М. Л. 113, 768 ()
                                                                                       Еганова Е. М. 113, 84 (75)
Данилов П. A. 110, 759 (755);
                                           Джао В. 109, 530 (521)
                                                                                       Егоров С. В. 109, 530 (521);
Данилов П. А. 112, 579 (533);
                                           Джентшел М. 110, 579 (581)
                                                                                           112, 743 (705)
Данилов П. А. 113, 299 (297);
                                           Димитриева С. Е. 112, 501 (471)
                                                                                       Егранов А. В. 113, 52 (47)
Данилов П. А. 113, 495 ();
                                           Дмитриев А. А. 110, 62 (68);
                                                                                       Екимов E. A. 112, 17 (13)
   113, 650 ()
                                               112, 54 (45)
                                                                                       Екомасов Е. Г. 109, 84 (87);
Данилов С. H. 113, 548 ()
                                           Дмитриенко В. Е. 110, 563 (568)
                                                                                       Екомасов Е. Г. 110, 607 (607);
Данюк А. В. 110, 421 (436)
                                           Днепровский В. С. 109, 375 (372);
                                                                                       Екомасов Е. Г. 111, 209 (193);
Даринская Е. В. 110, 255 ()
                                               109, 466 (454)
                                                                                           112, 357 (337)
Дворецкая Е. В. 113, 825 ()
                                           Доброносова А. А. 110, 569 (574)
                                                                                       Ельцов К. H. 111, 697 (591)
Дворецкий С. А. 109, 184 (191);
                                           Довженко Д. С. 109, 12 (12)
                                                                                       Емельянов A. B. 112, 379 (357)
Дворецкий С. А. 109, 679 (657);
                                           Долганов В. К. 110, 539 (545)
                                                                                       Еремеев C. B. 110, 190 (211)
Дворецкий С. А. 109, 835 (799);
                                           Долганов П. В. 110, 539 (545)
                                                                                       Еремин Б. 112, 388 (370)
Дворецкий С. А. 110, 274 (301);
                                           Доленко Т. А. 111, 625 (525)
                                                                                       Еремин М. В. 109, 242 (249);
Дворецкий С. А. 111, 682 (575);
                                           Долженко Д. Е. 112, 263 (246);
                                                                                           114, 31()
Дворецкий С. А. 111, 750 (633);
                                               113, 548 ()
                                                                                       Ермаков Ю. А. 109, 340 (334)
Дворецкий С. А. 112, 263 (246);
                                           Дормидонов А. Е. 113, 817 ()
                                                                                       Ерофеев М. В. 109, 584 (564)
Дворецкий С. А. 112, 541 (508);
                                           Дорожкин С. И. 109, 178 (185);
                                                                                       Есин А. А. 110, 165 (178);
Дворецкий С. А. 113, 399 ();
                                                                                           112, 644 (602)
                                           Дорожкин С. И. 110, 407 (424);
   113, 548 ()
                                           Дорожкин С. И. 111, 668 (562);
                                                                                       Ефимов М. А. 111, 335 (299)
Двуреченский А. В. 109, 258 (270);
                                               113, 697 ()
                                                                                       Жариков Е. В. 109, 360 (352)
```

Жаркова Е. В. 109, 466 (454) Зайцев-Зотов С. В. 112, 367 (346); Зотов А. **109**, 131 (136) Жаров А. А. 112, 73 (65) **114**, 36() Зубарева О. В. **110**, 443 (452); Зайцев М. Е. **109**, 209 (213) **113**, 370 () Жаров А. А. мл. **112**, 73 (65) Заколдаев Р. А. 113, 495(); Зубарев Н. М. 110, 443 (452); Жарова Н. А. 112, 73 (65) **113**, 650 () Зубарев Н. М. 113, 256 (259); Жаховский В. В. **113**, 84 (75); **113**, 311 (308) Заливако И. В. 112, 626 (585) **113**, 370 () Жевстовских И. В. 113, 52 (47) Залозная Е. Д. 113, 817 () Зудин И. Ю. 113, 96 (86) Желтиков A. M. **113**, 3(1) Замкова Н. Г. **109**, 265 (276) Зыбцев С. Г. **109**, 54 (51); Желтиков А. М. **112**, 22 (17); Зарезин А. М. **111**, 316 (282); Зыбцев С. Г. **112**, 93 (88); **113**, 304 (301) **113**, 740() **114**, 36() Жеребцов О. М. 109, 209 (213) Зарецкий Н. П. **111**, 149 (135) Зырянов В. Я. 109, 487 (478) Живая Я. А. 109, 325 (320) Заспел К. Э. 110, 474 (481) Зябловский А. А. 112, 725 (688); Жигадло Н. Д. 112, 523 (491) Захаров В. Е. 109, 312 (309) **114**, 43() Иванов А. А. **109**, 540 (529) Жиляева Е. И. 112, 623 (582) Захаров Ю. П. 111, 335 (299) Житлухин А. М. 110, 387 (405) Захарьин А. О. 109, 821 (781) Иванова А. К. **110**, 230 (250) Иванов Б. А. **110**, 474 (481) Жмерик В. Н. **113**, 507 () Звайгзне М. 109, 108 (112) Жолудев М. С. 111, 682 (575); Зверев В. Н. 112, 623 (582) Иванов К. Е. 111, 487 (422) Зегря Г. Г. **112**, 807 (769) Иванов С. В. 109, 147 (145); Жолудев М. С. 112, 541 (508); Иванов С. В. 109, 381 (377); **113**, 399() Зеленер Б. Б. **110**, 767 (761); **110**, 297 (313) Жукавин Р. X. **110**, 677 (677) **113**, 92 (82) Иванькова Е. М. 113, 385 () Жукова М. О. **113**, 237 (242) Зеленер Б. В. 110, 767 (761); Жумагулов Я. В. 109, 48 (45); **113**, 92 (82) Ивахненко С. А. **111**, 597 (489) **110**, 23 (31) Земба П. 110, 622 (624) Ивочкин В. Г. 109, 209 (213) Жуо Б. **109**, 91 (96) Земляная Е. В. **110**, 736 (722) Ивченко Е. Л. **113**, 10 (7) Игнатов А. И. 113, 84 (75) Журавлева E. H. **110**, 443 (452) Зиглер Й. 109, 835 (799) Игнатьева Д. О. 112, 759 (720) Журавлев А. С. 110, 260 (284); Зинган А. П. 111, 579 (477) **112**, 516 (485) Игошев П. А. **110**, 34 (41); Зиновьева А. Ф. 109, 258 (270); **110**, 741 (727) Заболотский А. А. 110, 303 (319) **113**, 58 (52) Заварцев Ю. Д. 110, 652 (654) Зиновьев А. Н. 114, 13() Иешкин А. Е. **111**, 531 (467) Завертяев М. В. 110, 652 (654) Зиновьев В. А. 109, 258 (270); Ижутов А. Л. 109, 209 (213) Загороднев И. В. 109, 124 (126) **113**, 58 (52) Изучеев В. И. 113, 291 (289) Загуменный А. И. 110, 652 (654) Зиновьев В. Г. 109, 209 (213) Изюров В. И. 114, 24() Иконников А. В. 109, 184 (191); Задиранов Ю. М. 109, 147 (145); Зиняков Т. А. 111, 65 (76) **113**, 248 (252) Зиятдинова М. З. 112, 774 (734) Иконников А. В. 111, 682 (575); Задорожная Л. А. 110, 750 (739); Злотников А. О. 109, 769 (736); Иконников А. В. **112**, 541 (508); **112**, 240 (225) **110**, 126 (140) Иконников А. В. **113**, 399 (); Зайцев-Зотов С. В. 110, 56 (62); **113**, 548 () Золотов Д. А. 111, 597 (489); Зайцев-Зотов С. В. 110, 178 (200); **113**, 161 (149) Ильичев Л. В. 113, 212 (207) Зайцев-Зотов С. В. 111, 45 (50); Золотько А. С. 113, 495 () Илюшин М. А. **111**, 291 (251) Зайцев-Зотов С. В. 112, 93 (88); Зонов Р. Г. 109, 739 (704) Иногамов Н. А. **113**, 84 (75);

440 ()	T. D. 110 110 ()	D D 440 0
<b>113</b> , 311 (308)	Капитан В. Ю. <b>110</b> , 700 (702) Кириенко В. В. <b>113</b> , 501 (	
Ионин А. А. <b>109</b> , 387 (382);	Капитан Д. Ю. <b>110</b> , 700 (702)	Кириллов В. Л. <b>110</b> , 614 (613)
Ионин А. А. <b>110</b> , 90 (107);	Капустин А. А. 109, 178 (185);	Кирова Е. М. <b>110</b> , 343 (359)
Ионин А. А. <b>110</b> , 230 (250);	Капустин А. А. <b>110</b> , 407 (424);	Кирпичев В. Е. <b>112</b> , 38 (31)
Ионин А. А. <b>110</b> , 591 (592);	Капустин А. А. <b>111</b> , 668 (562);	Кирпиченкова Н. В. <b>112</b> , 114 (112)
Ионин А. А. <b>110</b> , 759 (755);	<b>113</b> , 697 ()	Кирпиченков В. Я. <b>112</b> , 114 (112)
Ионин А. А. <b>112</b> , 579 (533);	Карабут Е. А. <b>110</b> , 443 (452)	Китаева Г. X. <b>112</b> , 297 (269)
Ионин А. А. <b>113</b> , 299 (297);	Караштин Е. А. <b>112</b> , 121 (122)	Киямов А. Г. <b>110</b> , 197 (217);
Ионин А. А. <b>113</b> , 365 ();	Кардакова А. И. $111$ , $88 (104)$	<b>113</b> , 450 ()
<b>113</b> , 495 ()	Карелина Л. Н. $112$ , $743 (705)$	Клавсюк А. Л. <b>110</b> , 331 (348)
Ионов А. Н. <b>109</b> , 162 (163)	Каримов Д. Н. <b>113</b> , 175 (162)	Кленов Н. В. <b>111</b> , 443 (371)
Иорш И. В. <b>109</b> , 805 (770)	Карки Д. <b>112</b> , 759 (720)	Климко Г. В. <b>109</b> , 147 (145);
Иоселевич А. С. <b>113</b> , 854 ()	Карманов Д. Е. <b>111</b> , 435 (363)	<b>113</b> , 248 (252)
Иоселевич П. А. <b>113</b> , 661 ()	Карпова О. В. <b>109</b> , 598 (578)	Клопотов Р. В. $111$ , $464 (392)$
Иоффе А. <b>110</b> , 579 (581)	Касахара Й. $114$ , 18 ()	Клочков А. В. $109$ , $43(40)$
Ирхин В. Ю. <b>110</b> , 34 (41);	Катаев А. Л. <b>111</b> , 789 (663)	Клочкова Н. В. $111$ , $723 (603)$
<b>110</b> , 741 (727)	Катаев В. $110$ , $325 (342)$	Клумов Б. А. <b>110</b> , 729 (715)
Исхаков Р. С. $111$ , 197 (183)	Катамадзе К. Г. <b>111</b> , 646 (543)	Клюев А. В. $110$ , $112(127)$
Ишибаши Т. $110$ , $204 (223)$	Катин К. П. <b>113</b> , $182(169)$	Кнап В. <b>109</b> , 91 (96)
Кабанов Ю. П. $109$ , $753 (722)$	Кац Е. И. <b>110</b> , 539 (545)	Книжник А. А. <b>111</b> , 305 (273)
Каган М. Ю. <b>111</b> , 321 (286)	Кацюба А. В. $109$ , $258 (270)$	Князев Б. А. $110$ , $677(677)$
Кадыков А. М. <b>109</b> , 91 (96);	Кашин А. М. <b>112</b> , 531 (498)	Князев Г. А. <b>112</b> , 314 (299);
<b>109</b> , 679 (657)	Кашкаров П. К. $112$ , $379 (357)$	<b>112</b> , 749 (710)
Казак Н. В. <b>113</b> , 267 (279)	Кашурников В. А. $109$ , $48 (45)$	Князев Ю. В. $110$ , $614 (613)$ ;
Казаков А. С. <b>112</b> , 263 (246);	Квачадзе В. Г. <b>110</b> , 793 (785)	<b>113</b> , 267 (279)
<b>113</b> , 548 ()	Квашнин А. Г. <b>111</b> , $380(343)$	Кобелев Н. П. $109$ , $473(460)$ ;
Казанцев Ю. Н. $109$ , $224 (232)$	Квашнин Д. Г. <b>111</b> , 244 (235);	Кобелев Н. П. <b>111</b> , 691 (586);
Казей З. А. $112$ , $189 (180)$	Квашнин Д. Г. <b>111</b> , 743 (627);	Кобелев Н. П. <b>111</b> , 806 (679);
Кайсин Б. Д. <b>110</b> , 268 (296);	<b>112</b> , 328 (305)	<b>113</b> , 751 ()
<b>112</b> , 62 (53)	Квон З. Д. <b>111</b> , 107 (121);	Кобяков А. В. <b>109</b> , $325 (320)$
Каламейцев А. В. <b>109</b> , 191 (198);	Квон З. Д. <b>112</b> , 174 (161);	Ковалев А. И. <b>113</b> , 468 ()
<b>109</b> , 842 (806)	Квон З. Д. <b>113</b> , 328 (331);	Ковалев И. М. <b>111</b> , 435 (363)
Калитеевский М. А. <b>111</b> , 763 (639)	<b>113</b> , 463 ()	Ковалев М. С. <b>113</b> , 365 ()
Калиш А. Н. <b>112</b> , 759 (720)	Кенжебекова А. И. $109$ , $452(441)$	Ковалевский В. В. <b>111</b> , 230 (218)
Камашев А. А. <b>110</b> , 325 (342)	Кецко В. А. <b>112</b> , 680 (636)	Ковалевский К. А. $110$ , $677 (677)$
Камерджиев С. П. <b>109</b> , 65 (69)	Кившарь Ю. <b>112</b> , 658 (615)	Ковалевский С. А. <b>109</b> , 709 (686)
Кандидов В. П. <b>113</b> , 817 ()	Кившарь Ю. С. <b>109</b> , 805 (770)	Коваленко С. Л. <b>111</b> , 697 (591)
Каневский В. М. <b>109</b> , 629 (610);	Кильмаметов А. Р. <b>110</b> , 622 (624);	Ковальчук О. Е. <b>112</b> , 579 (533)
Каневский В. М. <b>110</b> , 750 (739);	Кильмаметов А. Р. <b>111</b> , 674 (568);	Ковражкин Р. А. <b>111</b> , 223 (205)
<b>112</b> , 240 (225)	<b>112</b> , 45 (37)	Когай В. Я. <b>109</b> , 739 (704)

Кожаев М. А. <b>112</b> , 759 (720)	Константинов Д. <b>112</b> , 101 (95)	<b>113</b> , 533 ()	
Кожушнер М. А. <b>109</b> , 707 (684)	Кончаков Р. А. $109,\ 473\ (460);$ Краснорусский В. Н. $1$		
Козлова М. В. <b>109</b> , 466 (454)	Кончаков Р. А. <b>111</b> , 806 (679);	Красюк И. К. <b>109</b> , 525 (516)	
Козлов В. А. <b>110</b> , 652 (654)	<b>113</b> , 341 (345)	Крафтмахер Г. А. $109$ , $224$ (232)	
Козлов Д. А. <b>109</b> , 835 (799);	Конюх Д. А. <b>112</b> , 547 (513) Крахалев М. Н. <b>109</b> , 48		
<b>112</b> , 174 (161)	Копасов А. А. $113$ , $38(34)$	Крейнес Н. М. <b>112</b> , 88 (84)	
Козлов Д. В. <b>109</b> , 679 (657);	Копица Г. П. <b>113</b> , 385 ()	Кретова М. А. <b>109</b> , 473 (460);	
Козлов Д. В. <b>111</b> , 682 (575);	Коплак О. В. <b>109</b> , 753 (722);	<b>111</b> , 806 (679)	
<b>113</b> , 399 ()	<b>113</b> , 825 ()	Кривенков В. А. <b>109</b> , 108 (112);	
Козловская К. А. $110$ , $563 (568)$	Коренблит С. Э. $110$ , $291 (307)$	<b>112</b> , 584 (537)	
Козуб В. И. <b>110</b> , 482 (495)	Корнева А. $110$ , $622 (624)$	Кривобок В. С. <b>112</b> , 160 (145);	
Колачевский Н. Н. $112$ , $626 (585)$	Корнилов В. М. $110$ , $437 (447)$	<b>112</b> , 501 (471)	
Колдаева М. В. $110$ , $255()$	Коробейщиков Н. Г. $111$ , $531 (467)$	Кригель М. Й. $111$ , $674 (568)$	
Колесников С. В. <b>111</b> , 101 (116)	Коробков С. В. $113$ , $96 (86)$	Криштопенко С. С. <b>109</b> , 91 (96);	
Колмычек И. А. <b>111</b> , 370 (333)	Коробцев С. В. <b>111</b> , 305 (273)	<b>112</b> , 541 (508)	
Колобов А. В. <b>112</b> , 501 (471)	Королев Д. В. $113$ , $825()$	Кроиторь Д. $109$ , $547 (536)$	
Колоколов И. В. $111$ , $509 (442)$	Коротеев Г. А. <b>111</b> , 723 (603)	Кройчук М. К. $112$ , $730 (693)$	
Колотинский Д. А. $113$ , $514$ ()	Короткевич А. О. $109$ , $312 (309)$	Крутянский Л. М. $110$ , $666$ $(667)$	
Комаров Е. Н. <b>110</b> , 118 (133)	Коршунов М. М. $113$ , $63 (57)$	Крюкова А. Е. $112$ , $632 (591)$	
Комаров П. С. $113$ , $311 (308)$	Косарева О. Г. <b>111</b> , $27(31)$	Крюкова И. С. $112$ , $584 (537)$	
Комельков А. С. $112$ , $774 (734)$	Косач А. А. <b>112</b> , 114 (112)	Ксенофонтов В. $109$ , $547 (536)$	
Комиссарова М. В. $111$ , $355 (320)$	Костина Ю. В. $110$ , $456 (464)$	Кугель К. И. <b>109</b> , 557 (546);	
Комков О. С. $109$ , $381 (377)$	Костин В. А. <b>110</b> , 449 (457);	Кугель К. И. $112$ , $693 (651)$ ;	
Компанец В. О. $111$ , $27(31)$ ;	<b>112</b> , 81 (77)	<b>112</b> , 764 (725)	
Компанец В. О. <b>113</b> , 365 ();	Костров А. В. $110$ , $237(262)$	Кудасов Ю. Б. $113$ , $168 (155)$	
Компанец В. О. $113$ , $723()$ ;	Котова О. Д. <b>111</b> , $625 (525)$	Кудрявцев А. Г. $111$ , $112(126)$ ;	
<b>113</b> , 817 ()	Котов А. Ю. $110$ , $3(1)$ ;	<b>113</b> , 406 ()	
Конарев П. В. $112$ , $632 (591)$	<b>112</b> , 9 (6)	Кудрявцев К. Е. $110$ , $297 (313)$	
Кондорский А. Д. <b>112</b> , 736 (699)	Котов С. А. <b>110</b> , 118 (133)	Кудрявцев О. С. $112$ , 17 (13)	
Кондратьев В. И. <b>113</b> , 809 ()	Коханчик Л. С. $113$ , 797 ()	Кудряшов И. А. $111$ , $435 (363)$	
Кондратюк Е. С. $113$ , 291 (289)	Kox K. A. $113$ , 683 ()	Кудряшов С. И. $109$ , $301(298)$ ;	
Кондрин М. В. <b>110</b> , 602 (603)	Кочаровская Е. Р. $113$ , $655$ ()	Кудряшов С. И. $109$ , $387 (382)$ ;	
Кон И. А. <b>111</b> , 45 (50);	Кочергин И. В. <b>112</b> , 291 (263)	Кудряшов С. И. $109$ , $442(432)$ ;	
<b>112</b> , 93 (88)	Кочиев М. В. $112$ , $650 (607)$	Кудряшов С. И. $110$ , $90(107)$ ;	
Консежо К. <b>109</b> , 91 (96);	Кочурин Е. А. $109$ , $306 (303)$	Кудряшов С. И. $110$ , $230(250)$ ;	
<b>112</b> , 541 (508)	Кравцов Е. А. $109$ , $408 (406)$	Кудряшов С. И. $110$ , $591 (592)$ ;	
Константинова Е. А. $112$ , $562 (527)$	Крайнов И. В. $111$ , $820 (703)$	Кудряшов С. И. $110$ , $759 (755)$ ;	
Константинова Е. И. $109$ , $245$ (252);	Красавин А. В. $109$ , $48 (45)$ ;	Кудряшов С. И. $112$ , 579 (533);	
<b>109</b> , 552 (541)	<b>110</b> , 23 (31)	Кудряшов С. И. $113$ , 299 (297);	
Константинов А. М. $109$ , $828 (790)$	Красиков К. М. <b>112</b> , 451 (413);	Кудряшов С. И. $113$ , $365()$ ;	

```
Кудряшов С. И. 113, 495 ();
                                           Кулик Л. В. 109, 258 (270);
                                                                                       Лежнев С. К. 110, 437 (447)
   113, 650 ()
                                           Кулик Л. В. 110, 260 (284);
                                                                                       Лезова И. Е. 110, 521 (529)
Кузмичев А. Н. 112, 314 (299);
                                           Кулик Л. В. 112, 516 (485);
                                                                                       Лемзяков C. A. 111, 641 (539)
   112, 749 (710)
                                               113, 58 (52)
                                                                                       Леонидов А. В. 113, 620 ()
Кузмичёв А. Н. 111, 52 (62)
                                           Куликов А. Г. 112, 374 (352)
                                                                                       Леонидов И. А. 109, 245 (252);
Кузнеделев Д. Д. 112, 9 (6)
                                           Куликов К. В. 109, 36 (33);
                                                                                          109, 552 (541)
Кузнецов А. В. 109, 540 (529);
                                               110, 149 (160)
                                                                                       Леонова Т. И. 113, 147 (135)
   113, 533()
                                           Куликов Н. С. 109, 679 (657)
                                                                                       Леонтьев А. А. 112, 297 (269)
Кузнецов В. А. 110, 260 (284);
                                           Кумамото А. 114, 18 ()
                                                                                       Лерер А. M. 112, 152 (138)
   112, 516 (485)
                                           Куницына Е. И. 109, 753 (722)
                                                                                       Лерман Л. М. 110, 474 (481)
Кузнецов В. И. 110, 47 (54)
                                           Куницына Е. И. 113, 825 ()
                                                                                       Лимонов М. Ф. 109, 347 (340)
Кузнецов В. С. 110, 72 (85)
                                           Кунцевич А. Ю. 111, 166 (151);
                                                                                       Линьков П. 109, 108 (112)
Кузнецов Е. А. 109, 231 (239);
                                           Кунцевич А. Ю. 111, 750 (633);
                                                                                       Лисянский А. А. 112, 725 (688)
   110, 106 (121)
                                               112, 650 (607)
                                                                                       Литасов К. Д. 111, 160 (145);
Кузнецов К. А. 112, 297 (269)
                                           Курганов А. А. 111, 435 (363)
                                                                                          111, 230 (218)
Кузнецов С. В. 111, 625 (525)
                                           Кутлин А. Г. 113, 38 (34)
                                                                                       Литвинов А. В. 110, 723 (707)
                                           Кутовой С. А. 110, 652 (654)
                                                                                       Литвинов А. Н. 113, 791 ()
Кузьмин В. А. 110, 307 (323)
                                           Кутузов А. С. 111, 154 (139)
                                                                                       Лобанов И. С. 113, 223 (226);
Кузьмичева Т. Е. 111, 388 (350);
                                           Кучинский Э. З. 112, 603 (555)
                                                                                          113, 833 ()
Кузьмичева Т. Е. 112, 523 (491);
                                                                                       Ловцов С. В. 110, 291 (307)
                                           Кучмижак А. А. 110, 759 (755)
   112, 822 (786)
                                                                                       Лозин О. И. 112, 114 (112)
                                           Кучугов П. А. 111, 149 (135)
Кузьмичев С. А. 111, 388 (350);
                                           Кытина Е. В. 112, 562 (527)
                                                                                       Ломаченко К. A. 109, 615 (594)
Кузьмичев С. А. 112, 523 (491);
                                                                                       Ломоносова Т. А. 113, 320 (317)
                                           Лабзовский Л. H. 110, 363 (382)
   112, 822 (786)
                                           Лавриков А. С. 110, 750 (739)
                                                                                       Луговской А. А. 109, 595 (575)
Кукушкин В. И. 112, 38 (31)
                                           Ладыгина В. П. 111, 197 (183)
                                                                                       Лузанов В. А. 109, 170 (171)
Кукушкин И. В. 109, 685 (663);
                                           Лапушкин С. В. 113, 147 (135)
                                                                                       Лукичев В. Ф. 111, 646 (543)
Кукушкин И. В. 110, 260 (284);
                                           Ларюшин И. Д. 112, 81 (77)
                                                                                       Лукьянов А. Е. 109, 48 (45);
Кукушкин И. В. 110, 268 (296);
                                                                                          110, 23 (31)
Кукушкин И. В. 110, 597 (599);
                                           Латышев А. В. 110, 337 (354);
Кукушкин И. В. 111, 316 (282);
                                               113, 328 (331)
                                                                                       Лукьянчук Б. С. 112, 361 (341)
                                           Лахманский К. E. 112, 626 (585)
                                                                                       Любимов В. H. 112, 127 (127)
Кукушкин И. В. 112, 38 (31);
                                           Лачинов А. H. 110, 437 (447)
                                                                                       Любовская Р. Н. 112, 623 (582)
Кукушкин И. В. 112, 62 (53);
                                           Лебедев В. В. 111, 509 (442)
                                                                                       Любовский Р. Б. 112, 623 (582)
Кукушкин И. В. 112, 516 (485);
                                                                                       Любутин И. С. 109, 547 (536);
                                           Леви М. 112, 759 (720)
Кукушкин И. В. 113, 112 (102);
                                           Левин А. 109, 131 (136)
                                                                                       Любутин И. С. 110, 557 (562);
Кукушкин И. В. 113, 689();
                                                                                          112, 374 (352)
                                           Левин В. М. 113, 68 (61)
   113, 740 ()
                                                                                       Лютостанский Ю. С. 111, 723 (603)
Кулагина М. М. 109, 147 (145)
                                           Левченко А. А. 110, 545 (551);
                                               111, 653 (549)
                                                                                       Лядов Н. М. 113, 450 ()
Кулагин Н. Е. 110, 474 (481)
                                                                                       Ляпин С. Г. 110, 687 (687)
Кулатов Э. Т. 109, 98 (102)
                                           Левченко А. О. 112, 579 (533)
Кулеева Н. А. 112, 603 (555)
                                           Леднев В. Н. 109, 447 (437);
                                                                                       Лященко С. А. 110, 155 (166)
Кулеш Н. А. 110, 248 (273)
                                               111, 464 (392)
                                                                                       Мавринский В. В. 109, 634 (615)
```

Магарилл Л. И. **110**, 534 (540) Маркушев В. М. **110**, 750 (739) Меньшов В. Н. **109**, 98 (102); Мажорин Г. С. **110**, 569 (574) Мартемьянов В. П. **109**, 209 (213) **110**, 777 (771) Мазилкин А. А. 111, 674 (568); Меньщикова Т. В. **109**, 118 (121) Мартовицкий В. П. **111**, 166 (151); Месяц Г. А. **113**, 256 (259); **112**, 45 (37) **112**, 501 (471) Мазилкин И. A. **110**, 622 (624); Мартышкин А. А. **110**, 526 (533) **113**, 370 () Мазилкин И. А. 111, 514 (447); Мартьянов О. H. **110**, 614 (613) Мешков И. Н. 113, 784 () **112**, 275 (257) Марченко И. Г. **109**, 694 (671) Мигдал К. П. **113**, 299 (297) Мазур Е. А. **109**, 413 (410) Марченко И. И. **109**, 694 (671) Микушкин В. М. **112**, 801 (764) Мазуринкий М. И. **112**, 152 (138) Марчишин И. В. **109**, 401 (400); Милованович Д. **110**, 90 (107) Маишеев В. А. **112**, 3(1) Мильштейн А. И. 111, 215 (197); Марчишин И. В. 110, 337 (354); Майдыковский А. И. 111, 370 (333) **112**, 352 (332) **110**, 671 (672) Майзлах А. А. **114**, 36() Маслаков К. И. 111, 487 (422) Минакова В. Е. **110**, 56 (62); Майлыбаев А. А. **110**, 106 (121) Маслова E. Э. **109**, 347 (340) Минакова В. Е. **110**, 178 (200); Майоров С. А. **109**, 452 (441) Маслов М. M. **113**, 182 (169) **112**, 367 (346) Макаров А. Г. **110**, 700 (702) Массалимов Б. И. 111, 475 (403) Минеев В. П. **111**, 833 (715) Макарова К. В. **110**, 700 (702) Миннегалиев М. М. **113**, 3 (1) Масюгин А. H. **110**, 204 (223); Макарова М. В. **109**, 408 (406) **112**, 680 (636) Миннеханов А. А. 112, 379 (357); Макаров А. С. **109**, 473 (460); **112**, 562 (527) Матюшкин Л. Б. **109**, 30 (28) Миньков Г. М. **110**, 274 (301) Макаров А. С. 111, 691 (586); Ma X. 111, 501 (434) Миролюбов М. А. **113**, 553 () Макаров А. С. 113, 341 (345); Махалов В. Б. **109**, 564 (552) **113**, 751() Махмудиан М. М. **109**, 191 (198); Миронов A. **111**, 591 (494); Макаров В. А. 109, 666 (642) Махмудиан М. M. **109**, 337 (331); **113**, 757() Макаров Г. H. **111**, 361 (325); Миронов С. В. **113**, 38 (34); Махмудиан М. M. **109**, 842 (806); 112, 226 (213) **113**, 102 (92) **112**, 246 (230) Макаровский O. 109, 496 (482) Мирошниченко И. Б. 111, 335 (299) Мацукатова А. Н. 112, 379 (357) Машко А. М. **111**, 757 (608) Максимов А. А. 110, 806 (799) Митрофанов А. В. **112**, 22 (17); Максимова О. A. **110**, 155 (166) Медведев Д. Д. 111, 305 (273) **113**, 304 (301) Максимычев А. В. 113, 523 () Михайлов Н. H. **109**, 184 (191); Медведев С. А. 109, 547 (536) Макушина В. А. 112, 774 (734) Медриш И. В. **111**, 160 (145) Михайлов Н. H. **109**, 679 (657); Михайлов Н. H. **109**, 835 (799); Малахов Д. В. 109, 452 (441) Межов-Деглин Л. П. **110**, 545 (551); Малкин Б. З. 110, 241 (266) **111**, 653 (549) Михайлов Н. H. **110**, 274 (301); Малышев М. C. **110**, 237 (262) Мейлахс А. П. 111, 375 (338) Михайлов Н. H. **111**, 107 (121); Мальцев Е. И. **111**, 475 (403) Мейстерсон А. А. 111, 757 (608) Михайлов Н. Н. **111**, 682 (575); Мальцев В. П. **109**, 224 (232) Мельник H. H. **110**, 759 (755) Михайлов Н. H. **111**, 750 (633); Мамин Г. В. **111**, 52 (62) Михайлов Н. H. **112**, 174 (161); Мельников A. C. **113**, 38 (34); Мамрашев А. А. 111, 75 (85) Михайлов Н. H. **112**, 263 (246); **113**, 102 (92) Манцевич В. Н. 109, 375 (372) Менушенков А. П. 109, 540 (529); Михайлов H. H. **112**, 541 (508); Мареев Е. И. 112, 780 (739) **110**, 23 (31) Михайлов Н. H. **113**, 399 (); Марк Г. 112, 328 (305) Меньшиков Л. И. 113, 523 () Михайлов Н. H. **113**, 463 (); Маркевич С. А. 113, 486 () Меньшиков П. Л. **113**, 523 () **113**, 548 ()

113, 58 (52) 5, 77 (69) 3. B. 110, 579 (581) 112, 268 (250) 109, 209 (213) 110, 700 (702)
3. B. <b>110</b> , 579 (581) <b>112</b> , 268 (250) <b>109</b> , 209 (213) <b>110</b> , 700 (702)
<b>112</b> , 268 (250) <b>109</b> , 209 (213) <b>110</b> , 700 (702)
<b>109</b> , 209 (213) <b>110</b> , 700 (702)
<b>110</b> , 700 (702)
<b>113</b> , 689 ()
<b>110</b> , 597 (599)
<b>.3</b> , 229 (231)
<b>3</b> , 507 ()
. <b>110</b> , 56 (62);
6)
<b>109</b> , 54 (51)
<b>110</b> , 197 (217)
<b>110</b> , 526 (533)
И. <b>109</b> , 371 (368)
M. <b>111</b> , 443 (371)
<b>110</b> , 3 (1)
. <b>111</b> , 27 (31)
I. <b>109</b> , 162 (163)
<b>113</b> , 514 ()
<b>111</b> , 682 (575)
<b>111</b> , 215 (197);
2)
<b>112</b> , 268 (250)
<b>112</b> , 88 (84);
<b>112</b> , 160 (145);
1)
l <b>14</b> , 36 ()
A. <b>110</b> , 521 (529)
<b>10</b> , 633 (635)
. <b>109</b> , 496 (482)
<b>3</b> . <b>109</b> , 401 (400);
3. <b>110</b> , 337 (354);
3. <b>110</b> , 671 (672);
7)
<b>09</b> , 689 (667);

<b>111</b> , 251 (245)	<b>113</b> , 126 (115)	Пестовский Н. В. <b>110</b> , 652 (654)	
Носов А. П. <b>114</b> , 24 ()	Павлов С. Г. <b>110</b> , 677 (677)	Петелин А. Л. 109, 209 (213)	
Нуждин А. Д. <b>109</b> , 340 (334)	Павлов Т. Н. <b>110</b> , 248 (273)	Петин А. Н. <b>111</b> , 361 (325);	
Нурмухаметов А. Р. <b>114</b> , 31 ()	Пай Воей Ву <b>110</b> , 400 (417)	<b>112</b> , 226 (213)	
Образцова Е. А. <b>109</b> , 452 (441)	Палий А. В. <b>113</b> , 825 ()	Петржик Е. А. <b>113</b> , 678 ()	
Овчинникова Е. Н. <b>110</b> , 563 (568)	Панайотова С. А. <b>110</b> , 736 (722)	Петров А. А. <b>110</b> , 652 (654)	
Овчинникова Т. М. <b>112</b> , 258 (241)	Панарин В. А. <b>110</b> , 72 (85)	Петров А. В. <b>110</b> , 197 (217)	
Овчинников С. Г. <b>109</b> , 265 (276);	Панкрац А. И. <b>111</b> , 197 (183)	Петров А. Г. <b>109</b> , 821 (781);	
Овчинников С. Г. <b>110</b> , 155 (166);	Панов А. Д. <b>111</b> , 435 (363)	<b>112</b> , 165 (150)	
Овчинников С. Г. <b>112</b> , 258 (241);	Панов В. И. <b>111</b> , 396 (357)	Петров В. Ю. <b>109</b> , 797 (762)	
<b>112</b> , 268 (250)	Панов Н. А. <b>111</b> , 27 (31)	Петров Е. К. <b>109</b> , 118 (121)	
Огаркова Ю. Л. <b>109</b> , 547 (536)	Паршиков А. Н. <b>113</b> , 311 (308)	Петров И. Д. <b>111</b> , 61 (72)	
Оглобличев В. В. <b>114</b> , 24 ()	Паршин П. П. <b>110</b> , 30 (37)	Петров М. И. <b>113</b> , 553 ()	
Одинцов С. А. <b>110</b> , 414 (430);	Патрин Г. С. <b>109</b> , 325 (320)	Петров Н. И. <b>109</b> , 19 (18)	
<b>110</b> , 526 (533)	Патрин К. Г. <b>109</b> , 325 (320)	Петров Ю. В. <b>113</b> , 311 (308)	
Олейничук Е. А. <b>113</b> , 650 ()	Пахаруков Ю. В. <b>109</b> , 634 (615)	Петросян А. С. <b>110</b> , 314 (329);	
Ольшанецкий М. <b>109</b> , 131 (136)	Пахомов А. В. <b>110</b> , 9 (15);	<b>111</b> , 65 (76)	
Ольшанецкий Е. Б. <b>112</b> , 174 (161)	<b>113</b> , 237 (242)	Петруша С. В. <b>111</b> , 88 (104)	
Онищенко Е. Е. <b>112</b> , 501 (471)	Пацаева С. В. <b>111</b> , 625 (525)	Петрушевич Ю. В. <b>110</b> , 387 (405)	
Опенов Л. А. <b>109</b> , 746 (710)	Пашенькин И. Ю. <b>111</b> , 815 (690)	Петухов М. Н. <b>111</b> , 396 (357)	
Орешкин А. И. <b>111</b> , 396 (357)	Пеленович В. О. <b>111</b> , 531 (467)	Пех П. Л. <b>111</b> , 80 (90)	
Орешкин С. И. <b>111</b> , 396 (357)	Пельменев А. А. <b>110</b> , 545 (551)	Пивоваров А. А. <b>109</b> , 219 (222);	
Орлинский С. Б. <b>111</b> , 52 (62)	Пеньков Ф. М. <b>113</b> , 229 (231)	Пивоваров А. А. <b>110</b> , 217 (237);	
Орлита М. <b>109</b> , 184 (191);	Перваков К. С. <b>111</b> , 475 (403);	Пивоваров А. А. <b>110</b> , 376 (394);	
<b>112</b> , 541 (508)	<b>112</b> , 822 (786)	Пивоваров А. А. <b>112</b> , 493 (457);	
Орлов А. О. <b>111</b> , 311 (278)	Первишко А. А. <b>111</b> , 328 (293)	<b>113</b> , 777 ()	
Орлов А. П. <b>109</b> , 196 (203);	Перевалов Т. В. $109$ , $112 (116)$	Пидгайко Д. А. <b>113</b> , 809 ()	
Орлов А. П. <b>110</b> , 400 (417);	Пержу А. В. <b>110</b> , 700 (702)	Пикалов А. М. $113$ , $527()$	
<b>112</b> , 93 (88)	Перминов Н. С. $111$ , $602 (500)$	Пинто-Нето Н. $110$ , $515 (523)$	
Орлов Ю. С. <b>112</b> , 258 (241);	Пермякова И. Е. $113$ , $468 ()$	Пио Б. А. <b>109</b> , 184 (191)	
<b>112</b> , 268 (250)	Пермяков Д. В. $113$ , $809$ ()	Пиршин И. В. $112$ , 774 (734)	
Осипенко А. П. <b>111</b> , 723 (603)	Перно Ф. <b>110</b> , 666 (667)	Писарев В. В. $109$ , $689 (667)$ ;	
Осипов А. А. <b>110</b> , 368 (387);	Першина Е. А. $113$ , $84 (75)$	<b>110</b> , 343 (359)	
<b>113</b> , 410 ()	Першин С. М. $109$ , $447 (437)$ ;	Пискунов Ю. В. $114$ , 24 ()	
Ошурко В. Б. <b>109</b> , 598 (578);	Першин С. М. <b>109</b> , 598 (578);	Пластовец В. Д. $109$ , $761 (729)$	
Ошурко В. Б. $113$ , $435()$ ;	Першин С. М. <b>111</b> , 464 (392);	Платонов К. Ю. <b>112</b> , $598 (550)$	
<b>113</b> , 763 ()	Першин С. М. $112$ , $437 (399)$ ;	Плесеник А. $109$ , $36(33)$	
Павлова А. А. $113$ , $385$ ()	Першин С. М. $113$ , $435()$ ;	Побойко И. В. $112$ , $251 (234)$	
Павлова Т. В. $111$ , $697 (591)$	<b>113</b> , 763 ()	Подливаев А. И. $109$ , 746 (710);	
Павлов Н. С. <b>113</b> , $63(57)$ ;	Песоцкий С. И. $112$ , $623 (582)$	Подливаев А. И. $110$ , $692 (691)$ ;	

Подливаев А. И. 111, 728 (613); Прокофьев А. О. **109**, 312 (309) Ривнюк А. С. **113**, 299 (297); **113**, 182 (169) Просвирин И. П. 109, 112 (116) **113**, 650 () Подорожный Д. М. 111, 435 (363) Протасова С. Г. **112**, 45 (37) Риннерт Э. **109**, 371 (368) Покровский В. Я. 109, 54 (51); Рогалев А. **110**, 563 (568) Протогенов А. П. **109**, 320 (316) Покровский В. Я. 110, 400 (417); Рогов В. В. **111**, 815 (690) Прохоров В. Е. 112, 591 (543) **114**, 36() Прошин Ю. Н. 111, 154 (139) Рогожин В. Б. **110**, 521 (529) Полищук Б. В. 113, 291 (289) Прудковский П. А 111, 494 (428) Родин А. О. **111**, 514 (447) Полищук И. Я. 112, 618 (577) Прудкогляд А. Ф. 111, 291 (251) Родионов А. А. 110, 652 (654) Полников В. Г. 111, 501 (434) Пряников Д. С. **111**, 291 (251) Родионова В. В. 110, 799 (793) Полушина Г. Е. **110**, 521 (529) Пугачев М. В. 112, 650 (607) Родионов Д. А. 109, 124 (126) Полушин С. Г. 110, 521 (529) Пудалов В. М. 111, 237 (225) Родионов И. А. 110, 569 (574) Полуэктов И. В. 113, 223 (226) Пунегов В. И. 109, 651 (628); Родкин Д. М. 109, 435 (425) Полюшкин А. О. 109, 209 (213) **111**, 448 (376) Родный П. А. **112**, 240 (225) Попель С. И. 113, 440 () Пури А. 109, 540 (529) Родякина Е. Е. **113**, 328 (331) Попов А. М. 111, 443 (371) Пустовойт В. И. 109, 19 (18) Родякина Е. Е. **110**, 337 (354); Попова М. Н. 109, 360 (352) Путилов А. В. **109**, 789 (755) **110**, 671 (672) Попов А. Ю. 109, 723 (689) Пухов А. А. 112, 725 (688) Роенко А. А. 112, 9 (6) Попов В. В. 109, 540 (529) Пушкин А. В. **112**, 508 (478) Рожков А. В. 112, 693 (651); Попов Е. Н. 111, 846 (727) Пшеничный К. А. 110, 799 (793) **112**, 764 (725) Попов З. И. 111, 743 (627) Разова А. А. **113**, 399 () Рожко М. В. 112, 22 (17); Попов К. Е. 111, 295 (255) Разумов В. Ф. 110, 307 (323) **113**, 304 (301) Пополитова Д. В. 112, 702 (666) Ракович Ю. П. **109**, 12 (12) Розанов Н. Н. 109, 657 (634); Попруженко С. В. 113, 320 (317) Рамалеви П. **111**, 591 (494) Розанов Н. Н. **110**, 9 (15); Порфирьев А. П. 110, 759 (755) Рамазанов М. К. **109**, 610 (589) Розанов Н. Н. 111, 586 (484); Посух В. Г. 111, 335 (299) Ратников П. В. **111**, 80 (90) Розанов Н. Н. 111, 794 (668); Потапкин Б. В. 111, 305 (273) Раттенбахер Д. 112, 17 (13) Розанов Н. Н. 113, 157 (145); Потемкин Ф. В. **112**, 508 (478); Рафайя Д. 111, 674 (568) **113**, 237 (242) **112**, 780 (739) Розенбаум В. М. 112, 341 (316); Рахлин М. В. **109**, 147 (145); Потемски М. 109, 184 (191); Рахлин М. В. **112**, 17 (13); **113**, 768 () **112**, 541 (508) Романовский В. А. 111, 291 (251) **113**, 248 (252) Поткина М. Н. 113, 833 () Рахманов А. Л. 112, 693 (651); Романцова Т. В. **114**, 18 () Поторочин Д. В. **113**, 189 (176) **112**, 764 (725) Ромашевский С. А. **113**, 84 (75); Потылицын А. П. 109, 584 (564); Рахмонов И. Р. **109**, 36 (33); **113**, 311 (308) Потылицын А. П. 109, 809 (771); Рахмонов И. Р. **110**, 149 (160); Ромшин А. М. 112, 17 (13) **111**, 295 (255) **110**, 736 (722) Рощин Б. С. 109, 340 (334); Л. Преображенский В. 110. **113**, 175 (162) Рашков Р. 113, 757 () 666 (667) Резников М. 111, 750 (633) Рубан В. П. 109, 521 (512); Пресняков И. А. 111, 487 (422) Решетников С. Ф. 113, 223 (226) Рубан В. П. 111, 455 (383); Притула И. М. 110, 255 () Проглядо В. В. 109, 408 (406) Решетняк В. В. 110, 658 (659) Рубан В. П. 112, 554 (520); Пройдакова В. Ю. 111, 625 (525) Решетов В. А. 111, 846 (727) Рубан В. П. **113**, 539 ();

<b>113</b> , 848 ()	Рябчук С. В. <b>112</b> , 22 (17)	Салецкий А. М. <b>110</b> , 331 (348);	
Руденко А. А. <b>109</b> , 387 (382);	Рязанов В. В. <b>112</b> , 743 (705)	<b>111</b> , 101 (116)	
<b>110</b> , 759 (755)	Рязанов Д. К. <b>109</b> , 209 (213)	Салимов Р. К. <b>109</b> , 504 (490);	
Руденко В. В. <b>113</b> , 267 (279)	Саакян С. А. <b>110</b> , 767 (761);	Салимов Р. К. <b>111</b> , 209 (193);	
Руднев В. А. <b>114</b> , 6 ()	<b>113</b> , 92 (82)	<b>112</b> , 357 (337)	
Рудяк В. Ю. <b>109</b> , 487 (478)	Сабуров А. В. <b>109</b> , 579 (559)	Салимов Т. Р. <b>112</b> , 357 (337)	
Руменских М. С. <b>111</b> , 335 (299)	Савин Д. А. <b>113</b> , 223 (226)	Сальников С. Г. <b>111</b> , 215 (197);	
Румянцев Б. В. <b>112</b> , 780 (739)	Савинов С. Ю. <b>110</b> , 652 (654)	<b>112</b> , 352 (332)	
Румянцев В. В. <b>109</b> , 91 (96);	Савиных А. С. <b>109</b> , 460 (449)	Самарин А. Н. $110$ , $241 (266)$	
Румянцев В. В. <b>109</b> , 679 (657);	Савотченко С. Е. $109$ , $778 (744)$	Самойлов Р. М. <b>109</b> , 209 (213);	
Румянцев В. В. <b>111</b> , 682 (575);	Савченков Е. Н. <b>110</b> , 165 (178);	Самойлов Р. М. <b>112</b> , 211 (199);	
<b>113</b> , 399 ()	<b>112</b> , 644 (602)	<b>112</b> , 487 (455)	
Рунов В. В. <b>113</b> , 385 ()	Савченко М. Л. <b>112</b> , 174 (161)	Самосват Д. М. $112$ , $807 (769)$	
Рупасов А. Е. <b>112</b> , 579 (533);	Сагатова Д. Н. $111$ , $160 (145)$	Самохвалов А. А. <b>109</b> , 301 (298);	
Рупасов А. Е. <b>113</b> , 495 ();	Сагатов Н. Е. $111$ , $160 (145)$	Самохвалов А. А. $109$ , $442(432)$ ;	
<b>113</b> , 650 ()	Садаков А. В. <b>111</b> , $475(403)$	<b>110</b> , 230 (250)	
Русина Г. Г. <b>109</b> , 621 (600);	Садовников А. В. $110$ , $414(430)$ ;	Самохвалов А. В. <b>113</b> , 38 (34);	
<b>110</b> , 190 (211)	<b>110</b> , 526 (533)	<b>113</b> , 102 (92)	
Рут О. Э. <b>110</b> , 274 (301)	Садовников С. И. $109$ , $605 (584)$ ;	Самохвалов П. $109$ , $108$ (112) Самохвалов П. С. $112$ , $584$ (537)	
Рутьков Е. В. <b>110</b> , 683 (683);	Садовников С. И. $112$ , $203 (193)$ ;		
Рутьков Е. В. <b>111</b> , 520 (452);	<b>113</b> , 733 ()	Самусев А. К. $113$ , $553()$ ;	
<b>113</b> , 595 ()	Садовский М. В. $109$ , $165 (166)$ ;	<b>113</b> , 809 ()	
Руффенах С. <b>109</b> , 91 (96);	Садовский М. В. $111$ , $203 (188)$ ;	Самцевич А. И. <b>111</b> , 380 (343)	
<b>112</b> , 541 (508)	Садовский М. В. $112$ , $603 (555)$ ;	Сандалов И. С. <b>109</b> , 265 (276)	
Рыбальченко Г. В. $111$ , $166 (151)$	<b>113</b> , 600 ()	Сандлер В. А. <b>113</b> , 348 (352)	
Рыбин А. Е. <b>110</b> , 700 (702)	Садовский С. А. $113$ , 291 (289)	Сандомирский Ю. Е. $112$ , $3(1)$ ;	
Рыбин М. В. <b>109</b> , 347 (340)	Садыков А. Ф. <b>114</b> , 24 ()	<b>113</b> , 223 (226)	
Рыжкин И. А. <b>110</b> , 112 (127);	Сазонов С. В. <b>111</b> , 355 (320);	Сандуковский В. Г. <b>113</b> , 147 (135)	
Рыжкин И. А. <b>112</b> , 531 (498);	Сазонов С. В. <b>112</b> , 30 (24);	Сандуляну Ш. В. <b>112</b> , 165 (150)	
<b>113</b> , 457 ()	Сазонов С. В. <b>112</b> , 306 (283);	Санина В. А. <b>110</b> , 118 (133);	
Рыжкин М. И. <b>110</b> , 112 (127);	<b>113</b> , 612 ()	<b>111</b> , 826 (709)	
Рыжкин М. И. <b>112</b> , 531 (498);	Сазонтов С. А. <b>109</b> , 209 (213)	Сапожников М. В. $111$ , $815 (690)$	
<b>113</b> , 457 ()	Саиджонов Б. М. <b>109</b> , 375 (372);	Сараева И. Н. <b>110</b> , 591 (592);	
Рыжкова Д. А. <b>113</b> , 669 ()	<b>109</b> , 466 (454)	<b>113</b> , 365 ()	
Рыльков В. В. <b>109</b> , 170 (171);	Саитов И. М. <b>110</b> , 184 (206);	Сарвадий С. Ю. $109$ , $707 (684)$	
Рыльков В. В. <b>112</b> , 88 (84);	<b>111</b> , 175 (162)	Саргсян А. <b>113</b> , 629 ()	
<b>112</b> , 379 (357)	Сайко А. П. <b>113</b> , 486 ()	Саркисян Д. <b>113</b> , 629 ()	
Рюмцев Е. И. <b>110</b> , 521 (529)	Сайфутдинова А. А. $112$ , $443  (405)$	Сарманова О. Э. <b>111</b> , 625 (525)	
Рябова Л. И. <b>112</b> , 263 (246);	Сайфутдинов А. И. $112$ , $443 (405)$	Сарычев М. Н. $113$ , $52 (47)$	
<b>113</b> , 548 ()	Салахов М. X. <b>110</b> , 772 (766)	Сасвати Дхара 111, 591 (494)	

Сатунин С. Н. 112, 667 (623) Синев И. С. 113, 809 () Смирнов Н. А. 109, 387 (382); Саутенков В. А. 110, 767 (761); Синица Л. Н. 109, 595 (575) Смирнов Н. А. **110**, 90 (107); **113**, 92 (82) Синицкая А. В. **110**, 291 (307) Смирнов Н. А. **110**, 230 (250); Сафаргалиев Р. Ф. 109, 634 (615) Синицын В. В. 112, 531 (498) Смирнов Н. А. 112, 579 (533); Сафин Т. Р. 109, 43 (40); **113**, 650 () Синченко А. А. 109, 196 (203) **111**, 52 (62) Сираев Ф. М. **111**, 154 (139) Смирнов С. В. 110, 165 (178) Сафиуллин К. Р. 109, 43 (40) Сиразов Р. А. **110**, 314 (329) Смольников А. Г. **114**, 24 () Сбойчаков А. О. **112**, 693 (651); Смыслов Р. Ю. **113**, 385 () Ситникова А. А. 109, 381 (377); **112**, 764 (725) **110**, 297 (313) Снегирев В. В. **112**, 189 (180) Свирко Ю. П. 109, 739 (704) Снегирев Н. И. 112, 374 (352) Ситников А. В. 112, 88 (84) Седова И. В. 109, 147 (145) Соболевский О. А. **111**, 475 (403) Ситников М. Н. 110, 204 (223); Секербаев К. С. 110, 591 (592) **112**, 680 (636) Соколенко В. И. 109, 535 (525) Селезнев М. Н. 110, 421 (436) Скакун В. С. 110, 72 (85) Соколова В. В. **113**, 365 () Селиванов Ю. Г. 111, 166 (151) Скалдин О. А. 109, 84 (87); Соколов И. М. **113**, 791 () Семак А. А. 111, 291 (251) **110**, 607 (607) Солдатов А. В. **109**, 615 (594) Семенихин С. Ю. 110, 579 (581) Скворцова Н. Н. 109, 452 (441) Солдатов К. С. 110, 700 (702) Семенов А. В. 109, 249 (256) Скворцов М. А. **112**, 394 (376); Соловьев В. А. 109, 381 (377); Семенов А. Ю. 109, 525 (516) **112**, 466 (428) **110**, 297 (313) Семенов С. В. 110, 614 (613) Скрипников Л. В. 110, 363 (382) Соловьев В. В. 112, 38 (31) Семенов С. К. 110, 85 (102) Скробова Н. А. 112, 484 (452) Солодовников И. П. **111**, 291 (251) Семенцов Д. И. 111, 735 (619) Скрябина О. В. **109**, 530 (521) Солтамов В. А. 112, 813 (774) Семикоз Д. 113, 77 (69) Слепцов А. 111, 591 (494) Соменков В. А. 110, 30 (37) Сенков В. М. 112, 774 (734) Слободчиков А. А. 113, 63 (57) Сорокин А. О. 109, 200 (207); Сергеева Д. Ю. 110, 636 (638) Словинский И. С. 112, 508 (478) Сорокин А. О. 109, 423 (419); Сергеев А. С. 113, 655 () Случанко Н. Е. 110, 241 (266); **111**, 34 (41) Сердюков В. И. 109, 595 (575) Случанко Н. Е. 112, 451 (413); Сорокин Д. А. **113**, 133 (129) Серебров А. П. 109, 209 (213); **113**, 533 () Сороко В. А. **111**, 469 (397) Серебров А. П. **112**, 211 (199); Смаглюк Д. С. 113, 223 (226) Соснин Э. А. 110, 72 (85) **112**, 487 (455) Сосорев А. Ю. 110, 171 (193) Смаев М. П. 113, 495 () Серебрянников Е. Е. **112**, 22 (17); Смет Ю. Х. 109, 178 (185); Старостин А. Н. 110, 387 (405); **113**, 304 (301) Смет Ю. Х. **110**, 407 (424): **110**, 658 (659) Серещенко Е. В. 109, 231 (239) Смет Ю. Х. 111, 668 (562); Старчиков С. С. 109, 547 (536) Серов Ю. М. 113, 507 () Стаховский И. Р. 109, 852 (816); **113**, 697() Сидельников М. С. 109, 530 (521) **112**, 830 (793) Смирнов М. А. 113, 3(1) Сидоренков А. В. 111, 101 (116) Смирнов А. В. **112**, 774 (734) Стегайлов В. В. 113, 392() Сидоров-Бирюков Д. А. 112, Степаненко Д. И. 110, 493 (505) Смирнов А. М. 109, 375 (372); 22 (17); Степанов Н. А. 112, 394 (376) **113**, 304 (301) **109**, 466 (454) Степахин В. Д. 109, 452 (441) Сиковский Д. Ф. 109, 236 (249) Смирнова М. Н. 112, 680 (636) Силин А. П. 111, 80 (90) Смирнов И. Ю. 110, 62 (68); Степина Н. П. 109, 258 (270) Силкин И. В. 109, 118 (121) **112**, 54 (45) Столяренко М. С. **112**, 189 (180)

Столяров В. С. 109, 530 (521) Тарасенков В. Г. 109, 209 (213) Ткаченко В. А. **112**, 196 (186); Столяр С. В. 111, 197 (183) Тарасенко В. Ф. 109, 584 (564); **113**, 328 (331) Страумал А. Б. **111**, 514 (447); Тарасенко В. Ф. **110**, 72 (85); Ткаченко В. И. 109, 694 (671) **112**, 275 (257) **113**, 133 (129) Ткаченко И. М. 110, 658 (659) Страумал Б. Б. **110**, 622 (624); Тарасенко С. В. **109**, 393 (392); Ткаченко О. А. 112, 196 (186); Страумал Б. Б. 111, 674 (568); Тарасенко С. В. 111, 345 (311); **113**, 328 (331) Страумал Б. Б. 112, 45 (37); Тарасенко С. В. **112**, 458 (420); Товстун С. А. 110, 307 (323) **112**, 275 (257) **113**, 475 () Толордава Э. Р. 113, 365 () Стрельнов В. Н. 109, 598 (578) Тарасов А. П. **110**, 750 (739) Толстихина И. Ю. 113, 784 () Стриковский А. В. 113, 96 (86) Тарасов И. А. **110**, 155 (166) Толстогузов А. Б. 109, 511 (502); Стругацкий М. Б. 112, 374 (352) Тарасов М. А. 111, 641 (539) **111**, 531 (467) Струлева Е. В. 113, 311 (308) Тартаковский И. И. **110**, 806 (799) Томилин В. А. 113, 212 (207) Стрыгин И. С. 109, 401 (400); Татаринцев А. А. 111, 531 (467) Тонкаев П. 112, 658 (615) Стрыгин И. С. 110, 337 (354); Татарский Д. А. 111, 815 (690) Тоноян А. 113, 629 () Стрыгин И. С. **110**, 671 (672); Таурбаев Е. Т. 110, 591 (592) Торопов А. А. 109, 147 (145); **112**, 475 (437) Телькушев М. В. **113**, 147 (135) Торопов А. А. 112, 17 (13); Теппе Ф. **109**, 679 (657) Стучебрюхов И. А. 109, 525 (516) Торопов А. А. 113, 248 (252); Субботин К. А. 109, 360 (352) Тепп Ф. **109**, 91 (96); **113**, 507() Суворов Э. В. 113, 161 (149) **112**, 541 (508) Торунова С. А. 112, 623 (582) Султанов В. Д. 112, 297 (269) Терентьев Я. В. 109, 147 (145) Тофтул И. Д. 113, 553 () Супрун Е. М. 111, 597 (489) Терехов В. И. 111, 291 (251); Трахтенберг Л. И. 112, 341 (316); Суриков В. Т. 113, 52 (47) **113**, 223 (226) **113**, 768 () Суханова Е. В. 111, 743 (627) Терешонок М. В. **111**, 443 (371) Тронин И. В. **113**, 378 () Сухарников В. В. 109, 589 (569) Терещенко О. E. **113**, 683 () Трофимов О. В. **110**, 47 (54) Сухих А. С. 113, 267 (279) Терунума H. **109**, 809 (771) Трошков С. И. 109, 147 (145); **113**, 248 (252) Сухорукова О. С. 112, 458 (420) Тетерин A. Ю. **111**, 487 (422) Сушков О. П. 112, 196 (186) Тетерин Ю. A. **111**, 487 (422) Трубилко А. И. 109, 75 (77); Трубилко А. И. 110, 505 (517); Сыресин Е. М. 113, 784 () Тимеркаев Б. А. 112, 443 (405) Трубилко А. И. 111, 632 (532); Сыромятников А. Г. 110, 331 (348) Тимофеев А. В. 113, 514() Сырых Г. Ф. **110**, 30 (37) Тимофеев В. А. 109, 371 (368) **111**, 798 (672) Трубина С. В. **109**, 258 (270) Табачкова Н. Ю. 114, 36() Тимофеев В. Б. 110, 260 (284) Тагиров Л. Р. **110**, 197 (217) Тимофеев В. Е. 109, 200 (207) Трусов Г. В. **112**, 562 (527) Тагиров М. С. **109**, 43 (40); Тимошенко В. Ю. **110**, 591 (592) Труханов В. А. 109, 815 (776) Тсучия Ф. **114**, 18 () **111**, 52 (62) Титова Н. А. 111, 88 (104) Таланов Ю. И. 113, 450 () Тугушев В. В. 109, 98 (102) Тихонова О. В. **112**, 702 (666) Талденков А. Н. 110, 178 (200) Тузиков А. В. 113, 784() Тихонов А. М. 109, 340 (334) Талочкин А. Б. 113, 683 () Тихонова О. В. 109, 589 (569); Тузов А. А. 109, 209 (213) Тамегай Т. 109, 530 (521) **109**, 729 (695) Тупиков Е. В. **111**, 750 (633) Таран М. Д. 110, 387 (405) Тихонов В. Н. 111, 723 (603) Туркевич Р. В. **109**, 320 (316) Тарасенко А. С. 112, 458 (420) Тищенко A. A. **110**, 636 (638) Турлапов А. В. 109, 564 (552)

Турнье Э. <b>109</b> , 91 (96)	<b>112</b> , 639 (597)	<b>113</b> , 92 (82)
Турпанов И. А. $109$ , $325 (320)$	Федоров И. Б. <b>110</b> , 407 (424) Форш П. А. <b>112</b> , 379 (357)	
Турундаевский А. Н. <b>111</b> , 435 (363)	Федоров И. Д. <b>113</b> , 392 ()	Фраерман А. А. <b>111</b> , 815 (690);
Турьянский А. Г. $112$ , 774 (734)	Федоров П. П. $111$ , $625 (525)$	<b>113</b> , 353 (356)
Тюгаев М. Д. <b>110</b> , 772 (766)	Федорук Г. Г. <b>113</b> , 486 () Франк А. Г. <b>112</b> , 667 (6	
Тюренков И. О. $109$ , $360 (352)$	Федотов А. Б. <b>112</b> , 22 (17);	Фролов А. В. <b>109</b> , 54 (51);
Уаман Светикова Т. А. <b>111</b> ,	<b>113</b> , 304 (301)	Фролов А. В. <b>109</b> , 196 (203);
682 (575);	Федотова Я. В. $112$ , $38 (31)$	<b>110</b> , 400 (417)
113, 399 ()	Федотов И. В. $113$ , $3(1)$	Фролов В. А. $109$ , $535 (525)$
Уздин В. М. <b>113</b> , 833 ()	Федянин А. А. <b>111</b> , 40 (46);	Фролов К. В. $110$ , $557 (562)$
Уланов В. А. <b>113</b> , 52 (47)	Федянин А. А. <b>112</b> , 361 (341);	Фу Д. <b>111</b> , 531 (467)
Уманская С. Ф. <b>109</b> , 387 (382)	<b>112</b> , 730 (693)	Хабарова К. Ю. $112$ , $626 (585)$
Уманский В. <b>109</b> , 178 (185);	Фейгельман М. В. <b>112</b> , 251 (234)	Хайдуков З. В. <b>113</b> , 21 (18)
Уманский В. <b>110</b> , 407 (424);	Фельдман Э. Б. <b>112</b> , 754 (715)	Хайдуков Ю. Н. $109$ , $408 (406)$
Уманский В. <b>111</b> , 668 (562);	Феоктистов А. <b>113</b> , 385 ()	Хайнеманн А. <b>110</b> , 799 (793)
<b>113</b> , 697 () Уракава Дж. <b>109</b> , 809 (771)	Фёльсков М. $109$ , $258 (270)$	Халифа М. М. <b>110</b> , 368 (387)
Урюпин С. А. <b>109</b> , 387 (382);	Филатов Е. В. <b>110</b> , 806 (799)	Ханин Ю. Н. <b>109</b> , 496 (482);
Урюпин С. А. <b>110</b> , 90 (107);	Филатов С. В. <b>111</b> , 653 (549)	<b>113</b> , 605 ()
<b>110</b> , 230 (250)	Филипов В. Б. <b>109</b> , 152 (150);	Ханнанов Б. Х. <b>111</b> , 826 (709)
Успенский Ю. А. <b>109</b> , 98 (102)	Филипов В. Б. <b>110</b> , 241 (266);	Харинцев С. С. <b>110</b> , 772 (766);
Уставщиков С. С. <b>109</b> , 789 (755)	<b>113</b> , 533 ()	<b>113</b> , 152 (140)
Устинов В. В. <b>109</b> , 408 (406)	Филипович М. $113$ , $229(231)$	Харитонов А. В. <b>110</b> , 772 (766);
Устинов Н. В. <b>112</b> , 30 (24)	Филиппов А. В. <b>110</b> , 387 (405);	<b>113</b> , 152 (140)
Уткин Д. Е. <b>113</b> , 501 ()	Филиппов А. В. <b>110</b> , 658 (659);	Харлов Ю. В. <b>113</b> , 291 (289)
Уточкин В. В. <b>109</b> , 679 (657)	Филиппов А. В. <b>113</b> , 229 (231);	Харчев С. <b>109</b> , 131 (136)
Уханов М. Н. <b>111</b> , 291 (251)	<b>113</b> , 784 ()	Хисамеева А. Р. <b>110</b> , 597 (599);
Фабрис Ж. Ц. <b>110</b> , 515 (523)	Филиппов В. Б. <b>112</b> , 451 (413)	<b>113</b> , 689 ()
Фабричная О. Б. <b>111</b> , 674 (568)	Фильченков С. Е. <b>113</b> , 655 ()	Хищенко К. В. <b>109</b> , 525 (516)
Фадеев М. А. <b>109</b> , 91 (96);	Фирсов Д. Д. <b>109</b> , 381 (377)	Хмельницкий Р. А. <b>112</b> , 579 (533)
<b>109</b> , 679 (657)	Фишман А. И. <b>110</b> , 772 (766)	Ходжибагиян Г. Г. <b>113</b> , 784 ()
Фадин В. С. <b>111</b> , 3 (1)	Фишман Р. И. <b>112</b> , 774 (734)	Холин А. А. <b>112</b> , 314 (299)
Фазлиахметов А. H. <b>111</b> , 723 (603)	Флейта Д. Ю. <b>109</b> , 689 (667);	Хоник В. А. <b>109</b> , 473 (460);
Фалсиано Ф. Т. <b>110</b> , 515 (523)	<b>111</b> , 251 (245)	Хоник В. А. <b>111</b> , 691 (586);
Федорова А. В. <b>112</b> , 754 (715)	Флусова Д. С. <b>113</b> , 229 (231)	Хоник В. А. <b>111</b> , 806 (679);
Федоров А. Н. <b>109</b> , 598 (578);	Фомин А. К. <b>109</b> , 209 (213)	Хоник В. А. <b>113</b> , 341 (345);
Федоров А. Н. <b>112</b> , 437 (399);	Фомин И. А. <b>109</b> , 331 (325)	<b>113</b> , 751 ()
Федоров А. Н. <b>113</b> , 435 ();	Фоминов Я. В. <b>110</b> , 325 (342)	Хонкимаки В. <b>109</b> , 340 (334)
<b>113</b> , 763 ()	Фортов В. Е. <b>110</b> , 387 (405);	Хоперский А. Н. <b>109</b> , 662 (638);
Федоров А. С. <b>110</b> , 155 (166)	Фортов В. Е. <b>110</b> , 658 (659);	Хоперский А. Н. <b>110</b> , 95 (111);
Федоров В. В. <b>110</b> , 579 (581);	Фортов В. Е. <b>110</b> , 767 (761);	<b>111</b> , 61 (72)
· -	- ' ' ''	. ,

Хорошилов А. Л. **112**, 451 (413); **113**, 817 () Чукалина Е. П. **109**, 360 (352) **113**, 533 () Ченцов С. И. **112**, 501 (471) Чукланов Д. А. **113**, 661 () Хохлов В. А. 113, 84 (75); Черковец В. Е. 110, 387 (405) Чулков Е. В. **109**, 118 (121); **113**, 311 (308) Чернов М. Ю. **109**, 381 (377); Чулков Е. В. **109**, 320 (316); Хохлов Д. А. 112, 764 (725) **110**, 297 (313) Чулков Е. В. **109**, 621 (600); Хохлов Д. Р. **112**, 263 (246); Л. 109. Чернозатонский A. Чулков Е. В. **110**, 190 (211); 481 (472): **113**, 548 () **110**, 777 (771) Л. Α. 111. Чернозатонский Храпай В. С. 111, 88 (104) Чумаков А. И. **110**, 30 (37); 93 (109); Хуснутдинов Р. М. 110, 551 (557) Чумаков А. И. **110**, 614 (613); Л. 111, Чернозатонский Α 244 (235); Хьюберс Г. -B. **110**, 677 (677) **113**, 175 (162) Чернозатонский Л. A. 111. Хюберс X. -B. **109**, 679 (657) Чумаков Д. К. **113**, 229 (231) 469 (397); Цао Г. 109, 530 (521) Чупраков С. А. **114**, 24() **112**, 328 (305) Цвелиховская В. М. 110, 248 (273) Шабиев Ф. К. **109**, 634 (615) Чернопицский М. А. **112**, 160 (145) Цветков А. Ю. **111**, 166 (151) Шавров В. Г. 109, 393 (392); Черный А. В. **109**, 209 (213) Цзиао Ц. Ч. **111**, 691 (586); Шавров В. Г. **111**, 345 (311); Чернышева Л. В. 109, 355 (347); **113**, 751() Шавров В. Г. 112, 458 (420); Чернышева Л. В. **110**, 85 (102); Цицилин И. A. **110**, 569 (574) **113**, 475 () Чернышева Л. В. **111**, 12 (18); Цой К. В. **111**, 514 (447); Шадривов И. В. **109**, 805 (770) Чернышева Л. В. **112**, 233 (219); **112**, 275 (257) Шайхисламов И. Ф. 111, 335 (299) 112, 709 (673) Цуркан В. **109**, 547 (536) Шакуров Г. С. 113, 52 (47) Чернышев Б. А. 113, 147 (135) Цхай С. H. **110**, 652 (654) Шангараев А. А. 113, 291 (289) Чернышов А. А. **114**, 18() Цыганков П. A. **113**, 311 (308) Шандаров С. М. 110, 165 (178); Чернявский А. Ю. **111**, 615 (512) Цымбаленко В. Л. **113**, 33 (30) Шандаров С. М. 112, 644 (602); Черняк А. М. **111**, 40 (46) Цыпкин A. H. **113**, 237 (242) **113**, 797() Черняков Ю. **109**, 131 (136) Цыпленков В. В. **110**, 677 (677) Шапиро Д. Д. 110, 579 (581); Чесноков М. Ю. **112**, 3(1); Цяо Ф. 111, 501 (434) **112**, 639 (597) **113**, 223 (226) Чайка А. Н. **113**, 189 (176) Шапочкина И. В. 112, 341 (316); Чесноков Ю. А. **112**, 3(1); Чайков Л. Л. **113**, 435 () **113**, 768() **113**, 223 (226) Чайковский М. Е. **109**, 209 (213) Чибранов А. А. 111, 335 (299) Шараева А. Е. 112, 644 (602) Чанг Ш. 111, 501 (434) Шарыпов К. А. 113, 370() Чижевский Е. Г. **111**, 166 (151) Шастин В. Н. 110, 677 (677) Чаплик А. В. **109**, 191 (198); Чижов М. В. **112**, 147 (133) Шахмуратов Р. Н. 111, 181 (167) Чаплик А. В. **109**, 842 (806); Чижов П. А. 109, 447 (437) Шахов А. М. 109, 294 (292); Чаплик A. B. **110**, 534 (540); Чирков П. Н. 113, 223 (226) **110**, 456 (464) **112**, 246 (230) Чичай К. А. **110**, 799 (793) Шашков Е. В. 112, 774 (734) Чичков В. И. 112, 743 (705) Чаповский П. Л. **111**, 75 (85) Шашков И. В. 109, 753 (722) Чареев Д. А. 110, 557 (562); Чопорова Ю. Ю. **110**, 677 (677) Чубов Ю. В. **110**, 700 (702) Швец И. А. 110, 777 (771) **113**, 450 () Чекалин С. В. 111, 27 (31); Чубуков Д. В. 110, 363 (382) Шевелев М. В. 109, 584 (564); Чекалин С. В. 113, 365(); Чувильский Ю. М. 109, 435 (425) Шевелев М. В. 109, 809 (771); Чекалин С. В. **113**, 723 (); Чугунин Д. В. 114, 18 () **111**, 295 (255)

Шпак В. Г. **113**, 370 ()

Шевелько В. П. 113, 784 ()

Шевцов Д. В. 110, 155 (166) Шпатаковская Г. В. 111, 526 (463) Юанов Ю. В. **112**, 725 (688) Шевченко С. И. 109, 828 (790) Юркин Г. Ю. 109, 325 (320) Штоффель М. 109, 371 (368) Юсупов А. Р. **110**, 437 (447) Шевченко Ю. А. 110, 700 (702) Шуб Б. Р. 109, 707 (684) Шелаев А. В. 110, 772 (766) Юсупов Р. А. 111, 641 (539) Шубина Т. В. **113**, 248 (252); Юсупов Р. В. **110**, 197 (217) Шелыгина С. H. **110**, 230 (250); **113**, 507() Юшков В. И. **109**, 325 (320) **113**, 365() Шувалов Е. H. **113**, 229 (231) Ягупов С. В. **112**, 374 (352) Шергин А. П. 114, 13() Шукринов Ю. М. **109**, 36 (33); Язынин И. А. **112**, 3(1) Шерстобитов А. А. 110, 274 (301) Шукринов Ю. М. **110**, 149 (160); Якимов А. И. **110**, 393 (411); Шешукова С. Е. **110**, 414 (430); 110, 736 (722) **113**, 501 () **110**, 526 (533) Шуманн И. 110, 325 (342) Яковлев Д. Р. **110**, 806 (799) Шилин С. И. 109, 547 (536) Шумилин A. B. **110**, 482 (495) Яковлев И. А. **110**, 155 (166) Шилов Г. В. 111, 838 (720) Шунайлов С. А. **113**, 370 () Яковлев С. Л. 114, 6() Шиманский С. С. 111, 291 (251) Шуравин Н. С. 110, 539 (545) Якубовский А. Ю. **109**, 552 (541) Шимко А. А. 109, 657 (634); Шур В. Я. **110**, 165 (178); Якушкин Е. Д. 113, 348 (352) **110**, 9 (15) **112**, 644 (602) Якушкин С. С. **110**, 614 (613) Шипило Д. Е. 111, 27 (31) Шустин М. С. **110**, 126 (140); Яландин М. И. **113**, 370 () Ширяев А. А. 111, 597 (489) **113**, 267 (279) Янилкин И. В. **110**, 197 (217) Шитов М. И. 109, 65 (69) Шутый А. М. **111**, 735 (619) Янович А. А. **112**, 3 (1); Шицевалова Н. Ю. 109, 152 (150); Щапин Д. C. **113**, 415 () **113**, 223 (226) Шицевалова Н. Ю. 110, 241 (266); Щеголев A. E. **111**, 443 (371) Янушкевич К. И. **112**, 680 (636) Шицевалова Н. Ю. 112, 451 (413); Щепетильников A. В. 110, Яревский Е. А. **114**, 6() 597 (599); **113**, 533() Яржемский В. Г. **111**, 487 (422) Шишилов О. Н. 109, 452 (441) **113**, 689 () Ярославцев А. А. 109, 540 (529); Щербаков Г. В. **110**, 118 (133) Шишков В. Ю. 114, 43() **110**, 23 (31) Щербаков О. A. **110**, 222 (242); Шкарин А. Б. **112**, 17 (13) Ярославцев Р. Н. **111**, 197 (183) **112**, 343 (323) Шкитов Д. А. 109, 809 (771); Ярошевич А. С. **113**, 328 (331) Эггелер Г. 111, 514 (447) **111**, 295 (255) Ярошевич А. С. **111**, 107 (121); Эдельман В. С. 111, 641 (539) Шкляев А. А. 113, 58 (52) **112**, 174 (161) Шкляев В. А. 113, 133 (129) Энкович П. В. 110, 687 (687) Шорохов А. С. **111**, 40 (46); Энтин М. В. 109, 337 (331) Яруллин Д. Т. **110**, 498 (511) **112**, 730 (693) Эренбург С. Б. 109, 258 (270) Ясников И. С. 110, 421 (436)

Эркенов Ш. А. **112**, 743 (705)

#### Информация для авторов

Журнал "Письма в ЖЭТФ" (и его англоязычная версия "JETP Letters") публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.
- Миниобзоры на наиболее актуальные "горячие" темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.
- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

"Письма в ЖЭТФ" является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках<sup>1)</sup>. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В "JETP Letters" все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК "Наука/Интерпериодика". Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двух-колоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер миниобзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи $^{2}$ ), с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF- $8^{3}$ ), кодировка KOI8- $\mathbb{R}^{4}$ )).

#### Статьи в редакцию можно направлять

- о по электронной почте letters@kapitza.ras.ru направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (..ps), EncapsulatedPostScript (..eps) или PaintBrush (..pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроенными рисунками.
- о по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, "Письма в ЖЭТФ" − два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, может быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

 $<sup>^{1)}</sup>$ http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml#sub1

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup>http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/example.tex

<sup>&</sup>lt;sup>3)</sup>http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/jetpl.cls

 $<sup>^{4)}</sup> http://www.jetpletters.ru/tex/koi/jetpl.cls$ 

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов или членов Редколлегии.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу, с учетом мнения рецензентов. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала "JETP Letters", наш журнал "Письма в ЖЭТФ" с середины 2016 года лишен возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в "Письмах в ЖЭТФ" расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале "JETP Letters".

#### Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

#### ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — Учреждения, где работают авторы (включая город и почтовый индекс;
е-mail одного из авторов)

Дата поступления
Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. B. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP 71, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, Structure and Properties of Liquid Crystals, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать  $P_{\mathrm{opt}}$ , а не  $P_{\mathrm{ont}}$ .

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из "Писем в ЖЭТФ" в "JETP Letters" все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторов, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются "on-line" в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно найти на WWW-странице "Писем в  ${\rm WFT}\Phi$ " (http://www.jetpletters.ru/).

#### Дополнительный материал

Журнал "Письма в ЖЭТФ" предоставляет авторам возможность публикации Дополнительного материала. Дополнительный материал, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В Дополнительный материал помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. Дополнительный материал не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

#### В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается на английском языке в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы Дополнительного материала могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано "Дополнительный материал". В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла Дополнительного материала совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано "Дополнительный материал к статье {название статьи}". Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами Дополнительный материал рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка Дополнительного материала ответственность ложится на авторов.

Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес Дополнительного материала приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}

Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

**Дополнительный материал** не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение **Дополнительного материала** должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

### Комментарии в журнале "Письма в ЖЭТФ"

Журнал "Письма в ЖЭТФ" публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария — если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)<sup>5</sup>).

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

- 1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
- 2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
- 3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его ошибочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

<sup>&</sup>lt;sup>5)</sup>http://www.jetpletters.ru/ru/supp.shtml

#### Миниобзоры

Журнал "Письма в ЖЭТФ" в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал "заказные" миниобзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РНФ. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению миниобзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров - см. на

http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml

Миниобзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

# Содержание

# Том 114, выпуск 1 поля, частицы, ядра

Boroun G.R. Effect of the parameterization of the distribution functions on the longitudinal structure function at small $x$	3
<b>Likhovid N.A., Pantuev V.S.</b> Search for a heavy neutrino in the mass range under 750 keV using electron capture in <sup>7</sup> Be	4
Градусов В.А., Руднев В.А., Яревский Е.А., Яковлев С.Л. Теоретическое исследование реакций в трехчастичной $e^-e^+\bar{p}$ системе и сечения образования антиводорода	6
Оптика, лазерная физика	
Зиновьев А.Н., Бабенко П.Ю., Шергин А.П. Скейлинг для сечений образования К-вакансий при атомных столкновениях	13
Плазма, гидро- и газодинамика	
Могилевский М.М., Чугунин Д.В., Чернышов А.А., Романцова Т.В., Моисеенко И.Л, Кумамото А., Касахара Й., Тсучия Ф. Локализация источников двух типов "континуум" из- лучения	18
Конденсированное состояние	
Оглобличев В.В., Изюров В.И., Пискунов Ю.В., Смольников А.Г., Садыков А.Ф., Чупраков С.А., Дубинин С.С., Наумов С.В., Носов А.П. Неоднородное магнитное состояние тонких пленок YFeO $_3$ по данным ЯМР спектроскопии	24
<b>Еремин М.В., Нурмухаметов А.Р.</b> О магнитоэлектрической связи в $(Ni, Cu)B_2O_4$	31
Зыбцев С.Г., Табачкова Н.Ю., Покровский В.Я., Никонов С.А., Майзлах А.А., Зайцев- Зотов С.В. Новый политип NbS <sub>3</sub> , квазиодномерного проводника с высокотемпературной волной зарядовой плотности	36
Ioselevich A.S., Peshcherenko N.S. Two-impurity scattering in quasi-one-dimensional systems	41
Методы теоретической физики	
Вовченко И.В., Шишков В.Ю., Зябловский А.А., Андрианов Е.С. Модель для описания релаксации квантовомеханических систем с близко лежащими уровнями энергий	43

# Содержание

# Том 114, выпуск 2 Оптика, лазерная физика

Заливако И.В., Семериков И.А., Борисенко А.С., Аксенов М.Д., Хабарова К.Ю., Кола- чевский Н.Н. Экспериментальное исследование оптического кубита на квадрупольном переходе 435 нм в ионе <sup>171</sup> Yb <sup>+</sup>	53
430 IIM B HOIIC 10	99
<b>Алексеев В.А., Пастор А.А., Сердобинцев П.Ю., Вартанян Т.А.</b> Переход-спутник резонансного дублета атома Na в смеси с $\mathrm{CF}_4$	60
Плазма, гидро- и газодинамика	
<b>Агафонцев Д.С., Кузнецов Е.А., Майлыбаев А.А.</b> Отсутствие неустойчивости тангенциального разрыва для вихревых блинов	67
Конденсированное состояние	
Дураков Д.Е., Деребезов И.А., Винокур В.М., Миронов А.Ю. Особенности разрушения сверхизоляторного состояния импульсным напряжением в пленках NbTiN	72
<b>Магарилл Л.И., Чаплик А.В.</b> О долинной намагниченности монослоев дихалькогенидов переходных металлов	78
Русина Г.Г., Борисова С.Д., Чулков Е.В. Структурная релаксация и колебательные свойства поверхности с точечными дефектами	82
Казак Н.В., Бельская Н.А., Мошкина Е.М., Соловьев Л.А., Еремин Е.В., Гаврилкин С.Ю., Овчинников С.Г. Спин-флоп переход в пироборате $\mathrm{Co}_2\mathrm{B}_2\mathrm{O}_5$	89
Кривобок В.С., Николаев С.Н., Багаев В.С., Ченцов С.И., Онищенко Е.Е., Пручкина А.А. Нестандартные особенности взаимодействия одиночных люминесцентных центров, сформированных ядрами частичных дислокаций в CdTe и ZnSe, с продольными оптическими фононами	96
	50
Сазонов С.В. Метастабильные униполярные структуры упругой деформации	102
Ткаченко В.А., Ярошевич А.С., Квон З.Д., Ткаченко О.А., Родякина Е.Е., Латы- шев А.В. СВЧ-отклик квантового точечного контакта	108
Текущий авторский указатель томов 109—114	114
Информация для авторов	137