

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 115

Выпуск 11

10 июня 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора

Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

© Российская академия наук, 2022

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

Spin of protons in NICA and PTR storage rings as an axion antenna

N. N. Nikolaev¹⁾

Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

Moscow Institute of Physics and Technology, Department of Problems of Theoretical Physics, 141707 Dolgoprudny, Russia

Submitted 20 April 2022
 Resubmitted 20 April 2022
 Accepted 21 April 2022

DOI: 10.31857/S1234567822110015, EDN: iknund

Axions, first proposed by Peccei and Quinn in 1977 [1] as a solution to strong CP-violation in QCD, are widely discussed as a plausible candidate for the dark matter. One of manifestations of the cold galactic halo axions will be a NMR-like resonant rotation of the spin in the oscillating axion field [2–6]. Here the spin serves as an axion antenna and the experimental search by the JEDI collaboration of the axion signal with polarized deuterons in the storage ring COSY is in progress [7]. Inherent to the JEDI technique of a buildup of the vertical polarization from the in-plane one is a need for a long coherence time of the in-plane precessing spin and it is not applicable to protons with arguably short spin coherence time [8].

In this communication we suggest the alternative scheme which is free of these limitations and looks preferred one for searches for axions at the Nuclotron, NICA [9] and PTR [10] storage rings. We also comment on exclusive features of the spin frequency scan in hybrid rings with concurrent electric and magnetic bending, the PRT storage ring proposed by the CPEDM collaboration being a good example.

A detailed introduction into axions is found in reviews [4, 11–13], here we only mention the principal points. The amplitude of the classical axion field $a(x) = a_0 \cos(\omega_a t - \mathbf{k}_a \cdot \mathbf{x})$ can be inferred from the local density of the dark matter [2, 14]. Weinberg’s gradient interaction of axions with fermions [15],

$$L_{a\bar{\psi}\psi} = -\frac{1}{2f_a} g_f \bar{\psi} \gamma^\mu \gamma_5 \psi \partial_\mu a(x), \quad (1)$$

can be reinterpreted as an interaction of fermion’s spin with the pseudomagnetic field [16]. Still another manifestation of axions is the oscillating contribution to the electric dipole moment (EDM) of nucleons [2, 17], $d_N^{\text{ax}}(x) = (a(x)/f_a) \cdot (\mu_N/c) \cdot \kappa_a$, where μ_N is the nuclear magneton and the small factor $\kappa_a \sim (m_d m_u / (\Lambda_{QCD}(m_d + m_u))) \approx 10^{-2}$ describes the chiral suppression of the EDM by small masses of light quarks [18, 19].

We start with all magnetic storage rings, $\mathbf{E} = 0$, when the spin tune $\nu_s = G\gamma$. The effect of the axion

field induced EDM is tantamount to that of the radiofrequency Wien filter [20]. Secondly, spin interacts with the oscillating pseudomagnetic field, proportional to the particle velocity and the time derivative $\partial_t a(x)$ [16, 20], which is tangential to the particle orbit and acts as a radiofrequency solenoid. Note that the velocity of particles in a storage ring, v , is of the order of the velocity of light and $v \approx 10^3 v_a$, where $v_a \sim 250$ km/s is the velocity of Earth’s motion in Galaxy. At the axion resonance, $\omega_a = \nu_s \Omega_c$, the instantaneous angular velocity of the axion-driven resonant spin rotation takes the form [21]

$$\Omega_{\text{res}} = \frac{a_0}{f_a} \left(g_f \omega_a \sin(\omega_a t) \frac{\mathbf{v}}{c} - \kappa_a \gamma \cos(\omega_a t) \left[\frac{\mathbf{v}}{c} \times \Omega_c \right] \right). \quad (2)$$

Upon solving the BMT equations by the Bogoliubov–Krylov averaging [22, 23], one finds the angular velocity of the resonant up-down rotation of the spin envelope

$$\Omega_{\text{res}} = \frac{a_0}{2f_a} \frac{\gamma v}{c} |g_f G - \kappa_a| \Omega_c. \quad (3)$$

A strong enhancement of the contribution from the pseudomagnetic field by the factor $g_f G / \kappa_a \gg 1$ was missed in the early discussion [7], and the actual sensitivity of the JEDI experiment was greatly underestimated.

As the axion mass is unknown, one is bound to scanning the spin angular velocity as $\Omega_s(t) = \omega_a + 2\Omega_t^2 t$, where $2\Omega_t^2 = d\Omega_s/dt$. In our convention a scan starts at large negative time $t = -t_0$ and the exact resonance takes place at $t = 0$. The spin phase during the scan varies as $\theta_s(t) = \omega_a t + \Omega_t^2 t^2$. A derivation of the axion-driven small in-plane polarization envelope P_{xz} gives

$$P_{xz}(t) = P_y \Omega_{\text{res}} \int_{-t_0}^t d\tau \exp[-\Gamma(t - \tau)] \cos(\Omega_t^2 \tau^2). \quad (4)$$

In the usually discussed scheme with the in-plane initial polarization [6, 7, 24, 25], the axion signal will be proportional to $\sin \Delta$ [22, 26], where Δ is an entirely unknown difference of the spin precession and axion oscillation phases. In contrast to that, a buildup of the in-plane polarization from the initial vertical one is free of this phase ambiguity.

In the limit of large spin coherence time, $\Gamma \ll \Omega_t$, the envelope P_{xz} will exhibit a jump of temporal width

¹⁾e-mail: nikolaev@itp.ac.ru

$t_1 \sim 1/\Omega_t$ and the amplitude $P_{xz}^{\max} \sim P_y \Omega_{\text{res}}/\Omega_t$. The opposite limiting case of $\Gamma \gg \Omega_t$, is of special interest for protons with short spin coherence time [8], and here emerges a new time scale $t_2 \sim \Gamma/(\Omega_t^2)$. At $-t_2 < t < t_2$ the envelope P_{xz} will oscillate as

$$P_{x,z} \approx \frac{\Omega_{\text{res}}}{\Gamma} P_y \cos(\Omega_t^2 \tau^2), \quad (5)$$

and fits to the well specified function (5) will facilitate identification of the axion signal.

We note that in all magnetic fields the resonance condition entails $\omega_a = p/(R\gamma m)$, where R is the ring radius and p is the particle momentum. Consequently, in all magnetic rings the attainable axion masses are bounded from below by the minimal momentum the storage ring can run at.

The hybrid ring with concurrent magnetic and electric bendings are much more versatile compared to all magnetic rings. An example is provided by the prototype test ring PTR proposed by the CPEDM collaboration [9]. With the radial electric field $E_0 = 7 \times 10^6$ V/m complemented by the vertical magnetic field $B_0 = 0.0327$ T, PTR will provide the frozen spin of protons, $\Omega_s^{\text{mdm}} = 0$, i.e., $\nu_s = 0$. Beyond this point, the electric and magnetic fields must be varied synchronously to preserve the injection energy, the orbit radius and the cyclotron frequency, and the spin tune will vary as $\nu_s = -G_p \gamma \Delta E/E_0$. The axion resonance will take place at $\omega_a = -G_p \gamma \Omega_c \Delta E/E_0$, and the resulting angular velocity of the axion-driven spin rotation will be given by

$$\Omega_{\text{res}} = \frac{a_0}{2f_{(a)}} \frac{\gamma v}{c} |g_f G \frac{\Delta E}{E_0} + \kappa_{(a)}| \Omega_c. \quad (6)$$

To summarize, we demonstrated how the spin of polarized protons can be used as an axion antenna in spite of the short spin coherence time of the in-plane polarization of protons. The key point is to look for a buildup of the idly precessing in-plane polarization starting from the stable vertical one. Hybrid prototype rings emerge as a promising proton spin antenna sensitive to axions with small masses up to few neV/c². These observations suggest new options for the experimental searches for axions at NICA in Dubna, COSY in Juelich, planned PTR and elsewhere.

A support of thus study by the Russian Science Foundation grant # 22-42-04419 is acknowledged.

We are grateful to A.J. Silenko for useful discussions.

This is an excerpt of the article ‘‘Spin of protons in NICA and PTR storage rings as an axion antenna’’. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022600653

1. R. D. Peccei and H. R. Quinn, Phys. Rev. Lett. **38**, 1440 (1977).
2. P.W. Graham and S. Rajendran, Phys. Rev. D **88**, 035023 (2013).

3. D. Budker, P. W. Graham, M. Ledbetter, S. Rajendran, and A. Sushkov, Phys. Rev. X **4**, 021030 (2014).
4. P. Sikivie, Rev. Mod. Phys. **93**, 015004 (2021).
5. C. Abel, N.J. Ayres, G. Ban et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **7**, 041034 (2017).
6. S.P. Chang, S. Haciomeroglu, O. Kim, S. Lee, S. Park, and Y. K. Semertzidis, Phys. Rev. D **99**, 083002 (2019).
7. J. Pretz, S.P. Chang, V. Hejny, S. Karanth, S. Park, Y. Semertzidis, E. Stephenson, and H. Stoeher, Eur. Phys. J. C **80**, 107 (2020).
8. A. Lehrach, B. Lorentz, W. Morse, N. Nikolaev, and F. Rathmann, (2012), arXiv:1201.5773 [hep-ex].
9. N. N. Agapov, V. D. Kekelidze, A. D. Kovalenko, R. Lednitsky, V. A. Matveev, I. N. Meshkov, V. A. Nikitin, Yu. K. Potrebennikov, A. S. Sorin, and G. V. Trubnikov, Phys.-Uspekhi **59**, 583 (2016).
10. F. Abusaif, A. Aggarwal, A. Aksentev et al. (CPEDM Collaboration), Storage ring to search for electric dipole moments of charged particles: Feasibility study, CERN Yellow Reports: Monographs, 2021-003, CERN, Geneva (2021).
11. L. Di Luzio, M. Giannotti, E. Nardi, and L. Visinelli, Phys. Rep. **870**, 1 (2020).
12. C.B. Adams, A. Agrawal, R. Balafendiev et al. (Collaboration), in *2022 Snowmass Summer Study* (2022), arXiv:2203.14923.
13. S. N. Vergeles, N. N. Nikolaev, Y. N. Obukhov, A. J. Silenko, and O. V. Teryaev, (2022), arXiv:2204.00427 [hep-th].
14. P. Sikivie, Lect. Notes Phys. **741**, 19 (2008).
15. S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. **40**, 223 (1978).
16. M. Pospelov, A. Ritz, and M. B. Voloshin, Phys. Rev. D **78**, 115012 (2008).
17. P. W. Graham and S. Rajendran, Phys. Rev. D **84**, 055013 (2011).
18. V. Baluni, Phys. Rev. D **19**, 2227 (1979).
19. R. J. Crewther, P. Di Vecchia, G. Veneziano, and E. Witten, Phys. Lett. B **88**, 123 (1979); Erratum: Phys. Lett. B **91**, 487 (1980)].
20. J. Slim, R. Gebel, D. Heberling, F. Hinder, D. Hoelscher, A. Lehrach, B. Lorentz, S. Mey, A. Nass, F. Rathmann, L. Reifferscheidt, H. Soltner, H. Straatmann, F. Trinkel, and J. Wolters, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A **828**, 116 (2016).
21. A. J. Silenko (2021), arXiv:2109.05576.
22. A. Saleev, N. N. Nikolaev, F. Rathmann et al. (JEDI), Phys. Rev. Accel. Beams **20**, 072801 (2017).
23. A. J. Silenko, EPL **118**, 61003 (2017).
24. E. Stephenson, PoS PSTP **2019**, 018 (2020).
25. S. Karanth, *New method to search for axion-like particles demonstrated with polarized beam at the COSY storage ring* (2021), dPG Spring Meeting: Dortmund, 15-19 March 2021.
26. F. Rathmann, N. N. Nikolaev, and J. Slim, Phys. Rev. Accel. Beams **23**, 024601 (2020); arXiv:1908.00350.

Сверхизлучательный фазовый переход в микроструктурах с комплексной сетевой архитектурой

А. Ю. Баженов¹⁾, М. М. Никитина, А. П. Алоджанц

Национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (ИТМО),
197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 25 марта 2022 г.

После переработки 17 апреля 2022 г.

Принята к публикации 26 апреля 2022 г.

В настоящей работе предложена новая концепция топологической организации микроструктур, поддерживающих сверхсильное взаимодействие двухуровневых систем с фотонным полем и обладающих топологией сети (графа) со степенным распределением степени узлов. В рамках теории среднего поля изучен фазовый переход к состоянию сверхизлучения, который приводит к образованию двух дисперсионных ветвей поляритонов и сопровождается появлением ненулевой макроскопической поляризации двухуровневых систем. Выявлено, что специфика поведения такой системы зависит от статистических характеристик сетевой структуры, а именно, от нормированного второго момента $\zeta \equiv \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle$ распределения степеней узлов. Показано, что частота Раби может быть существенно увеличена в аномальном режиме сетевой структуры, где ζ значительно возрастает. Многомодовая (волноводная) структура взаимодействия вещества и поля в этом режиме может приводить к установлению сверхсильной связи, которая в основном и обеспечивает возникновение высокотемпературного фазового перехода.

DOI: 10.31857/S1234567822110027, EDN: ikzyof

Повышение эффективности взаимодействия светового излучения с веществом является одной из принципиальных проблем современных квантовых технологий, см., например, [1]. Доступные в настоящее время материалы позволяют осуществлять сильную, а также сверхсильную связь при таком взаимодействии [2]. Сильная связь вещества и поля предполагает периодический обмен энергией между двухуровневыми системами (ДУС), которыми служат атомы, квантовые точки, экситоны и т.д., и квантованным полем резонатора [3–5].

Режим сильной связи возникает, если однофотонная частота Раби $2g_0$ преобладает над спонтанным распадом, скоростями дефазировки и потерями в резонаторе; современные эксперименты с холодными атомами позволяют наблюдать вакуумное расщепление Раби, достигаемое с помощью одного атома (см., например, [3]). Однако на практике улучшение параметра коллективной связи материи и поля представляет собой более важную насущную задачу для квантовой информации, которая использует различные физические системы обработки и передачи квантовой информации, см. [6, 7]. Частота расщепления Раби в этом случае зависит от параметра коллективной связи ДУС и поля $g = \sqrt{N}g_0$, который демонстри-

рует увеличение параметра взаимодействия поля с веществом в \sqrt{N} раз; N – это количество ДУС, взаимодействующих с одномодовым полем резонатора. В этом случае эффективный спин Дике, который можно приписать ансамблю ДУС, ведет себя как гигантский квантовый осциллятор, эффективно связанный с одной квантованной модой, что описывается параметром g , см. [8].

С недавних пор усилия исследователей направлены на получение (коллективного) режима сверхсильной связи ДУС с полем резонатора, ср. с [2, 9, 10]. В частности, сверхсильная связь образуется в результате одного обхода традиционного резонатора Фабри–Перо при коллективном взаимодействии ансамбля ДУС с квантованным (многомодовым) полем, см. [2, 9, 11, 12].

С другой стороны, малый объем резонатора, а также большой дипольный момент ДУС позволяют получать достаточно большие значения коллективного параметра связи g , или даже g_0 , которые могут быть сопоставимыми с частотой ω_{ph} поля резонатора, т.е. $g_0/\omega_{ph} \simeq 0.01 \div 0.1$ [1]. Сверхсильный режим со значением $g_0/\omega_{ph} \equiv 0.12$ был экспериментально реализован с потоковыми сверхпроводящими кубитами, взаимодействующими с модой резонатора, образованного линией передачи (*transmission line resonator*) в микроволновом диапазоне частот [10].

¹⁾e-mail: b.a.y@mail.ru

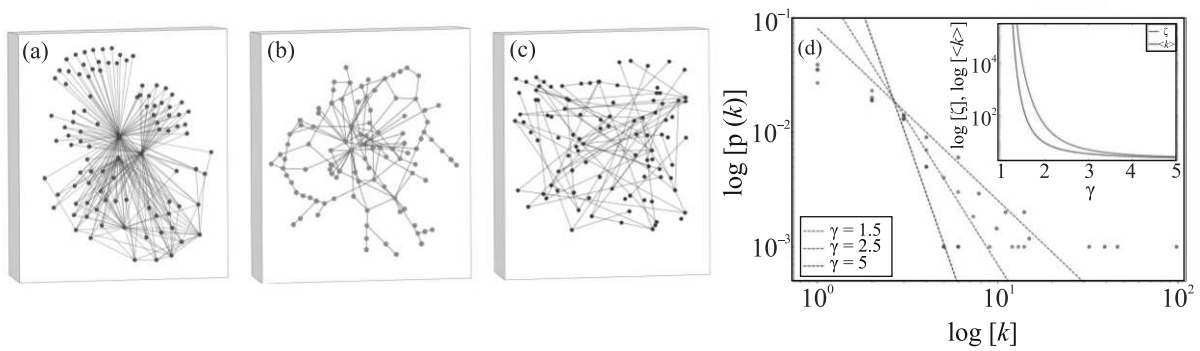


Рис. 1. (Цветной онлайн) Образцы сетевых структур, обладающих степенным законом распределения степени узлов для: (a) – $\gamma = 1.5$, (b) – $\gamma = 2.5$ и (c) – $\gamma = 5$, которые соответствуют $p(k) \propto k^{-\gamma}$ для распределения степеней узлов (фотонных каналов) представленных на (d) в двойном логарифмическом масштабе соответственно. Вставка в (d) показывает зависимость $\langle k \rangle$ и ζ от γ (в логарифмическом масштабе по оси ординат) для сетевой архитектуры с количеством узлов $N = 100$ и $k_{\min} = 2$

Получение сверхсильной связи поля с атомными, или полупроводниковыми ДУС является важной и очень сложной задачей, поскольку величина g_0/ω_{ph} весьма мала и составляет 10^{-6} и 10^{-3} в имеющихся экспериментах, соответственно ср. с [3, 13].

В данной работе для решения проблемы реализации сверхсильной связи квантованного поля и вещества впервые предлагается использовать вполне определенные топологические свойства сетевых структур. А именно, мы предлагаем организовать искусственную структуру (материал) в виде графа (сети), позволяющего осуществить сверхсильную связь между коллективным спином ДУС, расположенных в узлах, и модами волноводов, являющихся ребрами графа, ср. с [14]. При этом полагаем, что топология такого графа (сети) подчиняется степенному закону распределения степени узлов (СРСУ), который хорошо известен в информационных науках при исследованиях различных информационных процессов в реальных сетях [15]. В частности, хабы, которые могут возникать в таких сетях, обеспечивают гораздо более быстрое и надежное распространение информации [16].

Основной задачей работы является определение степени влияния архитектуры сети на величину расщепления Раби и возникновения высокотемпературного фазового перехода в сверхизлучающее (СИ) состояние.

В литературе явление сверхизлучения, как правило, обсуждается в двух предельных случаях. А именно, СИ рассматривают в существенно неравновесных системах ДУС и поля при реализации определенных условий на характерные времена релаксационных, а также коллективных процессов в среде, см.,

например, [17–20]. Во-вторых, рассматривается сверхизлучение как результат фазового перехода второго рода, происходящего в термодинамически равновесной системе ДУС и квантованного поля, см. например, [21, 22]. Разумеется, в общезначимом контексте такое деление весьма условно, поскольку достижения полного термодинамического равновесия в среде ДУС и квантованного поля невозможно добиться практически. Однако в ряде случаев все же удается получить связанные состояния атомных или экситонных систем и квантованного поля, близкие по своим свойствам к термодинамически равновесным, способные демонстрировать коллективные эффекты сверхизлучения и/или Бозе-Эйнштейновской конденсации (БЭК), ср. с [13, 23, 24]. В этом случае необходимо сперва приготовить среду и поле для наблюдения фазового перехода, в котором уже небольшие релаксационные процессы существенного влияния на саму суть эффекта не оказывают. Такая процедура физически основана на термализации связанных состояний вещества и поля, при которой учет релаксационных процессов играет важную роль, см., например, [25, 26]. В эксперименте рассматриваемый фазовый переход хорошо различим от существенно неравновесных фазовых переходов (например, лазерной генерации), которые могут иметь место в той же системе, но при других параметрах накачки, разности населенностей ДУС и т.д., см., например, [13, 27]. В данной работе речь пойдет именно о термодинамически равновесном фазовом переходе к СИ в топологической модели взаимодействия ДУС с квантованным излучением, которая может быть реализована с помощью различных физических систем, обладающих определенной спецификой в достижении

термализации. Исследование такой специфики представляет самостоятельную как теоретическую, так и экспериментальную задачу, и именно в силу своей масштабности выходит за рамки этой работы.

Предлагаемая здесь модель состоит из N локализованных ДУС, занимающих узлы графа, как показано на рис. 1, и находящихся в термодинамически равновесном состоянии при температуре T . Любой j -й узел обладает некоторым количеством ребер, которые связывают его с другими узлами. Количество ребер, которые принадлежат любому j -му узлу может быть охарактеризовано степенью этого узла k_j .

Физически материал с архитектурой графа на рис. 1 может быть воссоздан разными путями. Например, в качестве ДУС можно взять двухуровневые нейтральные атомы, которые можно удерживать на поверхности двумерной (фотонокристаллической) структуры с помощью эффекта Казимира–Полдера [28]. В этом случае соответствующие потенциалы удержания отдельных атомов, образованные Ван-дер-Ваальсовыми силами притяжения, фактически формируют сеть микрорезонаторов, ср. с [29]. Связь между атомами можно организовать с помощью той же (фотонокристаллической) системы волноводов [30], или, например, использовать технологию прямой лазерной записи волноводных структур, которая в настоящее время широко используется для создания квантовых (фотонных) чипов, см., например, [31]. В этом случае ребрами графа являются волноводы, которые на практике допускают сверхнизкие потери на уровне 0.1 дБ/см. Еще один метод приготовления рассматриваемых не периодических структур основан на использовании индуцируемых лазерным излучением микроловушек для ансамбля холодных нейтральных атомов, см. например, [32–34].

Другой способ разработки микроструктуры с сетевым интерфейсом может быть основан на существующих (технологических) возможностях управления топологией экситон-поляритонов в полупроводниковых микрорезонаторах Фабри–Перо с большой добротностью [35]. Эти возможности весьма разнообразны физически и направлены на модификацию общего микрорезонатора с получением требуемых топологических характеристик. Альтернативно, можно создать сеть микростолбиков (*micropillars*), которые представляют из себя микрорезонаторы с квантовыми точками и могут быть размещены в узлах графа, как это показано на рис. 1. Рассматриваемые здесь искусственные материалы представляют большой интерес с точки зрения исследований различных фазовых переходов, а также БЭК экситон-

поляритонов, которая может происходить при высоких температурах.

Наконец, еще один многообещающий способ реализации графов, изображенных на рис. 1, связан с технологиями волоконной оптики, которые позволяют проектировать метасети для целей квантовой коммуникации и квантового Интернета, см. [36, 37].

Гамильтониан H , описывающий взаимодействие фотонного поля с системой ДУС в рамках графовой структуры волноводов на рис. 1 имеет следующий вид:

$$H = \hbar \sum_i^N \frac{\omega_{0,i} \sigma_i^z}{2} + \hbar \omega_{ph} \frac{1}{N} \sum_i^N \sum_v^{k_i} a_v^\dagger a_v + \frac{\hbar g}{\sqrt{N}} \sum_i^N \sum_v^{k_i} (a_v \sigma_i^+ + a_v^\dagger \sigma_i^-), \quad (1)$$

где $a_v (a_v^\dagger)$ – оператор уничтожения (рождения) фотона моды v -го волновода, σ_i^z – оператор инверсии населенности для i -й ДУС, $\omega_{0,i}$ – резонансная частота перехода ДУС с основного в возбужденное состояние, g – это константа связи ДУС с фотонным полем, имеющим частоту ω_{ph} (далее для удобства записи формально полагаем $\hbar = k_B = 1$, для постоянных Планка и Больцмана, соответственно). Гамильтониан (1) коммутирует с оператором, характеризующим число возбуждений $N_{ex,i}$ i -го узла, который определяется как

$$N_{ex,i} = \sum_i^N \frac{\sigma_i^z}{2} + \sum_v^{k_i} a_v^\dagger a_v. \quad (2)$$

В работе мы используем приближение среднего поля в рамках термодинамического подхода большого канонического ансамбля, который подразумевает наличие отличного от нуля химического потенциала μ ; его можно учесть, проведя в (1) замены $\Omega_{0,i} = \omega_{0,i} - \mu$ и $\Omega_{ph} = \omega_{ph} - \mu$, см. [38]. Кроме того, предполагаем, что все фотонные моды находятся в когерентных состояниях $|\alpha_v\rangle$, определяемых соотношением $a_v |\alpha_v\rangle = \alpha_v |\alpha_v\rangle$, где α_v принимаются действительными и равными для всех узлов. Такое приближение оправдано, если моды сильно перекрываются и обладают схожими физическими характеристиками, ср. с [22]. Усреднив (1) по когерентным состояниям $|\alpha_v\rangle$, получим:

$$H = \sum_i^N \frac{\Omega_{0,i} \sigma_i^z}{2} + \Omega_{ph} \langle k \rangle \Lambda^2 + \frac{g \Lambda}{\sqrt{N}} \sum_i^N (\sigma_i^+ + \sigma_i^-), \quad (3)$$

где $\Lambda \equiv \alpha_v = \sqrt{N_{ph}}$ есть параметр порядка для (3), N_{ph} – среднее число фотонов в сетевой структуре.

Далее, определим плотность возбуждений $\rho \equiv \frac{1}{N} \langle \sum_i^N N_{ex,i} \rangle$, которая представляет собой нормированное среднее общее число возбуждений и может быть получена из (2) в виде

$$\rho = \frac{\langle k \rangle \Lambda^2}{N} + \frac{1}{2} S_z, \tag{4}$$

где $S_z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i^z \rangle$ – средняя коллективная инверсия населенности. В рамках теории среднего поля статистическая сумма $Z(N, T) = Tr(e^{-\beta H})$ с Гамильтонианом (3) имеет следующий вид:

$$Z(N, T) = e^{-\beta \Omega_{ph} \langle k \rangle \Lambda^2} \prod_i^N 2 \cosh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega_{0,i}^2 + 4 \frac{g^2 k_i^2}{N} \Lambda^2} \right], \tag{5}$$

где $\beta \equiv 1/T$ – обратная температура. Далее, полагая, что количество узлов достаточно велико, $N \gg 1$, и структура сети допускает переход к непрерывному распределению $p(k)$. Этот переход требует замены $\frac{1}{N} \sum_i \dots \rightarrow \int_{k_{min}}^{k_{max}} \dots p(k) dk$, где k_{min} и k_{max} являются минимальным и максимальным значениями степени узла k , см. [14]. В этом случае с помощью (5) получаем

$$\Omega_{ph} = \frac{g^2}{\langle k \rangle} \int_{k_{min}}^{k_{max}} \frac{k^2}{\Gamma} \tanh \left[\frac{\beta \Gamma}{2} \right] p(k) dk; \tag{6a}$$

$$\rho = \langle k \rangle \frac{\Lambda^2}{N} - \frac{1}{2} \int_{k_{min}}^{k_{max}} \frac{\Omega_0}{\Gamma} \tanh \left[\frac{\beta \Gamma}{2} \right] p(k) dk, \tag{6b}$$

где $\Gamma \equiv \sqrt{\Omega_0^2 + 4 \frac{k^2}{N} g^2 \Lambda^2} = \sqrt{\Omega_0^2 + 4k^2 g_0^2 \Lambda^2}$ и предполагается, что все ДУС идентичны друг другу, так что $\Omega_{0,i} = \Omega_0$ в (6).

Система (6) описывает основные свойства параметра порядка Λ (6a) и плотности возбуждений ρ (6b) в термодинамически равновесном состоянии. Решение (6) включает также нахождение химического потенциала μ для различной топологии сети. В этой связи мы рассматриваем СРСУ-сети, которые определяются функцией распределения $p(k)$, [16]:

$$p(k) = \frac{(\gamma - 1) k_{min}^{\gamma-1}}{k^\gamma}, \tag{7}$$

где γ – показатель степени. Сеть с распределением (7) подчиняется условию нормировки $\int_{k_{min}}^{+\infty} p(k) dk = \frac{1}{N}$, согласно которому подразумевается, что сеть

с N узлами обладает более чем одним узлом с $k > k_{max}$. Из (7) также следует, что $k_{max} = k_{min} N^{\frac{1}{\gamma-1}}$.

Статистические свойства сети описываются с помощью первого ($\langle k \rangle$) и второго ($\langle k^2 \rangle$) моментов для распределения степеней узлов, которые определяются как (ср. с [14]):

$$\langle k^m \rangle = \int_{k_{min}}^{k_{max}} k^m p(k) dk, \quad m = 1, 2. \tag{8}$$

В работе нас интересует параметр $\zeta = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}$, который определяет основные статистические свойства выбранной сети. Показатель степени γ описывает три различных области, которые определяют основные характеристики для $\langle k \rangle$ и ζ в аномальном ($1 < \gamma < 2$), безмасштабном ($2 < \gamma < 3$), и случайном ($\gamma > 3$) режимах, соответственно. Свойства сетей, обладающих распределением (7) при $\gamma = 2$ и $\gamma = 3$, рассчитываются отдельно.

На рисунке 1a–с приведены примеры сетевых структур, смоделированных численно, которые относятся к аномальному (рис. 1a), безмасштабному (рис. 1b), и случайному (рис. 1c) режимам соответственно. В настоящее время существуют различные алгоритмы генерации таких сетей с распределением, близким к (7), см., например, [16]. Так как число узлов на практике всегда ограничено ($N = 100$ для рис. 1), то конечное (получаемое численно) распределение степени узлов будет дискретным; оно характеризуется точками на рис. 1d, которые описывают вероятности того, что узлы сетей на рис. 1a–с будут иметь степени вершин, соответствующих данной вероятности. На рисунке 1d совокупность этих точек аппроксимирована соответствующими пунктирными линиями, которые определяются из (7) при заданном γ (эти линии соответствуют логарифмическим зависимостям для (7), приведенным по осям абсцисс и ординат соответственно).

Ключевым фактором поведения сетей на рис. 1a–с является наличие хабов, которые четко видны в виде нескольких точек, расположенных в правом углу рис. 1d. Самый большой узел описывается степенью k_{max} . Сеть в аномальном режиме, как правило, демонстрирует максимальное количество хабов, см. рис. 1a. Напротив, в случайном режиме свойства СРСУ-сети близки по своим характеристикам к сети, которая описывается распределением Пуассона для $p(k)$; с ростом γ количество хабов уменьшается, см. синюю линию на рис. 1d.

На рисунке 2 представлены самосогласованные численные решения (6) для параметра порядка Λ

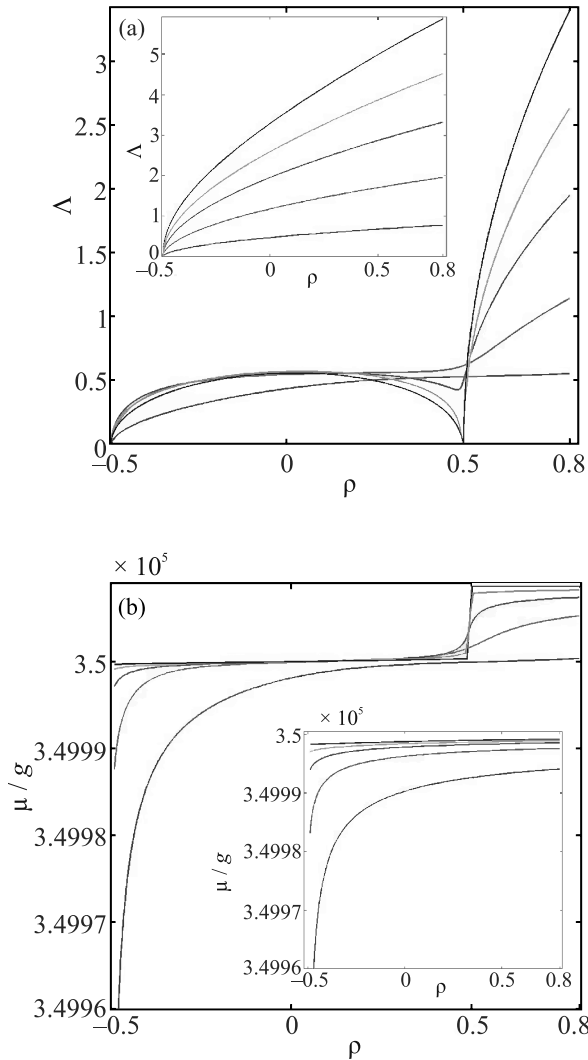


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость (а) – параметра порядка Δ , и (б) – нормированного химического потенциала μ/g от плотности возбуждений ρ при нормированной отстройке $\Delta/g = 9$ для $\gamma = 1.5$ (коричневый), $\gamma = 1.7$ (фиолетовый), $\gamma = 2$ (красный), $\gamma = 2.5$ (зеленый) и $\gamma = 4.5$ (синий). На вставках приведены зависимости для резонансного случая с $\Delta = 0$. Другие параметры: $\omega_0/g = 3.52 \cdot 10^5$, $N = 100$, $k_{\min} = 2$, $T = 0$

(рис. 2а) и нормированного на g химического потенциала μ (рис. 2б) как функции плотности возбуждений ρ для двух различных значений нормированной также на g отстройки $\Delta \equiv \omega_{ph} - \omega_0$ частоты поля в пределе нулевой температуры, $T \rightarrow 0$. Для численных оценок на рис. 2 в качестве ДУС взяты атомы цезия с переходом, соответствующем D_2 линии на частоте $\omega_0/2\pi \simeq 352$ ТГц [7, 20, 30]. В настоящее время удается экспериментально обеспечить сильную связь с квантованным излучением для таких атомов, локализованных на поверхности твердых сред, ср. с

[29, 30]. Для расчетов нами использовалось значение $g/2\pi = 1$ ГГц, соответствующее микроструктуре на рис. 1, содержащей $N = 100$ атомов.

Как видно из рис. 2а, Δ -параметр растет с ρ в условиях резонанса $\Delta = 0$.

Выражение для химического потенциала достаточно просто получить аналитически в пределе высоких температур $\beta \rightarrow 0$. В этом случае из (6) имеем

$$\mu_{1,2} = \frac{\omega_{ph} + \omega_0}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 - 8g^2\zeta \left(\rho - \frac{\langle k \rangle}{N} \Lambda^2 \right)}. \quad (9)$$

Выражение (9) определяет один из основных результатов данной работы. Оно устанавливает верхнюю (μ_1) и нижнюю (μ_2) ветви возбуждений системы связанных состояний квантованного поля и вещества, ср. с [39]. Выражение (9) позволяет также определить условие сильной связи.

В пределе малой плотности возбуждений можно положить $\Lambda \rightarrow 0$, $S_z \simeq -1$, что подразумевает $\rho \simeq -0.5$, т.е. ансамбль ДУС безинверсионный. При этом (9) описывает две поляритонные ветви, которые могут быть получены, например, с экситон-поляритонами в полупроводниковых микрорезонаторах, ср. с [13].

При $\rho = 0$ ДУС достигает насыщения, когда число частиц на нижнем и верхнем уровнях равно друг другу, $S_z \simeq 0$.

В пределе $\rho > 0$ имеем инверсию населенностей в ДУС, которая максимальна при $\rho = 0.5$ ($S_z = 1$). Примечательно, что при наличии большой отстройки Δ ансамбль ДУС претерпевает структурный переход к другому (параметрическому) типу возбуждений, которые присущи сильному усилению излучения, происходящему при $\rho > 0.5$, см. рис. 2 и [38].

Условие достижения такого перехода может быть найдено из (9) и представлено в виде $|\Delta| > 2g\sqrt{\zeta}$. На рис. 2 это неравенство не выполняется для коричневой кривой, что соответствует возрастающему значению ζ при $\gamma = 1.5$.

Из (9) следует, что частота расщепления Раби (последний член в (9)) существенно возрастает в зависимости от ζ в аномальном режиме изменения показателя степени γ , см. вставку на рис. 1d. Таким образом, можно усилить коллективное взаимодействие ДУС с квантованным полем, выбрав соответствующую γ , которая определяет топологию системы, представленную на рис. 1.

Фазовый переход в состояние СИ может быть определен из (6), полагая $\Lambda = 0$. Критическая температура фазового перехода T_c относительно просто выглядит для поляритонов нижней дисперсионной ветви при $\Delta = 0$ и имеет вид

$$T_c = \frac{\sqrt{-8g^2\zeta\rho}}{4 \tanh^{-1}(2\rho)}. \quad (10)$$

Выражение (10) демонстрирует другой важный результат работы. Из (10) видно, что критическая температура СИ фазового перехода T_c пропорциональна $\sqrt{\zeta}$, т.е. определяется топологией структуры на рис. 1. Примечательно, что в модели Изинга со спин-спиновым взаимодействием, характеризуемым функцией распределения (7), температура фазового перехода конечна и пропорциональна ζ -параметру, см. [14].

Как видно из (10), при $\rho \simeq 0$ критическая температура $T_c \rightarrow \infty$. Этот предел соответствует насыщению ДУС. Из (10) следует, что температура СИ фазового перехода T_c может быть очень высокой даже в пределе малой плотности возбуждений из-за статистических свойств самой сети, которые учитываются в (10) с помощью параметра ζ , и который, в свою очередь, может быть весьма большим в аномальном режиме – см. вставку на рис. 1d.

Для заданной температуры T в диапазоне изменения плотности возбуждений $-0.5 < \rho < 0$, т.е. для безинверсной ДУС соотношение (10) определяет критическое значение параметра ζ_c

$$\zeta_c = \frac{2T^2[\tanh^{-1}(2\rho)]^2}{|\rho|g^2}, \quad (11)$$

устанавливающего статистические свойства сети, когда происходит СИ фазовый переход. В частности, сверхизлучательная фаза существует при $\zeta \geq \zeta_c$. Поведение параметра порядка в области достаточно больших ζ и высоких температур может быть получено из (6b) в виде

$$\Lambda \simeq \sqrt{\frac{N_c x_c}{\langle k_c \rangle} \left(\frac{x}{x_c} - 1 \right)}, \quad (12)$$

где $x \equiv \frac{\beta g}{4} \sqrt{2\zeta|\rho|}$ представляет собой комбинацию ключевых параметров связанной системы поля и ДУС; x_c характеризует эту же комбинацию в точке фазового перехода при $\zeta = \zeta_c$. Выражение (12) демонстрирует характерную для фазовых переходов второго рода зависимость исчезновения числа фотонов СИ вблизи точки фазового перехода.

Проведем оценки достижимости условий как сильной, так и сверхсильной связи ДУС с квантованным полем для микроструктур с сетевой архитектурой на рис. 1. В пределе возбуждений малой плотности (при выполнении неравенства $\langle k \rangle \Lambda^2 / N \ll 1$) с помощью (9) такое условие можно представить в виде:

$$\Gamma, \kappa \ll g\sqrt{\zeta} \lesssim \omega_{ph}, \quad (13)$$

где κ и Γ характеризуют возможные потери фотонов и скорость деполяризации соответственно, ср. с [1]. В (13) левая часть неравенства характеризует условие сильной связи, а правая – сверхсильной.

Выполнение условий (13) для микроструктур с сетевой архитектурой на рис. 1 не представляется сложным, учитывая свойства распределения узлов (7), а также поведение параметра ζ , см. вкладку на рис. 1d. В частности, из (13) следует, что для достижения сверхсильной связи достаточно иметь параметры сети, удовлетворяющие, например, оценочному критерию $\zeta \simeq 0.01\omega_{ph}^2/g^2$, ср. с [10]. В аномальном режиме СРСУ-сети обладают большим числом различных каналов взаимодействия ДУС и поля, а также хабов, что может и обеспечить выполнение этого критерия. В этом случае для оценки достижимости сверхсильной связи можно использовать выражение $\zeta = k_{\min} \frac{2-\gamma}{3-\gamma} \frac{N^{\frac{3-\gamma}{2-\gamma}} - 1}{N^{\frac{2-\gamma}{\gamma-1}} - 1}$, получаемое из (7), (8).

Для атомных структур, анализируемых на рис. 2, показатель степени равен $\gamma = 1.219$ при $k_{\min} = 2$ и $N = 100$. Если же взять за основу микроструктуру с экситон-поляритонами, полученными на основе полупроводниковых квантовых ям GaAs, то величина параметра связи с квантованным полем резонатора будет составлять $g/2\pi = 1$ ТГц на резонансной длине волны $\lambda = 767.3$ нм, что приводит к значению $\gamma = 1.588$ для тех же величин k_{\min}, N .

В Заключении предложена новая концепция микроструктур с топологией сети (графа) со степенным распределением степени узлов, который основан на кооперативном когерентном взаимодействии ДУС, занимающих узлы данной сети с квантованным оптическим полем. Показано, что сверхсильный режим взаимодействия может быть реализован благодаря особенностям сетевой архитектуры, обеспечивающей связь ДУС по средством многочисленных волноводных каналов (ребер графа) структуры квантованным полем. Предсказана возможность гигантского усиления коллективного взаимодействия материи и поля в $\sqrt{\zeta}$ раз, который обеспечивается преимущественно в аномальной области распределения степени узлов сетевой структуры. Рассмотрена проблема сверхизлучательного фазового перехода, происходящего в рассматриваемых структурах. Предсказано, что температура фазового перехода существенно зависит от параметра ζ , который определяет статистические свойства (первый и второй моменты распределения степени связанности) сетевой структуры, и может быть очень высокой в пределе малой плотности возбуждений для аномальной области сети. По-

лученные результаты открывают качественно новые перспективы для обработки квантовой информации сетевыми или сетеподобными системами, а также наблюдение и изучение фазовых переходов с участием поляритонов в микроструктурах с сетевой топологией взаимодействия при достаточно высоких температурах, ср. с [36, 37].

Работа выполнена при поддержке гос. задания # 2019-1339 Министерства науки и высшего образования РФ.

1. A. F. Kockum, A. Miranowicz, S. De Liberato, S. Savasta, and F. Nori, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 19 (2019).
2. D. Meiser and P. Meystre, *Phys. Rev. A* **74**, 065801 (2006).
3. A. Boca, R. Miller, K. M. Birnbaum, A. D. Boozer, J. McKeever, and H. J. Kimble, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 233603 (2004).
4. C. Weisbuch, M. Nishioka, A. Ishikawa, and Y. Arakawa, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3314 (1992).
5. I. Buluta, S. Ashhab, and F. Nori, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 104401 (2011).
6. E. Pelucchi, G. Fagas, I. Aharonovich, D. Englund, E. Figueroa, O. Gong, H. Hannes, J. Liu, C. Lu, N. Matsuda, J. Pan, F. Schreck, F. Sciarrino, C. Siberhorn, J. Wang, and K. Jons, *Nat. Rev. Phys.* **4**, 194 (2022).
7. E. Vetsch, D. Reitz, G. Sague, R. Schmidt, S. T. Dawkins, and A. Rauschenbeutel, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 203603 (2010).
8. B. M. Garraway, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **369**, 1137 (2011).
9. A. Johnson, M. Blaha, A. E. Ulanov, A. Rauschenbeutel, P. Schneeweiss, and J. Volz, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 243602 (2019).
10. T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. P. Menzel, F. Hocke, M. J. Schwarz, J. J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hummer, E. Solano, A. Marx, and R. Gross, *Nature Phys.* **6**, 772 (2010).
11. M. N. Sundaresan, Y. Liu, D. Sadri, L. J. Szöcs, D. L. Underwood, M. Malekakhlagh, H. E. Türeci, and A. A. Houck, *Phys. Rev. X* **5**, 021035 (2015).
12. D. J. Egger and F. K. Wilhelm, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 163601 (2013).
13. H. Deng, H. Haug, and Y. Yamamoto, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1489 (2010).
14. A. Yu. Bazhenov, D. V. Tsarev, and A. P. Alodjants, *Phys. Rev. E* **103**, 062309 (2021).
15. M. Newman, *Networks*, Oxford University Press, Oxford (2018), p. 789.
16. A.-L. Barabási, *Network Science*, Cambridge University Press, Cambridge (2016).
17. А. В. Андреев, В. И. Емельянов, Ю. А. Ильинский, *УФН* **131** 653 (1980).
18. В. В. Кочаровский, В. В. Железняков, Е. Р. Кочаровская, В. В. Кочаровский, *УФН* **187**, 367 (2017).
19. А. М. Башаров, А. И. Трубилко, *ЖЭТФ* **155** 654 (2019).
20. A. Goban, C. Hung, J. D. Hood, S. P. Yu, J. A. Muniz, O. Painter, and H. J. Kimble, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 063601 (2015).
21. K. Hepp and E. H. Lieb, *Ann. Phys. (N.Y.)* **76**, 360 (1973).
22. Y. K. Wang and F. T. Hioe, *Phys. Rev. A* **7**, 831 (1973).
23. I. Yu. Chestnov, A. P. Alodjants, S. M. Arakelian, J. Nipper, U. Vogl, F. Vewinger, and M. Weitz, *Phys. Rev. A* **81**, 053843 (2010).
24. J. Klaers, J. Schmitt, T. Damm, F. Vewinger, and M. Weitz, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 160403 (2012).
25. M. H. Szymanska, P. B. Littlewood, and B. D. Simons, *Phys. Rev. A* **68**, 013818 (2003).
26. I. Yu. Chestnov, A. P. Alodjants, and S. M. Arakelian, *Phys. Rev. A* **88**, 063834 (2013).
27. D. Snoko, *Polariton Condensation and Lasing*. Springer Series in Solid-State Sciences **172**, 307, Springer, Berlin (2012).
28. И. Е. Дзялошинский, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *УФН* **73**, 381 (1961).
29. Su-Peng Yu, J. A. Muniz, Chen-Lung Hung, and H. J. Kimble, *PNAS* **116**, 12743 (2019).
30. C.-L. Hung, S. M. Meenehan, D. E. Chang, O. Painter, and H. J. Kimble, *New J. Phys.* **15**, 083026 (2013).
31. N. Skryabin, A. Kalinkin, I. Dyakonov, and S. Kulik, *Micromachines* **1**, 11 (2020).
32. S. Kuhr, *National Science Review* **3**, 170 (2016).
33. D. Barredo, V. Lienhard, S. de Léséleuc, T. Lahaye, and A. Browaeys, *Nature* **561**, 79 (2018).
34. D. de Mello, D. Schäffner, J. Werkmann, T. Preuschoff, L. Kohfahl, M. Schlosser, and G. Birkl, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 203601 (2019).
35. C. Schneider, K. Winkler, M. D. Fraser, M. Kamp, Y. Yamamoto, E. A. Ostrovskaya, and S. Höfling, *Rep. Prog. Phys.* **80**, 016503 (2016).
36. S. Brito, A. Canabarro, R. Chaves, and D. Cavalcanti, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 210501 (2020).
37. S. Lepri, C. Trono, and G. Giacomelli, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 123901 (2017).
38. A. Y. Bazhenov, D. V. Tsarev, and A. P. Alodjants, *Physica B: Condensed Matter* **579**, 411879 (2020).
39. A. P. Alodjants, I. O. Barinov, and S. M. Arakelian, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 095502 (2010).

Температурная зависимость Фано-резонанса в ультрамелких наноалмазах, синтезированных при высоком давлении

А. А. Ширяев⁺*, Е. А. Екимов[×], В. Ю. Прокофьев*, М. В. Кондрин^{×1)}

⁺ Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина, 119071 Москва, Россия

* Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН, 119017 Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 24 марта 2022 г.

После переработки 18 апреля 2022 г.

Принята к публикации 24 апреля 2022 г.

В настоящей работе исследуется температурная эволюция Фано-резонанса, недавно обнаруженного в инфракрасных спектрах наноалмазов, синтезированных из хлороадамантиана при высоком статическом давлении. Нами впервые была обнаружена перестройка в широких пределах Фано-резонанса в наноалмазах, вызванная изменением температуры. Форма Фано-резонанса существенно меняется с ростом температуры, при температурах выше 350 °С эффект полностью пропадает, но восстанавливается при охлаждении до комнатной температуры. Для изученных образцов подобное поведение позволяет считать маловероятным эффект влияния поверхностного заряда (*surface transfer doping*) как движущего фактора, приводящего к возникновению Фано-резонанса. Установлено, что изменение формы Фано резонанса с повышением температуры обусловлено сильной температурной зависимостью разницы частот между яркой (ИК-активной) и темной (рамановской) модами наноалмаза. При этом частота темной рамановской моды слабо зависит от температуры.

DOI: 10.31857/S1234567822110039, EDN: ilefys

1. Введение. Фано-эффект, предсказанный Уго Фано в работах, опубликованных в 1930-х гг. [1, 2], в настоящее время является предметом активного экспериментального исследования [3–5]. Быстрое переключение от поглощения к пропусканию вследствие Фано-эффекта представляет значительный фундаментальный и прикладной интерес. Фано-резонансы обнаруживаются в метаматериалах, метаповерхностях, наноболочках (*nanoshells*) и других нанодисперсных материалах [3–9].

Недавно двумя группами исследователей был обнаружен Фано-эффект в ИК-поглощении наноалмазов (размером больше 2 нм), синтезированных из адамантана и его производных при высоком статическом давлении [10, 11]. Заметим, что синтез из галогенированных углеводородов является бурно развивающимся направлением синтеза [12–16], которое позволяет получать наноалмазы контролируемого в широком диапазоне размера, начиная с 1 нм. Такие наноалмазы являются перспективным материалом для приложений в области биомедицины, квантовой оптики и криптографии [17]. Фано-резонанс для обсуждаемых наноалмазов проявляется в виде “окна

пропускания” в районе 1330 см⁻¹, т.е. в окрестности рамановской моды алмаза. Напомним, что в чистом алмазе рамановская мода является неактивной в ИК-диапазоне. Природа Фано резонанса в наноалмазах остается невыясненной. Было высказано предположение, что ИК поглощение рамановской модой в алмазе связано с проводящими состояниями на поверхности алмазных зерен. Появление этих состояний остается до конца непонятым: предположительно, эти состояния образуются из-за адсорбированной воды/кислорода и др. (так называемый *surface transfer doping mechanism* – легирование поверхностным зарядом [18–20]) на наводороженной поверхности наноалмазов [10] или из-за реконструкции поверхности наноалмазов [11]. В последнем случае, реконструкция приводит к появлению на поверхности своего рода трансполиацетилен-подобных фрагментов. Ранее была установлена корреляция между электрической проводимостью образцов наноалмазов и Фано-эффектом в ИК-поглощении. Было показано, что в образцах наноалмазов размером 8 нм одновременно присутствует как Фано-эффект, так и существенная электрическая проводимость ($\rho = 10^5 - 10^6$ Ом см), в то время как в наноалмазах размером менее 2 нм ни Фано-эффект, ни проводимость не наблюдаются [11].

¹⁾e-mail: mkondrin@hphi.troitsk.ru

Чтобы выяснить природу проводящих состояний, нами были проведены *in situ* измерения ИК-спектров отражения наноалмазов, на которых при комнатной температуре наблюдался Фано-эффект, при нагреве в инертной атмосфере (в потоке сухого N_2) и на воздухе. Результаты этих исследований приведены в данном сообщении.

Фано-эффект заключается в когерентном взаимодействии оптически-активной (яркой) широкополосной моды с узкой оптически-неактивной (темной) модой. За счет взаимодействия между модами темная мода проявляется в оптических экспериментах в качестве пика специфической несимметричной формы. Хотя природа Фано-резонанса исключительно квантовая, возникающие эффекты могут быть смоделированы с помощью двух классических связанных осцилляторов, которые можно описать с помощью матричного уравнения [5, 9, 21, 22]:

$$\begin{pmatrix} \omega - \omega_1 - i\gamma & g \\ g & \omega - \omega_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} f_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь ω_1 и ω_2 – характерные частоты яркой и темной моды соответственно, γ – ширина яркой моды, g – константа взаимодействия между яркой и темной модами. Размерность этих констант, как и амплитуды движущей силы f_1 и ее частоты ω даны в энергетических единицах. Отклик системы x_i – безразмерный. Заметим, что движущая сила состоит из одной компоненты f_1 , что указывает, что с внешним полем непосредственно взаимодействует только один осциллятор.

Решение этой системы выражается функцией:

$$\|x_1\|^2 = \frac{\|f_1\|^2 A (\omega - \omega_0 + \Gamma F)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2}, \quad (1)$$

где A , Γ , F , ω_0 – это функции зависящие, от частоты ω :

$$F = \frac{\omega - \omega_1}{\gamma}, \quad (2)$$

$$\Gamma = \frac{g^2}{\gamma(1 + F^2)}, \quad (3)$$

$$\omega_0 = \omega_2 + \Gamma F, \quad (4)$$

$$A = \frac{1}{\gamma^2(1 + F^2)}. \quad (5)$$

В то же время, вблизи частоты темной моды (бесконечно узкой в модели связанных осцилляторов) эти функции можно приравнять константам, сделав подстановку $\omega \rightarrow \omega_2$ в уравнении (2). Тогда уравнение (1) приобретает характерный несимметричный

вид, описывающий Фано-профиль поглощения. Таким образом получим, что параметр A – это амплитуда поглощения, Γ и ω_0 – ширина и характерная частота линии поглощения, а F (параметр Фано) – коэффициент асимметрии этой линии. Типичный пример такого профиля поглощения приведен на рис. 1. В данном случае, с помощью этого профиля подгоня-

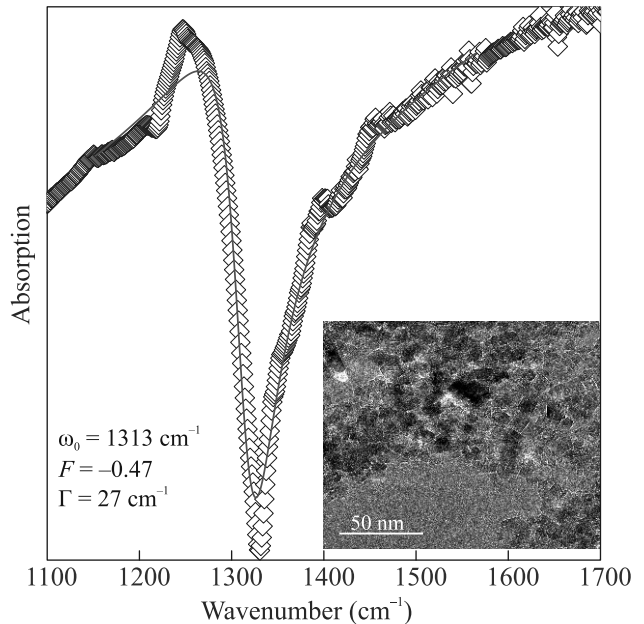


Рис. 1. (Цветной онлайн) Подгонка экспериментальных значений Фано-резонанса, наблюдаемого в наноалмазах размером 8 нм (ромб), теоретической зависимостью, описываемой уравнением (1) с линейным некогерентным фоном (красная сплошная кривая). Значения нелинейных параметров подгонки показаны на рисунке. Вставка: изображение наноалмазов исследованного образца, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии

ются экспериментальные данные поглощения в наноалмазах размером 8 нм, синтезированных из хлороадамантиана при высоком давлении. Необходимо отметить, что асимметрия профиля приводит к появлению окна пропускания на частотах, выше характерной частоты Фано-резонанса.

Следует сделать одно замечание по процедуре подгонки, показанной на рис. 1. Нами была использована формула (1) вместе с дополнительным некогерентным фоном, аппроксимируемым прямой линией. Как следует из формулы (1), коэффициент пропорциональности A для линии поглощения должен быть положительным. В процессе неконтролируемой подгонки экспериментальных данных этот коэффициент пропорциональности может оказаться отрицательным. В этом случае следует “позаимствовать”

дополнительную спектральную плотность из некогерентного фона согласно формуле:

$$-\frac{(F + \Omega)^2}{(1 + \Omega^2)} + (1 + F^2) = F^2 \frac{(1/F - \Omega)^2}{(1 + \Omega^2)}, \quad (6)$$

где $\Omega = (\omega - \omega_0)/\Gamma$. Это означает, что амплитуда Фано-резонанса (равная -1) может быть конвертирована в положительное число (F^2) с одновременной заменой Фано-параметра $F \rightarrow -1/F$. Нужно отметить, что в предыдущей нашей работе [11] эти соотношения не были учтены (амплитуда резонанса была отрицательной), что привело к неправильному значению параметра Фано. Необходимые исправления внесены на рис. 1 в параметр F .

2. Методика. ИК-исследования проводились в лаборатории геохимии ИГЕМ РАН. В экспериментах использован образец наноалмаза с размером зерен 8 нм (см. также [11]). Порошок наноалмаза наносился на алюминиевое зеркало, помещенное в термокамеру Linkam THMSG600 [23], управляемую температурным контроллером T95 [24]. Сборка, состоящая из фольги с насыпанным на нее образцом, сверху накрывалась прозрачным в ИК-диапазоне окном, сделанным из BaF_2 , находящимся в тепловом контакте с нагревателем. Следовательно, нагрев образовавшейся полости был всесторонним и установившаяся температура внутри нее была постоянной. Чтобы откалибровать значения этой температуры, был предпринят эксперимент по известному фазовому переходу с температурой 289°C , который при условиях нашего эксперимента был зарегистрирован в точке 288°C . Таким образом, точность определения температуры была в пределах ± 1 градуса. Это значение находится в хорошем согласии с опубликованными ранее [25] данными, полученными при измерениях стандартных геологических образцов. ИК-спектры регистрировались в геометрии “на отражение” с помощью ИК-микроскопа Lumos II; спектральное разрешение 2 см^{-1} ; количество сканов от 600 до 1000 (5–10 мин). Эксперименты проводились как на воздухе в диапазоне от 22 до 400°C , так и в инертной атмосфере при непрерывной продувке сухим N_2 в диапазоне от -80 до 380°C ; шаг по температуре от 20 до 50°C . Спектры также регистрировались после цикла нагрева. Заметной зависимости результатов от конкретного режима нагрева не отмечено.

Для пошагового нагрева мы выбрали 8-нанометровые наноалмазы с наиболее простым и ярко выраженным Фано-резонансом. Как было отмечено выше, на наноалмазах диаметром меньше 2 нм Фано-эффект отсутствует, вместо него в этом диапазоне длин волн наблюдается несколько пиков ИК-

поглощения [11]. В промежуточной области размеров картина смешанная – присутствует сильно модулированный пиками ИК-поглощения Фано-резонанс [11]. Таким образом, оптимальными оказались наиболее крупные из синтезированных наноалмазов.

3. Результаты. Экспериментальные спектры ИК-отражения, полученные в результате ступенчатого нагрева, приведены на рис. 2, 3 в диапазоне температур -80 – 400°C . В высокотемпературной части

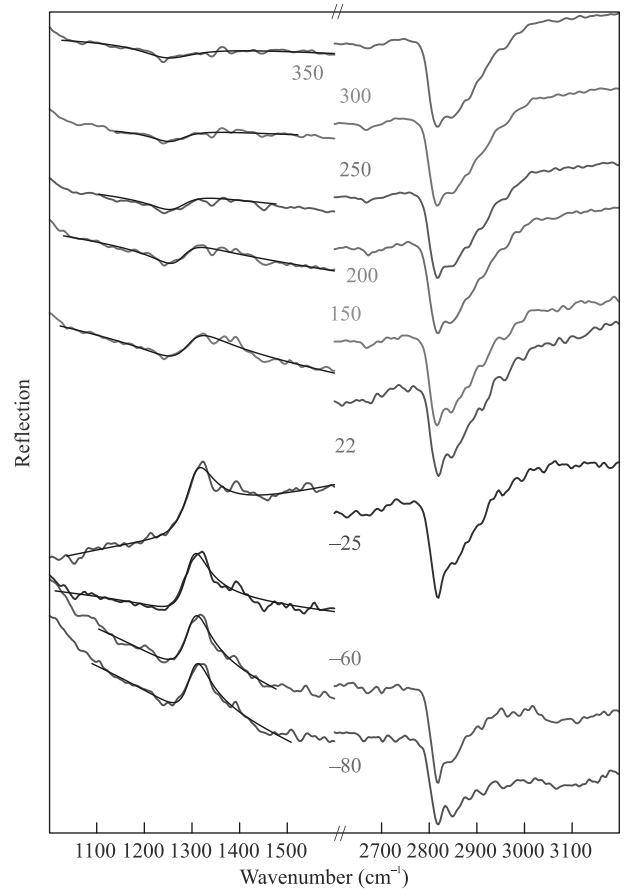


Рис. 2. (Цветной онлайн) ИК-спектры отражения образца наноалмаза размером 8 нм, полученные при нагреве в азотной атмосфере. Температура в $^\circ\text{C}$ приведена рядом с соответствующей кривой. Подгонка Фано-резонанса теоретической зависимостью описываемой уравнением (1) с линейным некогерентным фоном показана сплошными черными кривыми

этого диапазона наблюдалось полное исчезновение Фано-резонанса. Помимо Фано-резонанса в районе 1300 см^{-1} , при всех температурах наблюдается ИК-поглощение на частотах $\approx 3000\text{ см}^{-1}$, обусловленное валентными колебаниями С-Н связей; других ярко выраженных полос в наших образцах не наблюдалось. Наличие поверхностных С-Н групп обычно для

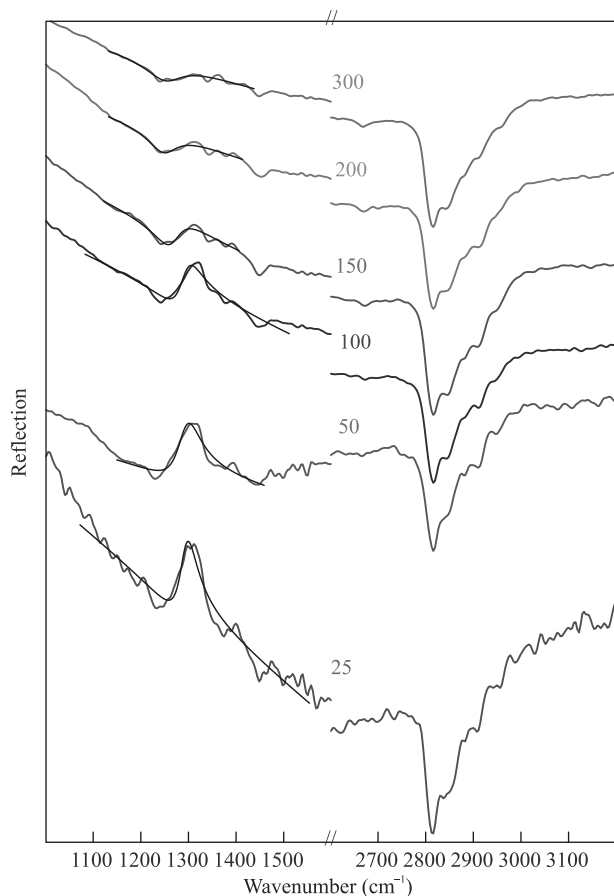


Рис. 3. (Цветной онлайн) ИК-спектры отражения образца нанодиамаза размером 8 нм, полученные при нагреве на воздухе. Температура в °С приведена рядом с соответствующей кривой. Подгонка Фано-резонанса теоретической зависимостью, описываемой уравнением (1) с линейным некогерентным фоном, показана сплошными черными кривыми

нанодиамазов. Отметим, что для наводороженных алмазных пленок отмечалось необратимое разрушение поверхности и исчезновение сопутствующего влияния поверхностного заряда на электропроводность при отжиге на воздухе до 230 °С [18]. Данный эффект очевидным образом связан с разрушением физисорбированных молекул воды/кислорода, так как при столь низких температурах отжига практически не наблюдается потерь Н-содержащих поверхностных групп [26]. В наших же экспериментах сброс температуры после отжига с 380–400 °С до комнатной температуры как в инертной, так и воздушной атмосферах приводил к полному восстановлению Фано-эффекта. То, что Фано-эффект в нанодиамазах “выживает” после их продолжительного отжига на воздухе при 250 °С, было ранее установлено в результате *ex situ* эксперимента [11].

Прежде чем перейти к обсуждению Фано-эффекта на отожженных образцах, следует сделать несколько замечаний по амплитуде спектров отражения. Можно было бы предположить постоянство коэффициента пропускания с точностью до независимой от температуры мультипликативной константы. Однако в эксперименте было обнаружено, что амплитуда С-Н мод *растет* с температурой (см. также [27]). Данное поведение может объясняться вкладом излучательной способности образца (*emissivity*), но также может частично объясняться изменением поверхности насыпанного образца (перераспределение зерен и т.п.). Поэтому в нашей работе экспериментальные данные отнормированы на амплитуду С-Н мод. Именно в таком масштабе и приведены экспериментальные данные на рис. 2, 3. В любом случае, изменение поправочного коэффициент невелико и в исследуемой области температур не превышает 2–3. Таким образом, для дальнейших рассуждений с точностью до порядка величины этот коэффициент существенной роли не играет.

Подгонка окна пропускания в левой части рис. 2, 3 показана сплошными черными линиями. Несмотря на значительное изменение формы и амплитуды линии в области температур –80–300 °С удается получить достаточно гладкое изменение параметров подгонки согласно уравнению (1). Некоторые из полученных параметров подгонки приведены в табл. 1 и на рис. 4. При температуре 350 °С подгонка все еще возможна, но значения параметров подгонки становятся нереалистичными; при более высоких температурах аппроксимация уже невозможна. На наш взгляд, это свидетельствует об (обратимом) разрушении Фано-резонанса при температурах выше 350 °С.

Как следует из полученных данных, наиболее сильно меняются значения Фано-параметра F (почти на порядок) и A , $A_{\text{сорт}}$ (на полтора порядка). Характерная частота ω_0 и ширина линии Γ меняются сравнительно слабо. Возникает интересный вопрос – чему в модели двух связанных осцилляторов соответствует такое изменение экспериментальных параметров? Заметим в этой связи, что хотя модель связанных осцилляторов активно обсуждается в литературе, но насколько нам известно, она ранее не применялась для количественной интерпретации экспериментальных данных (что во многом связано с опечатками, встречающихся в конечных формулах этой модели).

Как следует из уравнений (2)–(5), непосредственно из нелинейных параметров подгонки (ω_0 , F , Γ), полученных в абсолютных единицах, можно вычислить только значение характеристической частоты

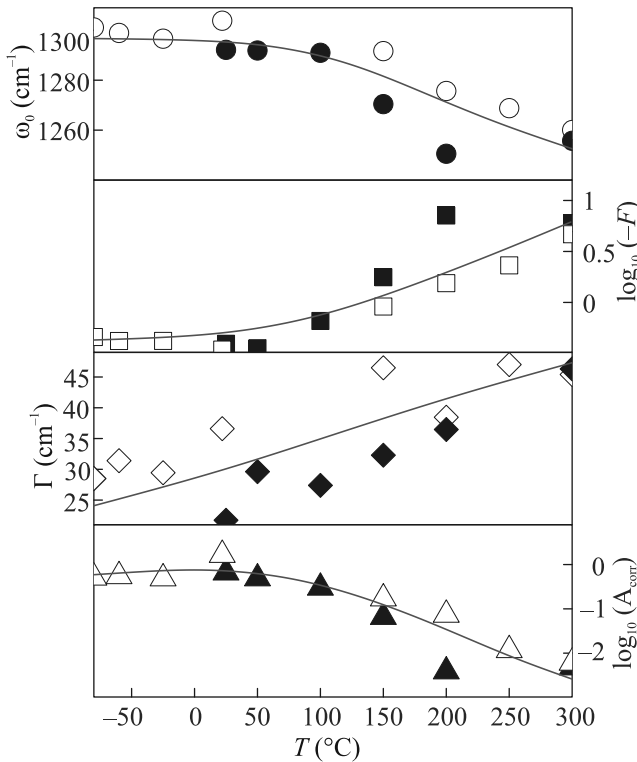


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурная зависимость параметров наблюдаемого в эксперименте Фано-резонанса (см. рис. 2, 3), полученных в результате подгонки уравнением (1). Сплошные красные линии схематически указывают тенденцию изменения параметров. Черные символы соответствуют данным, полученным на воздухе, белые – в азотной атмосфере

темной моды ω_2 (она приведена на верхнем графике рис. 5). Как видно из рис. 5, в диапазоне температур -80 – 200 °C эта частота с хорошей точностью (± 10 cm^{-1}) совпадает с частотой рамановской моды алмаза, что свидетельствует об участии рамановской моды в появлении Фано-эффекта в наноалмазах.

В то же время, определение остальных параметров модели связано с получением температурной зависимости параметра γ (ширины яркой моды) из зависимости величины амплитуды Фано-резонанса A (уравнение (5)). Как отмечалось ранее, эта зависимость известна из экспериментальных данных с точностью до мультипликативной константы, и в качестве амплитуды мы берем откорректированное с учетом амплитуды С-Н колебаний значение A_{corr} . Тем не менее, таким образом можно установить наиболее сильное *относительное* изменение любого из параметров модели. Эти параметры в условных единицах приведены на рис. 5.

Как следует из рис. 5, наиболее сильно (почти в 25 раз) меняется значение разности частоты яркой

Таблица 1. Значения параметров Фано-резонанса, полученных из подгонки экспериментальных данных, зарегистрированных при различных температурах T . A – амплитуда пропускания, Γ и ω_0 – ширина и характерная частота линии поглощения, а F – Фано-параметр, A_{corr} – амплитуда пропускания, нормированная на амплитуду С-Н мод (см. текст). Верхняя часть таблицы соответствует данным, полученным в азотной атмосфере, нижняя – на воздухе

T °C	ω_0 cm^{-1}	F	Γ cm^{-1}	A	A_{corr}
-80	1301.1	-0.457	28.4	0.006085	0.50716
-60	1298.9	-0.418	31.4	0.004372	0.54660
-25	1296.6	-0.419	29.4	0.004077	0.48777
22	1303.8	-0.344	36.6	0.010737	1.65199
150	1291.6	-0.911	46.4	0.002407	0.17193
200	1275.6	-1.545	38.4	0.001177	0.07362
250	1268.8	-2.310	47.0	0.000271	0.01170
300	1260.0	-4.666	45.4	0.000145	0.00608
25	1292.1	-0.393	21.7	0.005289	0.66112
50	1291.8	-0.355	29.6	0.003902	0.48778
100	1290.9	-0.658	27.3	0.005710	0.30054
150	1270.4	-1.767	32.2	0.001379	0.06571
200	1250.5	-7.124	36.4	0.000108	0.00387
300	1255.7	-5.982	46.3	0.000142	0.00475

и темной моды $\omega_2 - \omega_1$. Следующим по величине изменения является константа взаимодействия между яркой и темной модами g , меняющаяся почти в 8 раз. Таким образом, напрашивается вывод, что основным фактором приводящем к изменению формы Фано-резонанса с ростом температуры является изменение частоты яркой моды. Из-за большой ширины этой моды установить ее местоположение в эксперименте не представляется возможным. В то же время изменение параметра расстройки частот яркой и темной моды $\omega_2 - \omega_1$ влияет на их параметр взаимодействия g .

Несколько слов следует сказать об абсолютном значении частоты яркой моды. По всей видимости, она незначительно отличается от частоты темной моды (которая, как было установлено выше, близка к частоте рамановской моды). Это вывод можно сделать из малого значения Фано-параметра, наблюдаемого в эксперименте. Следует также заметить, что на наноалмазах большего размера (порядка 30 нм) параметр расстройки $\omega_2 - \omega_1$ практически нулевой [10], что приводит к значению параметра Фано F , близкому к нулю и практически симметричному окну пропускания, наблюдаемому в эксперименте.

4. Выводы. В первую очередь, мы должны отметить впервые обнаруженную перестройку в широких пределах Фано-резонанса в наноалмазах (Фано-параметр меняется почти на порядок), вызванному

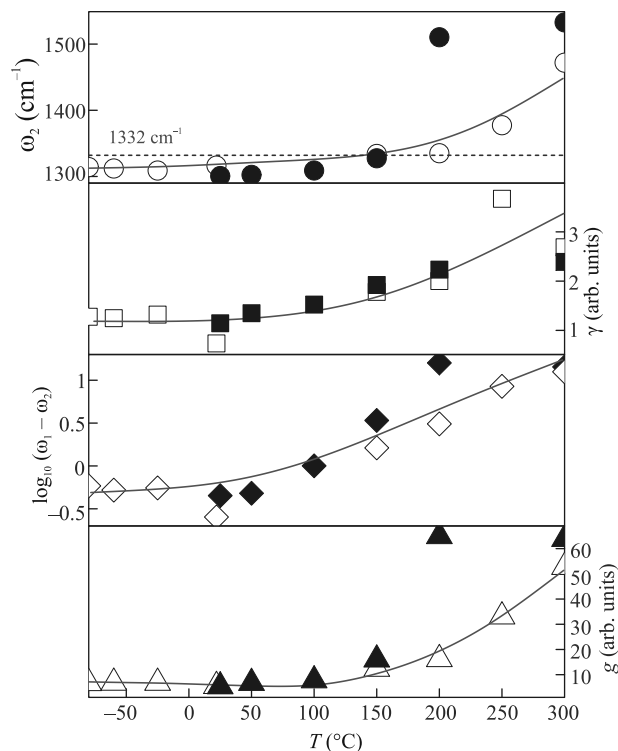


Рис. 5. (Цветной онлайн) Температурная зависимость параметров модели двух связанных осцилляторов. ω_2 – абсолютное значение частоты темной моды (прерывистая прямая на графике обозначает частоту рамановской моды алмаза); $\omega_1 - \omega_2$ частота расстройки между яркой и темной модами; γ – ширина яркой моды; g – константа взаимодействия между яркой и темной модами. Сплошные красные линии схематически указывают тенденцию изменения параметров. Черные символы соответствуют данным, полученным на воздухе, белые – в азотной атмосфере

изменением температуры. При этом отжиг наноалмазов, полученных из хлороадамантиана при высоком давлении, приводит к подавлению Фано-эффекта при температурах выше 350°C . В то же время понижение температуры до комнатной в азотной атмосфере приводит к обратимому восстановлению этого эффекта. Для изученных образцов подобное поведение позволяет считать маловероятным эффект легирования поверхностным зарядом как движущего фактора, приводящего к возникновению Фано-резонанса. Исследование параметров Фано-эффекта приводит к заключению, что наиболее сильное влияние на изменение формы Фано-резонанса оказывает параметр расстройки (разница частот между темной и ИК-активной модами), который меняется более чем на порядок в исследованной области температур. При этом по абсолютной величине частота темной моды в области температур до 200°C с хорошей

точностью совпадает с частотой рамановской моды алмаза.

Мы благодарим Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку (грант # 20-52-26017) и Степана Стехлика (Dr. Stepan Stehlik) за содержательную дискуссию.

1. U. Fano, *Il Nuovo Cimento* (1924-1942) **12**, 154 (1935).
2. U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
3. B. Luk'yanchuk, N. I. Zheludev, S. A. Maier, N. J. Halas, P. Nordlander, H. Giessen, and C. T. Chong, *Nature Mater.* **9**, 707 (2010).
4. F. J. García de Abajo, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1267 (2007).
5. M. F. Limonov, M. V. Rybin, A. N. Poddubny, and Y. S. Kivshar, *Nature Photon.* **11**, 543 (2017).
6. M. I. Tribelsky and A. E. Miroshnichenko, *Phys.-Uspekhi* **65**, 40 (2022).
7. F. Lapointe, E. Gaufrès, I. Tremblay, N. Y.-W. Tang, R. Martel, and P. Desjardins, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 097402 (2012).
8. P. Gu, X. Cai, G. Wu, C. Xue, J. Chen, Z. Zhang, Z. Yan, F. Liu, C. Tang, W. Du, Z. Huang, and Z. Chen, *Nanomaterials* **11**, 2039 (2021).
9. M. F. Limonov, *Adv. Opt. Photonics* **13**, 703 (2021).
10. O. S. Kudryavtsev, R. H. Bagramov, A. M. Satanin, A. A. Shiryayev, O. I. Lebedev, A. M. Romshin, D. G. Pasternak, A. V. Nikolaev, V. P. Filonenko, and I. I. Vlasov, *Nano Lett.* **22**, 2589 (2022).
11. E. Ekimov, A. A. Shiryayev, Y. Grigoriev, A. Averin, E. Shagieva, S. Stehlik, and M. Kondrin, *Nanomaterials* **12**, 351 (2022).
12. V. A. Davydov, A. V. Rakhmanina, S. G. Lyapin, I. D. Ilichev, K. N. Boldyrev, A. A. Shiryayev, and V. N. Agafonov, *JETP Lett.* **99**, 585 (2014).
13. E. Ekimov, S. Lyapin, Y. Grigoriev, I. Zibrov, and K. Kondrina, *Carbon* **150**, 436 (2019).
14. E. Ekimov, M. Kondrin, S. Lyapin, Y. Grigoriev, A. Razgulov, V. Krivobok, S. Gierlotka, and S. Stelmakh, *Diam. Relat. Mater.* **103**, 107718 (2020).
15. E. Ekimov, K. Kondrina, I. Zibrov, S. Lyapin, M. Lovygin, and P. Kazanskiy, *Materials Research Bulletin* **137**, 111189 (2021).
16. M. V. Kondrin, I. P. Zibrov, S. G. Lyapin, Y. V. Grigoriev, R. A. Khmel'nitskiy, and E. A. Ekimov, *ChemNanoMat* **7**, 17 (2021).
17. E. A. Ekimov and M. V. Kondrin, *Phys.-Uspekhi* **60**, 539 (2017).
18. F. Maier, M. Riedel, B. Mantel, J. Ristein, and L. Ley, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3472 (2000).
19. W. Chen, D. Qi, X. Gao, and A. T. S. Wee, *Progress in Surface Science* **84**, 279 (2009).

20. K.G. Crawford, I. Maini, D.A. Macdonald, and D.A. Moran, *Progress in Surface Science* **96**, 100613 (2021).
21. Y.S. Joe, A.M. Satanin, and C.S. Kim, *Phys. Scr.* **74**, 259 (2006).
22. B. Gallinet and O. J. F. Martin, *Phys. Rev. B* **83**, 235427 (2011).
23. THMSG600 Temperature Controlled Geology Stage. User Guide, Linkam Scientific Instruments, <https://linkamscientific.squarespace.com/archivemanuals>.
24. PE95/T95 System Controller. User Guide, Linkam Scientific Instruments, <https://linkamscientific.squarespace.com/archivemanuals>.
25. V.Y. Prokof'ev, I.A. Baksheev, F.Y. Korytov, and J. Touret, *Comptes Rendus Geoscience* **338**, 617 (2006).
26. A.P. Koscheev, *Gas desorption from detonation nanodiamonds during temperature-programmed pyrolysis*, in *Carbon Nanomaterials for Gas Adsorption*, Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., N.Y. (2012), p. 219.
27. A. Maturilli, A.A. Shiryaev, I.I. Kulakova, and J. Helbert, *Spectrosc. Lett.* **47**, 446 (2014).

Нарушение осевой симметрии терагерцового излучения плазмы одноцветного филамента

Г. Э. Ризаев¹⁾, Д. В. Мокроусова⁺, Д. В. Пушкарёв⁺, Д. Е. Шипило⁺, И. А. Николаева⁺⁺, Н. А. Панов⁺⁺,
Л. В. Селезнев⁺, О. Г. Косарева⁺⁺, А. А. Ионин⁺

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

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

Поступила в редакцию 14 апреля 2022 г.

После переработки 22 апреля 2022 г.

Принята к публикации 25 апреля 2022 г.

Измерены двумерные диаграммы направленности терагерцового излучения, генерируемого в плазме лазерного филамента, в различных диапазонах терагерцового спектра. Показано, что в низкочастотной области 0.1–0.5 ТГц излучение распространяется в конус с минимумом на оси. На больших частотах ~ 1 ТГц диаграмма направленности терагерцового излучения существенно зависит от поляризации лазерного импульса. Так, при линейной поляризации осевая симметрия картины нарушается: излучение распространяется в два максимума, расположенных на оси, перпендикулярной направлению поляризации лазерного излучения, а в случае циркулярной поляризации осесимметричный характер распределения терагерцового излучения сохраняется.

DOI: 10.31857/S1234567822110040, EDN: ilgev

Терагерцовое излучение плазменных каналов [1], формирующихся при филаментации фемтосекундных лазерных импульсов [2, 3] в воздухе, изучается с середины 1990-х гг. Во многих работах сообщалось, что терагерцовое излучение плазменных каналов одноцветного филамента распространяется в конус с минимумом на оси [4, 5]. В указанных экспериментальных исследованиях применялись существенно разные методики измерения: узкополосный гетеродинный детектор, чувствительный к частоте около 0.1 ТГц [4] и болометр с рабочим диапазоном частот от 0.1 до 3 ТГц [5]. Совершенно иначе выглядит угловое распределение терагерцового излучения, полученное в работах [6, 7], – оно представляет собой два максимума, расположенных на вертикальной оси при горизонтальной поляризации импульса накачки. Во многих работах по отдельности рассматривались и спектр терагерцового излучения [8], или его диаграмма направленности [4]. Однако угловое распределение отдельных спектральных компонент изучено сравнительно мало [9]. Поэтому целью нашей работы стало измерение разрешенных по спектру двумерных распределений терагерцового излучения.

Эксперименты проводились на титан-сапфировой лазерной системе с центральной длиной волны 740 нм (Авеста). Длительность импульсов составля-

ла 90 фс, диаметр лазерного пучка – 8 мм $FWe^{-1}M$. На выходе лазерной системы излучение имело горизонтальную поляризацию. Поворот плоскости поляризации осуществлялся с помощью полуволновой пластинки, преобразование поляризации в круговую (эллиптическую) – с использованием четвертьволновой пластинки. Для симметризации пучок проходил через диафрагму диаметром 6 мм, затем направлялся на сферическое зеркало с фокусным расстоянием 50 см, что соответствует числовой апертуре $NA = 0.006$. Энергия импульса после диафрагмы составляла 1.5 мДж. В области филаментации в воздухе формировался плазменный канал, являвшийся источником терагерцового излучения, которое регистрировалось сверхпроводниковым NbN болометром (Сконтел) с рабочим диапазоном от 0.1 до 6 ТГц. Перед входным окном болометра размещалась тефлоновая пластина толщиной 3 мм, отсекающая оптическое излучение, и узкополосные терагерцовые фильтры для регистрации сигнала в определенных спектральных диапазонах [9, 10].

Для регистрации двумерных угловых распределений терагерцового излучения ТГц независимо изменялись два угла (см. рис. 1). Горизонтальный угол NA варьировался вращением поворотного столика, на котором был установлен болометр В, в плоскости оптического стола вокруг оси, проходящей через фокус. Изменение вертикального угла VA до-

¹⁾e-mail: rizaev@lebedev.ru

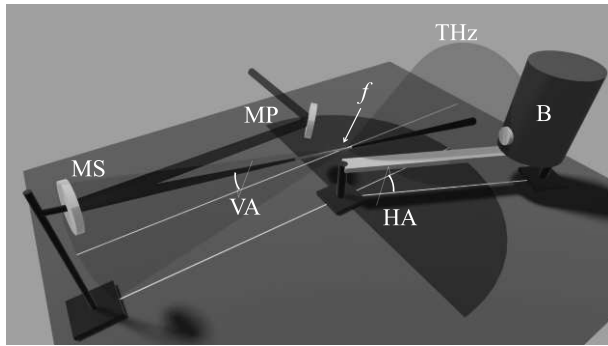


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента. Красным показано распространение лазерного пучка, оранжевым – область филаментации. MP и MS – плоское поворотное и сферическое фокусирующее зеркала; HA и VA – горизонтальный и вертикальный углы; B – болометр; THz – терагерцовое излучение; f – положение геометрического фокуса. Белыми прямыми показаны оптическая ось лазерного пучка при нулевых углах HA и VA, ее проекция на оптический стол, а также проекция на оптический стол прямой, соединяющей фокус f и входное окно болометра

стигалось вращением оптической оси лазерного пучка вокруг фокуса: фокусирующее зеркало перемещалось по вертикальной оси, поворотное плоское зеркало MP и фокусирующее сферическое зеркало MS переюстировались, чтобы вернуть фокус f лазерного пучка в прежнее положение. Оптическая схема обеспечивала минимальный угол падения на сферическое зеркало в целях уменьшения наведенного им астигматизма.

До начала экспериментов по регистрации терагерцового излучения мы убедились, что в наших условиях при энергии импульса 1.5 мДж образуется одиночный плазменный канал. Для этого в области филаментации помещался кварцевый клин, изображение распределения плотности энергии лазерного пучка на котором с помощью линзы переносилось на ПЗС-матрицу. Поперечные профили снимались с шагом 1 см вдоль оси распространения пучка. На протяжении около 3 см перед геометрическим фокусом в поперечном сечении наблюдался яркий филамент, окруженный низкоинтенсивным резервуаром, что свидетельствовало о существовании одиночного плазменного канала.

В ходе экспериментов были получены угловые распределения терагерцового излучения на частотах 0.1, 0.3, 0.5, 1 ТГц. Так, на рис. 2 показано распределение терагерцового излучения на 0.3 ТГц. Измеренное распределение на частотах 0.1–0.5 ТГц имело кольцевую структуру, т.е. терагерцовое излучение распространялось в конус с минимумом на оси,

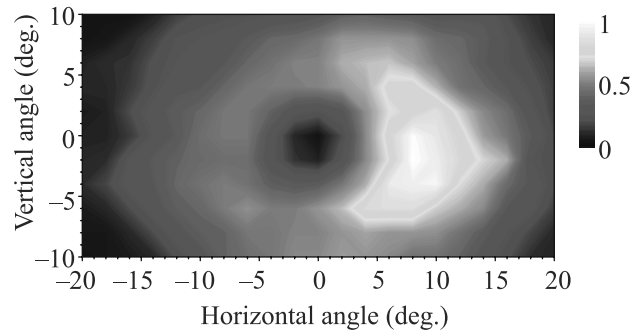


Рис. 2. (Цветной онлайн) Нормированное угловое распределение терагерцового излучения на частоте 0.3 ТГц

что полностью соответствует ранее наблюдавшейся картине [4, 5]. Несмотря на существование одиночного плазменного канала, распределение терагерцового излучения было неоднородно и обладало локальными минимумами и максимумами.

В отличие от низкочастотных компонент терагерцового излучения, в области 1 ТГц излучение имело два ярко выраженных максимума (рис. 3а), расположенных на вертикальной оси, что согласуется с результатами работ [6, 7]. Как и в этих работах, представленные на рис. 2 и 3а результаты получены при горизонтальной поляризации лазерного пучка. При повороте поляризации лазерного пучка на 90° распределение терагерцового излучения на частоте 1 ТГц поворачивается вслед за ней (ср. рис. 3а, б), а при эллиптической поляризации накачки (соотношение осей эллипса 0.6) приобретает кольцевую структуру (рис. 3с).

К настоящему времени разработан ряд моделей терагерцовой генерации одноцветным филаментом. Работы [11, 12], в которых нелинейным механизмом терагерцовой генерации полагались световое давление [11] либо пондеромоторная сила [12], предсказывают осесимметричное угловое распределение терагерцового излучения на всех частотах независимо от поляризации оптического импульса накачки. В моделировании [13], проведенном в условиях эксперимента [6, 7], удалось получить модулированную кольцевую структуру в двумерном распределении плотности энергии терагерцового излучения одноцветного филамента. Максимумы плотности энергии в [13] были расположены на прямой, перпендикулярной поляризации фемтосекундной накачки. Однако в численном моделировании [13] модуляция кольцевой структуры составляла всего $\sim 20\%$, тогда как провал между лепестками в работах [6, 7] и наших экспериментах на частотах ~ 1 ТГц существенно глубже. Тем самым, современные модели генерации терагерцового

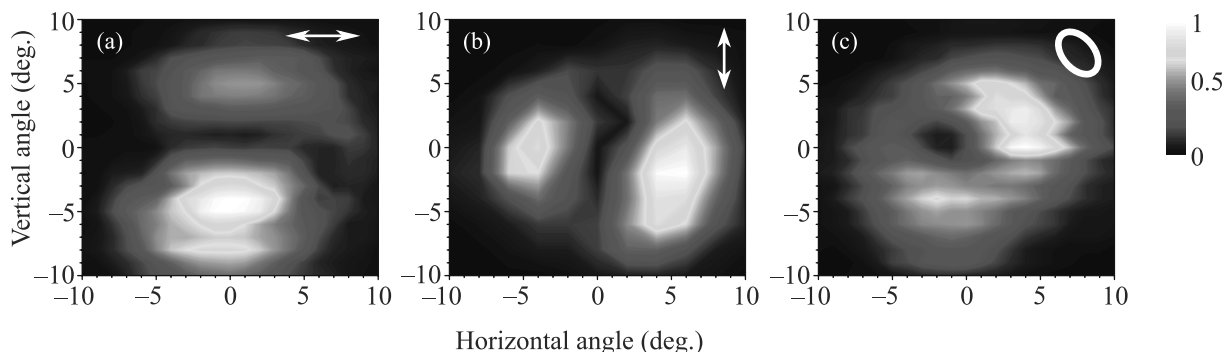


Рис. 3. (Цветной онлайн) Нормированное угловое распределение излучения на частоте 1 ТГц, полученное для горизонтальной (а), вертикальной (б) и эллиптической (с) поляризации лазерного пучка. Белым показана поляризация лазерного импульса

излучения одноцветным филаментом не воспроизводят зарегистрированные нами его двумерные угловые распределения.

Таким образом, в нашей работе были впервые экспериментально исследованы двумерные угловые распределения излучения в различных диапазонах терагерцового спектра. Показано, что характер распределений качественным образом меняется при переходе от низкочастотной части терагерцового спектра к высокочастотной. Если излучение с частотой 0.1–0.5 ТГц имеет коническую диаграмму направленности с минимумом на оси независимо от поляризации фемтосекундного импульса, то при переходе к частотам ~ 1 ТГц в диаграмме направленности наблюдаются два ярко выраженных максимума на прямой, перпендикулярной плоскости поляризации линейно поляризованного лазерного излучения. При переходе к циркулярной поляризации излучение в дальней зоне распространяется в виде полого конуса, подобно наблюдавшемуся на более низких частотах.

Полученные нами результаты могут прояснить видимое несоответствие диаграмм направленности терагерцового излучения одноцветного филамента, зарегистрированных в работах [4] и [6]. В экспериментах [4] измерялись угловые распределения низкочастотной (~ 0.1 ТГц) компоненты электромагнитного излучения, и терагерцовое излучение имело коническую диаграмму направленности. В работе [6] регистрация осуществлялась без какой-либо спектральной селекции, однако независимые измерения спектра терагерцового излучения, приведенные в этой работе, показали, что он достигает максимума на частоте около 1 ТГц. Тем самым, диаграммы направленности (имеющие вид двух максимумов, расположенных на прямой, перпендикулярной поляризации оптической накачки) измерены в [6] для из-

лучения, спектр которого лежит в окрестности этой частоты. Рассмотренные выше два типа угловых распределений терагерцового излучения одноцветного филамента разумно соответствуют зарегистрированным в данной работе на низких и высоких частотах.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00114. Работа Д. Е. Шпило поддержана стипендией Президента РФ молодым ученым и аспирантам (СП-3450.2022.2). Работа И. А. Николаевой поддержана стипендией Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (21-2-10-55-1).

1. H. Hamster, A. Sullivan, S. Gordon, W. White, and R. W. Falcone, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2725 (1993).
2. S. L. Chin, S. A. Hosseini, W. Liu, Q. Luo, F. Théberge, N. Aközbeq, A. Becker, V. P. Kandidov, O. G. Kosareva, and H. Schroeder, *Can. J. of Phys.* **83**, 863 (2005).
3. A. Couairon and A. Mysyrowicz, *Phys. Rep.* **441**, 47 (2007).
4. C. D’Amico, A. Houard, M. Franco, B. Prade, A. Mysyrowicz, A. Couairon, and V. T. Tikhonchuk, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 235002 (2007).
5. A. P. Shkurinov, A. S. Sinko, P. M. Solyankin, A. V. Borodin, M. N. Esaulkov, V. V. Annenkov, I. A. Kotelnikov, I. V. Timofeev, and X. C. Zhang, *Phys. Rev. E* **95**(4), 043209 (2017).
6. R. A. Akhmedzhanov, I. E. Piyakov, V. A. Mironov, E. V. Suvorov, D. A. Fadeev, and B. V. Shishkin, *Radiophys. Quantum Electron.* **52**(7), 482 (2009).
7. E. Suvorov, R. Akhmedzhanov, D. Fadeev, I. Piyakov, V. Mironov, and B. Shishkin, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **32**(10), 1243 (2011).
8. Y. Zhang, Y. Chen, C. Marceau, W. Liu, Z.-D. Sun, S. Xu, F. Théberge, M. Châteauneuf, J. Dubois, and S. L. Chin, *Opt. Express* **16**, 15483 (2008).

9. L. V. Seleznev, G. E. Rizaev, D. V. Pushkarev, A. V. Koribut, Y. A. Gerasimova, Y. V. Grudtsyn, S. A. Savinov, Y. A. Mityagin, D. V. Mokrousova, and A. A. Ionin, *JOSA B* **38**(7), 2168 (2021).
10. I. A. Nikolaeva, D. E. Shipilo, D. V. Pushkarev, G. E. Rizaev, D. V. Mokrousova, A. V. Koribut, Y. V. Grudtsyn, N. A. Panov, L. V. Seleznev, W. Liu, A. A. Ionin, and O. G. Kosareva, *Opt. Lett.* **46**(21), 5497 (2021).
11. C. D'Amico, A. Houard, S. Akturk, Y. Liu, J. Le Bloas, M. Franco, B. Prade, A. Couairon, V. T. Tikhonchuk, and A. Mysyrowicz, *New J. Phys.* **10**(1), 013015 (2008).
12. Н. А. Панов, О. Г. Косарева, В. А. Андреева, А. Б. Савельев, Д. С. Урюпина, Р. В. Волков, В. А. Макаров, А. П. Шкуринов, *Письма в ЖЭТФ* **93**(11), 715 (2011).
13. N. A. Zharova, V. A. Mironov, and D. A. Fadeev, *Phys. Rev. E* **82**(5), 056409 (2010).

О возможности эффективной изотопно-селективной ИК диссоциации колебательно-возбужденных бихроматическим лазерным излучением молекул $^{235}\text{UF}_6$

Г. Н. Макаров¹⁾

Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 апреля 2022 г.

После переработки 25 апреля 2022 г.

Принята к публикации 26 апреля 2022 г.

На основе спектроскопических данных о молекулах $^{235}\text{UF}_6$ и $^{238}\text{UF}_6$, о частотах генерации CF_4 - и пара- H_2 -лазеров, а также результатов недавних исследований предложен метод увеличения эффективности изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул $^{235}\text{UF}_6$ в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения. Метод основан на использовании двух процессов: 1) резонансного многофотонного возбуждения молекул $^{235}\text{UF}_6$ в колебательные состояния $3\nu_3$ или $2\nu_3$ бихроматическим ИК излучением двух CF_4 - или пара- H_2 -лазеров и 2) облучения молекул с резонансно поглощающим излучением указанных лазеров сенсибилизатором – молекулами SF_6 . Описана суть метода, приведены схемы и параметры для изотопно-селективной диссоциации молекул $^{235}\text{UF}_6$ предложенным способом.

DOI: 10.31857/S1234567822110052, EDN: ilhvgy

1. Введение. В последнее время проводится много исследований, посвященных молекулярному лазерному разделению изотопов (МЛРИ, *MLIS – molecular laser isotope separation*) [1–23]. Основная цель многих исследований – разработка методов разделения изотопов урана с использованием молекул UF_6 [1–7, 10–22]. Большинство выполнявшихся в ряде стран (в США, Германии, Англии, Франции, Японии, Австралии) в конце прошлого века проектов по лазерному разделению изотопов урана было закрыто. Вместе с тем исследования по МЛРИ урана проводятся во многих странах и в настоящее время [1–7, 20–22]. Ожидается, что с использованием лазеров можно разработать более экономичную и эффективную, чем центрифугирование, технологию обогащения урана – лазерную технологию. Сегодня исследования направлены главным образом на разработку низкоэнергетических методов МЛРИ [1–3, 10–22], а также альтернативных им методов [2, 3, 13, 24, 25].

Важными проблемами при лазерном разделении изотопов урана с использованием молекул UF_6 являются: 1) малая величина изотопического сдвига в спектрах ИК поглощения возбуждаемых лазером колебаний ν_3 молекул $^{235}\text{UF}_6$ и $^{238}\text{UF}_6$ и 2) отсутствие мощных и эффективных лазерных источников для изотопно-селективного колебательного возбуждения и диссоциации молекул UF_6 . Изотопический сдвиг в

колебании ν_3 ($\approx 627.7 \text{ см}^{-1}$ [26]) для молекул $^{235}\text{UF}_6$ и $^{238}\text{UF}_6$ составляет $\Delta\nu_{is} \approx 0.604 \text{ см}^{-1}$ [26]. Из-за малой величины изотопического сдвига и сравнительно большой ширины (около 20 см^{-1}) полосы ИК поглощения молекул при комнатной температуре [2, 27] реализовать изотопно-селективную ИК диссоциацию молекул UF_6 возможно лишь при низкой температуре газа, когда полосы ИК поглощения молекул UF_6 с разной изотопической модификацией значительно уже [1, 2, 27].

Для выполнения проектов по МЛРИ урана методом изотопно-селективной ИК многофотонной диссоциации (МФД) молекул UF_6 были разработаны два источника перестраиваемого по частоте излучения в области 16 мкм. Это – оптически накачиваемый мощным излучением CO_2 -лазера молекулярный CF_4 -лазер [28, 29] и источник излучения, основанный на смещении частоты излучения CO_2 -лазера в область 16 мкм за счет стимулированного комбинационного (рамановского) рассеяния света на вращательных переходах молекул пара-водорода, – пара- H_2 -лазер [30, 31]. По многим параметрам эти лазеры удовлетворяют требованиям, которые предъявляются к работе на крупномасштабных установках [2]. Однако существенными недостатками как CF_4 -лазера, так и пара- H_2 -лазера применительно к разделению изотопов урана являются дискретность перестройки частоты излучения указанных лазеров и отсутствие сильных и перестраиваемых линий генерации в обла-

¹⁾e-mail: gmakarov@isan.troitsk.ru

сти Q-ветви колебания ν_3 молекул $^{235}\text{UF}_6$ (в области 628.32 см^{-1} [26]).

В качестве возможного подхода к МЛРИ урана рассматривается метод изотопно-селективного возбуждения состояния $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ ($\approx 1877.5\text{ см}^{-1}$ [32]), в котором изотопический сдвиг составляет около 1.81 см^{-1} [26], излучением СО-лазера [33–36]. В этом подходе использовалась химическая реакция колебательно-возбужденных молекул UF_6 с молекулами HCl [33, 34]. Разделение изотопов урана происходит за счет различия в скоростях реакции колебательно-возбужденных и невозбужденных молекул UF_6 с молекулами HCl . Для этого подхода создаются мощные СО-лазеры [35, 36], генерирующие в области 5.3 мкм , которые планируется использовать для возбуждения молекул $^{235}\text{UF}_6$. Однако эффективное возбуждение состояний $3\nu_3$ молекул UF_6 ИК излучением с длиной волны $\approx 5.3\text{ мкм}$ проблематично из-за слабого поглощения молекул UF_6 на колебательном переходе $0\nu_3 \rightarrow 3\nu_3$. Интегральное поглощение оберточной полосы $0\nu_3 \rightarrow 3\nu_3$ молекул UF_6 более чем на четыре порядка (примерно в 1.8×10^4 раз) меньше интегрального поглощения основной полосы $0\nu_3 \rightarrow 1\nu_3$ UF_6 [32]. Поэтому поиск альтернативных схем изотопно-селективного возбуждения и диссоциации молекул $^{235}\text{UF}_6$ представляется весьма важным и актуальным. В данной работе предлагается новый метод для реализации эффективной изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул $^{235}\text{UF}_6$.

2. Основы метода. Предлагаемый метод основан на использовании процесса резонансного трех- или двухфотонного возбуждения молекул $^{235}\text{UF}_6$ в колебательные состояния $3\nu_3$ или $2\nu_3$ бихроматическим ИК излучением двух импульсных CF_4 - или пара- H_2 -лазеров [18, 19] и облучения возбужденных молекул $^{235}\text{UF}_6$ с резонансно поглощающим излучением этих лазеров сенсibilизатором – молекулами SF_6 [16, 17, 23]. Кроме того, возбуждение молекул предлагается проводить в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения, формирующегося перед твердой поверхностью при падении на нее интенсивного сверхзвукового газодинамически охлажденного молекулярного потока [1, 2, 24, 25].

В работах [37, 38] было показано, что за счет резонансного двух- [37] и трехчастотного [38] возбуждения молекул SF_6 , охлажденных в газодинамической струе, импульсами излучения CO_2 -лазера можно эффективно заселять высокие колебательные состояния $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул SF_6 . А в недавних работах [16, 23] продемонстрирована возможность сильного

увеличения выхода диссоциации молекул CF_2HCl при их облучении в скачке уплотнения с резонансно поглощающим излучением лазера сенсibilизатором – молекулами CF_3Br . Установлено, что указанные выше процессы применимы также к другим молекулам [16, 23, 37], включая молекулы UF_6 . Именно эти процессы и положены в основу предлагаемого нами метода, реализуемого в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения.

Для формирования молекулярного потока предполагается использовать смесь молекул $\text{UF}_6/\text{SF}_6/\text{CH}_4$ при соотношении давлений примерно $1/3/10$ [39]. Молекулы SF_6 используются как сенсibilизаторы, а молекулы CH_4 – как акцепторы атомов фтора, образующихся при диссоциации молекул UF_6 и SF_6 . При указанном соотношении давлений используемых газов колебательная температура молекул UF_6 (а также молекул SF_6) в падающем на поверхность потоке, а также в скачке уплотнения будет составлять $T_{\text{vib}} \leq 100\text{ К}$ [27, 39]. При такой колебательной температуре заселенность основного колебательного состояния молекул UF_6 составляет около 50 % [2, 27], и молекулы UF_6 имеют сравнительно узкие ($\approx 7\text{--}8\text{ см}^{-1}$ на полувысоте) полосы ИК поглощения [39].

Используемые в качестве сенсibilизатора молекулы SF_6 резонансно возбуждаются теми же лазерными импульсами, что и молекулы $^{235}\text{UF}_6$. Частота колебания моды ν_4 молекул SF_6 ($\approx 615\text{ см}^{-1}$ [40, 41]) находится в очень хорошем резонансе с высоколежащими переходами колебательно-возбужденных молекул $^{235}\text{UF}_6$. Это обеспечивает эффективную передачу энергии от возбужденных CF_4 - или пара- H_2 -лазерами молекул SF_6 к колебательно возбужденным молекулам $^{235}\text{UF}_6$. В результате реализуется эффективная изотопно-селективная диссоциация молекул $^{235}\text{UF}_6$ за счет радиационных и столкновительных процессов возбуждения [16, 17, 23].

Отметим, что молекулы SF_6 в качестве сенсibilизаторов для возбуждения и диссоциации молекул UF_6 использовались во многих работах (см., например, работы [2, 42] и приведенные там ссылки). Однако в них молекулы SF_6 использовались для предварительного накопления колебательной энергии в результате их возбуждения импульсным излучением CO_2 -лазера. Молекулы SF_6 имеют интенсивную полосу поглощения в области 10.6 мкм (колебание ν_3 , частота $\approx 948\text{ см}^{-1}$ [43]). В последующем запасенная молекулами SF_6 энергия через моды ν_4 , резонансную с модой ν_3 молекул UF_6 , передавалась последним, что приводило к их возбуждению и диссоциации [2, 42].

В отличие от этого, в предлагаемом нами методе молекулы сенсibilизатора и молекулы $^{235}\text{UF}_6$ должны возбуждаться резонансным излучением CF_4 - или пара- H_2 -лазеров одновременно, что приводит к существенному увеличению эффективности диссоциации молекул $^{235}\text{UF}_6$ [16, 17, 23]. Поскольку энергия диссоциации молекул UF_6 (≈ 68 ккал/моль [44]) намного меньше энергии диссоциации молекул SF_6 (≈ 92 ккал/моль [45]), в процессе облучения смеси диссоциация молекул UF_6 будет происходить при значительно меньшей колебательной температуре, чем диссоциация молекул SF_6 . В результате, при небольшой плотности энергии возбуждающего лазерного излучения ($\Phi \leq 1.5\text{--}2$ Дж/см²) могут реализоваться условия, когда молекулы UF_6 будут диссоциировать, в то время как молекулы SF_6 не будут подвергаться диссоциации [16, 17, 23].

В газодинамически охлажденном молекулярном потоке для поступательной, вращательной и колебательной температур многоатомных молекул реализуются [46] условия: $T_{1,\text{tr}} \leq T_{1,\text{rot}} \leq T_{1,\text{vib}}$. В скачке уплотнения [47], из-за разницы в скоростях поступательной, вращательной и колебательной релаксаций [48], реализуются обратные неравновесные условия, а именно: $T_{2,\text{tr}} \geq T_{2,\text{rot}} \geq T_{2,\text{vib}}$ [1, 2, 24]. Числами 1 и 2 в нижних индексах обозначены температуры молекул соответственно в падающем потоке и в скачке уплотнения. При этом из-за большого времени колебательно-поступательной релаксации молекул (например, для SF_6 $\tau_{\text{V-T}} \approx 150$ мкс · торр [49], для UF_6 $\tau_{\text{V-T}} \approx 32$ мкс · торр [50]), колебательная температура молекул в скачке уплотнения в случае использования импульсного потока разреженного газа может практически не отличаться от колебательной температуры молекул в падающем потоке ($T_{2,\text{vib}} \approx T_{1,\text{vib}}$), в то время как поступательная и вращательная температуры молекул в скачке уплотнения значительно выше, чем в невозмущенном потоке: $T_{2,\text{tr}} > T_{1,\text{tr}}$ и $T_{2,\text{rot}} > T_{1,\text{rot}}$. Таким образом, в скачке уплотнения создаются новые неравновесные условия, которые характеризуются тем, что колебательная температура молекул существенно меньше поступательной и вращательной температур.

Для резонансного возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ излучением двух импульсных ИК лазеров необходимо [51], чтобы выполнялись соответственно следующие соотношения между частотами ν_{1L} и ν_{2L} излучения используемых лазеров и частотой ν_3 возбуждаемого колебания молекул $^{235}\text{UF}_6$:

$$\nu_{1L} + \nu_{2L} = 2\nu_3, \quad (1)$$

$$2\nu_{1L} + \nu_{2L} = 3\nu_3. \quad (2)$$

С использованием двух или трех лазеров, имеющих разные частоты излучения, сравнительно легко обеспечить резонансные условия для возбуждения высоких колебательных уровней молекул. Особенно просто это реализовать в условиях, когда используются лазеры высокого давления с плавной перестройкой частоты излучения. Необходимым условием для реализации таких экспериментов является точное знание частот (энергий) высоких колебательных уровней исследуемых молекул. Для молекул SF_6 [52] и UF_6 [53] такие данные были получены исследователями Лос-Аламосской научной лаборатории в ходе выполнения проектов по молекулярному лазерному разделению изотопов урана.

Преимущества процесса облучения молекул $^{235}\text{UF}_6$ с резонансно поглощающим излучением лазера сенсibilизатором SF_6 для увеличения эффективности их диссоциации поясняются рис. 1. На

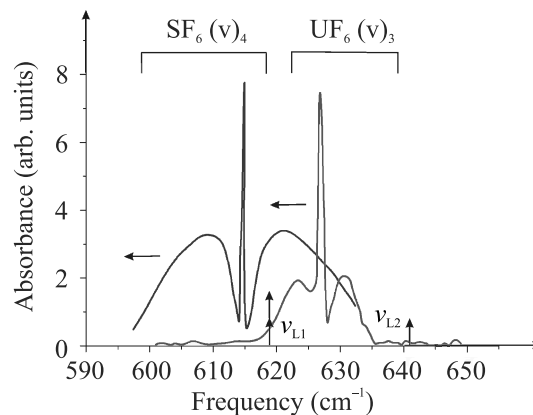


Рис. 1. (Цветной онлайн) Полоса ИК поглощения колебания ν_4 молекул SF_6 при температуре $T = 213$ К [54] и полоса ИК поглощения колебания ν_3 молекул UF_6 , охлажденных в сверхзвуковой газодинамической струе в смеси с аргоном при температуре $T \leq 130$ К [39]. Вертикальными стрелками показаны частотные положения линий генерации CF_4 -лазера, на которых предполагается возбуждать молекулы $^{235}\text{UF}_6$ в состояние $3\nu_3$ F_1 (1877.41 см⁻¹). Горизонтальными стрелками показано направление смещения полос поглощения молекул UF_6 и SF_6 в низкочастотную область при их колебательном возбуждении

нем показаны полоса ИК поглощения колебания ν_4 (частота 615 см⁻¹ [41, 54]) резонансно поглощающих излучение CF_4 -лазера молекул SF_6 при температуре $T = 213$ К [54] и полоса ИК поглощения колебания ν_3 (≈ 627.72 см⁻¹ [26]) молекул UF_6 , охлажденных в сверхзвуковой газодинамической струе в смеси с аргоном при температуре $T \leq 130$ К [39]. На рисунке 1 вертикальными стрелками показаны также

частотные положения линий генерации CF_4 -лазера (частоты – 618.2 см^{-1} и 640.9 см^{-1}), на которых предполагается возбуждать молекулы $^{235}\text{UF}_6$ в состояние $3\nu_3$ F_1 (1877.41 см^{-1}) (см. ниже). Горизонтальными стрелками показано направление смещения полос поглощения молекул UF_6 и SF_6 в низкочастотную область при их колебательном возбуждении.

Резонансное возбуждение молекул $^{235}\text{UF}_6$ в колебательные состояния $2\nu_3$ и $3\nu_3$ бихроматическим лазерным ИК излучением приводит из-за ангармонизма колебаний к смещению их полос ИК поглощения в низкочастотную область, совпадающую с полосой ИК поглощения колебания ν_4 молекул SF_6 . В результате этого для колебательно-возбужденных молекул $^{235}\text{UF}_6$ и молекул SF_6 реализуется процесс эффективного резонансного радиационно-столкновительного возбуждения молекул [16, 17, 23, 42]. Возбужденные лазером молекулы SF_6 за счет процесса колебательно-колебательного $V-V$ обмена энергией передают поглощенную энергию молекулам $^{235}\text{UF}_6$, приводя к увеличению их выхода диссоциации. Поскольку процесс $V-V$ обмена энергией между молекулами происходит в условиях малых частотных отстроек между колебательными переходами молекул SF_6 и UF_6 , передача энергии между молекулами очень эффективна [42, 55]. Этому способствуют также сравнительно большая плотность частиц в скачке уплотнения [$\approx (5-7) \times 10^{16}$ [23, 24]] и высокая колебательная и вращательная температуры молекул ($\geq 550\text{ K}$ [23, 24]).

3. Схемы и параметры резонансного возбуждения состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$. Состояния $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ нами вычислялись с учетом изотопического сдвига в полосе поглощения колебания ν_3 для $^{235}\text{UF}_6$ и $^{238}\text{UF}_6$ ($\Delta\nu_{is} = 0.604\text{ см}^{-1}$ [26]). В состоянии $2\nu_3$ изотопическое смещение считалось равным 1.21 см^{-1} , а в состоянии $3\nu_3$ – 1.81 см^{-1} . Уровни энергии $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ смещались в сторону более высоких энергий на указанные величины. С использованием двух ИК лазеров можно осуществить эффективное изотопно-селективное возбуждение колебательных состояний как $2\nu_3$, так и $3\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$ и $^{238}\text{UF}_6$ [18, 19]. Мы рассмотрим возбуждение только тех состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$, через которые возможно резонансное возбуждение молекул теми же лазерными импульсами в более высокие колебательные состояния $4\nu_3$ и $6\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$.

На рисунке 2а приведена схема возбуждения колебательного состояния $3\nu_3$ F_1 молекул

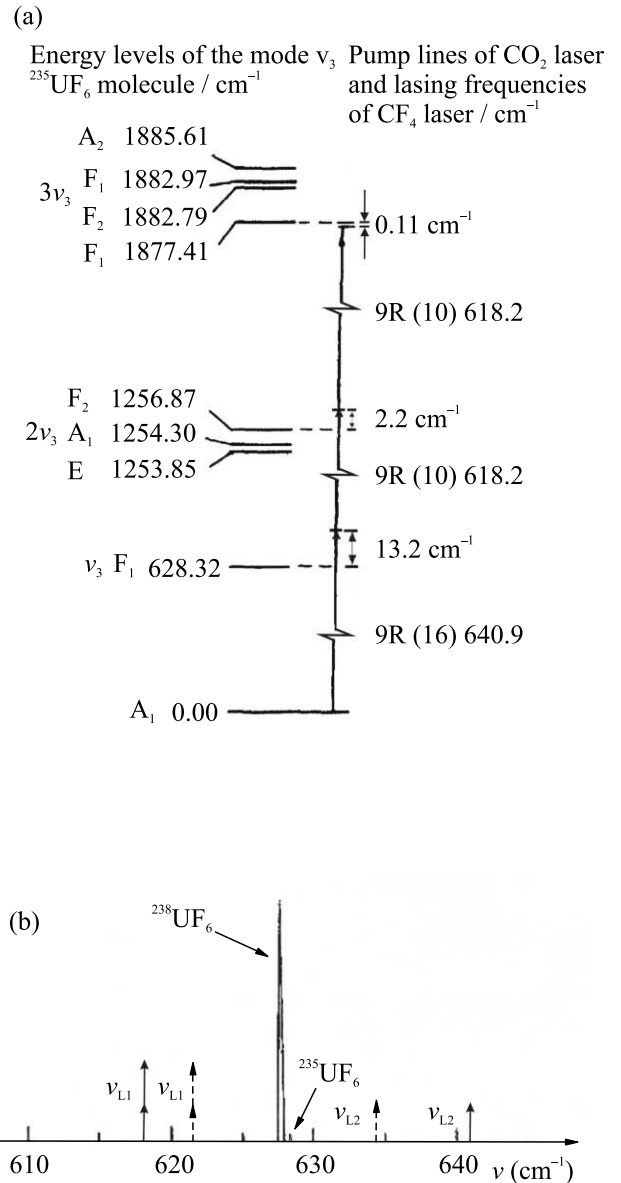


Рис. 2. (а) – Схема резонансного трехфотонного бихроматического возбуждения колебательного состояния $3\nu_3$ F_1 молекул $^{235}\text{UF}_6$ (1877.41 см^{-1} [53]) излучением двух CF_4 -лазеров. (б) – Частотное положение линий генерации CF_4 -лазеров для возбуждения состояния $3\nu_3$ F_1 $^{235}\text{UF}_6$ (сплошные стрелки) относительно Q-ветвей колебания ν_3 молекул $^{238}\text{UF}_6$ и $^{235}\text{UF}_6$ в газодинамически охлажденном молекулярном потоке при температуре $T \leq 50-70\text{ K}$ [27]. Частотное положение линий генерации пара- H_2 -лазеров для возбуждения состояния $3\nu_3$ F_1 $^{235}\text{UF}_6$ показано пунктирными стрелками

$^{235}\text{UF}_6$ (1877.41 см^{-1} [53]) излучением двух CF_4 -лазеров, работающих соответственно на частотах $\nu_{L1} \approx 618.2\text{ см}^{-1}$ и $\nu_{L2} \approx 640.9\text{ см}^{-1}$. Трехфотонное бихроматическое возбуждение указанного уровня

Таблица 1. Схемы резонансного двух-фотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ ИК излучением двух CF_4 -лазеров (схемы 1 и 2) и двух пара- H_2 -лазеров (схемы 3 и 4). При стимулированном комбинационном рассеянии на вращательных уровнях пара-водорода частота генерации CO_2 -лазера уменьшается на величину 354.33 см^{-1} [30]

Схема	Возбуждаемое состояние и его частота, см^{-1}	Частота CF_4 -/пара- H_2 -лазера ν_{L1} , см^{-1}	Линия и частота CO_2 -лазера-1 накачки, см^{-1}	Частота CF_4 -/пара- H_2 -лазера ν_{L2} , см^{-1}	Линия и частота CO_2 -лазера-2 накачки, см^{-1}	Частотная отстройка в конечном состоянии $2\nu_3$, $\Delta\nu_{\text{fin}} = 2\nu_3 - (\nu_{L1} + \nu_{L2})$, см^{-1}	Частотные отстройки в ближайшие резонансные состояния $4\nu_3$, см^{-1}
1	$2\nu_3 \text{ A}_1$ (1254.30)	612.2	9R (14), 1074.65	642.4	9P (4), 1060.57	-0.30	+0.09 - A_1 -0.18 - E
2	$2\nu_3 \text{ F}_2$ (1256.87)	615.1	9R (12), 1073.28	641.9	9R (18), 1077.30	-0.13	-0.16 - F_2
3	$2\nu_3 \text{ E}$ (1254.05)	621.63	10R (20), 975.93	632.27	10R (38), 986.57	+0.15	-0.51 - A_1
4	$2\nu_3 \text{ E}$ (1254.05)	622.91	10R (22), 977.21	631.19	10R (36), 985.49	-0.05	-0.12 - A_1

Таблица 2. Схемы резонансного бихроматического возбуждения колебательных состояний $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ ИК излучением двух CF_4 -лазеров (схемы 1 и 2) и двух пара- H_2 -лазеров (схемы 3 и 4)

Схема	Возбуждаемое состояние и его частота, см^{-1}	Частота CF_4 -/пара- H_2 -лазера ν_{L1} , см^{-1}	Линия и частота CO_2 -лазера-1 накачки, см^{-1}	Частота CF_4 -/пара- H_2 -лазера ν_{L2} , см^{-1}	Линия и частота CO_2 -лазера-2 накачки, см^{-1}	Частотная отстройка в конечном состоянии $3\nu_3$, $\Delta\nu_{\text{fin}} = 3\nu_3 - (2\nu_{L1} + \nu_{L2})$, см^{-1}	Частотные отстройки в ближайшие резонансные состояния $6\nu_3$, см^{-1}
1	$3\nu_3 \text{ F}_1$ (1877.41)	618.2×2	9R (10), 1071.90	640.9	9R (16), 1075.99	+0.11	-0.06 - A_1 -0.16 - E
2	$3\nu_3 \text{ F}_2$ (1882.78)	615.1×2	9R (12), 1073.28	652.2	9P (10), 1055.63	+0.38	+0.12 - A_1
3	$3\nu_3 \text{ F}_1$ (1877.41)	621.60×2	10R (20), 975.93	634.32	10R (42), 988.65	-0.11	-0.5 - A_1
4	$3\nu_3 \text{ F}_2$ (1882.79)	631.16×2	10R (36), 985.49	620.29	10R (18), 974.62	+0.18	-0.3 - A_1

$3\nu_3 \text{ F}_1$ реализуется с отстройкой по конечному состоянию $\Delta\nu_{\text{fin}} \approx 0.11 \text{ см}^{-1}$ ($2\nu_{L1} + \nu_{L2} = 1877.3 \text{ см}^{-1}$). На рисунке 2b показано (сплошными стрелками) для данного конкретного примера частотное положение линий генерации CF_4 -лазеров относительно Q-ветвей колебания ν_3 молекул $^{238}\text{UF}_6$ и $^{235}\text{UF}_6$ в газодинамически охлажденном молекулярном потоке при температуре $T \leq 50-70 \text{ K}$ [27]. Частотное положение линий генерации пара- H_2 -лазеров для возбуждения состояния $3\nu_3 \text{ F}_1$ $^{235}\text{UF}_6$ показано пунктирными стрелками. Отметим, что при выборе схем для резонансного возбуждения молекул нами учитывались только наиболее интенсивные линии излучения CF_4 -лазеров [56], а также пара- H_2 -лазеров. Частоты генерации лазеров ни в

отдельности, ни попарно не находятся в резонансе с низколежащими переходами молекул UF_6 .

В таблице 1 приведены предлагаемые нами возможные схемы резонансного двухфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $2\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$ ИК излучением двух CF_4 -лазеров и двух пара- H_2 -лазеров, а в табл. 2 – схемы резонансного трехфотонного бихроматического возбуждения колебательных состояний $3\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$ ИК излучением двух CF_4 -лазеров и двух пара- H_2 -лазеров. Как видно из табл. 1 и 2, при использовании обоих типов лазеров можно осуществить резонансное возбуждение состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$ с небольшой частотной отстройкой по конечному состоянию, что способствует достижению высокой селективности процесса

возбуждения молекул $^{235}\text{UF}_6$. Для всех приведенных в табл. 1 и 2 схем возбуждения состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$ реализуется возможность резонансного заселения теми же лазерными импульсами состояний $4\nu_3$ и $6\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$. Реализация такой возможности является полезным фактором, поскольку при этом происходит [57] более эффективное возбуждение молекул в высокие колебательные состояния и последующая их диссоциация. Условия для оптимального изотопно-селективного заселения состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$ и $^{238}\text{UF}_6$ обсуждаются в работе [19].

4. Заключение. Предложен метод увеличения эффективности изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул $^{235}\text{UF}_6$ в неравновесных условиях скачка уплотнения, основанный на селективном возбуждении колебательных состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ $^{235}\text{UF}_6$ бихроматическим излучением двух CF_4 - или пара- H_2 -лазеров и использовании резонансно поглощающего излучение этих лазеров сенсбилизатора – молекул SF_6 . Приведены схемы и параметры для резонансного двух- и трех-фотонного бихроматического возбуждения состояний $2\nu_3$ и $3\nu_3$ молекул $^{235}\text{UF}_6$, охлажденных в газодинамическом потоке до температуры $T \leq 100$ К излучением указанных лазеров. Результаты работы могут найти практическое применение при использовании лазерной ИК диссоциации молекул для разделения изотопов.

Автор выражает глубокую благодарность А. Н. Петину за помощь в работе над рисунками.

1. Г. Н. Макаров, УФН **185**, 717 (2015).
2. Г. Н. Макаров, УФН **192** (2022), в печати; <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.02.038942>.
3. J. W. Eerkens and J. Kim, *AIChE Journal* **56**, 2331 (2010).
4. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **97**, 82 (2013).
5. P. Mathi, V. Parthasarathy, A. K. Nayak, J. P. Mittal, and S. K. Sarkar, *Proc. Nat. Acad. Sci. India, Sect. A: Phys. Sci.*, **1** (2015), p. 1; DOI:10.1007/s40010-015-0249-6.
6. E. Ronander, H. J. Strydom, and R. L. Botha, *Prana – Journal of Physics* **82**(1), 49 (2014).
7. C. D. Ferguson and J. Boureston, <https://www.iranwatch.org/sites/default/files/perspex-fwi-Laser.pdf>
8. K. A. Lyakhov and A. N. Pechen, *Appl. Phys. B* **126**(8), 141 (2020).
9. J. Guo, Y.-J. Li, J.-P. Ma, X. Tang, and X.-S. Liu, *Chem. Phys. Lett.* **773**, 138572 (2021).
10. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, *Квантовая электроника* **48**, 157 (2018).
11. В. М. Апатин, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Е. А. Рябов, *ЖЭТФ* **154**, 287 (2018).
12. V. N. Likhman, G. N. Makarov, A. L. Malinovskii, A. N. Petin, D. G. Poydashev, and E. A. Ryabov, *Laser Phys.* **28**, 105703 (2018).
13. Г. Н. Макаров, УФН **190**, 264 (2020).
14. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Д. Г. Пойдашев, Е. А. Рябов, *ЖЭТФ* **155**, 216 (2019).
15. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **111**, 361 (2020).
16. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **112**, 226 (2020).
17. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, *ЖЭТФ* **159**, 281 (2021).
18. Г. Н. Макаров, *Квантовая электроника* **51**, 643 (2021).
19. Г. Н. Макаров, *ЖЭТФ* **160**, 786 (2021).
20. <http://www.silex.com.au>.
21. SILEX Process, www.chemeurope.com/en/encyclopedia/Silex_Process.html.
22. SILEX Uranium Enrichment, SILEX Annual Report 2019, <http://www.silex.com.au>.
23. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **115**, 292 (2022).
24. Г. Н. Макаров, УФН **173**, 913 (2003).
25. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, *Квантовая электроника* **46**, 248 (2016).
26. J. P. Aldridge, E. G. Brock, H. Filip et al. (Collaboration), *J. Chem. Phys.* **83**, 34 (1985).
27. R. J. Jensen, P. Judd O'Dean, and J. A. Sullivan, *Los Alamos Science* **4**, 2 (1982).
28. J. J. Tjee and C. Wittig, *Appl. Phys. Lett.* **30**, 420 (1977).
29. J. J. Tjee, T. A. Fischer, and C. Wittig, *Rev. Sci. Instrum.* **50**, 958 (1979).
30. R. L. Byer, *IEEE J. Quantum Electron.* **12**, 732 (1976).
31. W. R. Trutna and R. L. Byer, *Appl. Opt.* **19**, 301 (1980).
32. G. A. Laguna, K. C. Kim, C. W. Patterson, M. J. Rausfeld, and D. M. Seitz, *Chem. Phys. Lett.* **75**, 357 (1980).
33. J. W. Eerkens, R. P. Griot, J. H. Hardin, and R. G. Smith, in *Conference on Lasers and Electro-Optics, OSA Technical Digest*, Optical Society of America (1986); <https://www.osapublishing.org/abstract.cfm?URI=CLEO-1986-TUI4>.
34. B.-y. Xu, Y. Liu, W.-b. Dong, Ch.-f. Zheng, Y.-y. Zhao, G.-yh. Wang, and H.-sh. Qian, *INIS (International Nuclear Information System)* **21** (20), 1990; https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:21077879.
35. O. V. Budilova, A. A. Ionin, I. O. Kinyaevskiy, Yu. M. Klimachev, A. A. Kotkov, and A. Yu. Kozlov, *Opt. Commun.* **345**, 163 (2015).

36. I. Y. Varanov and A. V. Koptev, Proc. SPIE **7915**, 7915F (2011); <https://doi.org/10.1117/12871578>.
37. С. С. Алимпов, С. М. Никифоров, Б. Г. Сартаков, Э. М. Хохлов, А. Л. Штарков, Квантовая электроника **12**, 434 (1985).
38. V. M. Apatin, V. N. Lohman, and G. N. Makarov, Laser Chem. **5**(4), 231 (1985).
39. Y. Okada, S. Tanimura, H. Okamura, A. Suda, Y. Tashiro, and R. Takeuchi, J. Mol. Struct. **410–411**, 299 (1997).
40. W. B. Person and K. C. Kim, J. Chem. Phys. **69**, 1764 (1978).
41. K. C. Kim, W. B. Person, D. Seitz, and B. J. Krohn, J. Mol. Spectrosc. **76**, 322 (1979).
42. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, Appl. Phys. B **53**, 108 (1991).
43. K. Kim, R. S. McDowell, and W. T. King, J. Chem. Phys. **73**, 36 (1980).
44. D. Hildenbrand, J. Chem. Phys. **66**, 4478 (1977).
45. S. W. Benson, Chem. Rev. **78**, 23 (1978).
46. J. B. Anderson, *Molecular beams from nozzle sources*, in *Gasdynamics, Molecular Beams and Low Density Gasdynamics*, ed. by P. P. Wegener, Marcel Dekker, N.Y. (1974).
47. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, М. (1966).
48. Е. В. Ступоченко, С. А. Лосев, А. И. Осипов, *Релаксационные процессы в ударных волнах*, Наука, М. (1965).
49. J. I. Steinfeld, I. Burak, D. G. Sutton, and A. V. Nowak, J. Chem. Phys. **52**, 5421 (1970).
50. H. E. Bass, F. D. Shields, W. D. Breshears, and L. B. Asprey, J. Chem. Phys. **67**, 1136 (1977).
51. В. С. Летохов, В. П. Чеботаев, *Принципы нелинейной лазерной спектроскопии*, Наука, М. (1975).
52. C. W. Patterson, B. J. Krohn, and S. N. Pine, Opt. Lett. **6**, 39 (1981).
53. B. J. Krohn, R. S. McDowell, C. W. Patterson, N. G. Nereson, M. J. Raisfield, and K. C. Kim, J. Mol. Spectrosc. **132**, 285 (1988).
54. V. Boudon, G. Pierre, and H. Burger, J. Mol. Spectr. **205**, 304 (2001).
55. B. H. Mahan, J. Chem. Phys. **46**, 98 (1967).
56. R. S. McDowell, C. W. Patterson, C. R. Jones, M. I. Buchwald, and J. M. Telle, Opt. Lett. **4**, 274 (1979).
57. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, *Оптика и спектроскопия* **63**, 762 (1987).

О механизме генерации импульсов Тричела в воздухе атмосферного давления

В. Ф. Тарасенко¹⁾, Е. Х. Бакшт¹⁾, Н. П. Виноградов¹⁾, А. В. Козырев¹⁾, А. С. Коковин¹⁾, В. Ю. Кожевников¹⁾

Институт сильноточной электроники Сибирского отделения РАН, 634055 Томск, Россия

Поступила в редакцию 4 апреля 2022 г.

После переработки 17 апреля 2022 г.

Принята к публикации 22 апреля 2022 г.

Для коронного разряда с острия отрицательной полярности, функционирующего в режиме импульсов Тричела, зарегистрированы с субнаносекундным временным разрешением профили импульсов тока разряда, с высоким пространственным разрешением измерены оптические характеристики свечения плазмы, и в рамках двумерной теоретической модели с учетом плазмохимической кинетики проведено численное моделирование этого же коронного разряда. Показано, что в воздухе атмосферного давления инициирование импульсов Тричела происходит при накоплении положительных ионов у острия до уровня критической концентрации лавинно-стримерного перехода, в том числе при стационарном напряжении на промежутке (единицы – десятки секунд). Установлено, что наносекундный фронт импульса определяется временем лавинного размножения электронов в области локально усиленного поля. Показано, что короткая длительность импульса Тричела обусловлена быстрым вытеснением электрического поля из области плотной плазмы и уходом свободных электронов из нее с последующим исчезновением за счет рекомбинации и прилипания. Установлено, что в паузе между импульсами Тричела концентрация ион-ионной воздушной плазмы в локальной области перед острием удерживается на уровне 10^{11} см^{-3} , что обеспечивает последующую генерацию новых импульсов Тричела.

DOI: 10.31857/S1234567822110064, EDN: iljebh

Введение. Коронный разряд относится к одному из наиболее распространенных режимов самостоятельного разряда [1, 2]. Для его возникновения необходима область высокого электрического поля у одного из электродов (или у обеих), которое достаточно для инициирования интенсивной ионизации газа. Кроме того, у второго электрода или в промежутке должна быть область с низким электрическим полем, в котором ионизация газа отсутствует, а долгоживущие заряженные частицы (отрицательные и положительные ионы) дрейфуют под действием слабого электрического поля. Зажигание коронного разряда, как правило, является вредным явлением, приводящим к потерям энергии и(или) к повреждению различных устройств во время искрового пробоя, инициируемого коронным разрядом. С другой стороны, в ряде областей, например, для получения озона и в электрических фильтрах, широко используются стационарные режимы коронного разряда. Различные применения коронного разряда требуют проведения исследований физических процессов,

которые определяют механизм его зажигания и перехода в другие формы разряда. Такие исследования широко проводились ранее и продолжаются в настоящее время [1–22].

Одним из вопросов, который вызывает большой интерес – это физическая природа импульсов Тричела, см., например, [1–10]. Они возникают при зажигании коронного разряда с отрицательной полярностью напряжения на острие и продолжаются с увеличивающейся частотой с ростом напряжения на промежутке. Амплитуда импульсов Тричела относительно стационарной стадии тока короны с увеличением напряжения уменьшается, а величина тока короны между импульсами нарастает [11]. При величине напряжении выше определенного уровня формирование импульсов Тричела прекращается. Эти тенденции описаны во многих работах.

Особенностью импульсов Тричела в электроотрицательном газе является быстрое нарастание тока через промежуток и наличие ступенек на фронте тока [7, 9, 12]. Первые физические модели, объясняющие быстрое нарастание тока в тричеловских импульсах были предложены в работах [3–5]. Согласно [4], первый электрон инициировался с катода за счет автоэлектронной эмиссии или бомбардировки поло-

¹⁾e-mail: VFT@loi.hcei.tsc.ru; ВЕН@loi.hcei.tsc.ru; vinikitavin@mail.ru; kozyrev@to.hcei.tsc.ru; kokovin.alexandr@mail.ru; vasily.y.kozhevnikov@iee.org

жительным ионом, далее, за счет Таунсендовской ионизации формировал первичную лавину. Вторичные лавины инициировались с катода за счет фотоионизации. Однако, как показано в [5, 9], этот механизм не мог обеспечить фронт тока импульсов Тричела ~ 1 нс, зарегистрированный, в [7, 9, 12].

Модель Леба [1, 4] была развита в работе Александрова [5]. На основе анализа было показано, что за счет фотоионизации параллельно формируется большое число электронных лавин. Также было предложено наличие начальной стадии разряда длительностью (~ 500 нс) с медленным нарастанием тока до амплитуды, с которой стартует импульс Тричела. Это позволяло объяснить длительность фронта импульса тока ~ 10 нс. Однако модель не объясняла формирования последовательности импульсов Тричела и их исчезновение с ростом напряжения.

В работах Морроу [13, 14] было предложено, что ступенька на переднем фронте импульса Тричела обусловлена процессами эмиссии электронов с катода. Вначале эмиссию определяют фотоны из разрядной плазмы, а затем основной вклад в эмиссию электронов с той же части катода дают положительные ионы. Сложно предположить, что тяжелые ионы будут иметь для этого достаточную скорость.

Изучение роли фотоэмиссии электронов с катода выявило их влияние на ступеньку на фронте импульса тока в чистом кислороде атмосферного давления [9]. В этой работе делается предположение, что тричеловские импульсы при отрицательной короне связаны с развитием катодонаправленного стримера в непосредственной близости от острия и формированием после прихода стримера к катоду тлеющего разряда. В обзоре [15] на основе анализа и моделирования была поддержана гипотеза [9], согласно которой импульсы Тричела обусловлены формированием положительных стримеров в непосредственной близости от катода. Формирование последовательности импульсов и их исчезновение с ростом напряжения эта модель не объясняла.

Последовательность формирования импульсов Тричела была получена в модели, развитой в [16], предыдущие результаты этих авторов опубликованы в [8, 10]. Из расчетов следовало, что за время импульса происходит существенное изменение поперечной структуры разряда, а рост тока обеспечивается за счет заполнения плазмой поверхности катода.

Как следует из анализа наиболее цитируемых работ, предлагаемые физические модели формирования тричеловских импульсов существенно отличаются. Также отличаются параметры и режимы генерации импульсов Тричела, получаемые в различ-

ных экспериментальных работах. Поэтому требуются более глубокие и всесторонние исследования этого режима коронного разряда. Причем, для адекватного теоретического моделирования многофакторных газоразрядных процессов, протекающих в малых объемах и за короткие времена, необходимо использовать современные вычислительные алгоритмы, требующие большой памяти и времени счета.

Цель настоящей работы – выяснить механизм формирования импульсов Тричела при коронном разряде в воздухе атмосферного давления с острия, имеющего малый радиус кривизны $r \approx 20$ мкм. Для реализации поставленной цели была разработана теоретическая модель коронного разряда с учетом плазмохимических реакций, специально привязанная к экспериментальным исследованиям, в которых с высоким пространственным и временным разрешением фиксировалась динамика свечения плазмы и электрические характеристики разряда.

Установка, методики и экспериментальные результаты. При проведении исследований использовалась две схемы с различным расположением игольчатого электрода. В традиционной схеме, показанной на рис. 1а, применялся промежуток острие-

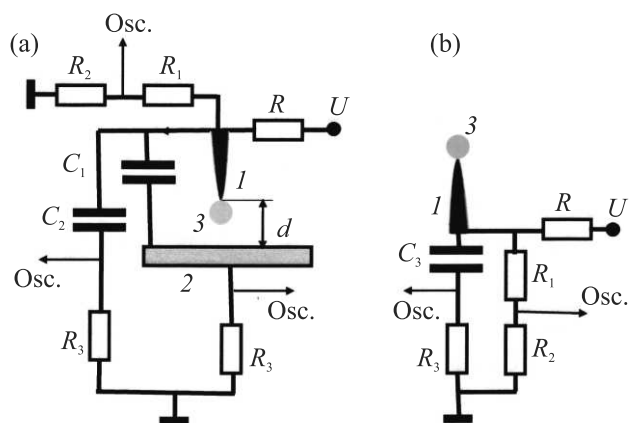


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схемы установок для изучения коронного разряда в промежутке d между острием 1 и плоским электродом 2 (а), а также с уединенного острия 1 (б). 3 – область свечения коронного разряда; U – подвод высокого напряжения; $R = 3 \text{ M}\Omega$ – сопротивление, ограничивающее ток источника питания; R_1 , R_2 – сопротивления омического делителя; $R_3 = 1 \text{ k}\Omega$ – сопротивление шунта; C_1 – емкость между острием 1 с подводами к нему и плоским электродом 2; C_2 – дополнительный конденсатор, устанавливаемый параллельно d ; C_3 – конденсатор, позволяющий регистрировать импульсы Тричела при уединенном острие

плоскость, а вторая схема, рис. 1б, использовала уединенное острие, связанное с удаленными зазем-

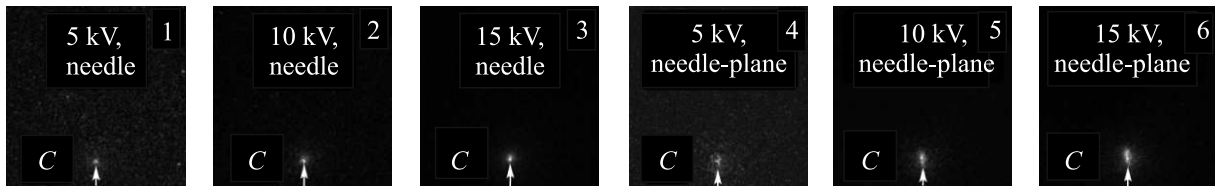


Рис. 2. Изображения коронного разряда в режиме с импульсами Тричела, полученные с помощью ICCD камеры в атмосферном воздухе у одиночного острия (1–3) и в промежутке острие–плоскость с $d = 2$ см (4–6) при длительности экспозиции одного кадра 10 мс (1, 2, 3) и 500 мкс (4, 5, 6). Высота изображения 5 мм. Стрелкой показано положение острия

ленными металлическими объектами “паразитной” емкостью (на рис. 1b не показана).

Импульсная и стационарная составляющие тока коронного разряда регистрировались с помощью шунтов R_3 . Сигналы с шунтов и омических делителей напряжения подавались на осциллограф MDO 3104 (1 ГГц, частота дискретизации 5 ГС/с). Величина емкости C_1 между острием с подводами к нему и плоским электродом составляла ≈ 3.7 пФ. В ряде экспериментов между заземленным выводом шунта и острием параллельно d подключался дополнительный конденсатор $C_2 = 4.7$ нФ с дополнительным шунтом.

При использовании второй установки (рис. 1b) острие устанавливалось на керамическом конденсаторе K15-10 емкостью 4.7 нФ. Это позволяло регистрировать импульсную составляющую тока коронного разряда. В данной схеме величина напряженности электрического поля E вблизи острия существенно не изменялась. Однако при удалении от острия спад E был более быстрым, и стационарный ток коронного разряда уменьшался.

Острийный электрод был изготовлен из куска “бисерной” иглы диаметром 0.32 мм с радиусом скругления острия ≈ 20 мкм, который при проведении экспериментов существенно не изменялся. Это достигалось за счет большого балластного сопротивления и сравнительно низкого напряжения на острие, что ограничивало импульсные и средние токи разряда, а, следовательно, сильно снижало эрозию электрода. Постоянство геометрических параметров острия можно было оперативно контролировать по уровню напряжения, обеспечивающего появление первого импульса тока коронного разряда. Известно, что при увеличении радиуса скругления острия и сохранении внешних условий (давления, влажности и температуры воздуха) напряжение зажигания короны будет увеличиваться (см., например, [11]).

Фотографирование разряда осуществлялось с помощью ICCD камеры HSFC PRO и фотоаппарата

SONY A100. Поскольку энергии, вкладываемые в разряд за один импульс Тричела, были очень малы (~ 1 мкДж и менее), то получить данные о динамике излучения плазмы при формировании единичного импульса не удалось. Однако, при использовании ICCD камеры были зарегистрированы размеры светящейся области плазмы у острия, которая для второй схемы была практически сферой (рис. 2, кадры 1, 2, 3), а для первой имела вытянутую вдоль оси разряда форму (рис. 2, кадры 4, 5, 6).

Это можно объяснить другой конфигурацией электрического поля из-за близости плоского электрода. Съемка показывает, что увеличение напряжения, подаваемого на острие, приводит к увеличению диаметра светящейся области. При напряжении 5 и 10 кВ свечение коронного разряда при короткой экспозиции (50 мкс и менее) вообще не регистрировалось ICCD камерой. И лишь при напряжении 15 кВ регистрировалось весьма слабое свечение у одиночного острия, которое при длительности кадра 50 мкс соответствовало суммарному излучению 5 импульсов Тричела. Регистрация тока разряда показала, что за время экспозиции кадра 10 мс (кадры 1, 2, 3 на рис. 2) при напряжении $U = 15$ кВ с одиночного острия формируется ≈ 1000 импульсов Тричела.

Использование промежутка острие–плоскость с $d = 2$ см (рис. 2, кадры 4, 5, 6) усиливало интенсивность свечения коронного разряда при равных напряжениях на электроде с малым радиусом кривизны и длительностях экспозиции, а также частоту следования импульсов Тричела. Изображения свечения коронного разряда при длительности кадра 500 мкс приведены на кадрах 4, 5, 6 рис. 2. За 500 мкс при $U = 15$ кВ в промежутке острие–плоскость формировалось ≈ 1500 импульсов Тричела. При напряжении 15 кВ слабое излучение коронного разряда также было зарегистрировано за три импульса. Отметим, что при первой схеме установки с уменьшением длительности одного кадра свечение плазмы во время импульса Тричела давало основной вклад в регистрируемое излучение. Однако при увеличении напряже-

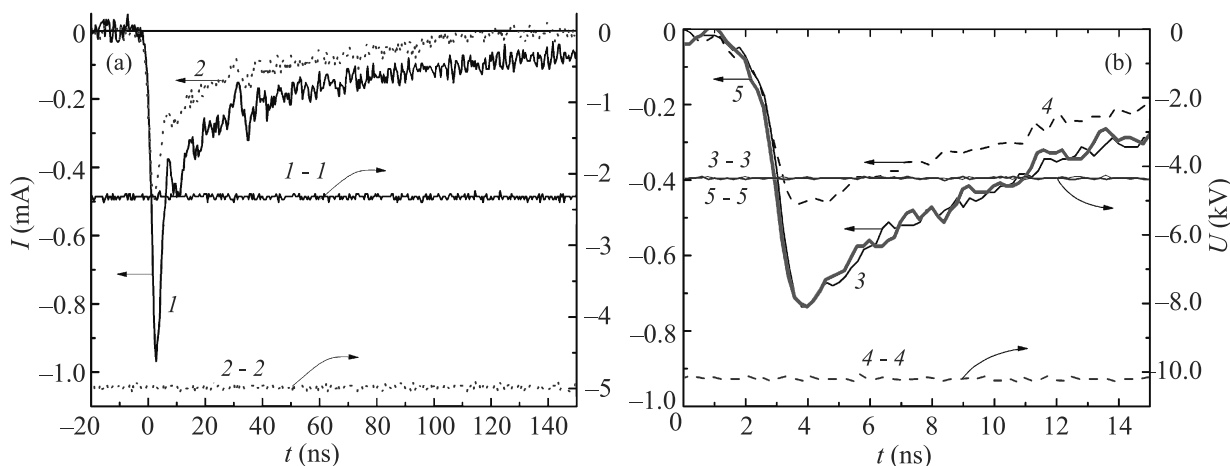


Рис. 3. (Цветной онлайн) Осциллограммы тока импульсов Тричела: (а) – в промежутке острие–плоскость (1 – первый импульс при зажигании разряда, 2 – импульс в стационарном импульсно-периодическом режиме при $U = 5$ кВ) и напряжение для соответствующих импульсов тока 1-1, 2-2; (б) – в условиях уединенного острья (3 – первый импульс при зажигании разряда, 4 – импульс в стационарном импульсно-периодическом режиме при $U = 10.2$ кВ, 5 – третий импульс после зажигания разряда при постоянном напряжении 4.4 кВ) и напряжение для соответствующих импульсов тока 3-3, 4-4, 5-5

ния и/или сокращении межэлектродного зазора основной вклад в регистрируемое излучение начинала вносить квазистационарная стадия коронного разряда, светящаяся между импульсами Тричела.

Фотографирование коронного разряда с помощью ICCD камеры в условиях последовательного стабильного формирования импульсов Тричела показало, что область свечения при уединенном острье имеет сферическую форму и малые размеры, которые хорошо соответствуют расчетным размерам области интенсивной ионизации газа. Как будет показано ниже, при численном моделировании эксперимента концентрация электронов в этой области превышает 10^{13} см $^{-3}$. Сферическая форма свечения сохранялась с увеличением напряжения на острье до 15 кВ и не изменялась при вариации времени экспозиции (включая излучение квазистационарных стадий между импульсами).

Характерные осциллограммы коронного разряда приведены на рис. 3.

На рисунке 3а видно, что ток импульсов Тричела состоит из первого короткого пика с длительностью фронта $\tau_{0.2-0.9} \approx 2$ нс и спада тока за время ~ 100 нс и более. Подобная форма импульса тока регистрировалась как для первых импульсов при зажигании разряда, так и переходе в режим формирования последовательности импульсов Тричела. Частота импульсов увеличивается с ростом напряжения на промежутке. Применение одиночного острья несколько сократило длительность фронта импульса Тричела $\tau_{0.2-0.9} \approx 1.5$ нс. Частота следования импульсов при

одиночном острье существенно меньше, чем в промежутке острие–плоскость (при одинаковых напряжениях). Так, при напряжении 15 кВ эти частоты составили 100 кГц и 3 МГц, соответственно.

В данных экспериментах использовались только низкие скорости нарастания напряжения на промежутке, или оно было постоянным. Поэтому графики напряжений на рис. 3 имеют вид горизонтальных линий. Изменение напряжения во время импульсов определяется величиной сопротивления R и наличием “паразитной” емкости $C_1 \approx 3.7$ пФ, а также применением конденсаторов C_2 и C_3 . Оценка величины заряда в первом импульсе Тричела, который при медленном нарастании напряжения на острье и заданном напряжении имеет наибольшую амплитуду, показала, что за импульс переносится не более 0.04 нК. Это дает снижение напряжения на C_1 за один импульс ≈ 4 В. Такое уменьшение напряжения в приведенном для напряжения масштабе не заметно. Мы могли инициировать одиночные импульсы Тричела (в отличие от работы [16]) при низком постоянном напряжении на острье, т.е. паузы между импульсами достигали единиц и десятков секунд. Амплитуда и форма последующих импульсов Тричела в этих режимах практически не изменялась. На рисунке 3б показан 3-й импульс Тричела, который мало отличается от первого и генерируется при том же напряжении. Такие же амплитуды и формы импульсов при пороговых напряжениях имеют осциллограммы тока и напряжения всех последующих импульсов.

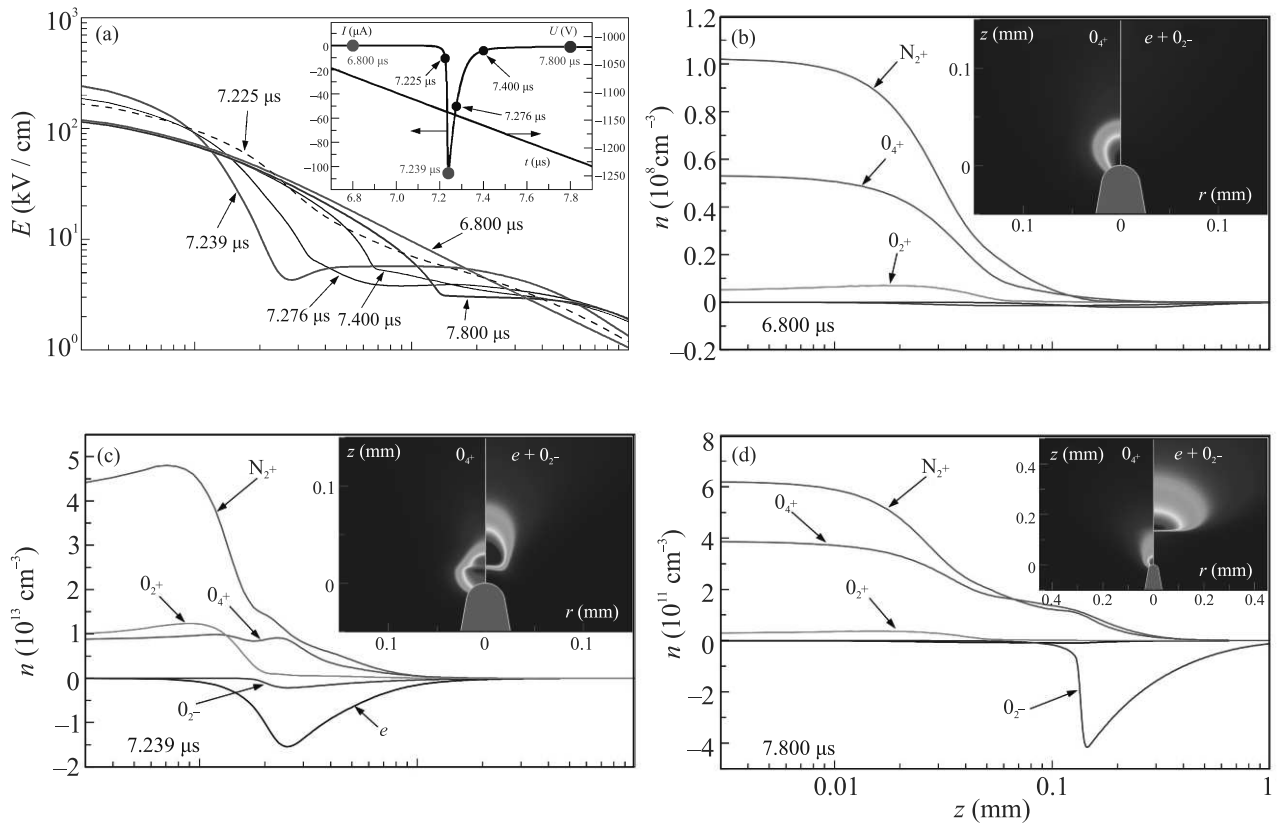


Рис. 4. (Цветной онлайн) Пространственные распределения напряженности электрического поля (а) и концентраций заряженных частиц (б)–(д) вдоль оси (графики) и в промежутке (вставки) разряда на разных стадиях его развития (отображенные моменты времени отмечены на профиле импульса тока на вставке (а)). Масштаб оси абсцисс логарифмический

Результаты теоретического моделирования коронного разряда, обсуждение и сравнение с экспериментальными данными. Для описания коронного разряда в искусственном воздухе ($N_2:O_2 = 4:1$) была разработана теоретическая модель [21], которая включала учет 19 основных плазмохимических реакций (реакции ионизации, электрон- и ион-ионной рекомбинации, диссоциации молекул, электронного прилипания и отлипания, ион-ионной конверсии и перезарядки), систему уравнений для диффузионно-дрейфовой кинетики семи преобладающих сортов нейтральных и заряженных частиц (e , O , N , N_2^+ , O_2^+ , O_4^+ , O_2^-), уравнение Пуассона для расчета электрического поля и уравнение Кирхгофа для электрической цепи разряда. Физико-математическая модель явления и ее результаты применительно к длительному коронному разряду на отрицательном острие (радиус кривизны 100 мкм) подробно описаны в работе [21], но детального анализа процессов в течение единичного импульса Тричела не проводилось.

Вычислительная программа, специально адаптированная к условиям вышеописанного эксперимента (воздух атмосферного давления, радиус кривизны острия 20 мкм, межэлектродный зазор 20 мм, та же электрическая цепь), позволила детально проследить пространственно-временную динамику концентраций частиц и электрического поля в ходе первого и последующих импульсов Тричела. Полученные зависимости приведены на рис. 4.

На рисунке 4а (на вставке) видно, что при скорости линейного роста напряжения на промежутке 160 В/мкс формирование первого импульса Тричела произошло через 7.2 мкс, когда напряжение достигло 1150 В. Как и в эксперименте, импульс тока имеет крутой передний фронт и пологий спад.

Расчеты напряженности электрического поля (рис. 4а), динамики концентраций ионов и электронов (рис. 4б–д) в промежутке показывают, что толщина слоя объемного заряда (слоя прикатодного падения потенциала) меняется от ~ 100 мкм в слаботорочной фазе (6.8 и 7.8 мкс) до ~ 30 мкм в стадии максимального тока (7.239 мкс). Основной ансамбль

свободных электронов, обеспечивающих скорость ионизационных процессов на стадии импульса тока, сосредоточен на расстоянии 15–60 мкм от поверхности острия (рис. 4с). Область свечения плазмы около уединенного острия (рис. 2) имеет примерно те же размеры.

Расчет показывает, что быстрый рост тока начинается с достижения концентрацией плазмы в области отрицательного свечения уровня $\sim 10^{11} \text{ см}^{-3}$. После чего идет быстрая ионизация газа перед острием, концентрация плазмы здесь за десятков наносекунд достигает $\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$, и напряженность поля в протяженной области от 30 до 400 мкм резко снижается до уровня $\sim 5 \text{ кВ/см}$. Постепенно ($\sim 150 \text{ нс}$), концентрация свободных электронов в этой области снижается за счет их рекомбинации и/или прилипания, скорость ионизации падает почти до нуля, а ток разряда уменьшается до единиц мкА.

Спад тока в импульсе Тричела связан с исчезновением свободных электронов и накоплением отрицательных ионов (рис. 4д) в пониженном электрическом поле. Далее, в паузе между импульсами концентрация отрицательных ионов постепенно уменьшается за счет расходимости потока, происходит термическое отлипание электронов в области слабого поля и их быстрый уход к аноду. После распада/ухода отрицательных ионов, электрическое поле в окрестности острия снова нарастает до $\sim 10 \text{ кВ/см}$, здесь сильно увеличивается скорость генерации свободных электронов и положительных ионов, и начинает формироваться следующий импульс Тричела. Интересно, что если мы исключали из плазмохимической схемы реакцию отлипания электронов от молекулы кислорода, то после первого импульса последующие импульсы до конца расчета не появлялись! Косвенным подтверждением изложенной точки зрения на импульсно-периодический режим отрицательной короны может служить ярко выраженный эффект электро-отрицательности газа – в электроположительных смесях ($\text{N}_2 : \text{Ar}$) импульсов Тричела не наблюдалось [2].

Отметим, что уровень концентрации электронов 10^{13} см^{-3} примерно соответствует концентрации в лавине на стадии лавинно-стримерного перехода [1, 2], когда также происходит вытеснение поля из плазменной области на головку стримера. Но у острия при малых размерах области с высоким электрическим полем и сравнительно низких напряжениях переход от лавинного разряда к стримерному не может реализоваться из-за отсутствия эффекта усиления напряженности поля перед наработанным плазменным сгустком (на рис. 4а видно, что поле

здесь не превышает 3 кВ/см). Именно поэтому при сравнительно невысоком напряжении (единицы кВ) реализуется импульсно-периодический режим Тричела. Если же напряжение увеличивать свыше 8 кВ, то импульсно-периодический режим может перейти в стационарный тлеющий разряд [21].

Выводы. На базе сопоставления результатов экспериментальных исследований коронного разряда с отрицательно заряженного острия и результатов теоретического моделирования разряда в этой же конфигурации электродов удается выявить основные физические механизмы, ответственные за наблюдаемые закономерности.

Показано, что при зажигании коронного разряда в воздухе атмосферного давления с отрицательно заряженного острия инициирование режима импульсов Тричела обусловлено накоплением положительных ионов у острейного катода и быстрым ростом скорости ионизационных процессов при достижении концентрацией свободных электронов уровня $\sim 10^{11} \text{ см}^{-3}$. Расчеты показали, что максимальный ток первых импульсов Тричела реализуется при концентрации электронов $\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$, характерной для электронных лавин в стадии лавинно-стримерного перехода. Однако высокая неоднородность электрического поля за счет быстрого ухода свободных электронов из области сильного поля и последующей их рекомбинации и/или прилипания не позволяет зарождающемуся стримеру продвигаться к аноду. С другой стороны, при использовании импульсов напряжения с коротким фронтом, и соответственно, при более высоких напряженностях поля у вершины острия, стример при коронном разряде успевает сформироваться [19, 22].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-29-00137.

1. Л. Леб, *Основные процессы электрических разрядов в газах*, Гостехиздат, М. (1950).
2. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, 3-е изд., испр., доп., Интеллект, Долгопрудный (2009).
3. G. W. Trichel, *Phys. Rev.* **54**, 1078 (1938).
4. L. B. Loeb, *Phys. Rev.* **86**, 256 (1952).
5. Г. Н. Александров, *ЖТФ* **33**(2), 263 (1963).
6. W. L. Lama and C. F. Gallo, *J. Appl. Phys.* **45**, 103 (1974).
7. P. Dancer, R. C. Davidson, O. Farish, and M. Goldman, *Proceedings of the IEEE-AS Annual Meeting*, Cleveland 87 (1979), p. 87.
8. A. P. Napartovich, Y. S. Akishev, A. A. Deryugin, I. V. Kochetov, M. V. Pan'kin, and N. I. Trushkin, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **30**, 2726 (1997).

9. M. Černák, T. Hosokawa, S. Kobayashi, and T. Kaneda, *J. Appl. Phys.* **83**, 5678 (1998).
10. Ю. С. Акишев, М. Е. Грушин, И. В. Кочетов, А. П. Напартович, Н. И. Трушкин, *Физика плазмы* **25**, 998 (1999).
11. V. Tarasenko, E. Baksht, V. Kuznetsov, V. Panarin, V. Skakun, E. Sosnin, and D. Beloplotov, *J. Atmospheric Science Research* **3**(4), 28 (2020).
12. R. Zentner, *Z. Angew Phys.* **29**, 294 (1970).
13. R. Morrow, *Phys. Rev. A* **32**, 1799 (1985).
14. R. Morrow, *Phys. Rev. A* **32**, 3821 (1985).
15. M. Černák, T. Hoder, and Z. Bonaventura, *Plasma Sources Sci. Technol.* **29**, 013001 (2019).
16. Ю. С. Акишев, И. В. Кочетов, А. И. Лобойко, А. П. Напартович, *Физика плазмы* **28**, 1136 (2002).
17. Э. И. Асиновский, А. А. Петров, И. С. Самойлов, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 354 (2007).
18. P. Sattari, C. F. Gallo, G. S. P. Castle, and K. Adamiak, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44**, 155502 (2011).
19. В. Ф. Тарасенко, В. С. Кузнецов, В. А. Панарин, В. С. Скакун, Э. А. Соснин, Е. Х. Бакшт, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 72 (2019).
20. B. Lu, H. Ma, and J. Xiong, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **49**, 2055 (2021).
21. А. О. Коквин, А. В. Козырев, and V. Yu. Kozhevnikov, *J. Phys. Conf. Ser.* **2064**, 012024 (2021).
22. В. Ф. Тарасенко, Е. Х. Бакшт, Э. А. Соснин, А. Г. Бураченко, В. А. Панарин, В. С. Скакун, *Физика плазмы* **44**, 447 (2018).

Спиновые флуктуации и спин-флуктуационной переход в магнитоупорядоченной фазе моносилицида марганца

С. В. Демишев^{+*1)}, А. Н. Самарин⁺, М. С. Карасев⁺, С. В. Григорьев[×], А. В. Семенов⁺

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

^{*}Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

[×]Национальный исследовательский центр “Курчатовский Институт” –
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, 188300 Гатчина, Россия

Поступила в редакцию 18 апреля 2022 г.

После переработки 24 апреля 2022 г.

Принята к публикации 24 апреля 2022 г.

Монокристалл моносилицида марганца, MnSi, исследован методом высокочастотного (60 ГГц) электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). В температурном диапазоне 2–40 К получены наиболее подробные из известных на сегодняшний день температурные зависимости ширины линии и g -фактора, позволившие установить, что в спин-поляризованной фазе MnSi, образованной магнитными поляронами, в поле $B \sim 2$ Тл при $T_L \sim 15$ К возникает спин-флуктуационный переход, отвечающий изменению режима магнитных флуктуаций при температуре, существенно меньшей температуры перехода $T_c \sim 30$ К из парамагнитной ($T > T_c$) в магнитоупорядоченную фазу ($T < T_c$). Данный результат расширяет область применимости представления о спин-флуктуационных переходах, которые ранее рассматривались лишь для случая магнитных состояний, не обладающих дальним магнитным порядком. Обсуждается модель для описания параметров ЭПР в системе магнитных поляронов.

DOI: 10.31857/S1234567822110076, EDN: ilvbdu

1. Исследования моносилицида марганца, MnSi, методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) позволили значительно уточнить физическую картину магнитных свойств этого металла со спиральным магнитным упорядочением. Традиционно для описания статической магнитной восприимчивости MnSi применялась теория зонного магнетизма Морри [1], однако исследование спиновой динамики методом ЭПР показало, что магнитный момент не распределен по элементарной ячейке кристалла, а локализован на ионах марганца [2–4] и, согласно LDA расчетам [5] и экспериментальным данным [6], оказывается $\mu_{Mn} \sim (1.2–1.3)\mu_B$. При этом редуцицию магнитного момента насыщения до значений $\mu_S \sim 0.3–0.4\mu_B/Mn$ как в парамагнитной, так и в магнитоупорядоченной фазе можно связать с образованием состояний спин-поляронного типа, в которых локализованные магнитные моменты (ЛММ) марганца и зонных электронов направлены противоположно и компенсируют друг друга. При этом спин-поляронная модель позволяет количественно описать данные по температурным и полевым зависимостям намагниченности и дать

качественную интерпретацию наблюдаемой моды магнитного резонанса [6].

Однако возможности метода ЭПР не ограничены лишь информацией о величине ЛММ, участвующих в магнитных колебаниях. В сильно коррелированных электронных системах ширина резонансной линии несет информацию об амплитуде спиновых флуктуаций [4, 7–9] и, следовательно, электронный парамагнитный резонанс открывает возможности для прямого экспериментального исследования различных спин-флуктуационных явлений, в том числе спин-флуктуационных переходов (СФП) [4]. В общем случае под СФП понимается изменение характеристик спиновых флуктуаций под влиянием управляющего параметра (например, температуры), не связанное с установлением в системе магнитного порядка в результате спинового упорядочения. Наиболее известным СФП является переход в фазу спинового нематика [10], когда нарушается равенство амплитуд спиновых флуктуаций вдоль различных направлений без установления дальнего магнитного порядка. СФП типа спинового нематика был предсказан теоретически [10] и обнаружен экспериментально в антиферроквадрупольной фазе гексаборида церия, CeB₆, в том числе с помощью ЭПР [11, 12]. Инте-

¹⁾e-mail: demis@lt.gpi.ru

ресно, что СФП не сводятся к рассмотренному частному случаю спинового нематика. Например, в [12] был обнаружен СФП нового типа, связанный с изменением симметрии спиновых флуктуаций, который можно рассматривать как аналог ориентационного перехода в магнетиках [4, 12]. Существование СФП в модели Изинга на случайных центрах было установлено в недавней теоретической работе [13].

Спиральные магнетики типа MnSi являются перспективными объектами для поиска и исследования СФП. Известно, что спиральные флуктуации у MnSi существуют в достаточно протяженной области в парамагнитной фазе, в которой температура может превышать температуру перехода в спиральную фазу на несколько градусов [14]. В спиральных магнетиках – твердых растворах замещения $Mn_{1-x}Fe_xSi$ на $B-T$ [15, 16] и $T-x$ [15, 17, 18] магнитных фазовых диаграммах экспериментально обнаружены так называемые промежуточные магнитные фазы. Исторически эти фазы рассматривались как области со специфическими спиновыми флуктуациями [19] или как неупорядоченные магнитные фазы с промежуточным (ближним) магнитным порядком, соответствующим упорядоченным областям размером 10–50 нм [20]. С точки зрения современной проблематики СФП “альтернативные” подходы к описанию промежуточных фаз [19, 20] представляют собой не более чем терминологическое различие. Действительно, уже в [20] было указано на тождество картины нейтронной дифракции в промежуточных фазах у $Mn_{1-x}Fe_xSi$ с дифракционными данными для классических жидких кристаллов. Это наблюдение полностью соответствует модели спинового нематика [10] и, следовательно, возникновение рассматриваемых промежуточных фаз следует связать со спин-флуктуационным переходом.

Отметим, что спин-флуктуационный подход был успешно применен для описания $T-x$ магнитной фазовой диаграммы $Mn_{1-x}Fe_xSi$ [18]. Модель [18] основана на идее о сосуществовании в системе двух типов спиновых флуктуаций: классических (CF), радиус которых расходится в точке перехода $T_S(x)$ в спиральную фазу S с дальним магнитным порядком $R_{CF} \sim (T - T_S)^\delta$, и квантовых (QF), радиус которых зависит от температуры по закону $R_{QF} \sim 1/T$ [21]. Предполагается, что промежуточные фазы возникают в результате СФП, когда R_{CF} и R_{QF} достигают критического значения R_c при понижении температуры, причем величина $R_c(x)$ определяется беспорядком в системе. Результаты моделирования $T-x$ магнитной фазовой диаграммы приведены на рис. 1а. Хорошее согласие модели с эксперименталь-

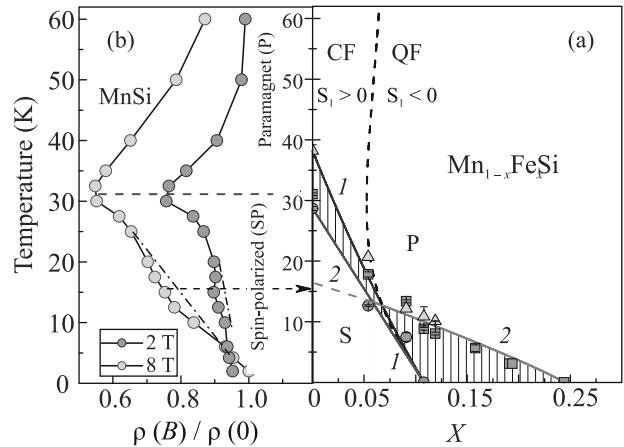


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Магнитная фазовая диаграмма твердых растворов замещения $Mn_{1-x}Fe_xSi$ по данным [18, 23]. Точки – эксперимент, линии – теоретическая модель [18]. Обозначены спиральная фаза S и парамагнитная фаза P . Пунктирная линия в парамагнитной фазе соответствует спин-флуктуационному переходу между классическими (CF) и квантовыми (QF) флуктуациями. Линии 1 и 2 обозначают границы промежуточных фаз, возникающих из-за спин-флуктуационных переходов, связанных с классическими (линия 1) и квантовыми (линия 2) флуктуациями. (б) – Температурные зависимости магнитосопротивления у MnSi в фиксированных магнитных полях 2 и 8 Тл. Основной минимум магнитосопротивления соответствует границе между парамагнитной фазой (P) и спин-поляризованной фазой (SP) (по работе [3])

ными данными было достигнуто с помощью единственного подгоночного параметра, задающего энергетическую шкалу для квантовых флуктуаций [18]. В модели [18] возникает еще один СФП в парамагнитной фазе (P), разделяющий области, где выполняются условия $R_{CF} > R_{QF}$ (CF) и $R_{CF} < R_{QF}$ (QF). Существование такого СФП, отвечающего кроссоверу между спиновыми флуктуациями различной природы (пунктирная линия на рис. 1а), было экспериментально подтверждено данными по температурным зависимостям удельного сопротивления $\rho(T, x)$ [22] и результатами исследования аномального эффекта Холла [23]. В частности, в [23] было показано, что вследствие изменения характера магнитного рассеяния в выражении для пропорционального намагниченности M аномального вклада в холловское сопротивление $\rho_{aH} = S_1 \rho M$ коэффициент S_1 меняет знак при пересечении CF-QF границы (рис. 1а).

Все рассмотренные выше СФП отвечают изменению характера спиновых флуктуаций в фазах, в которых дальний магнитный порядок отсутствует (антиферроквадрупольная и парамагнитная фаза в

случае CeB_6 , и парамагнитная фаза у $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$), что полностью укладывается в теоретическую парадигму [10, 13]. Однако данные работы [3] позволяют предположить наличие СФП у MnSi *внутри* магнитоупорядоченной фазы. Согласно [3] минимум на температурной зависимости магнитосопротивления в фиксированном магнитном поле $\rho(B)/\rho(0)$ при $T_c \sim 30$ К точно соответствует переходу между парамагнитной фазой и спин-поляризованной фазой (области P и SP на рис. 1b, в SP фазе редуцированные магнитные моменты спиновых поляронов выстраиваются параллельно, образуя квазиферромагнитный порядок).

Интересно, что, помимо основного минимума на кривых $\rho(B)/\rho(0) = f(T)$, наблюдается дополнительный минимум при $T_L \sim 15$ К (рис. 1b). Природа этой аномалии до сих пор не получила объяснения, однако из данных рис. 1b видно, что данная температура удивительно хорошо соответствует характерному энергетическому масштабу квантовых флуктуаций, экстраполированному к значению $x = 0$ (чистый MnSi , зеленая пунктирная линия на рис. 1a). Таким образом, низкотемпературная особенность магнитосопротивления у MnSi может отражать изменение характера спиновых флуктуаций в спин-поляризованной фазе MnSi в результате некоторого СФП. Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию этого вопроса.

2. Для количественного анализа спиновых флуктуаций у MnSi была использована оригинальная методика количественного анализа спектров ЭПР, успешно применявшаяся нами ранее в случае твердых растворов замещения $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ и чистого моносицида марганца [2–4]. Эксперименты были выполнены на частоте ~ 60 ГГц в температурном диапазоне 2–40 К в магнитном поле B до 8 Тл. Акцент был сделан на получение максимально подробных данных, для чего в указанном интервале было записано порядка 200 спектров и получено соответствующее количество экспериментальных точек для температурных зависимостей ширины линии $W(T)$ и g -фактора $g(T)$. Насколько нам известно, эти данные являются наиболее подробными из известных в литературе, в том числе по сравнению с результатами, сообщавшимися в более ранних работах [2–4]. Для исследования были выбраны монокристаллы MnSi с правосторонней кристаллографической киральностью, идентичные исследованным ранее в [24]. Контроль качества монокристаллов осуществлялся рентгенографически и по данным нейтронного рассеяния [24]. Отсутствие нарушения стехиометрии проверялось с помощью рентгенофазового ана-

лиза. В ЭПР-экспериментах магнитное поле было направлено вдоль кристаллографического направления [100].

3. Типичные спектры ЭПР, полученные в настоящей работе, аналогичны опубликованным ранее в [2–4]. На частоте ~ 60 ГГц резонансное поле составляет ~ 2 Тл (вставка на рис. 2a). Для такого поля спиральный магнитный порядок подавлен и единственный магнитный переход, известный из литературы, – это переход P-SP между парамагнитной и спин-поляризованной фазами [3].

Рассмотрим вначале температурную зависимость ширины линии. При понижении температуры ширина линии вначале убывает, а затем в области $T < 25$ К наблюдается значительный низкотемпературный рост $W(T)$: при уменьшении температуры от $T = 25$ К до $T = 2$ К ширина линии увеличивается более чем в два раза (рис. 2a). Обращает на себя внимание наличие двух дополнительных особенностей на кривой $W(T)$. При 29.6 К наблюдается резкое изменение ширины линии (особенность A на рис. 2a). Ранее аналогичное резкое изменение параметра W наблюдалось в магнитном полупроводнике $\text{Hg}_{0.865}\text{Mn}_{0.135}\text{Te}$ при температурах, отвечающих различным магнитным переходам в системе спиновых поляронов [25]. Поэтому, с учетом данных по магнитной фазовой диаграмме MnSi , полученным ранее, скачок ширины линии ЭПР естественно связать с P-SP фазовой границей $T_c = 29.6$ К, поскольку данный магнитный переход отвечает образованию спиновых поляронов в SP фазе. Интересно, что в окрестности особенности A производная $\partial W/\partial T$ демонстрирует λ -аномалию (рис. 2b).

Помимо рассмотренного выше скачка ширины линии, на кривой $W(T)$ можно выделить аномальную точку B при $T \sim T_L \approx 15$ К. При этой температуре достоверно регистрируется излом кривой $\partial W/\partial T = f(T)$ (рис. 2b). Кроме того, особенность B соответствует локальный максимум производной ширины линии по температуре, однако его амплитуда сопоставима с величиной ошибки вычисления $\partial W/\partial T$ из экспериментальных данных и существенно меньше амплитуды аномалии в точке A (рис. 2b). Таким образом, данные ЭПР свидетельствуют о том, что в области температур, где у MnSi ожидается спин-флуктуационный переход внутри SP фазы, действительно происходит изменение характера спиновых флуктуаций.

Наблюдаемая немонотонная зависимость $W(T)$ (рис. 2a) также является весьма нетривиальной. Действительно, для сильно коррелированного металла, такого как MnSi , в парамагнитной фазе ожида-

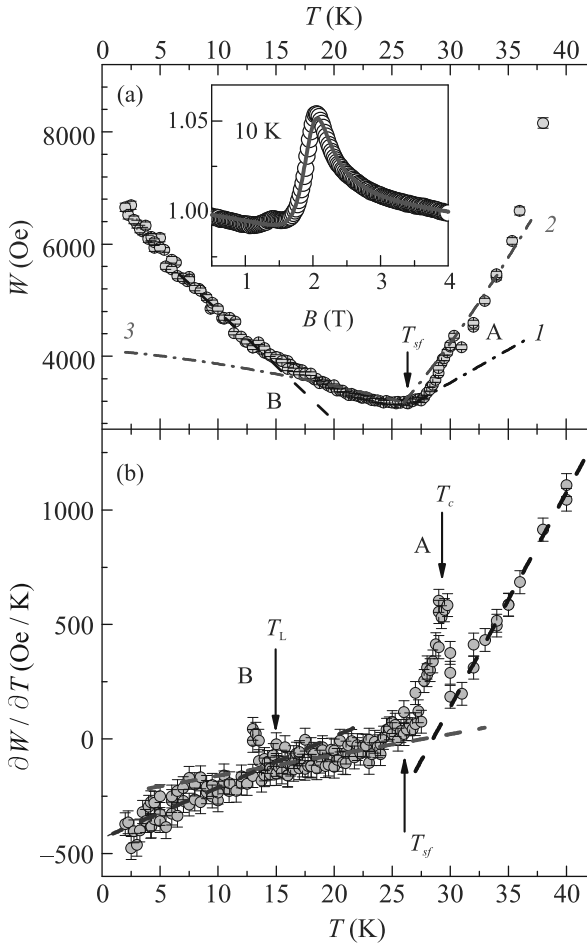


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости ширины линии ЭПР W (a) и производной $\partial W/\partial T$ (b). Буквами обозначены особенности $W(T)$: скачок (A) и излом (B). На панели (a): точки – эксперимент, 1–3 – теоретические зависимости (см. текст). Стрелки обозначают различные характерные температуры (см. текст). На панели (b): точки – производная, вычисленная по экспериментальным данным, пунктирные линии на панели отображают качественное изменение производной $\partial W/\partial T$ в различных температурных интервалах. На вставке к панели приведен пример спектра ЭПР при $T = 10$ К. Точки – эксперимент, сплошная линия – описание данных в рамках модели [4], из которой были получены данные по ширине линии и g -фактору

ся корринговский тип спиновой релаксации, когда $W(T) \sim 1/\chi(T)$, где χ – магнитная восприимчивость [9]. Так как магнитная восприимчивость растет по мере приближения к точке перехода в квазиферромагнитную спин-поляризованную фазу, то ширина линии должна убывать, что и наблюдается экспериментально (рис. 2a). При этом $\chi(T)$ задается законом Кюри–Вейсса и, следовательно, должна наблюдаться зависимость ширины линии вида $W(T) \sim$

$\sim 1/\chi(T) \sim T - T_c$. Однако вычисление производной $\partial W/\partial T$ показывает, что эта величина в парамагнитной области $T > T_c$ не является константой, а линейна по температуре (рис. 2b). В результате ширина линии $W(T)$ в парамагнитной фазе MnSi квадратично зависит от температуры, и стандартный корринговский механизм спиновой релаксации в области $T > T_c$ может рассматриваться для описания экспериментальных данных лишь на качественном уровне. Следует отметить, что убывание ширины линии при понижении температуры продолжается и в области $T < T_c$ вплоть до точки минимума $W(T)$ при $T_{sf} \approx 26$ К (рис. 2a). Если оставаться в рамках “корринговской парадигмы”, то необходимо предположить, что у MnSi корреляции в магнитной подсистеме ослаблены во всей области $T > T_{sf}$, а не только при $T > T_c$ в парамагнитной фазе.

Такое предположение, очевидно, несправедливо для магнитной подсистемы, образованной обычными ЛММ, однако может иметь смысл для системы спиновых поляронов. Известно, что процесс формирования спин-поляронной фазы (SP фаза у MnSi) может иметь сложный многостадийный характер и сопровождаться изменением характеристик спиновых поляронов [26]. Поэтому температура образования спиновых поляронов T_c и температура, при которой магнитные корреляции усиливаются T_{sf} , могут отличаться.

В рамках спин-поляронной модели [2, 3] представляет интерес возможное количественное описание ширины линии ЭПР, для чего необходимо учесть вклад спиновых флуктуаций. Для спин-поляронных состояний флуктуации магнитного момента обусловлены переходами электронов из квазисвязанных состояний в окрестности ЛММ Mn в зонные состояния. Электронная природа спиновых флуктуаций позволяет предположить [2], что перспективным для решения поставленной задачи может оказаться теория Мории [1], в которой получено следующее модельное выражение для амплитуды спиновых флуктуаций $S_L(T)$ в системе с ферромагнитными корреляциями:

$$S_L(T)^2 = S_L(T_{sf})^2 \cdot T/T_{sf} \text{ при } T \geq T_{sf}, \quad (1)$$

$$S_L(T)^2 = S_L(T_{sf})^2 \cdot [1 + 2(1 - (T/T_{sf})^{4/3})/3] \text{ при } T < T_{sf}. \quad (2)$$

Легко видеть, что $S_L(T)$, задающаяся формулами (1)–(2), имеет минимум при характерной температуре T_{sf} , которую мы интерпретировали как температуру упорядочения спиновых флуктуаций в спин-поляронном состоянии. При

этом спин-флуктуационный вклад в магнитную восприимчивость, согласно [1] обратно пропорционален квадрату амплитуды спиновых флуктуаций $\chi(T) \sim 1/S_L(T)^2$. Отметим, что немонотонная теоретическая зависимость $S_L(T)$ качественно согласуется с экспериментальными данными $W(T)$.

Поэтому для стандартного корринговского механизма при $T > T_{sf}$ согласно формуле (1) по-прежнему будет иметь место линейная зависимость ширины линии ЭПР от температуры $W(T) \sim 1/\chi(T) \sim S_L(T)^2 \sim T$, которая плохо согласуется с экспериментом (кривая 1 на рис. 2а). Исправить ситуацию может стандартная перенормировка ширины линии некоторым быстрым процессом с характерным временем τ , изменяющим характер фазовой когерентности при резонансе [27]: $\tilde{W}(T) = W(T)^2\tau$. Тогда при определенных условиях можно ожидать модифицированного корринговского закона $W(T) \sim 1/\chi(T)^2 \sim S_L(T)^4 \sim T^2$. Данная оценка для экспериментальных значений T_{sf} и $W(T_{sf})$, отвечающих минимуму зависимости $W(T)$, демонстрирует удовлетворительное согласие с экспериментом при $T < T_c$ (рис. 2а, кривая 2). Отметим, что альтернативный вариант интерпретации квадратичной зависимости был предложен в [8], где этот эффект связывается с релаксацией квазичастиц в системах с тяжелыми фермионами, к которым можно отнести и моносилцид марганца (согласно [28] эффективная масса электронов у MnSi в рассматриваемой области температур оказывается порядка 10 масс свободного электрона).

В области $T < T_{sf}$ система спиновых поляронов упорядочена и формулы корринговского типа $W(T) \sim 1/\chi(T)$ или $W(T) \sim 1/\chi(T)^2$ неприменимы. Если ΔM – амплитуда флуктуаций намагниченности вдоль внешнего поля, то в отсутствие корреляций между флуктуациями частоты спиновой прецессии и намагниченности можно использовать соотношение $W(T) = \Delta M/(\partial M/\partial B) \sim S_L(T)$ [7]. Видно, что данная аппроксимация хорошо согласуется с экспериментом вплоть до $T_L \sim 15$ К (рис. 2б, кривая 3). При этом в низкотемпературной области $T < T_L$ возникает дополнительное уширение линии, которое нельзя описать с помощью модельной функции $S_L(T)$ при $T < T_{sf}$ (формула (2)). В этой же области температур наблюдается изменение зависимости $\partial W/\partial T = f(T)$ (рис. 2б). Таким образом, и экспериментальные данные, и их теоретический анализ согласуются с представлением об изменении характера спиновых флуктуаций в окрестности температуры предполагаемого низкотемпературного спин-флуктуационного перехода у MnSi.

Перейдем теперь к анализу температурной зависимости g -фактора. В случае сильно коррелированных металлов, обладающих широкими линиями ЭПР, точность определения данного параметра ниже по сравнению с точностью определения ширины линии. Причина этого заключается в том, что в рассматриваемом случае для описания формы линии поглощения необходимо использовать сложную функцию комплексных компонент тензора магнитной проницаемости, и, в результате, нельзя корректно найти g -фактор по положению максимума поглощения при резонансе [4]. В настоящей работе для нахождения характеристик ЭПР использовалась методика [2–4], которая, в общем случае, предполагает использование трех подгоночных параметров: осциллирующей намагниченности, ширины линии (параметра спиновой релаксации) и g -фактора (гироманнитного отношения). Отметим, что экспериментальная форма линии, которая при анализе аппроксимируется теоретической функцией эффективной магнитной проницаемости, зависит от процедуры абсолютной калибровки данных ЭПР [4]. При этом существенным оказывается корректный учет базовой линии, методика безмодельного учета которой приведена в [4]. Отметим, что в случае MnSi наиболее точно определяется именно ширина линии, а для g -фактора может возникнуть дополнительная погрешность, связанная с выбором базовой линии.

Анализ ЭПР у MnSi и $Mn_{1-x}Fe_xSi$, выполненный нами ранее, позволил установить, что осциллирующая часть намагниченности, определяющая форму линии ЭПР, совпадает со статической намагниченностью образца [3, 4]. Поскольку этот параметр может быть определен независимо, то для нахождения $W(T)$ и $g(T)$, в отличие от [2–4], в настоящей работе мы использовали двухпараметрические аппроксимации, что позволило существенно уменьшить погрешность нахождения этих величин. Кроме того, при расчетах особое внимание было уделено более точно по сравнению с [2, 3] учету базовой линии и устранению связанных с этим систематических ошибок, повлиявших на данные $g(T)$, приведенные в предшествующих публикациях [2–4].

Полученные “исправленные” температурные зависимости $g(T)$ и производной $\partial g/\partial T = f(T)$ (рис. 3) согласуются с представлением об определяющей роли спиновых флуктуаций в генезисе низкотемпературных динамических магнитных свойств MnSi. Из рис. 3а видно, что g -фактор при понижении температуры вначале возрастает, проходит через максимум при $T \sim 5$ К, а затем в области $T < 5$ К начинает уменьшаться. При этом особенность А

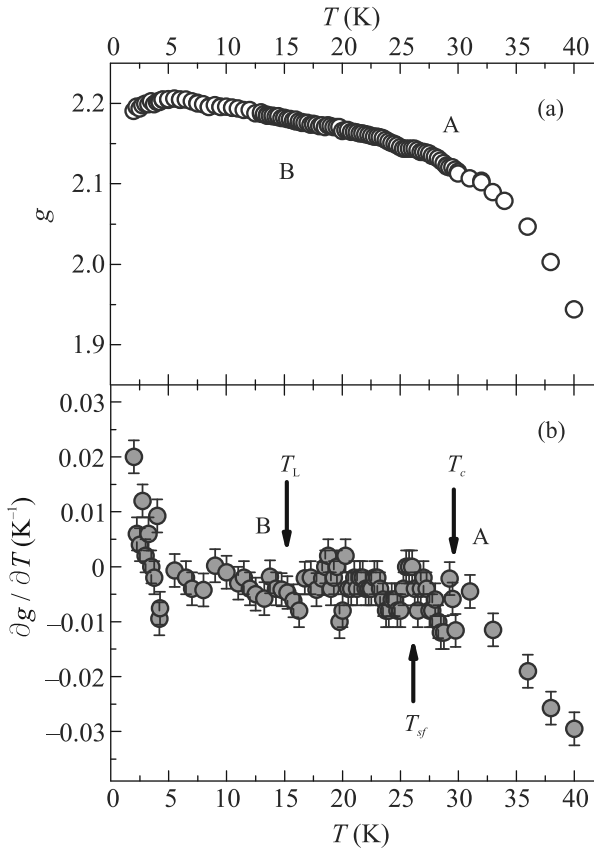


Рис. 3. (Цветной онлайн) Экспериментальные температурные зависимости g -фактора (а) и производной $\partial g/\partial T$ (б). Отмечены особенности и характерные температуры, следующие из температурной зависимости ширины линии ЭПР (обозначения те же, что и на рис. 2)

(переход P-SP) проявляется в виде излома кривой $\partial g/\partial T = f(T)$ (рис. 3б), в то время как в пределах погрешности особенность В (ожидаемый при T_L спин-флуктуационный переход) никак не выделена на температурных зависимостях $g(T)$ и $\partial g/\partial T$ (рис. 3). Отметим, что с характерной температурой минимума ширины линии ЭПР T_{sf} также нельзя связать какие-либо явно выраженные изменения на температурной зависимости g -фактора или его производной.

Начальный участок роста g -фактора при понижении температуры в области $T > T_c$ естественно связать с изменением локального поля в окрестности иона марганца в парамагнитной фазе вследствие изменения экранировки ЛММ зонными электронами, которое предшествует образованию спиновых поляронов. Для оценки эффективного значения g -фактора спинового полярона g_S в пределе $T \rightarrow 0$ можно использовать результаты для двухподре-

точного ферримагнетика [29] с учетом конфигурации противоположно направленных магнитных моментов электронов μ_e и ЛММ марганца μ_{Mn} в спин-поляронном состоянии [6]:

$$g_S = \frac{g_e \mu_e n_e - g_{Mn} n_{Mn}}{\mu_e n_e - \mu_{Mn} n_{Mn}} \approx g_{Mn} \frac{g_e \mu_{Mn} / g_{Mn} \mu_e - 1}{\mu_{Mn} / \mu_e - 1}. \quad (3)$$

Здесь n_e и n_{Mn} – число электронов и ЛММ в спиновом поляроне соответственно. В формуле (3) мы использовали соотношение $n_e/n_{Mn} \approx (\mu_{Mn}/\mu_e)^2$ полученное в [6] как условие стабильности спинового полярона. Для оценки примем, что g -фактор электронов $g_e \approx 2$, а для g -фактора Mn используем высокотемпературное значение в парамагнитной фазе $g_{Mn} \approx 1.9$ (рис. 3а). Тогда для $\mu_e = \mu_B$ и $\mu_{Mn} = 1.3\mu_B$ [6] с помощью формулы (3) находим $g_S(T \rightarrow 0) \approx 1.23g_{Mn} \sim 2.3$. Таким образом, в SP фазе, в которой образуются спин-поляронные состояния при $T < T_c$, естественно ожидать возрастания g -фактора при понижении температуры в соответствии с наблюдаемым поведением (рис. 3а). При этом наша численная оценка $g_{SP}(T \rightarrow 0) \sim 2.3$ также разумно согласуется с экспериментом.

Наблюдаемое при $T < 5$ К уменьшение g -фактора (рис. 3а), во-первых, указывает на наличие дополнительного специфического вклада в $g(T)$. Во-вторых, уменьшение $g(T)$ возникает в области, в которой изменяется зависимость $W(T)$, что также можно связать с дополнительным вкладом в ширину линии. Такое поведение согласуется с предсказаниями работы [7], в которой было показано, что учет квантовых флуктуаций магнитного момента приводит к перенормировке параметров в уравнении Ландау–Лифшица, в результате чего изменяется и ширина линии ЭПР, и поле резонанса. При этом квантовые спиновые флуктуации одновременно увеличивают W и уменьшают g , что находится в качественном согласии с результатами эксперимента (рис. 2, 3).

4. Таким образом, совокупность ЭПР-данных $W(T)$ и $g(T)$ согласуется с представлением о СФП при $T_L \sim 15$ К, связанном с квантовыми флуктуациями, как это и предполагалось по результатам работ [3, 18, 23] (рис. 1). Результаты исследования ЭПР, полученные в настоящей работе, подтверждают возможность существования СФП в магнитоупорядоченной (спин-поляризованной) фазе у MnSi, что существенно расширяет область применимости концепции спин-флуктуационных переходов, которые ранее рассматривались лишь для случая магнитных состояний, не обладающих дальним магнитным порядком. По-видимому, теоретические и экспериментальные исследования различных спин-флуктуационных

переходов могут оказаться одной из точек роста в современной физике магнитных явлений.

1. T. Moriya, *Spin fluctuations in itinerant electron magnetism*, Berlin, Heidelberg, N.Y., Tokyo, Springer-Verlag (1985).
2. С. В. Демишев, А. В. Семенов, А. В. Богач, В. В. Глушков, Н. Е. Случанко, Н. А. Самарин, А. Л. Чернобровкин, *Письма в ЖЭТФ* **93**(4), 213 (2011).
3. S. V. Demishev, V. V. Glushkov, I. I. Lobanova, M. A. Anisimov, V. Yu. Ivanov, T. V. Ishchenko, M. S. Karasev, N. A. Samarina, N. E. Sluchanko, V. M. Zimin, and A. V. Semenov, *Phys. Rev. B* **85**, 045131 (2012).
4. S. V. Demishev, *Applied Magnetic Resonance* **51**, 473 (2020).
5. M. Corti, F. Carbone, M. Filibian, Th. Jarlborg, A. A. Nugroho, and P. Carretta, *Phys. Rev. B* **75**, 115111 (2007).
6. S. V. Demishev, T. V. Ishchenko, and A. N. Samarina, *Low Temp. Phys.* **41**, 971 (2015).
7. S. V. Demishev, *Dokl. Phys.* **66**, 187 (2021).
8. P. Wölfle and E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **80**, 235112 (2009).
9. P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* **79**, 045104 (2009).
10. K. Penc and A. M. Läuchli, in *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer Series in Solid-State Sciences, ed. by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, Springer-Verlag, Berlin (2011), v. 164, p. 331.
11. A. V. Semenov, M. I. Gilmanov, A. V. Bogach, V. N. Krasnorussky, A. N. Samarina, N. A. Samarina, N. E. Sluchanko, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, V. V. Glushkov, and S. V. Demishev, *Sci. Rep.* **6**, 39196 (2016).
12. S. V. Demishev, V. N. Krasnorussky, A. V. Bogach, V. V. Voronov, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, V. V. Glushkov, and N. E. Sluchanko, *Sci. Rep.* **7**, 17430 (2017).
13. Н. А. Богословский, П. В. Петров, Н. С. Аверкиев, *Письма в ЖЭТФ* **114**(6), 383 (2021).
14. C. Pappas, E. Lelievre-Berna, P. Falus, P. M. Bentley, E. Moskvin, S. Grigoriev, P. Fouquet, and B. Farago, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 197202 (2009).
15. A. Bauer, A. Neubauer, C. Franz, W. Münzer, M. Garst, and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **82**, 064404 (2010).
16. A. Bauer and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **85**, 214418 (2012).
17. S. V. Grigoriev, E. V. Moskvin, V. A. Dyadkin, D. Lamago, T. Wolf, H. Eckerlebe, and S. V. Maleyev, *Phys. Rev. B* **83**, 224411 (2011).
18. S. V. Demishev, I. I. Lobanova, V. V. Glushkov, T. V. Ischenko, N. E. Sluchanko, V. A. Dyadkin, N. M. Potapova, and S. V. Grigoriev, *Pis'ma v ZhETF* **98**(12), 933 (2013).
19. M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Böni, and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **87**, 134407 (2013).
20. S. V. Demishev, I. I. Lobanova, A. V. Bogach, V. V. Glushkov, V. Yu. Ivanov, T. V. Ischenko, N. A. Samarina, N. E. Sluchanko, S. Gabani, E. Čížmar, K. Flachbart, N. M. Chubova, V. A. Dyadkin, and S. V. Grigoriev, *Pis'ma v ZhETF* **103**(5), 365 (2016).
21. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge (2011).
22. С. В. Демишев, В. В. Глушков, С. В. Григорьев, М. И. Гильманов, И. И. Лобанова, А. Н. Самарин, А. В. Семенов, Н. Е. Случанко, *УФН* **186**(6), 628 (2016).
23. V. V. Glushkov, I. I. Lobanova, V. Yu. Ivanov, V. V. Voronov, V. A. Dyadkin, N. M. Chubova, S. V. Grigoriev, and S. V. Demishev, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 256601 (2015).
24. S. V. Grigoriev, D. Chernyshov, V. A. Dyadkin, V. Dmitriev, E. V. Moskvin, D. Lamago, Th. Wolf, D. Menzel, J. Schoenes, S. V. Maleyev, and H. Eckerlebe, *Phys. Rev. B* **81**, 012408 (2010).
25. A. V. Shestakov, I. I. Fazlizhanov, I. V. Yatsyk, M. I. Ibragimova, and R. M. Eremina, *IEEE Magn. Lett.* **11**, 2503505 (2020).
26. U. Yu and B. I. Min, *Phys. Rev. B* **74**, 094413 (2006).
27. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, М. (1978), с. 606.
28. F. P. Mena, D. van der Marel, A. Damascelli, M. Fath, A. A. Menovsky, and J. A. Mydosh, *Phys. Rev. B* **67**, 241101(R) (2003).
29. R. K. Wangsness, *Phys. Rev.* **91**, 1085 (1953).

Основное состояние орбитально упорядоченного ферромагнетика PbMnVO_4

С. Н. Мартынов¹⁾

Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 15 апреля 2022 г.

После переработки 25 апреля 2022 г.

Принята к публикации 25 апреля 2022 г.

Основное состояние четырехподрешеточного ферромагнетика PbMnVO_4 исследовано с учетом симметрии кристалла и пространственного распределения орбитальных состояний ионов Mn^{3+} . Численной минимизацией энергии основного состояния классической модели с тремя видами анизотропии – одноионной, диполь-дипольной и взаимодействия Дзялошинского–Мория – получены значения параметров анизотропных взаимодействий для магнитных фаз с различной ориентацией полной намагниченности в кристалле. Показано, что экспериментально наблюдаемое состояние с намагниченностью, направленной вдоль орторомбической оси **a** становится основным только при наличии антисимметричного анизотропного обмена.

DOI: 10.31857/S1234567822110088, EDN: imdlbz

Связь магнитного и орбитального упорядочений в кристаллической решетке активно изучается в течение долгого времени [1–5]. Наиболее явно она проявляется в кристаллах с $3d$ -ионами Mn^{3+} и Cu^{2+} , в которых на двух верхних e_g состояниях находится один электрон (дырка). Понижение симметрии кристаллического поля и снятие орбитального вырождения этих уровней сопровождаются искажением октаэдрического окружения магнитных ионов, при котором локальные оси орбитальных состояний распределяются по решетке с альтернированием. Спин-орбитальное взаимодействие связывает спиновые и орбитальные степени свободы, приводя к чередованию локальных главных осей магнитной анизотропии ионов, что, в конечном итоге, отражается на виде магнитного упорядочения кристалла. В настоящее время рассматриваются два основных механизма орбитального упорядочения (ОУ): электрон-фононное взаимодействие [2, 6–8] и суперобменный механизм Кугеля–Хомского [4, 7, 9, 10]. Независимо от того, какой из механизмов дает основной вклад в ОУ, понижение симметрии кристаллического поля приводит к смешиванию исходных функций e_g -состояний [2, 3, 9–13]. Это отражается как на магнитной одноионной анизотропии (ОА), так и на анизотропии обменного взаимодействия.

PbMnVO_4 является редким случаем ферромагнетика-изолятора, в котором вид магнитного упорядо-

чения определяется цепочечной структурой из искаженных октаэдров MnO_6 с чередованием направления их локальных осей [14]. Четыре кристаллографические позиции ионов Mn^{3+} формируют при $T < T_c = 30.3$ К четырехподрешеточную ферромагнитную структуру [14, 15]. Пространственная группа кристалла $Pnma$ допускает три вида основного магнитного состояния $Pnm'a'$, $Pn'ma'$ и $Pn'm'a$ с ориентацией суммарного ферромагнитного момента $\mathbf{M} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4$ вдоль орторомбических осей **a**, **b** и **c** (фазы А, В и С) соответственно. Отсутствие центра инверсии между обменно-связанными ионами и сильное искажение локального окружения требуют при определении вида основного состояния учета как ОА, так и антисимметричного обмена (взаимодействия Дзялошинского–Мория (ДМ)). Целью работы является определение параметров одноионной анизотропии и взаимодействия Дзялошинского–Мория, при которых происходит экспериментально наблюдаемое упорядочение с $\mathbf{M} \parallel \mathbf{a}$ с учетом орбитального упорядочения ионов Mn^{3+} .

Главными фрагментами кристаллической структуры, определяющими магнитные свойства PbMnVO_4 , являются соединенные ребрами линейные цепочки октаэдров MnO_6 с доминирующим ферромагнитным обменом, ориентированные вдоль орторомбической оси **b** (рис. 1). Более слабый ферромагнитный обмен между спинами соседних цепочек реализуется через группы ионов VO_3 и PbO_4 [15, 16]. Кислородные октаэдры, окружающие

¹⁾e-mail: unonav@iph.krasn.ru

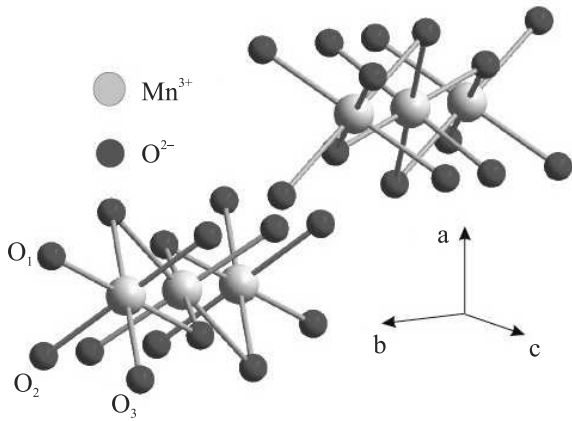


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фрагмент кристаллической структуры $PbMnVO_4$. Ионы V^{3+} и Pb^{2+} не показаны

ионы Mn^{3+} ($L=2, S=2$), сильно искажены – расстояния между ионами Mn^{3+} и O^{2-} , занимающими три неэквивалентные позиции O_1, O_2 и O_3 равны $s = 1.885 \text{ \AA}$, $m = 1.99 \text{ \AA}$ и $l = 2.225 \text{ \AA}$, соответственно [14]. Основная электронная конфигурация иона марганца в сильном кристаллическом поле имеет вид $t_{2g}^3 e_g^1$. Тетрагональное искажение ($l > m, s$) снимает вырождение, существующее в чисто октаэдрическом поле (статический эффект Яна-Теллера), расщепляя верхние уровни энергии электронных состояний e_g с функциями $|0\rangle \propto |3z^2 - r^2\rangle/\sqrt{6}$ и $|2^s\rangle = (|2\rangle + |-2\rangle)/\sqrt{2} \propto |x^2 - y^2\rangle/\sqrt{2}$. Угловые части функций приведены в системе координат с осью z вдоль направления тетрагонального искажения – локальная ось z_i направлена вдоль длинной диагонали октаэдра $z_i || 1$ [2, 9, 11, 17]. Ромбическое искажение ($m \neq s$) смещает уровни энергии и смешивает e_g -функции. Нижним по энергии становится состояние с функцией

$$\Psi_e = \cos \delta |0\rangle - \sin \delta |2^s\rangle, \quad (1)$$

а верхним –

$$\Psi_h = \sin \delta |0\rangle + \cos \delta |2^s\rangle. \quad (2)$$

Знаки при коэффициентах выбраны для сохранения обозначений, использованных Абрагамом и Блини для функции Ψ_h [11]. В основном орбитальном состоянии электрон занимает уровень с функцией Ψ_e , оставляя состояние с Ψ_h пустым. Коэффициенты смешивания волновых функций (1) и (2) определяются нормальными модами орторомбического Q_2 и тетрагонального Q_3 искажений октаэдра [2]

$$Q_2 = \sqrt{2}(m - s), \quad Q_3 = \sqrt{\frac{2}{3}}(2l - m - s), \quad (3)$$

$$\tan 2\delta = \frac{Q_2}{Q_3}. \quad (4)$$

Используя структурные данные для $PbMnVO_4$ [14], получаем

$$\cos \delta = 0.988, \quad \sin \delta = 0.153. \quad (5)$$

Угловые части волновых функций принимают вид

$$\Psi_e \propto \frac{1}{\sqrt{2}}|1.155z^2 - 0.73x^2 - 0.424y^2\rangle, \quad (6)$$

$$\Psi_h \propto \frac{1}{\sqrt{2}}|0.177z^2 + 0.9x^2 - 1.077y^2\rangle. \quad (7)$$

В дальнейшем проведем сравнение полученных значений с аналогичными параметрами в наиболее изученном орбитально упорядоченном перовските $LaMnO_3$ с такой же пространственной группой симметрии кристалла и близкими значениями локальных искажений кислородного октаэдра [17, 18]. Соответствующие коэффициенты функций (1), (2) $\cos \delta = 0.996$, $\sin \delta = 0.092$ показывают, что большее ромбическое искажение в $PbMnVO_4$ приводит к большему перемешиванию орбитальных e_g -функций. На рисунке 2 показано схематическое представление ори-

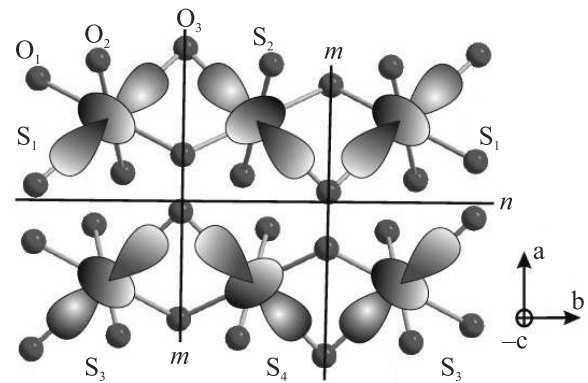


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схематическое представление ориентации орбиталей Ψ_e , участвующих в образовании σ -связи, для цепочек с доминирующим обменом в кристаллической решетке $PbMnVO_4$. Показаны зеркальные плоскости симметрии m и диагональная плоскость скольжения n

ентации орбиталей Ψ_e , участвующих в образовании σ -связи, для цепочек с доминирующим обменом в кристаллической решетке $PbMnVO_4$. Максимальное перекрытие функций основного состояния происходит через ионы кислорода O_3 , что и обеспечивает доминирующий ферромагнитный обмен через эти ионы [19].

Энергия ОА ионов Mn^{3+} в октаэдре с тетрагональным и ромбическим искажением имеет вид

$$H_{ai} = DS_{zi}^2 + E(S_{xi}^2 - S_{yi}^2), \quad (8)$$

где локальные оси анизотропии zi , xi и yi направлены вдоль длинных, средних и коротких осей октаэдров соответственно. Такой выбор системы координат позволяет зафиксировать знаки и соотношение между тетрагональной и ромбической компонентами $D < E < 0$ и связать эти величины с соответствующими искажениями октаэдра [2, 7, 11, 12]

$$\frac{E}{D} = \frac{\tan 2\delta}{\sqrt{3}} = 0.183. \quad (9)$$

ОУ сопровождается соответствующим распределением по решетке локальных осей ОА. Как было показано в рамках двухподрешеточной модели ферромагнетика [20], при угле между легкими осями анизотропии zi и орторомбической осью \mathbf{b} $\beta = 47.9^\circ$ в основном состоянии полная намагниченность ферромагнетика \mathbf{M} направлена вдоль оси \mathbf{a} (фаза А), а нелинейная полевая зависимость намагниченности заканчивается скачком при завершении переориентации (фазовым переходом первого рода), что наблюдается экспериментально в $PbMnVO_4$ [15]. Для объяснения сильной магнитной анизотропии и основного состояния в этой работе также рассматривалась ОА с легкой осью вдоль длинной диагонали октаэдра. Однако в четырехподрешеточном ферромагнетике $PbMnVO_4$ плоскости длинных осей октаэдра соседних цепочек развернуты относительно орторомбической оси \mathbf{a} на угол $\pm 30^\circ$ (рис. 1). В результате угол между длинными осями l и осью \mathbf{a} $\alpha = 50^\circ$ становится больше угла β . В предельном случае сильного ферромагнитного обмена, когда подрешетки можно рассматривать коллинеарными, энергия анизотропии в фазе В будет меньше, чем в фазе А. В другом предельном случае, когда величина ОА больше межцепочечного обмена, магнитные моменты в каждой цепочке отклоняются от плоскости ab , угол между ними и легкими осями уменьшается, и энергия ОА фазы А становится ниже, чем энергия фазы В. Следовательно, существует пороговое соотношение между этими величинами, с которого основным состоянием становится фаза А, как это происходит в двухподрешеточной модели [20].

Вторая константа ОА E сильнее понижает энергию фазы А, чем фазы В, так как угол между осью xi и осью \mathbf{a} меньше угла с осью \mathbf{b} . Отношение орторомбического и тетрагонального искажений октаэдра (4) позволяет определить только отношение параметров ОА (9). Во втором порядке теории возму-

щений по спин-орбитальному взаимодействию абсолютные значения параметров ОА D и E зависят от отношения λ^2/Δ , где λ – константа взаимодействия, а Δ – энергетическая щель между основной $t_{2g}^3 e_g^1$ -конфигурацией и возбужденным состоянием [3, 11]. Последняя величина зависит от кристаллического поля и в разных кристаллах имеет разное значение. В настоящее время в литературе отсутствует какая-либо информация о ее величине в $PbMnVO_4$. Данные о константе спин-орбитального взаимодействия в ионе Mn^{3+} варьируются в широком диапазоне даже для одного кристалла. Таким образом, абсолютное значение параметра D остается неопределенным и может быть найдено из экспериментальных полевых зависимостей намагниченности [15].

Необходимость учета антисимметричного обмена (взаимодействия ДМ) [21, 22] следует из отсутствия в кристаллической структуре центра инверсии между взаимодействующими спинами. Центр инверсии на магнитном ионе определяет пространственное распределение взаимодействия – альтернирование направления вектора \mathbf{D}_j при смещении координат спинов вдоль цепочки $i \rightarrow i + 1$. Такой тип взаимодействия, как и неколлинеарность осей анизотропии, приводит к неколлинеарности магнитных моментов ферромагнитных подрешеток [23]. В зависимости от направления вектора \mathbf{D}_j антисимметричный обмен может либо увеличивать неколлинеарность подрешеток, либо ее уменьшать. При этом уменьшается или увеличивается энергия фаз – в одной из фаз взаимодействие ДМ становится фрустрированным относительно одноионной анизотропии. При расчете энергии основного состояния доминирующий внутрицепочечный обмен позволяет в первом приближении ограничиться учетом антисимметричного обмена между ближайшими спинами внутри цепочек

$$H_{DM} = \mathbf{D}_{12}[\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2] + \mathbf{D}_{34}[\mathbf{S}_3 \times \mathbf{S}_4]. \quad (10)$$

Вектора \mathbf{D}_{12} и \mathbf{D}_{34} лежат в зеркальной плоскости m (ac), расположенной между взаимодействующими спинами [22] (рис. 2) и их ориентация зависит от геометрии обменных связей. Если обмен реализуется через один лиганд (одномостиковый обмен), вектор направлен ортогонально плоскости, содержащей магнитные ионы и лиганд [24–27]. Это правило справедливо и при обмене через два лиганда, лежащие в одной плоскости со спинами [28]. Однако при некопланарном обмене через два лиганда какой-либо расчет направления вектора взаимодействия ДМ в настоящее время отсутствует. Помимо двух независимых вкладов от отдельных обменных путей, будет существовать и “кольцевой” обменный путь антисим-

метричного обмена [29], который может существенно изменить общую величину и направление вектора. Следовательно, при дальнейшем учете влияния этого обмена необходимо учитывать возможность присутствия двух компонент вектора в плоскости симметрии. С учетом аксиальной и диагональной плоскостей симметрии структуры, расположенных между цепочками (рис. 2), для спинов подрешеток $S_1 - S_4$ получаем $\mathbf{D}_{12}(D_a, 0, D_c)$ и $\mathbf{D}_{34}(-D_a, 0, D_c)$.

Диполь-дипольное взаимодействие при пространственно анизотропном распределении магнитных моментов дает существенный вклад в общую анизотропию магнетика [11]. Малое расстояние между ближайшими спинами в цепочках, ориентированных вдоль орторомбической оси \mathbf{b} (2.97 \AA) по сравнению с межцепочечным расстоянием (5.45 \AA) приводит при ферромагнитном упорядочении к дополнительной легкоосной диполь-дипольной анизотропии вдоль этой оси и перенормировке изотропного обмена.

$$H_{dd} = \frac{g^2 \mu^2}{j^3} (\mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i+1,j} - 3b^{-2} (\mathbf{S}_{i,j} \mathbf{b}) (\mathbf{S}_{i+1,j} \mathbf{b})) = d \cdot \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i+1,j} - 3d \cdot S_{i,j}^b S_{i+1,j}^b. \quad (11)$$

Для точечных магнитных диполей в цепочках Mn^{3+} получаем $3d = 0.28 \text{ K}$.

Для определения соотношений между параметрами анизотропных взаимодействий, при которых реализуется экспериментально наблюдаемая фаза А, проведем численную минимизацию энергии фаз А и В в приближении классических моментов подрешеток.

$$E = \frac{N}{2} \left((J_1 + d) (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 \mathbf{S}_4) + 2J_2 (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_4) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 (DS_{zi}^2 + E(S_{xi}^2 - S_{yi}^2)) + \mathbf{D}_{12} [\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2] + \mathbf{D}_{34} [\mathbf{S}_3 \times \mathbf{S}_4] - 3d \cdot (S_1^b S_2^b + S_3^b S_4^b) \right), \quad (12)$$

где J_1 – внутри- и J_2 – межцепочечный изотропные обмены. Межцепочечный обмен рассматривается только между ближайшими спинами в соседних цепочках. При минимизации энергии используются значения обменов, полученные с использованием правой теории Гинзбурга–Ландау при описании квазиодномерного поведения $PbMnVO_4$ со значениями температуры упорядочения $T_c = 30.3 \text{ K}$ и парамагнитной температуры Кюри $\Theta = 49 \text{ K}$ [30],

$$J_1 + d = -20.2 \text{ K}, \quad J_2 = -2.2 \text{ K}.$$

Близкие значения обменов были получены при расчетах с использованием функционала плотности [16, 19].

При минимизации энергии основного состояния четырехподрешеточного ферромагнетика в общем случае требуется варьировать 8 углов ориентации моментов подрешеток Θ_i, ϕ_i в полярной системе координат. Для $PbMnVO_4$ симметрия магнитных фаз А и В накладывает на углы ограничения, уменьшающие число независимых переменных до двух

$$\begin{aligned} \text{Фаза А } (Pnm'a') : \quad & \mathbf{S}_1(\Theta, \phi), \quad \mathbf{S}_2(\pi - \Theta, \phi), \\ & \mathbf{S}_3(\Theta, -\phi), \quad \mathbf{S}_4(\pi - \Theta, -\phi); \\ \text{Фаза В } (Pn'ma') : \quad & \mathbf{S}_1(\Theta, \phi), \quad \mathbf{S}_2(\Theta, \phi + \pi), \\ & \mathbf{S}_3(\Theta, -\phi), \quad \mathbf{S}_4(\Theta, \pi - \phi), \end{aligned} \quad (13)$$

где полярные углы отсчитываются от ромбической оси \mathbf{b} , а азимутальные – от оси \mathbf{a} . Минимизируя энергии фаз (12) и сравнивая их для различных значений одноионной анизотропии D , получаем в фазовом пространстве компонент вектора антисимметричного обмена, нормированных на внутрицепочечный обмен ($D_a/J_1, D_c/J_1$), области существования двух основных состояний А и В с близкими энергиями (рис. 3). Для значений $|D| < |D_0| = 4.7 \text{ K}$ в от-

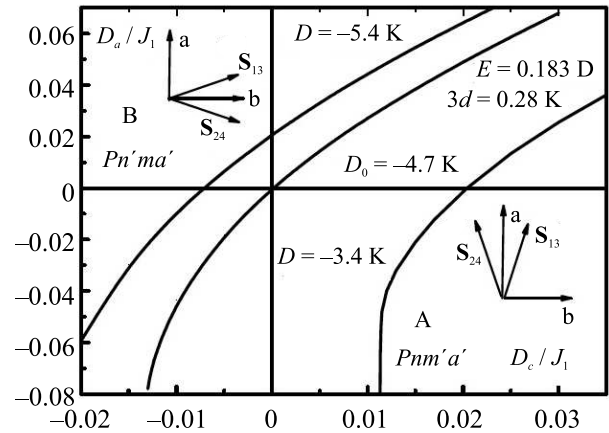


Рис. 3. Граница между фазами А и В при различных значениях параметра одноионной анизотропии D на плоскости нормированных компонент антисимметричного обмена с учетом диполь-дипольной анизотропии

сутствии взаимодействия ДМ основным состоянием является фаза В. При величине тетрагональной компоненты одноионной анизотропии, близкой к межцепочечному обмену $D \approx zJ_2/2 = -4.04 \text{ K}$, где z – число соседних цепочек, магнитные моменты в фазе А отклоняются от оси \mathbf{a} , угол между ними и легкой осью анизотропии уменьшается и при $D = D_0$ энергии фаз сравниваются. При дальнейшем увеличении абсолютной величины анизотропии основным состоянием становится фаза А. Положительное значение компоненты вектора антисимметричного обмена D_c

увеличивает неколлинеарность спинов в фазе А и понижает ее энергию – граница между фазами смещается в область меньших значений D .

Сравнение полученного отношения параметров ОА с имеющимися данными требует сопоставления используемых систем координат. В используемой системе малое ромбическое искажение, как и в других кристаллах с ионами Mn^{3+} , приводит к малому примешиванию функции $|2^s\rangle$ к функции $|0\rangle$ [11, 17]. При описании ОУ в перовскитах часто используются орбитальные функции с осью z , направленной вдоль средней диагонали искаженного октаэдра $\mathbf{z} \parallel \mathbf{m}$ [3, 7, 10, 12, 13]. Такой выбор системы координат приводит к формальной замене $l \leftrightarrow m$ в выражениях для тетрагональной и ромбической мод (3) искажений октаэдра и сильному перемешиванию исходных орбитальных функций $|0\rangle$ и $|2^s\rangle$ в собственных функциях электронного (1) и дырочного (2) состояний. При этом параметры одноионной анизотропии $D' \approx -E' > 0$ перестают отражать тетрагональные и ромбические искажения отдельно, становясь смешанными характеристиками искажения октаэдрического кристаллического поля. Это усложняет сопоставление рассчитанной ОА с кристаллографическими данными о лигандном окружении и сравнение с параметрами, используемыми при анализе резонансных исследований. При анализе спектров ЭПР изолированных ионов параметр D соответствует тетрагональному, а E – ромбическому искажениям [11, 31]. Выбор оси z вдоль направления максимального искажения (длинной диагонали l) не только имеет простой физический смысл направления преимущественной ориентации электронной орбитали с меньшей энергией к более удаленным лигандам [11], но и очевидную асимптотику нормальных мод (3) и волновых функций при предельных значениях диагоналей октаэдра l , m и s . Чисто тетрагональному искажению $m = s$ с $\delta = 0$ и $E = 0$ соответствует в системе координат с $z \parallel m$ тетрагональное искажение с легкой осью x и $\delta = 120^\circ$ [32]. В используемой в работе системе координат при $m \rightarrow l \tan 2\delta \rightarrow \sqrt{3}$ и опять получаем случай тетрагонального искажения, но с короткой осью y . При этом нижняя по энергии орбитальная функция $\Psi_e \rightarrow |z^2 - x^2\rangle$ имеет электронную плотность, распределенную от оси y . Одноионная анизотропия $D = E < 0$ становится одноосной с трудной осью y $DS_{zi}^2 + E(S_{xi}^2 - S_{yi}^2) = -2ES_{yi}^2 + \text{const}$.

Единственные прямые измерения ОА из данных ЭПР спектра Mn^{3+} в TiO_2 [31] дают значения $D = -4.9$ К, $|E| = 0.167$ К. Таким образом, отношение $E/D = 0.034$ значительно меньше отношения, следу-

ющего из искажений октаэдров в $LaMnO_3$ [17, 18] и $PbMnVO_4$ [14] 0.11 и 0.183, соответственно. Провести аналогичные расчеты для изолированных ионов в какой-либо матрице не представляется возможным, поскольку неизвестны локальные искажения при таком замещении. Можно только предположить значительно большее тетрагональное искажение в данном случае. Для $LaMnO_3$ в системе координат с локальной осью z вдоль длинной диагонали октаэдра $D = -3.4$ К, $E = -0.46$ К, $E/D = 0.134$ [13].

Так же, как и в $PbMnVO_4$, в $LaMnO_3$ отсутствие центра инверсии между спинами и значительные искажения октаэдров приводят к взаимодействию ДМ с вектором, имеющим соответствующее распределение в кристалле [33]. Но и без учета такого распределения эффективное взаимодействие ДМ, одинаковое для всех обменных связей между ферромагнитными плоскостями в $LaMnO_3$, используемое для объяснения слабого ферромагнитного момента и результатов резонансных исследований, дает порядок величины взаимодействия, сравнимый с ОА [34–37]. Анализ высокотемпературного спектра ЭПР в $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ [38] также дал близкие по величине абсолютные значения ОА и антисимметричного обмена.

Приведенные выше значения ОА в $LaMnO_3$ использовались в работе [13] для объяснения полевой зависимости спектра антиферромагнитного резонанса (АФМР) без учета возможного влияния антисимметричного обмена. Учет влияния полученной в [38] величины взаимодействия ДМ на спектр АФМР показал отсутствие качественного изменения как магнитной структуры, так и спектра [39], что имеет простое объяснение. Ориентация намагниченности в ферромагнитных слоях $LaMnO_3$ вдоль орторомбической оси \mathbf{b} определяется ОА, легкая ось которой, направленная вдоль длинной диагонали октаэдра, имеет с этой осью наименьший угол. В этом отношении $PbMnVO_4$ принципиально отличается от $LaMnO_3$ – его энергия ОА ниже в фазе В, а экспериментально наблюдаемое основное состояние с симметрией $Pnm'a'$ реализуется только при учете влияния антисимметричного обмена. Такая ситуация наблюдается в ортоферритах, где анизотропия определяется конкуренцией взаимодействия ДМ с относительно слабыми вкладами, такими как магнитодипольный и одноионный [27].

Совместное влияние ОА и взаимодействия ДМ на основное состояние и полевые зависимости намагниченности в рамках двухподрешеточной модели ферромагнетика было исследовано в работе [40]. Было показано, что наблюдаемая в $PbMnVO_4$ нелинейная зависимость намагниченности со скачком при завер-

шении переориентации может быть объяснена при близких по абсолютной величине значениях параметров анизотропных взаимодействий $D \approx -3$ К и $D_c \approx 3.3$ К.

Результатом анализа основного состояния является также определение знака компоненты D_c вектора ДМ. Наблюдаемое экспериментально состояние с намагниченностью вдоль орторомбической оси \mathbf{a} реализуется при $D_c > 0$ (рис. 3). Обратное неравенство приводило бы к намагниченности вдоль оси \mathbf{b} .

1. J. V. Goodenough, Phys. Rev. **100**, 564 (1955).
2. J. Kanamori, J. Appl. Phys. **31**, 14S (1960).
3. G. Matsumoto, J. Phys. Soc. Jpn. **29**, 606 (1970).
4. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, УФН **136**, 621 (1982).
5. Y. Tokura and N. Nagaosa, Science **288**, 462 (2000).
6. L. E. Gonchar' and A. E. Nikiforov, Phys. Rev. B **88**, 094401 (2013).
7. M. Snamina and A. Oles, Phys. Rev. B **94**, 214426 (2016).
8. L. E. Gonchar', J. Magn. Magn. Mater. **465**, 661 (2018).
9. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **64**, 1429 (1973).
10. E. Pavarini and E. Koch, Phys. Rev. Lett. **104**, 086402 (2010).
11. А. Абрагам, Б. Блини, *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, Мир, М. (1972), т. 1 [A. Abragam and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Clarendon Press, Oxford (1970), v. 1].
12. J. Rodriguez-Carvajal, M. Hennion, F. Moussa, A. H. Moudden, L. Pinsard, and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **57**, R3189 (1998).
13. Л. Е. Гончарь, А. Е. Никифоров, С. Е. Попов, ЖЭТФ **118**, 1411 (2000).
14. H. Park, R. Lean, J. E. Greedan, and J. Barbier, Chem. Mater. **15**, 1703 (2003).
15. A. Pankrats, K. Sablina, M. Eremin, A. Balaev, M. Kolkov, and V. Tugarinov, J. Magn. Magn. Mater. **414**, 82 (2016).
16. H.-J. Koo and M.-H. Whangbo, Solid State Commun. **149**, 602 (2009).
17. Th. Proffen, R. G. DiFrancesco, S. G. L. Billinge, E. L. Brosha, and G. H. Kwei, Phys. Rev. B **60**, 9973 (1999).
18. F. Moussa, M. Hennion, J. Rodriguez-Carvajal, H. Moudden, L. Pinsard, and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **54**, 15149 (1996).
19. H. Xiang, Y. Tang, S. Shang, and Z. He, J. Phys: Condens. Matter **28**, 276003 (2016).
20. С. Н. Мартынов, ФТТ **62**, 1036 (2020).
21. I. Dzyaloshinsky, J. Phys. Chem. Solids **4**, 241 (1958).
22. T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
23. S. V. Vonsovsky and E. A. Turov, J. Appl. Phys. **30**, 9S (1959).
24. F. Keffer, Phys. Rev. **126**, 896 (1961).
25. А. С. Москвин, И. Г. Бострем, ФТТ **19**, 1616 (1977).
26. Е. А. Туров, А. В. Колчанов, В. В. Меньшенин, И. Ф. Мирсаев, В. В. Николаев, *Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков*, Физматлит, М. (2001), с. 104.
27. А. С. Москвин, ЖЭТФ **159**, 607 (2021).
28. А. С. Москвин, ЖЭТФ **131**, 1048 (2007).
29. M. V. Eremin and Yu. V. Rakitin, J. Phys. C: Solid State Phys. **15**, L259 (1982).
30. A. Pankrats, M. Kolkov, S. Martynov, S. Popkov, A. Krasikov, A. Balaev, and M. Gorev, J. Magn. Magn. Mater. **471**, 416 (2019).
31. H. J. Gerritsen and E. S. Sabiski, Phys. Rev. **132**, 507 (1963).
32. Л. Е. Гончарь, ФТТ **61**, 841 (2019).
33. I. Soloviev, N. Hamada, and K. Terakura, Phys. Rev. Lett. **76**, 4825 (1996).
34. M. Tovar, G. Alejandro, A. Butera, A. Caneiro, M. T. Causa, F. Prado, and R. D. Sanchez, Phys. Rev. B **60**, 10199 (1999).
35. V. Skumryev, F. Ott, J. M. D. Coey, A. Anane, J.-P. Renard, L. Pinsard-Goudart, and A. Revcolevschi, Eur. Phys. J. B **11**, 401 (1999).
36. H. I. Huber, G. Alejandro, A. Caneiro, M. T. Causa, F. Prado, M. Tovar, and S. B. Oseroff, Phys. Rev. B **60**, 12155 (1999).
37. A. Pimenov, M. Biberacher, D. Ivannikov, A. Loidl, V. Yu. Ivanov, A. A. Muchin, and A. M. Balbashov, Phys. Rev. B **62**, 5685 (2000).
38. J. Deisenhofer, M. V. Eremin, D. V. Zakharov, V. A. Ivanshin, R. M. Eremina, H.-A. Krug von Nidda, A. A. Muchin, A. M. Balbashov, and A. Loidl, Phys. Rev. B **65**, 104440 (2002).
39. A. A. Mozhegorov, L. E. Gonchar', and A. E. Nikiforov, Low Temp. Phys. **33**, 229 (2007).
40. С. Н. Мартынов, ФТТ **63**, 1090 (2021).

Обнаружение ферромагнитных свойств Si:P в области фазового перехода изолятор-металл

А. И. Вейнгер⁺, А. Г. Забродский⁺, Э. Лахдеранта^{*1)}, П. В. Семенихин⁺²⁾

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

^{*} Lappeenranta-Lahti University of Technology, 53850 Lappeenranta, Finland

Поступила в редакцию 17 апреля 2022 г.

После переработки 27 апреля 2022 г.

Принята к публикации 27 апреля 2022 г.

Обнаружены и исследованы ферромагнитные свойства Si:P в области концентрационного фазового перехода изолятор–металл при гелиевых температурах. Для определения спиновой составляющей намагниченности из измеренных СКВИДом значений полной намагниченности образцов вычитался линейный по полю диамагнитный вклад. Спиновая намагниченность обладает характерными для ферромагнетика сильной нелинейностью с насыщением в полях порядка нескольких кЭ, а также петлей гистерезиса. Способность к намагничиванию резко убывает при смещении вглубь изоляторной стороны фазового перехода. Она, однако, сильно возрастает при близкой к половинной степени компенсации Si:P акцепторными примесями. Результаты свидетельствуют о том, что в Si:P в области перехода изолятор–металл при низких температурах триплетное состояние для части пар обменно-связанных спинов (ферромагнитная фаза) оказывается энергетически более выгодным чем синглетное (антиферромагнитная фаза), чему, в значительной степени, способствует умеренная компенсация.

DOI: 10.31857/S123456782211009X, EDN: imdqth

Введение. Основной вклад в магнитную восприимчивость легированного немагнитными мелкими (водородоподобными) примесями полупроводника обычно вносит диамагнитная восприимчивость решетки [1]. Однако, при значительных уровнях легирования на ее фоне начинает проявляться магнитная восприимчивость примесей с парамагнитной (спиновой) χ_s и диамагнитной составляющими. (Диамагнитную примесную восприимчивость удалось измерить сравнительно недавно при достаточно высоких степенях поляризуемости локализованных на примесях электронных волновых функций вблизи концентрационного фазового перехода изолятор–металл (ИМ) [2].) В настоящей работе нас будет интересовать первая из них, которая, например, проявляется в электронном спиновом резонансе (ЭСР), парамагнетизме Кюри и Паули, а также в законе Кюри–Вейсса при переходе от парамагнетизма к ферро- или антиферромагнетизму.

Уже на ранней стадии изучения магнитных свойств такого классического полупроводника, как n -Si, было экспериментально установлено, что при достаточно высоких уровнях легирования – вблизи концентрационного фазового перехода ИМ, наблю-

даются отклонения от закона Кюри [1, 3]. Как было показано теоретически, эти отклонения определяются обменным взаимодействием локализованных спинов [4]. В результате, при низких температурах спины носителей заряда (электронов или дырок) на близких нейтральных примесях ориентируются антипараллельно, подобно тому, как это происходит при образовании молекулы водорода. Возникает антиферромагнитная (АФМ) фаза спинового стекла, в которой концентрация спинов, определяющая амплитуду сигнала ЭСР, оказывается заметно меньше концентрации электронов (нейтральных примесей), измеренной, например, из эффекта Холла, а спиновая восприимчивость следует закону Кюри–Вейсса с отрицательной температурой Вейсса. Подобное поведение наблюдалось в различных легированных водородоподобными примесями полупроводниках n -типа, где работает техника ЭСР: n -Si:P [5], n -Ge:As [6] и даже n -SiC:N [7–9], в котором примеси азота уже заметно отличаются от водородоподобных.

Однако, в отличие от молекулы водорода, спинам ближайших нейтральных доноров не запрещено при определенных условиях объединяться также и в пары с параллельно ориентированными спинами, образуя ферромагнитную (ФМ) фазу спинового стекла [10, 11]. Другими словами, для обменно-связанных в пары спинов, наряду с синглетным состоянием АФМ

¹⁾ E. Lahderanta.

²⁾ e-mail: psemenikhin@mail.ioffe.ru

фазы, в принципе, возможно и триплетное состояние ФМ фазы. Косвенное подтверждение этого впервые было получено при изучении особенностей низкотемпературной теплоемкости Si [12], которые были объяснены на основе локального ФМ упорядочения примесных спинов [13, 14]. Позднее, из обнаружения явления низкотемпературного гистерезиса прыжкового магнетосопротивления умеренно компенсированного дырочного Ge:Ga был сделан вывод о проявлении в нем ФМ свойств вблизи перехода ИМ при температурах ниже 1 К [15]. Предпринятая попытка измерить кривую намагничивания этого материала с помощью СКВИД-магнитометра не увенчалась успехом [2], по-видимому, из-за недостатка чувствительности прибора, поскольку критическая для перехода ИМ в Ge:Ga концентрация Ga невелика и составляет $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Изучение с помощью ЭСР парамагнитной восприимчивости электронного Ge:As, компенсированного введением с помощью нейтронной трансмутации акцепторных примесей Ga [16], показало изменение знака температуры Вейсса с отрицательного на положительный при гелиевых температурах, что позволило предположить изменение характера упорядочения части спаренных примесных спинов с антипараллельного на параллельный и важную роль в этом компенсирующих примесей. Эти предположения были подкреплены качественной моделью [17], предсказывающей увеличение вероятности образования обменно-связанных в пары спинов в триплетном состоянии вследствие эффекта кулоновской блокады донорных состояний, ближайших к компенсирующим (заряженным) акцепторам. Это свойство компенсации было подтверждено расчетом кюри-вейссовского поведения спиновой восприимчивости на основе модели Гайтлера–Лондона [18], который продемонстрировал трансформацию локального АФМ упорядочения в ФМ, а затем переход к парамагнетизму Кюри в Ge:As с ростом степени компенсации. Однако, как показано в [16], на опыте сложно отделить кюри-вейссовское поведение от проявления парамагнетизма Паули вблизи перехода ИМ.

Таким образом, нужны более веские экспериментальные основания, чтобы утверждать, что легированный до близости к фазовому переходу ИМ немагнитными водородоподобными примесями полупроводник, действительно, является одним из объектов для развернувшегося в мире поиска так называемого “d0”-магнетизма (см., например, [19, 20]). Электронный кремний, в котором из-за заметно меньшего борровского радиуса электрона на мелком доноре крити-

ческая для перехода ИМ концентрация доноров примерно в 10 раз больше, чем в Ge, представлялся более перспективным материалом для прямых измерений намагниченности с помощью СКВИД-магнитометра. Исходя из опыта предшествующих исследований Ge, следовало также позаботиться о решении задачи выращивания умеренно компенсированного Si с необходимым уровнем легирования.

Целью работы являлось обнаружение и исследование характерного для ферромагнетизма поведения низкотемпературной спиновой намагниченности в близких к концентрационному фазовому переходу ИМ объемных образцах Si:P, а также выяснение влияния на это поведение близости к точке перехода ИМ и степени компенсации материала. (Об обнаружении ФМ включений 2D электронном газе в кремниевых структурах см., например, [21].)

Образцы и измерения. Напомним, что критическая для перехода ИМ в некомпенсированном Si:P электронная концентрация $n_c = 3.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [22]. Как было установлено на Ge [23], а потом и на Si [24], при умеренных компенсациях ее величина практически не меняется. Это дает представление об уровнях легирования Si:P основной (фосфор) и компенсирующей примесями, которые бы соответствовали нахождению на изоляторной стороне перехода ИМ недалеко от критической точки.

Эксперименты проводились на образцах, вырезанных из трех разных слитков *n*-Si:P, которые отличались концентрациями доноров фосфора N_P , компенсирующих акцепторных примесей бора N_B и, соответственно, степенью компенсации $K = N_B/N_P$: 1) $N_P = 3.0 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.5$; 2) $N_P = 3.3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $K = 0$; 3) $N_P = 1.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $K = 0$. Основные параметры образцов сведены в табл. 1. Слиток 1 Si:P, компенсированный на 50% бором, был специально выращен для целей настоящего исследования в Leibniz Institute for Crystal Growth (Berlin, Germany). Измерения намагниченности M (магнитного момента) проводились в области гелиевых температур с использованием СКВИД магнитометра MPMS XL.

Результаты измерений и их анализ. На рисунке 1а показана зависимость измеренного магнитного момента $M(H)$ от приложенного внешнего поля для образца 1 с концентрацией фосфора $N_P = 3.0 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и степенью компенсации $K = 0.5$ при температуре $T = 5 \text{ К}$. Зависимость $M(H)$ является суперпозицией линейной от поля (решеточной и примесной) диамагнитной составляющей намагниченности $M_{\text{dia}}(H)$ и нелинейной намагниченности примесных спинов $M_s(H)$. Из рисунка 1а видно, что при до-

Таблица 1. Параметры образцов

Параметр	Номер образца		
	1	2	3
Концентрация электронов n , 10^{18} см^{-3}	~ 1.5	3.3	1.3
Концентрация фосфора N_P , 10^{18} см^{-3}	3.0	3.3	1.3
Степень компенсации K	~ 0.5	~ 0	~ 0
Сопротивление R , мОм · см при 300 К	30	12.5	25
Близость к точке перехода ИМ n_c : $(n_c - n)/n_c$	0.59	0,11	0.65
Намагниченность насыщения, M_{sat} , 10^{-4} emu/cm^3	14	6, 5	0.75
Парамагнитная восприимчивость $\chi_s(0) = dM/dH$, 10^{-7}	10	5	0.3–0.5
Остаточная намагниченность M_r , 10^{-4} emu/cm^3	2.8	< 1	–
Коэрцитивная сила, H_c кЭ	0.3	< 0.2	–

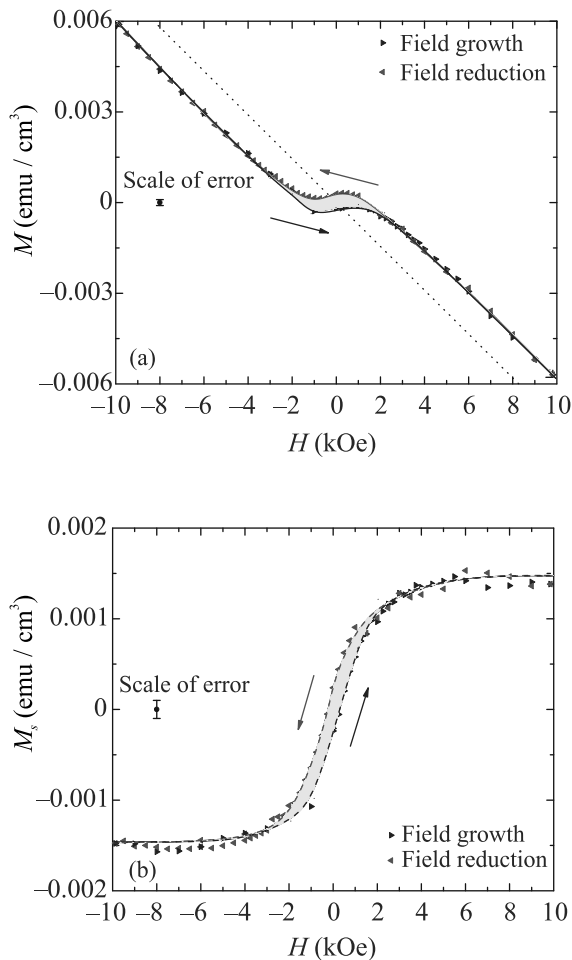


Рис. 1. (Цветной онлайн) Полевая зависимость полной (а) и спиновой (б) намагниченности образца 1 Si:P с концентрацией $N_P = 3.0 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и степенью компенсации $K = 0.5$ при $T = 5 \text{ К}$. Пунктир на рис. 1а изображает линейный ход диамагнитной составляющей M_{dia} . На рис. 1б штрихами показаны кривые намагничивания, стрелками – направление изменения поля

статочно сильных полях $|H| > 6 \text{ кЭ}$ результирующая зависимость $M(H)$ является практически линейной,

угловой коэффициент которой равен его значению для $M_{\text{dia}}(H)$. Для восстановления хода $M_{\text{dia}}(H)$ следует провести через начало координат на рис. 1а прямую, параллельную высокополевым ветвям $M(H)$. Искомое поведение примесной спиновой составляющей магнитного момента $M_s(H)$, определяемое разностью $M(H)$ и $M_{\text{dia}}(H)$, показано на рис. 1б.

Зависимость $M_s(H)$ представляет собой типичную кривую намагничивания слабо ФМ материала [1] с сильно нелинейной магнитной восприимчивостью $\chi_s(H) = dM/dH$ и петлей гистерезиса, наблюдаемой при перемагничивании образца (направление изменения поля на рис. 1 показано стрелками). Максимальная величина магнитной восприимчивости в пределе слабого поля составляет $\chi_s(0) = 10^{-6}$. В полях $|H| \gtrsim 1 \text{ кЭ}$ начинает проявляться эффект насыщения намагниченности M_s , которому соответствует быстрое уменьшение величины $\chi_s(H)$ с полем. При $|H| \geq 6 \text{ кЭ}$ практически достигается спиновая намагниченность насыщения $M_{s,\text{sat}} = 1.4 \cdot 10^{-3} \text{ emu/cm}^3$. Величины $\chi_s(0)$ и $M_{s,\text{sat}}$ являются характеристиками намагничивания и представлены в табл. 1. Петля гистерезиса характеризуется величиной остаточной намагниченности $M_r = 2.8 \cdot 10^{-4} \text{ emu/cm}^3$ и значением коэрцитивной силы $H_c = 300 \text{ Э}$.

Обратимся к результатам исследования образца 2, близкого по уровню легирования к образцу 1, но, в отличие от него, некомпенсированного. Полевые зависимости его полной M и спиновой M_s намагниченности при $T = 3 \text{ К}$ показаны на рис. 2а и б.

Качественно полевые зависимости намагниченности для образца 2 похожи на соответствующие зависимости для образца 1. Однако, несмотря на то, что спиновая плотность в образце 2 вдвое выше, чем в образце 1, проявление его намагниченности (по величинам $\chi_s(0)$ и $M_{s,\text{sat}}$) примерно вдвое слабее, чем у компенсированного образца 1. На фоне разброса экспериментальных точек у образца 2 можно

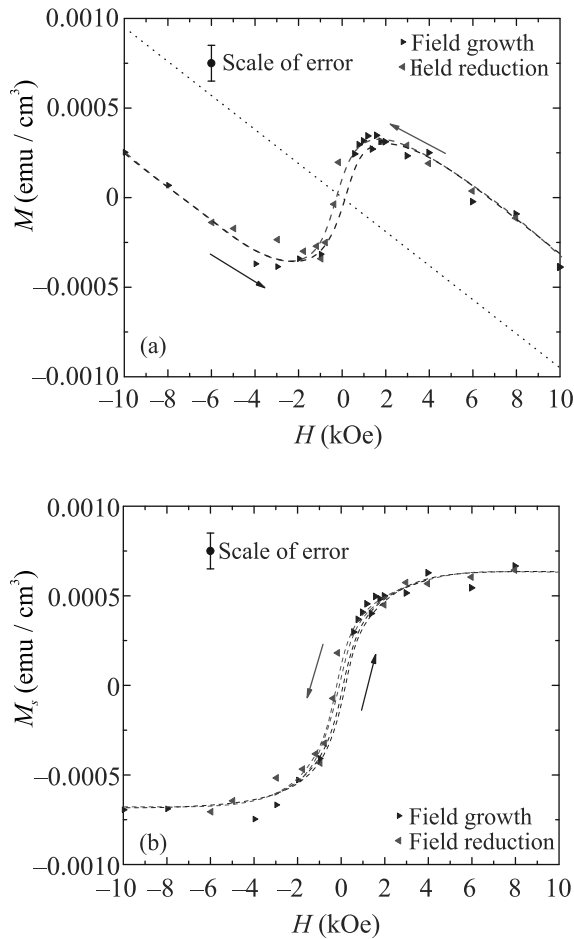


Рис. 2. (Цветной онлайн) Полевая зависимость полной (а) и спиновой (б) намагниченности некомпенсированного образца 2 Si:P с концентрацией $N_P = 3.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при $T = 3 \text{ К}$. Пунктир на рис. 2,а изображает линейный ход M_{dia} . На рисунке 2b штрихами показан возможный ход кривых намагничивания, стрелками – направление изменения поля

лишь оценить параметры петли гистерезиса сверху: $M_r < 10^{-4} \text{ эму/см}^3$ и $H_c < 200 \text{ Э}$.

Для ответа на вопрос о влиянии на эффекты намагничивания близости к критической точке фазового перехода ИМ были выполнены измерения на некомпенсированном образце 3 с уровнем легирования фосфором в 2.5 раза ниже, чем у образца 2. Полевые зависимости полной и спиновой намагниченности для образца 3 показаны на рис. 3а и б. Величина его спиновой намагниченности M_s оказалась весьма малой и практически неразличимой на фоне полной намагниченности M образца на рис. 3а даже при предельном для наших измерений уровне разрешения.

Чтобы попытаться все же выявить ход кривой намагничивания, по аналогии с образцами 1 и 2, из полной намагниченности M вычтем диамагнитный

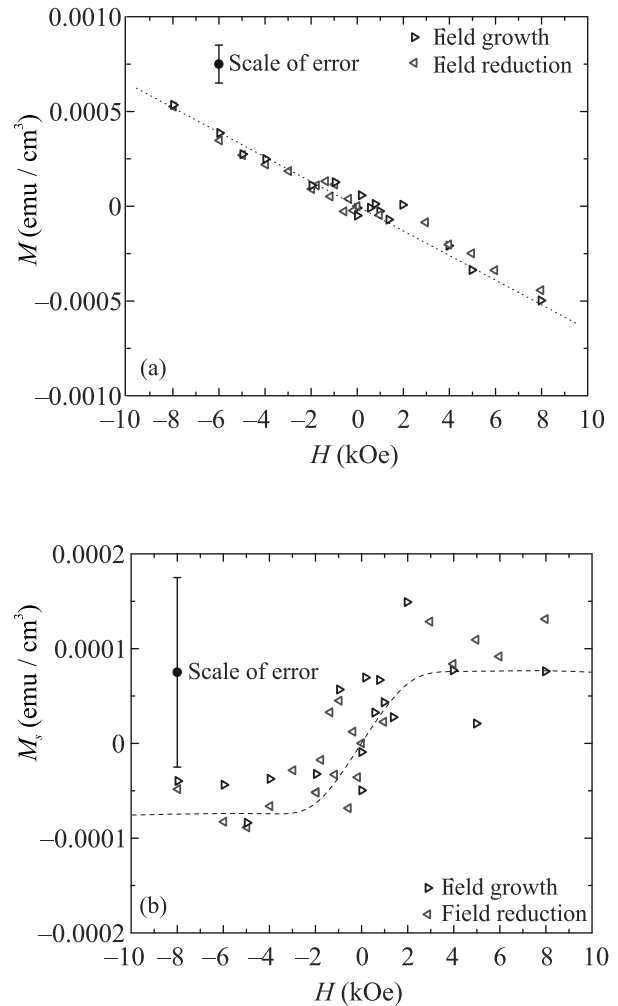


Рис. 3. (Цветной онлайн) Полевая зависимость полной (а) и спиновой (б) намагниченности некомпенсированного образца 3 Si:P с концентрацией фосфора $N_P = 1.3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при $T = 3 \text{ К}$. Пунктиром на рис. 3а показан линейный ход M_{dia} . Штрихи на рис. 3б – кривая намагничивания

вклад M_{dia} и перейдем к анализу поведения спиновой намагниченности M_s . Эта дифференциальная процедура позволяет на фоне большой погрешности измерений на рис. 3б, тем не менее, достаточно отчетливо проследить общий ход кривой намагничивания и грубо оценить ее характеристики (см. табл. 1). Значения $\chi_s(0)$ и M_{sat} у образца 3 оказываются примерно в 7 раз меньше, чем у образца 2. Таким образом, имеет место резкое ослабление спиновой намагниченности некомпенсированного Si:P при уменьшении уровня легирования фосфором и удалении от точки перехода ИМ в сторону изолятора.

Обсуждение результатов. При работе со слабыми сигналами на пределе разрешения СКВИД-магнитометра есть опасность того, что источником

эффекта является микроскопическое количество попавшей в него ФМ “грязи” [25–27]. В этой связи заметим, что в то время, как с образцом 3 мы работали на пределе разрешения СКВИД – магнитометра, для образца 2 и, тем более, для образца 1 сигналы были многократно сильнее. Динамический диапазон изменения магнитной восприимчивости в слабых полях и намагниченности насыщения для образцов 1–3 составил более порядка величины, что не позволяет списать наблюдаемые проявления ферромагнетизма на “грязь”.

Оценим концентрацию спинов мелких примесей n_{fm} , обеспечивающую наблюдаемую намагниченность насыщения M_{sat} . Для близкого к переходу ИМ компенсированного образца 1 с наиболее сильным проявлением ФМ свойств в предположении, что все спины сориентированы по полю, получаем: $n_{fm} = M_{sat}/\beta = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, где $\beta = 9.27 \cdot 10^{-21} \text{ эрг/Гс}$ – магнетон Бора. Полученная величина n_{fm} составляет примерно 14% от концентрации электронов (нейтральных доноров), что представляется вполне реалистичным. В близком к переходу ИМ, но некомпенсированном образце 2, она составляет 2%, а в сдвинутом от перехода ИМ в глубь изоляторной стороны некомпенсированном образце 2 – порядка 1%

Итак, пример Si:P показывает способность полупроводника, легированного мелкими водородоподобными примесями до близости к концентрационному фазовому переходу ИМ, к сильно нелинейному намагничиванию, характерному для слабого ферромагнетизма. Это означает, что в спиновом стекле, наряду с синглетным (АФМ) состоянием части обменно-связанных в пары спинов, другая их часть находится в триплетном (ФМ) состоянии. Кроме этого, оказавшиеся статистически уединенными (не связанными в пары) спины представляют собой изолированные парамагнитные центры. Таким образом, изучаемая спиновая система Si:P вблизи перехода ИМ оказывается трехфазной. Для отождествления сильно нелинейного поведения намагниченности именно с триплетными состояниями обменно-связанных пар, важно, что две других фазы (АФМ и парамагнитная) обладают существенно более слабой полевой зависимостью намагниченности, которой можно с хорошей точностью пренебречь.

Налицо также способность умеренных концентраций компенсирующих примесей в Si:P (отрицательно заряженных в материале n -типа) служить “катализатором” образования ФМ фазы, усиливая в разы эффекты намагничивания. Этот экспериментальный факт согласуется с качественной моделью изменения характера спинового обмена для части пар нейтраль-

ных доноров D^0 от АФМ к ФМ под влиянием умеренной компенсации [17]. Он соответствует также результатам прямого расчета поведения уровней энергий триплетного и синглетного состояний для Ge:As в функции компенсации на основе модели Гайтлера–Лондона [18]. Имеет место пересечение этих уровней в области умеренных компенсаций и, таким образом, переход от АФМ к ФМ фазе, затем – переход к парамагнитной фазе при высоких компенсациях.

Закключение. Поведение низкотемпературной спиновой намагниченности легированного мелкими водородоподобными донорами фосфора Si:P вблизи концентрационного фазового перехода ИМ на его изоляторной стороне представляет собой характерную для слабо ФМ материала кривую намагничивания, которая обусловлена находящимися в триплетном состоянии парами обменно-связанных спинов.

В отсутствие компенсирующих примесей относительная доля триплетной фазы (ФМ образом обменно-связанных спинов) невелика, проявления намагниченности достаточно слабы и быстро исчезают при уменьшении уровня легирования и удалении от точки перехода ИМ в глубину изоляторного состояния.

Умеренная (близкая к половинной) компенсация Si:P в разы увеличивает относительную долю ФМ фазы и макроскопические проявления спиновой намагниченности, в частности, позволяет регистрировать эффект гистерезиса.

Авторы выражают благодарность Н. В. Абросимову из Leibniz Institute for Crystal Growth (Berlin, Germany) за изготовление образцов компенсированного кремния, а также Н. А. Поклонскому из Белорусского государственного университета (Минск, Беларусь) за обсуждение результатов.

1. С. В. Вонсовский, *Магнетизм. Магнитные свойства диа-, пара-, антиферро- и ферримагнетиков*, Наука, М. (1971).
2. А. И. Вейнгер, А. Г. Забродский, Т. Л. Макарова, Т. В. Тиснек, С. И. Голощапов, П. В. Семенихин, *ФТП* **49**, 1339 (2015).
3. E. Sonder and D. K. Stevens, *Phys. Rev.* **110**, 1027 (1958).
4. C. Herring, *Exchange Interactions Among Itinerant Electrons*, Academic Press, N.Y.-London (1966).
5. M. A. Paalanen, S. Sachdev, R. N. Bhatt, and A. R. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 2061 (1986).
6. А. И. Вейнгер, А. Г. Забродский, Т. В. Тиснек, С. И. Голощапов, *ФТП* **41**, 812 (2007).
7. А. И. Вейнгер, А. Г. Забродский, Т. В. Тиснек, Е. Н. Мохов, *ФТП* **37**, 874 (2003).

8. B. Song, H. Bao, H. Li, M. Lei, T. Peng, J. Jian, J. Liu, W. Wang, W. Wang, and X. Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 1376 (2009).
9. Y. Liu, G. Wang, S. Wang, J. Yang, L. Chen, X. Qin, B. Song, B. Wang, and X. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 087205 (2011).
10. D. L. Stein, *Scientific American*, Scientific American, a division of Nature America, Spin Glasses, Springer Nature, Berlin (1989), p. 52.
11. Y. Wang, Y. Liu, G. Wang, W. Anwand, C. A. Jenkins, E. Arenholz, F. Munnik, O. D. Gordan, G. Salvan, D. R. T. Zahn, X. Chen, S. Gemming, M. Helm, and S. Zhou, *Sci. Rep.* **5**, 8999 (2015).
12. A. Kurobe, T. Takemori, and H. Kamimura, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1457 (1984).
13. H. Kamimura, *Impurity Bands, in Crystalline Semiconducting Materials and Devices*, Springer, Berlin (1986), p. 305.
14. M. Lakner and H. V. Lohneysen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 648 (1989).
15. A. G. Andreev, S. V. Egorov, A. G. Zabrodskii, R. V. Parfen'ev, and A. V. Chernyaev, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **34**, 796 (2000).
16. A. I. Veinger, A. G. Zabrodskii, T. L. Makarova, T. V. Tisnek, S. I. Goloshchapov, and P. V. Semenikhin, *JETP* **116**, 796 (2013).
17. A. G. Zabrodskii, A. I. Veinger, and P. V. Semenikhin, *Appl. Magn. Res.* **51**, 327 (2020).
18. N. A. Poklonski, A. N. Dzeraviaha, S. A. Vyrko, A. G. Zabrodskii, A. I. Veinger, and P. V. Semenikhin, *AIP Adv.* **11**, 055016 (2021).
19. K. Yang, R. Wu, L. Shen, Y. P. Feng, Y. Dai, and B. Huang, *Phys. Rev. B* **81**, 125211 (2010).
20. Y. Wang, C. Liu, and Y. Zhang, *J. Semicond.* **38**, 033006-1 (2017).
21. N. Teneh, A. Yu. Kuntsevich, V. M. Pudalov, and M. Reznikov, *Rev. Lett.* **109**, 226403 (1981).
22. T. F. Rosenbaum, K. Andres, G. A. Thomas, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 568 (1981).
23. A. Г. Забродский, *ФТП* **14**, 1492 (1980).
24. U. Thomanshefsky and D. F. Holcomb, *Phys. Rev. B* **45**, 13356 (1992).
25. M. A. Garsia, E. F. Pinel, J. De la Venta, A. Quesada, V. Bouzas, J. F. Fernández, J. J. Romero, M. S. Martin-Gonzalez, and J. L. Costa-Krämer, *J. Appl. Phys.* **105**, 013925 (2009).
26. P. Esquinazi, J. Barzola-Quiquia, D. Spemann, M. Rothermel, H. Ohldag, N. Garcia, A. Setzer, and T. Butz, *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 1156 (2010).
27. Y. Wang, Y. Liu, E. Wendler, R. Hubner, W. Anwand, G. Wang, X. Chen, W. Tong, Z. Yang, F. Munnik, G. Bukalis, X. Chen, S. Gemming, M. Helm, and S. Zhou, *Phys. Rev. B* **92**, 174409 (2015).

Комментарий к статье “Бозе конденсация и спиновая сверхтекучесть магнонов в перпендикулярно намагниченной пленке железо-иттриевого граната” (Письма в ЖЭТФ 112(5), 314 (2020))

С. О. Демокритов^{1),2)}

University Muenster, 48149 Muenster, Germany

Поступила в редакцию 1 апреля 2022 г.

После переработки 22 апреля 2022 г.

Принята к публикации 26 апреля 2022 г.

DOI: 10.31857/S1234567822110106, EDN: imtdtp

В рассматриваемой статье, на мой взгляд, содержатся утверждения, не подкрепленные экспериментальными данными, а также некорректные формулировки.

Перед тем, как рассматривать результаты статьи по существу, хочу напомнить, что Бозе-Эйнштейновская конденсация (БЭК) описывает спонтанное формирование когерентного состояния в системе (квази-)частиц, находящейся в термодинамическом равновесии [1]. Однако, так как в реальных системах, где наблюдается БЭК, полностью равновесное состояние достигнуть невозможно, – в атомных конденсатах это связано с конечным временем жизни атомов при ультранизких температурах, в системах квазичастиц с их конечным временем жизни из-за релаксации в решетку – это определение было расширено на квазиравновесные системы. Тем не менее, даже при расширенном определении, например, лазерное излучение, сформированное за счет создания сильно неравновесной системы с инверсным заполнением, не относится к БЭК.

Таким образом, для подтверждения экспериментального наблюдения БЭК необходимо подтвердить а) когерентность полученного состояния, б) спонтанность обнаруженной когерентности и в) квазиравновесность рассматриваемой системы [2]. Замечу, что вместо того, чтобы демонстрировать выполнение перечисленных критериев, авторы вводят свои критерии, на которых остановимся позже.

В эксперименте на пленку железо-иттриевого граната (ЖИГ), помещенную в перпендикулярное магнитное поле с помощью полосковой линии шириной 0.2 мм подавалось когерентное микроволновое

излучение (накачка) и измерялось поглощение как функция внешнего поля для разных мощностей накачки. Во второй серии экспериментов к однородному внешнему полю добавлялся градиент поля. При этом вторая полосковая линия, расположенная от первой на расстоянии 2 мм, измеряла сигнал, наведенный прецессией намагниченности. В определенных интервалах полей в первом случае наблюдалось поглощение микроволнового излучения, во втором случае детектировался наведенный сигнал. Эти результаты рассматриваются как доказательство формирования магнонного БЭК. Показано ли экспериментально, что критерии БЭК выполнены?

а) Когерентность: в статье нет данных по степени когерентности полученного состояния. Более того, первая серия экспериментов, где измерялась поглощенная мощность, не может дать информацию о степени когерентности состояния. Спектральный анализ сигнала наведенной прецессии намагниченности в принципе мог бы дать необходимую информацию. Однако эти данные в статье отсутствуют. Таким образом, можем заключить, что когерентность полученного состояния в статье не продемонстрирована.

б) Спонтанность: в случае атомного конденсата вопрос спонтанности не стоит, так как конденсат создается за счет охлаждения облака “некогерентных” атомов. В случае квазичастиц (особенно магнонов) ситуация более сложная, так как в систему инжектируются первичные магноны. Нужно быть уверенным, что первичные магноны не привнесут в систему внешнюю когерентность, связанную, например, с когерентной накачкой. В классических экспериментах по магнонной БЭК [3–5] эта проблема решалась за счет того, что первичные магноны накачивались на одной частоте, а формирование конденсата наблюдалось на другой частоте, сильно отличаю-

¹⁾S.O. Demokritov.

²⁾e-mail: demokrit@uni-muenster.de

щейся от частоты первичных магновов. Более того, изучался процесс термализации первичных магновов [5] и было показано, что термализация происходит путем многократных неупругих столкновений, которые заведомо нарушают любую внешнюю когерентность. И, чтобы отвести последние сомнения, первичные магновы инжектировались не посредством FMR, который создает когерентные первичные магновы с фазой, определяемой фазой накачки, а с помощью параметрической накачки, так как хорошо известно [6], что в результате этого процесса инжектируются пары магновов с произвольными фазами каждого магнона в паре. В рассматриваемой статье магновы инжектировались с помощью FMR. Чтобы лучше проанализировать данные, приведенные на рис. 2 рассматриваемой статьи, рассмотрим дисперсионный спектр, $f(k)$ спиновых волн в используемой геометрии, показанный на рис. 1 сплошной ли-

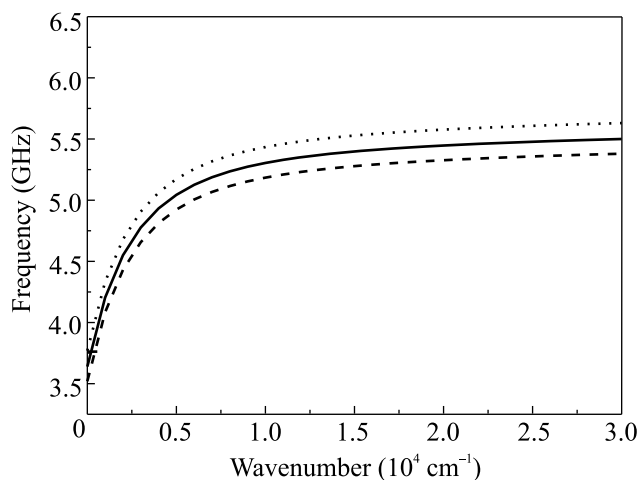


Рис. 1. Сплошная линия: дисперсионный спектр малоамплитудных спиновых волн в пленке ЖИГ (намагниченность $4\pi M = 1.75$ кГс) толщиной 6 мкм во внешнем поле 3.05 кЭ. Частота FMR 3.65 ГГц. Пунктирная линия: то же самое при большой амплитуде прецессии, приводящей к уменьшению статической намагниченности до $4\pi M = 1.71$ кГс. Частота FMR 3.75 ГГц. Штриховая линия: то же самое, что и сплошная линия, но в поле 3.00 кЭ. Горизонтальная полочка иллюстрирует частоту накачки 3.70 ГГц. Видно, что увеличение амплитуды прецессии сдвигает спектр в большие частоты, а уменьшение поля в меньшие частоты

нией. Спектр посчитан для условий (толщина пленки, величина намагниченности, внешнее поле), близких к условиям описанных экспериментов с частотой накачки 3.7 ГГц. Очевидно, что микроволновое поле полосковой линии возбуждает магновы, соответствующие волновому числу $k = 0$ (или малым k

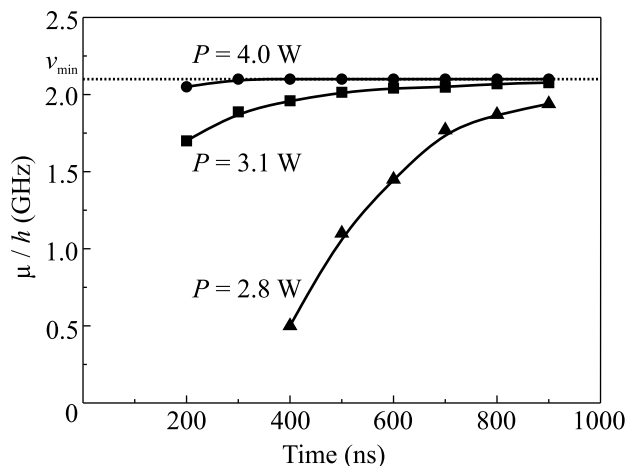


Рис. 2. Из [4]. Изменение химического потенциала газа магновов в пленке ЖИГ толщиной 6 мкм со временем после включения накачки с разной мощностью

в непосредственной близости от нуля из-за конечной ширины полосковой линии). При сканировании поля вниз при малых мощностях поглощение наблюдается в узком интервале полей, определяемом естественной шириной линии FMR и шириной области доступных для возбуждения волновых чисел. Однако при большей мощности накачки прецессия с большой амплитудой приводит к уменьшению статической намагниченности и, как правильно объяснено в рассматриваемой статье, нелинейному увеличению частоты (пунктирная линия на рис. 1), что обеспечивает выполнение резонансных условий при уменьшении внешнего поля. Таким образом резонансная кривая “затягивается” в сторону малых полей. И чем больше амплитуда прецессии, тем больше это затягивание. Отметим, однако, что независимо от мощности накачки и приложенного поля частота инжектированных магновов определяется частотой накачки, которая близка к частоте FMR. Поскольку в рассматриваемой геометрии эта частота соответствует минимуму спектра ($f(k)$ есть монотонная функция), она и должна являться точкой конденсации. Таким образом, в этих экспериментах накачка инжектирует когерентные первичные магновы с частотой, совпадающей или очень близкой к частоте возможного конденсата. Поэтому говорить о спонтанности полученного когерентного состояния не приходится. В статье этот вопрос даже не рассматривается.

в) Квазиравновесность: так как первичные магновы инжектируются с частотой, совпадающей или очень близкой к частоте минимума спектра, их термализация, т.е. перераспределение по существенной части магнонного спектра сильно затруднена. Дей-

ствительно, все остальные магны имеют большую частоту, поэтому такой эффективный механизм магнон-магнонного взаимодействия, как обменное четырех-магнонное рассеяние, запрещен законом сохранения энергии. Более того, слабое релятивистское трех-магнонное слияние двух магнов в один магнон большей частоты запрещено законом сохранения импульса. Приходится отмечать, что авторы статьи даже не обсуждают эту проблему.

Таким образом, выполнение общепризнанных критериев БЭК экспериментально не подтверждено. Вместо этого авторы вводят собственные критерии БЭК и делаются некорректные утверждения. Например, читаем на с. 315: “Важное наблюдение заключается в том, что мощность, поглощаемая образцом, не зависит от мощности, подаваемой на полосок. Это ...полностью соответствует свойствам магнонного БЭК” и далее на с. 315–316: “состояние мБЭК полностью определяется его химическим потенциалом, который зависит от частоты накачки, но не от ее амплитуды”. Эти утверждения противоречат физической картине формирования БЭК в системе квазичастиц. Химический потенциал и температура определяют свойства неконденсированных магнов: при нулевой мощности накачки, в равновесном состоянии химический потенциал газа магнов равен нулю. Для повышения химического потенциала и нужна накачка: чем мощнее накачка, тем больше дополнительных магнов внесено в систему, тем больше химический потенциал. Рисунок 2, взятый из [4], иллюстрирует этот факт: показан химический потенциал газа магнов в ЖИГе как функция времени после включения накачки для разных мощностей накачки. Очевидно, что при малой мощности (2.8 Вт) рост химического потенциала медленный, в то время как при большой мощности (4.0 Вт) химический потенциал быстро достигает своего критического значения, при котором начинается БЭК. Хотя при этом, как правильно отмечено в рассматриваемой статье, достигается критическая плотность дополнительно инжектированных магнов, утверждение, что “состояние мБЭК полностью определяется его химическим потенциалом” ошибочно. Действительно, после достижения критической величины химический потенциал не меняется. Однако, это только означает, что не меняется плотность неконденсированных магнов, в то время как при дальнейшем увеличении числа инжектированных магнов все эти магны (или их большая часть, если учитывать конечное время жизни магнов) добавляются к конденсату [1]. Поэтому наблюдаемый эффект насыщения поглощаемой мощности

при увеличении мощности накачки никоим образом не может быть критерием конденсации.

Также утверждается, что “... свойством мБЭК является то, что он должен заполнять все пространство, в котором эффективное магнитное поле меньше, чем соответствующая частота накачки” (с. 316). Действительно, если эффективное магнитное поле, определяющее частоту конденсата, меньше частоты накачки (отмеченной на рис. 1 горизонтальной полочкой), то спектр спиновых волн соответствует штриховой линии на рис. 1. При этом, как видно из этого рисунка, инжектируются магны с ненулевым волновым числом и, соответственно, ненулевой групповой скоростью. Такие магны, независимо от того, формируют они конденсат или нет, распространяются за пределы области накачки.

Особое внимание хочется уделить утверждению об обнаружении сверхтекучего движения магнов. В статье не дается подтверждения сверхтекучести движения и даже не указаны использованные критерии сверхтекучести. Вместо этого вывод основывается на аналогии со сверхтекучим He^3 . Эта аналогия представляется весьма сомнительной. Действительно, причиной сверхтекучего спинового тока в He^3 является сверхтекучий перенос массы, который, естественно, запрещен в твердом ЖИГе.

В целом, ситуация со сверхтекучестью в магнонном БЭГе в ЖИГе остается довольно противоречивой. Очевидно, что сверхтекучести в понимании бездиссипативного движения наблюдаться не должно, так как даже покоящийся конденсат с постоянной плотностью требует для своего поддержания внешний поток энергии и углового момента из-за конечного времени жизни магнов. Надо отметить, однако, что в [7] при описании затекания БЭК в потенциальную яму с помощью простой модели, основанной на модифицированном уравнении Гросса–Питаевского, было обнаружено, что характерное время, описывающее релаксацию линейного импульса конденсата почти на два порядка больше, чем собственное время жизни магна. Это обстоятельство можно рассматривать как косвенный индикатор сверхтекучести. Однако нельзя исключить, что полученный результат связан с несовершенством теоретической модели. И наконец, попытки определить сверхтекучий ток без привязки к диссипации, а как поток магнов, не вызванный градиентом магнонной плотности, а вызванный градиентом фазы спиновой волны, не приводят к интересным последствиям, так как такие потоки наблюдаются в магнонных пучках и без БЭК.

Суммируя все вышесказанное, считаю, что предложенные в статье критерии образования конденса-

та таковыми не являются, а признанные критерии конденсации не проверены, а, значит, что утверждение об обнаружении магнонного БЭК и магнонной сверхтекучести, сделанные в статье, не подтверждены экспериментальными данными.

1. A. Einstein, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., Phys. Math. Kl.* **1**, 3 (1925).
2. D. Snoke, *Nature (London)* **443**, 403 (2006).
3. S. O. Demokritov, V. E. Demidov, O. Dzyapko, G. A. Melkov, A. A. Serga, B. Hillebrands, and A. N. Slavin, *Nature (London)* **443**, 430 (2006).
4. O. Dzyapko, V. E. Demidov, S. O. Demokritov, G. A. Melkov, and A. N. Slavin, *J. Appl. Phys.* **101**, 09C103 (2007).
5. V. E. Demidov, O. Dzyapko, S. O. Demokritov, G. A. Melkov, and A. N. Slavin, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 037205 (2007).
6. A. G. Gurevich and G. A. Melkov, *Magnetization Oscillations and Waves*, CRC, N.Y. (1996).
7. I. V. Borisenko, B. Divinskiy, V. E. Demidov, G. Li, T. Nattermann, V. L. Pokrovsky, and S. O. Demokritov, *Nat. Commun.* **11**, 1691 (2020).

Ответ на комментарий к статье “Бозе-конденсация и спиновая сверхтекучесть магнонов в перпендикулярно намагниченной пленке железо-иттриевого граната” (Письма в ЖЭТФ 112(5), 314 (2020))

Ю. М. Буньков¹⁾

Российский Квантовый Центр, 143025 Сколково, Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 апреля 2022 г.

После переработки 22 апреля 2022 г.

Принята к публикации 26 апреля 2022 г.

Единство законов физики позволяет применять единый подход к различным физическим системам. Бозе-конденсация магнонов (мБЭК) и связанное с этим явление магнонной сверхтекучести было открыто почти 40 лет тому назад в антиферромагнитном сверхтекучем ^3He . Затем явление БЭК было обнаружено в ряде других систем – в газе ультрахолодных атомов, в газе экситон-поляритонов и т.д. Магнонный БЭК был в дальнейшем обнаружен в антиферромагнетиках со связанной ядерно-электронной прецессией и в пленках железо-иттриевого граната (ЖИГ). Причем в пленках свойства магнонного БЭК принципиально различны при ориентации магнитного поля, вдоль или поперек плоскости пленки. В этой краткой статье мы осветим основные свойства мБЭК, и в частности, различие между “классическим” мБЭК для магнонов с $\mathbf{k} = 0$ и “экзотическим” мБЭК для магнонов с ненулевым импульсом.

DOI: 10.31857/S1234567822110118, EDN: imenhq

Эта статья является ответом на критические замечания [1] по поводу результатов эксперимента в пленке железо-иттриевого граната (ЖИГ), намагниченной перпендикулярно [2], в котором было продемонстрировано пространственное распространение когерентных магнонов за пределы области их возбуждения. В статье [2] речь идет об одном конкретном эксперименте. Для понимания результатов этого эксперимента, является императивом изучение всего комплекса проведенных ранее исследований магнонного БЭК, ссылки на которые даны в статье.

Бозе-конденсация магнонов и связанное с этим явление магнонной сверхтекучести было открыто почти 40 лет тому назад в антиферромагнитном сверхтекучем ^3He [3]. Именно они и проливают свет на данное явление. Сверхтекучий антиферромагнитный ^3He является уникальной системой, в которой можно изучать многие закономерности квантовой теории поля и квантовых возбуждений. В ней удастся исследовать и моделировать различные другие физические системы. Ее можно рассматривать как квантовый вакуум основного состояния и набор различных квазичастиц – фермионов (квазичастицы), бозонов (магнонов и фононов, а также частиц майорано) и т. д. [4, 5]. Кроме того, в нем можно наблюдать

точечные, одномерные и двумерные топологические дефекты, а также различные квантовые поля [6]. В частности, в ^3He были проведены уникальные эксперименты, подтверждающие образование космических струн после Большого взрыва [7].

При переходе ^3He в сверхтекучее состояние, помимо нарушения калибровочной симметрии, происходит независимое нарушение спиновой и орбитальной симметрии с образованием антиферромагнитного жидкого кристалла. Именно комбинация сразу трех нарушений симметрии и делает ^3He уникальной системой для фундаментальных исследований. С точки зрения магнитных свойств уникальность ^3He заключается в том, что время жизни магнонов является рекордно большим. Величина затухания Гильберта может составлять 10^{-8} . Благодаря столь малому затуханию и удалось наблюдать экспериментально Бозе-конденсацию магнонов, при которой ширина резонансной линии сужалась в 1000 раз [8–10]. В этих экспериментах радиочастотный импульс возбуждал магноны с волновым вектором \mathbf{k} , близким к нулю и энергетическому минимуму спектра магнонов. Однако, несмотря на когерентность возбуждения, образующиеся магноны имели разброс частот за счет неоднородности магнитного поля. В демонстрационном эксперименте, проведенном в градиенте магнитного поля, ширина линии ядерного маг-

¹⁾e-mail: y.bunkov@rqc.ru

нитного резонанса (ЯМР) составляла 500 Гц и сигнал индукции спадал за время около 2 мс [11]. После возбуждающего импульса сигнал индукции полностью пропадал за счет расфазировки магнонов. Однако через 10 мс когерентность магнонов спонтанно восстанавливалась и спектральная ширина линии уменьшалась до 0.5 Гц! Именно спонтанное восстановление когерентности прямо демонстрирует Бозе-конденсацию магнонов.

В экспериментах с антиферромагнитным $^3\text{He-V}$ были обнаружены все сверхтекучие свойства магнонного Бозе-конденсата, такие как эффект Джозефсона и переход в режим сброса фазы, измерена критическая скорость Ландау, обнаружено образование квантовых вихрей, получены Голдстоуновские моды колебаний (второй звук) и т. д. Описание этих эффектов можно найти в книге [12] и в статьях автора. Следует отметить, что комплексное исследование магнонного БЭК и магнонной сверхтекучести в ^3He получило широкое международное признание.

Некоторые исследователи задаются вопросом, применимы ли результаты экспериментов по мБЭК в антиферромагнитном ^3He к другим магнитоупорядоченным веществам. На этот вопрос следует ответить весьма положительно. Конечно, при этом следует исходить из модели Хольштейна–Примакова, а не квазиклассической теории прецессии макроспинов, которая, конечно, не применима для описания квантовых явлений. В одной из интерпретаций магнонной сверхтекучести в ^3He была применена модель противотока сверхтекучих жидкостей с противоположной намагниченностью. Однако для явления магнонной сверхтекучести достаточно существование пространственной подвижности магнонов. При этом возникает как нормальный поток магнонов при градиенте химического потенциала, так и сверхтекучий поток при градиенте фазы волновой функции Бозе-конденсата. При этом релаксация плотности магнонов не имеет значения для данной классификации.

Фундаментальным вопросом для образования Бозе-конденсата является знак взаимодействия между квазичастицами. В случае магнонов в $^3\text{He-V}$ магноны отталкиваются. Это приводит к увеличению частоты прецессии при увеличении плотности магнонов и устойчивости магнонного БЭК. Напротив, в $^3\text{He-A}$ магноны притягиваются, что приводит к неустойчивости однородной прецессии [13].

В настоящее время большой интерес прикован к экспериментам по магнонной Бозе-конденсации в пленках ЖИГ, в которых это явление можно наблюдать даже при комнатной температуре. В зависимости от направления магнитного поля вдоль или попе-

рек поверхности пленки знак взаимодействия магнонов меняется. Так, в случае намагничивания по нормали магноны отталкиваются, как и в $^3\text{He-V}$. При этом минимум энергии соответствует стоячим магнонам с $\mathbf{k} = 0$. Поэтому образуется устойчивое состояние магнонного Бозе-конденсата [14]. Напротив, при тангенциальной намагниченности пленки ЖИГ магноны притягиваются, что делает неустойчивой однородную прецессию с $\mathbf{k} = 0$. Однако в этих условиях возникает нетривиальный спектр магнонов, минимум энергии которых соответствует магнонам, бегущим вдоль поля и имеющим волновой вектор \mathbf{k} около 10^5 см^{-1} . Другими словами, в этой системе магноны имеют импульс, что кардинально отличает ее от классических систем с атомарным БЭК и с БЭК магнонов в $^3\text{He-V}$. Именно в этих условиях были обнаружены эффекты, которые можно трактовать как образование магнонного БЭК для магнонов с ненулевым волновым вектором, начиная с работы [15]. Наиболее доказательной демонстрацией образования БЭК бегущих магнонов являются результаты эксперимента, опубликованные в [16]. Можно назвать такой мБЭК экзотическим. Часть замечаний автора комментария [1] обусловлена именно тем, что его работы связаны с этим экзотическим мБЭК, а не с классическим, о котором идет речь в [2].

Рассмотрим основные различия между этими двумя типами мБЭК а также между мБЭК, в ^3He и в ЖИГ. Во-первых, возникает вопрос о концентрации магнонов, необходимой для образования классического мБЭК. В антиферромагнитном ^3He магнонная Бозе-конденсация наступает при достаточно малой концентрации магнонов [3], в то время, как в ЖИГ, при комнатной температуре, их концентрация должна быть доведена до уровня, соответствующего отклонению прецессирующей намагниченности (в классической интерпретации) на угол порядка 2.5 градусов [17]. Другое различие заключается в том, что наиболее совершенные образцы ЖИГ характеризуются константой затухания Гильберта не лучше, чем 10^{-5} , что на три порядка хуже, чем в ^3He . Однако и при этих условиях удается наблюдать эффекты, связанные с мБЭК и магнонной сверхтекучестью. В частности, в [2] опубликованы результаты по переносу мБЭК из области возбуждения магнонов. Этот эксперимент аналогичен эксперименту в $^3\text{He-V}$, опубликованному в [18].

Одно из замечаний автора комментария [1] заключается в том, что спиновые волны также могут переносить магноны из области возбуждения в область расположения антенны. Однако в нашем случае антенной служит полосковая линия шириной 0.2 мм, которая чувствительна только к прецессии с

малым волновым вектором. При этом следует учитывать, что частота однородной прецессии увеличивается с увеличением плотности магнонов. В условиях прохождения магнонов в область антенны этот динамический сдвиг частоты за счет взаимодействия магнонов в точности равен изменению частоты прецессии из-за градиента магнитного поля между полюсовыми линиями.

Другое замечание связано с рассмотрением перегрева магнонной системы в процессе накачки магнонов. Действительно, в случае экзотического мБЭК магноны возбуждаются параметрической накачкой на частоте, существенно выше энергии конденсата. Поэтому наблюдение мБЭК возможно только через некоторое время после выключения накачки и термализации облака магнонов [16]. В случае классической Бозе-конденсации в эксперименте [2] энергия магнонов равна частоте возбуждающих фотонов. При этом возникает гибридное состояние магнонов и радиочастотных фотонов в резонаторе. В непрерывном режиме радиочастотные фотоны резонатора возбуждают магноны именно с той фазой и на той частоте, которые соответствуют образовавшемуся магнонному Бозе-конденсату [19]. Этот процесс является квазиравновесным, в силу квантового принципа когерентного рождения новых магнонов в состоянии существующего Бозе-конденсата. В результате магнонный конденсат не перегревается, что было продемонстрировано в экспериментах с ^3He , теплоемкость которого при сверхнизких температурах чрезвычайно мала. мБЭК не перегревался даже при отклонении намагниченности на угол более 120° .

Ну и наконец последнее замечание: “при дальнейшем увеличении (мощности) все магноны добавляются к конденсату” относится к параметрическому возбуждению, с которым автор комментария обычно работает, но не к резонансному возбуждению мБЭК фотонами. Как было показано в классических работах по магнонному БЭК, фазы магнонного БЭК и фотонов в резонаторе отличаются на величину, которая определяется равновесием между возбуждением магнонов и их испарением. Поэтому разность фаз автоматически устанавливается так, что число возбуждаемых магнонов равно числу испарившихся (см. [20], рис. 6, а также [14]). Поэтому даже при увеличении мощности накачки плотность магнонов в мБЭК не меняется.

В заключение хочу согласиться, что ситуация с образованием и свойствами экзотического мБЭК действительно весьма противоречива. В частности, возникает законный вопрос об образовании мБЭК в условиях притяжения магнонов. Однако свойства классического мБЭК для магнонов с $\mathbf{k} = 0$, резуль-

таты исследования которого опубликованы в статье [2], лишены этих проблем. Суммируя все вышесказанное, считаю, что замечания в комментарии [1] сделаны без учета отличий классического мБЭК от экзотического.

Эта работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда (проект # 22-12-00322).

1. С. О. Демокритов, Письма в ЖЭТФ **115**(11) (2022).
2. П. М. Ветошко, Г. А. Князев, А. Н. Кузмичев, А. А. Холин, В. И. Белотелов, Ю. М. Буньков, Письма в ЖЭТФ **112**, 313 (2020).
3. G. E. Volovik, J. Low Temp. Phys. **153**, 266 (2008).
4. Yu. M. Bunkov, Philos. Trans. R. Soc. A **366**, 2821 (2008).
5. Yu. M. Bunkov and R. R. Gazizulin, Sci. Rep. **10**, 20120 (2020).
6. G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Oxford University Press, Oxford (2003).
7. C. Bäuerle, Yu. M. Bunkov, S. N. Fisher, H. Godfrin, and G. R. Pickett, Nature **382**, 332 (1996).
8. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskii, JETP Lett. **40**, 1033 (1984).
9. Yu. M. Bunkov, S. N. Fisher, A. M. Guenault, and G. R. Pickett, Phys. Rev. Lett. **69**, 3092 (1992).
10. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, Phys. Rev. Lett. **98**, 265302 (2007).
11. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 164210 (2010).
12. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, *Spin superfluidity and magnon BEC*, in *Novel Superfluids*, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Oxford University press, Oxford (2013).
13. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskiy, JETP Lett. **39**, 469 (1984).
14. Yu. M. Bunkov, A. N. Kuzmichev, T. R. Safin, P. M. Vetoshko, V. I. Belotelov, and M. S. Tagirov, Sci. Rep. **11**, 7673 (2021).
15. G. A. Melkov, V. L. Safonov, A. Yu. Taranenko, and S. V. Sholom, J. Magn. Magn. Mater. **132**, 180 (1994).
16. D. A. Bozhko, P. Clausen, A. V. Chumak, Yu. V. Kobljanskyj, B. Hillebrands, and A. A. Serga, Low Temp. Phys. **41**, 1024 (2015).
17. Yu. M. Bunkov and V. L. Safonov, Journal MMM **452**, 30 (2018).
18. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, Phys. Rev. Lett. **62**, 1631 (1989).
19. R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics (1963)*, *The New Millennium edition*, <https://www.feynmanlectures.caltech.edu/>.
20. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskii, E. V. Poddyakova, and O. D. Timofeevskaya, Sov. Phys. JETP **69**, 542 (1989).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 115

Выпуск 12

25 июня 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

© Российская академия наук, 2022

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

Модификация регуляризационного SVD-метода обратной свертки

Ю. В. Богомолов^{+*1)}, В. В. Алексеев⁺, О. А. Леванова⁺, А. Г. Майоров^{*}, В. В. Малахов^{*}, С. Г. Язынин⁺

⁺ Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова, 150003 Ярославль, Россия

^{*} Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 апреля 2022 г.

После переработки 3 мая 2022 г.

Принята к публикации 4 мая 2022 г.

Обратная свертка (unfolding) сегодня является важным этапом обработки экспериментальных данных, позволяя снижать влияние погрешностей и восстанавливать приближенные к истинным распределения измеряемых физических величин. В настоящее время для решения этой задачи разработано много подходов, в том числе широко используемых в современной физике атомного ядра и элементарных частиц, космофизике и других смежных научных направлениях. Однако многие применяемые алгоритмы не предназначены или плохо адаптированы для восстановления многомерных распределений, когда, например, измеряются сразу несколько характеристик частиц. В работе предложен способ адаптации SVD-алгоритма обратной свертки на многомерный случай. Для проверки построенный модифицированный метод применен к данным моделирования спектра космических лучей, измеряемого в космофизическом эксперименте PAMELA. Метод не только позволил решить задачу восстановления оценки истинного распределения многомерной величины (импульс и два угла, определяющих направление входа частицы в прибор), но и показал лучший результат в сравнении с классическим SVD-подходом в одномерном случае (только импульс частицы).

DOI: 10.31857/S1234567822120011, EDN: imfewl

1. Введение. Экспериментальные возможности определения любой физической величины ограничены характеристиками используемой научной аппаратуры, и по этой причине получаемые непосредственно при измерениях распределения принято называть приборными. Однако интерес для анализа и физических выводов представляют истинные распределения физических величин или, по крайней мере, их оценки. Отличия приборных и истинных спектров могут быть связаны с конечными энергетическим, угловым или пространственным разрешениями приборов, наличием шумов и других источников ложных или искаженных сигналов в научной аппаратуре. Знание подобных инструментальных эффектов и возможность их воспроизведения в математической модели прибора позволяют строить качественные оценки истинных распределений с использованием специального математического подхода, в котором формулируется так называемая задача обратной свертки или анфолдинга (от англоязычного термина “unfolding”) [1–3]. Подробные обзоры методов решения этой задачи приведены, например, в работах [4–8].

Для построения статистических оценок, полученных в измерениях распределений изучаемых вели-

чин, используются разные способы, которые можно условно разделить на две большие группы:

- гистограммные, где диапазон изменения физической величины разделяется на дискретные интервалы (бины);
- безбиновые, не требующие такого разбиения.

В статье будут рассматриваться методы обратной свертки, применяемые к гистограммным способам представления измерений, поскольку именно они широко применяются в различных областях современной экспериментальной физики, в том числе в экспериментах по физике частиц и космофизике, например, в [9–12].

В гистограммном подходе при восстановлении распределений множество значений непрерывной физической величины (или окрестность около искомого значения дискретной величины) разбивается на интервалы. При этом описание измерительных искажений сводится к определению вероятностей регистрации случайной величины в различных бинах при условии, что истинное значение величины попадает в свой бин. Эти вероятности образуют так называемую матрицу миграций [1, 2]. Искажение распределения, возникающее при измерении, предполагает свертку истинного распределения с этой

¹⁾e-mail: yuribogomolov@gmail.com

матрицей. Тогда оценка истинного распределения определяется путем свертки измеренного распределения с обратной матрицей миграции. Однако такая оценка оказывается неустойчивой [3, 13, 14], что приводит к необходимости выбора других подходов.

Некоторые методы обратной свертки позволяют не только учитывать информацию о характере искажений, но также использовать априорные предположения об особенностях восстанавливаемого распределения физической величины (например, непрерывность или гладкость) [15]. На этой идее основаны так называемые регуляризационные алгоритмы [3, 5, 16], широко применяемые для корректировки одномерных распределений в современных экспериментах [4, 17–20].

Однако рассматриваемая физическая величина в общем виде может являться многомерной, например, ее компонентами может быть набор характеристик элементарной частицы (энергия, масса, направление движения и др.). В этом случае адаптация методов обратной свертки затруднительна, и такая задача сегодня остается открытой, а для некоторых алгоритмов не решенной. В представленной статье предлагается подход, позволяющий перенести хорошо зарекомендовавшие себя алгоритмы обратной свертки, применяемые в одномерном анализе, на случай многомерного распределения. Также приводится его проверка с использованием данных моделирования регистрации космических лучей космофизической аппаратурой PAMELA [21], рассматривая три характеристики частицы – магнитную жесткость, полярный и азимутальный углы входа в прибор.

2. Постановка задачи и обзор методов ее решения в одномерном случае. Пусть в ходе эксперимента наблюдаются N частиц, характеристики которых измеряются с помощью соответствующей аппаратуры (факт детектирования частицы прибором будем называть событием). Разобьем множество истинных значений величины на n ячеек (многомерных бинов) $(\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_n)$, где $\Delta_i \subset \mathbb{R}^k$. Дискретизацией истинного распределения физической величины является набор вероятностей попадания характеристик частицы в соответствующие бины: $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$. Также истинным распределением будем называть математические ожидания количества частиц в этих бинах: $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n)$, где $\tau_i = Np_i$. Множество измеренных значений величины также разбиваем на интервалы $(\Delta'_1, \Delta'_2, \dots, \Delta'_{n'})$, где $\Delta'_i \subset \mathbb{R}^k$ (зачастую для истинных и измеренных значений используется одно и то же разбиение на бины, однако в общем виде такие разбиения могут различаться). Количество частиц, по итогам экспе-

римента, детектированных аппаратурой в выделенных ячейках, обозначим как $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_{n'})$ и будем называть измеренным многомерным спектром.

Искажения, обусловленные конечным разрешением аппаратуры, шумами или другими приборными эффектами, описываются матрицей миграций R , где элемент R_{ij} – вероятность того, что истинное значение величины из j -й ячейки будет детектировано как попавшее в i -ю ячейку. Тогда математические ожидания $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_{n'})$ количества событий, детектированных в рассматриваемых ячейках, вычисляются следующим образом: $\boldsymbol{\nu} = R\boldsymbol{\tau}$.

Основной задачей является разработка методов состоятельной статистической оценки неизвестных \mathbf{p} или пропорциональных им математических ожиданий $\boldsymbol{\tau}$ по известному измеренному спектру \mathbf{m} . Такая задача носит название обратной свертки (также используются термины деконволюция и unfolding). Важный прикладной интерес представляют задачи сравнительного анализа методов обратной свертки: как сопоставления методов между собой, так и сравнения оценок истинного распределения, полученные для разных реализаций одного метода (для различных параметров алгоритма, способов выделения бинов и особенностей матрицы миграций) [16, 22].

Естественные допущения позволяют считать последовательность зарегистрированных событий в каждом из бинов пуассоновским потоком [2], что дает возможность построить статистическую оценку истинного количества событий в рассматриваемых бинах с помощью метода максимального правдоподобия. Решением соответствующей задачи является оценка $\hat{\boldsymbol{\tau}} = R^{-1}\mathbf{m}$ [3, 23], что также соответствует “наивному” оцениванию истинного распределения (считать, что $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{m}$, и решать систему уравнений $R\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$, инвертируя матрицу миграций). Такая оценка истинного распределения является состоятельной, несмещенной и имеющей наименьшую дисперсию среди всех несмещенных оценок [3, 24]. Тем не менее, ее дисперсия зачастую является достаточно высокой, а оценка оказывается неустойчивой (чувствительной к возмущениям измеренного распределения), что делает затруднительным ее использование на практике [3, 13, 14, 23].

Это требует искать другие пути построения оценки, в том числе основанные на искусственном введении смещения. На практике особо выделяются такие два подхода [25].

1. Итеративные методы, в которых последовательно производится уточнение статистической оценки истинного распределения, с

ранней остановкой итеративного процесса. На этой идее основаны байесовский алгоритм д'Агостини [26] и некоторые его модификации, а также ряд других итеративных процедур [27].

2. Минимизация функции правдоподобия с введенным “штрафным” слагаемым (идея регуляризации). Такой подход применяется в SVD-методе [28], использующем регуляризацию Тихонова, алгоритме TUnfold [16, 29] и некоторых других методах [30].

Программные реализации метода д'Агостини, SVD-метода и алгоритма TUnfold включены в библиотеки пакета программ ROOT [31], применяемого в экспериментальных задачах физики высоких энергий, а также связанного с ним пакета RooUnfold [32], предназначенного для решения задачи обратной свертки. Также авторы методов восстановления спектра используют собственные программные разработки, содержащие реализации конкретных алгоритмов решения задачи [33–37].

Регуляризационный подход привлекателен возможностью использовать для построения оценок функции, отражающие предполагаемые особенности восстанавливаемого спектра. Например, регуляризация Тихонова, используемая в SVD-методе, отражает гладкость распределения, однако существующие реализации этого алгоритма применимы только для восстановления одномерных спектров, так как соответствующая регуляризационная функция построена на основе разности значений в соседних линейно занумерованных бинах. В то же время в многомерном случае не существует нумерации бинов, при которой пространственно близкие бины имели бы близкие номера, поэтому применение упомянутых алгоритмов для восстановления многомерных распределений в существующем виде невозможно. Тем не менее, можно поставить задачу модификации регуляризационной функции, основанной на степени близости одномерных или многомерных бинов, что позволило бы адаптировать существующие алгоритмы на более широкий класс задач, а также повысить точность статистических оценок спектров и для одномерного случая. Возможный вариант такой модификации, разработанный авторами, предлагается в следующем разделе.

3. Многомерный регуляризационный метод. Перед описанием предлагаемого метода отметим некоторые основные положения, которые использовались при адаптации описанных ранее подходов.

1. Метод должен позволять использование в многомерном случае и учитывать миграцию между ячейками (бинами), заданную матрицей R .
2. Алгоритм должен учитывать непрерывность или гладкость истинного многомерного распределения. Для этого естественным является подход, основанный на регуляризации.
3. Соответствующее этим особенностям спектра регуляризационное слагаемое основывается на рассмотрении разностей значений величин в пространственно близких ячейках (необходимо учитывать, какие ячейки являются близкими или соседними, а какие не являются).
4. В предельном случае для одномерных измеряемых величин метод должен сводиться к ранее рассмотренным подходам (например, SVD-алгоритму), особенности применения которых для восстановления спектра изучены.

Оценку истинного распределения τ будем искать как решение задачи минимизации:

$$\Phi(\tau) = (R\tau - \mathbf{m})^T (R\tau - \mathbf{m}) + \alpha S(\tau) \rightarrow \min_{\tau},$$

где первое слагаемое соответствует функции правдоподобия без дополнительного смещения (минимум этого слагаемого достигается при $\tau = R^{-1}\mathbf{m}$), а регуляризационная функция $S(\tau)$ описывает заданные особенности искомого распределения [38]. При этом числовой параметр α отражает вклад регуляризационного слагаемого в функцию, используемую при построении оценки спектра.

В одномерном случае отношение близости бинов вводилось естественным путем: бины нумеровались в порядке возрастания значения характеристики и соседними бинами считались те, номера которых отличаются на 1. В частности, это отношение позволяло использовать при построении оценки спектра регуляризационную функцию

$$S(\tau) = \sum_{i=2}^{n-1} (\tau_{i-1} - 2\tau_i + \tau_{i+1})^2,$$

отражающую гладкость искомого распределения [28]. Она также может быть записана в виде

$$S(\tau) = (C\tau)^T (C\tau),$$

где матрица C отражает близость соседних бинов и имеет следующий вид:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Предлагаемая модификация общего подхода основана на использовании при построении регуляризационной функции такой матрицы, которая позволяет отразить сложные виды отношения соседства или близости бинов. Для бинарного отношения (два бина либо являются соседними, либо нет) в одномерном или многомерном случае в таком качестве будем использовать матрицу Кирхгофа $K = (k_{ij})$, где

$$k_{ij} = \begin{cases} \deg(\Delta_i), & \text{при } i = j; \\ -1, & \text{если } i \neq j, \text{ а } \Delta_i \text{ и } \Delta_j \text{ соседние;} \\ 0, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Здесь через $\deg(\Delta_i)$ обозначено количество бинов, соседних с бином Δ_i . Например, соседними можно считать пространственные бины, имеющие общий участок границы. Несложно убедиться, что в одномерном случае со стандартным бинарным отношением соседства такая матрица K совпадает с описанной выше матрицей C , а построенная оценка истинного спектра будет соответствовать результатам упомянутых ранее регуляризационных алгоритмов [28, 29].

Для многомерных ячеек становится все более заметной ограниченность бинарного подхода: во-первых, можно считать соседними (близкими) не обязательно ячейки с общим участком границы, а во-вторых, степень близости даже для граничащих ячеек может быть различной (и зависеть от размера области касания, от размера самих ячеек и других характеристик). Развивая предложенную идею, можно перейти к небинарным отношениям близости бинов. Для этого введем показатель $w(\Delta_i, \Delta_j) \geq 0$ — весовой коэффициент соседства ячеек Δ_i и Δ_j (при $i \neq j$). Бинарный случай соответствует значениям $w(\Delta_i, \Delta_j) = 1$ для соседних ячеек и $w(\Delta_i, \Delta_j) = 0$ для ячеек, не являющихся соседними; однако можно гибко настроить весовые коэффициенты, считая их пропорциональными степени связи, определяемой заранее выбранным способом (по области соприкосновения, размеру ячеек, расстоянию между центрами масс ячеек и другим характеристикам). Общих жестких рекомендаций по выбору элементов матрицы K нет, выбор весов $w(\Delta_i, \Delta_j)$ может варьироваться в зависимости от особенностей текущей задачи.

С учетом этих обозначений для построения регуляризационной функции будем использовать обобщенную матрицу Кирхгофа (K), элементы k_{ij} которой вводятся так:

$$k_{ij} = \begin{cases} \sum_{v \neq i} w(\Delta_i, \Delta_v), & \text{при } i = j; \\ -w(\Delta_i, \Delta_j), & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Соответственно, оценка истинного распределения будет получена как минимум функции

$$\Phi(\boldsymbol{\tau}) = (R\boldsymbol{\tau} - \mathbf{m})^T (R\boldsymbol{\tau} - \mathbf{m}) + \alpha (K\boldsymbol{\tau})^T (K\boldsymbol{\tau}).$$

Для многомерного случая рассматривается последовательная (линейная) нумерация бинов. Поэтому структура функции не меняется, но связи между бинами определяются не их нумерацией, а видом матрицы K . И поскольку отношение близости теперь вводится не только для соседних бинов, то появляется возможность строить оценки распределения для случая, когда параметры сильно коррелируют.

Точка минимума получается как решение переопределенной расширенной системы уравнений:

$$\begin{bmatrix} RK^{-1} \\ \sqrt{\alpha} \cdot I \end{bmatrix} K\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \mathbf{m} \\ 0 \end{bmatrix},$$

где I — единичная матрица.

Отметим, что матрица K является вырожденной, поэтому для вычисления обратной матрицы и корректного решения задачи ее нужно возмутить. Для этого прибавим константу ξ к диагональным элементам, т.е. рассмотрим вместо K матрицу $K + \xi I$. Далее при вычислении K^{-1} будем предполагать, что эта поправка уже сделана.

Для решения системы воспользуемся подходом, применяемым в исходном SVD-алгоритме обратной свертки [28]. Пусть система линейных уравнений имеет вид $A\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$. Сингулярным разложением матрицы A размера $l \times k$ называется ее представление в форме $A = USV^T$, где U и V — ортогональные матрицы размером $l \times l$ и $k \times k$ соответственно, S — диагональная матрица $l \times k$ (диагональные значения s_i неотрицательны и называются сингулярными значениями), сама матрица S называется сингулярной матрицей. Выбором U и V можно добиться того, чтобы сингулярные значения шли по убыванию. Для $l = k$ все матрицы будут квадратными.

Точное решение системы линейных уравнений $A\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$ с помощью сингулярного разложения выполняется по следующему алгоритму [28]:

1. Составляется система $USV^T \boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}$.
2. Выполняется замена $\mathbf{z} = V^T \boldsymbol{\tau}$. Система приобретает вид $US\mathbf{z} = \mathbf{m}$.

3. Домножается слева на обратную матрицу $U^{-1} = U^T$, получается система $Sz = U^T m$.
4. Выполняется замена: $d = U^T m$. Система приобретает вид $Sz = d$.
5. Матрица S является диагональной, поэтому компоненты решения строятся как $z_i = d_i/s_i$.
6. Записывается решение системы: $\tau = Vz$.

Для плохо обусловленных матриц A значения d_i и соответствующие s_i малы, поэтому малые возмущения этих значений приводят к сильным погрешностям решений z_i и решений исходной системы τ .

Решение описанной выше расширенной системы уравнений производится приведенным способом на основе сингулярного разложения, однако промежуточные решения z_i теперь выглядят так [28]:

$$z_i = \frac{d_i}{s_i} \cdot \frac{s_i^2}{s_i^2 + \alpha}.$$

При $s_i^2 \gg \alpha$ решения практически совпадают с рассмотренным прямым решением задачи. При малых сингулярных значениях s_i уже становится более заметным поправочный коэффициент. В качестве коэффициента регуляризации авторы SVD-алгоритма рекомендуют выбирать квадрат “последнего большого” сингулярного значения [28]: расположить диагональные элементы s_i матрицы S в порядке убывания и взять $\alpha = s_k^2$, где $s_k \gg s_{k+1}$.

Перед решением системы для уменьшения погрешностей также производится перенормировка уравнений исходной линейной системы (чтобы каждое уравнение вносило одинаковый “вклад”) [28].

4. Результаты. В качестве исходных данных для анализа алгоритма использовано моделирование потока протонов с характеристиками, соответствующими галактической компоненте космических лучей, который измеряется в космофизическом эксперименте PAMELA [21]. Для каждого события измеряется магнитная жесткость частицы, а также направление прилета, характеризуемое зенитным и азимутальными углами. В результате моделирования получен набор пар истинных и измеренных значений жесткости, зенитного угла и азимута. Область истинных значений величин (жесткость от 0.1 до 200 ГВ, зенитный угол от 0 до 45 градусов, азимутальный угол произвольный) разбивалась на трехмерные ячейки (бины): по направлению прилета рассматриваемый участок небесной сферы разбивался на близкие по размеру области, в каждой такой области рассматривалось неравномерное разбиение диапазонов значений жесткости. Полученный набор данных

был разбит на две выборки: по одной из них строилась матрица миграций, а другая использовалась для тестирования. Для выделенных трехмерных бинов строились трехмерные истинный и измеренный спектры рассматриваемых величин, а также матрица миграций.

Восстановление спектра в трехмерном случае производилось предложенным модифицированным SVD-алгоритмом. Матрица Кирхгофа строилась на основе бинарного отношения соседства трехмерных бинов: $w(\Delta_i, \Delta_j) = 1$, если бины Δ_i и Δ_j имеют ненулевую площадь касания, и $w(\Delta_i, \Delta_j) = 0$ в противном случае. Величина параметра регуляризации α выбиралась как квадрат наибольшего сингулярного значения при разложении матрицы системы после перенормировки (процедура выбора параметров описана в разделе 3).

Рассмотрим одномерные проекции трехмерного спектра, например, на область значений магнитной жесткости для некоторого сегмента апертуры. На верхнем графике рис. 1 представлен пример восстановленного предложенным методом спектра (полужирная сплошная линия) в диапазоне азимута $\phi = 42^\circ$ и зенитного угла $z = 17^\circ$. Для сравнения приведены истинный и приборный спектры, показанные соответственно пунктирной и тонкой сплошной линиями. В качестве показателя точности (погрешности) метода принимаем относительное отклонение измеренного и восстановленного спектров от истинного. Значения показателя точности для измеренного и восстановленного спектров приведены на нижнем графике рис. 1 контурными и закрашенными маркерами соответственно.

Из графика рис. 1 следует, что предложенный алгоритм обратной свертки восстановил заниженный спектр в области малых значений магнитной жесткости (до 1 ГВ) и завышенный спектр в диапазоне жесткостей от 1.5 до 3 ГВ. Среднее значение погрешности в рассматриваемом диапазоне от 0.35 до 40 ГВ снизилось с $\delta_{\text{meas}} = 0.076$ до $\delta_{\text{unf}} = 0.040$. Для сравнения, использование прямого алгоритма восстановления спектра (применение обратной матрицы миграций к измеренному спектру) приводит к средней погрешности восстановленного спектра $\delta_{\text{inv}} = 0.088$, что выше не только средних погрешностей обратной свертки для предложенного алгоритма, но и погрешностей при измерении (отклонении приборного спектра от истинного).

Приведенная погрешность вычислялась для результата работы алгоритма при однократном разбиении выборки на две подвыборки: для построения матрицы миграций и тестирования. Более

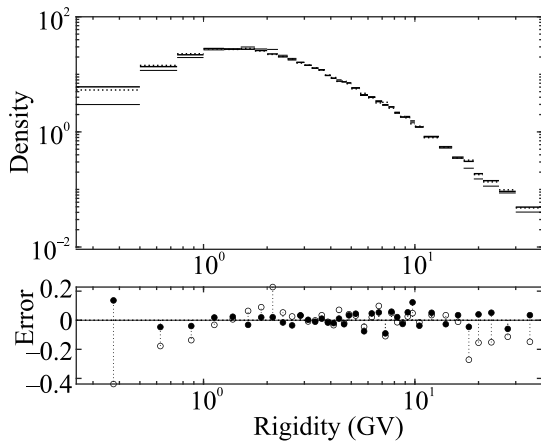


Рис. 1. Восстановление спектра в выбранном диапазоне зенитного и азимутального углов. На верхнем рисунке показаны истинный (пунктирная линия), приборный (тонкая сплошная линия) и восстановленный (полужирная сплошная линия) спектры. На нижнем рисунке показано относительное отклонение измеренного (контурные маркеры) и восстановленного (закрашенные маркеры) спектров от истинного

глубокий анализ систематических и статистических погрешностей может быть проведен в ходе серии вычислительных экспериментов, в каждом из которых проводится разбиение исходной выборки с дальнейшим построением оценок отклонений восстановленного спектра от истинного. Это исследование предполагается вынести в отдельную работу.

Предложенный алгоритм позволяет решать задачу восстановления спектра и в одномерном случае, более гибко учитывая отношение соседства между бинами. Для каждой частицы в качестве изучаемой физической характеристики рассмотрена только магнитная жесткость. Как и для многомерного случая, выполнено численное моделирование, в результате которого получен набор пар истинных и измеренных значений жесткости. Далее построены истинный и измеренный спектр в аналогично заданном диапазоне значений жесткости, неравномерно разбитом на интервалы. Для этого разбиения и данных моделирования построена матрица миграций. Алгоритм применяется к измеренному распределению жесткости в тестовой выборке, результат восстановления спектра сопоставляется с соответствующим истинным спектром (для тестовой выборки).

Восстановление спектра проводилось предложенным алгоритмом, в котором весовой коэффициент связи между бинами экспоненциально уменьшается в зависимости от их удаленности (по номерам): $w(\Delta_i, \Delta_j) = cq^{-|i-j|}$ (рассмотрен случай $c = 2$,

$q = 2$). Для сравнения результатов рассмотрена оценка, полученная исходным SVD-методом [28]. На рисунке 2 показаны относительные ошибки вос-

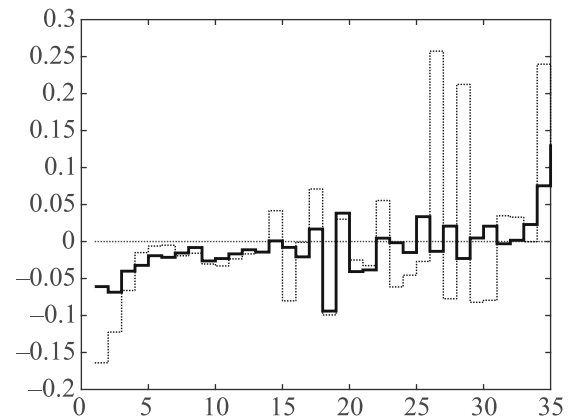


Рис. 2. (Цветной онлайн) Погрешность восстановления спектра для классического SVD-метода (штрихпунктирная линия) и предложенного модифицированного SVD-метода (сплошная линия) в зависимости от номера бина (приборный спектр не представлен)

становленного спектра по отношению к истинному спектру (в каждом бине): сплошной линией — ошибки предложенного в статье алгоритма, штрихпунктирной линией — ошибки SVD-алгоритма, истинный спектр показан горизонтальной пунктирной линией на уровне 0. Для корректного отображения исключен первый бин, в котором для обоих алгоритмов характерна высокая относительная погрешность.

В области высоких значений магнитной жесткости (правая часть спектра) для предложенного алгоритма отметим подавление больших колебаний оценки спектра. Среднее относительное отклонение также снижено (по отношению к ошибке классического SVD-алгоритма). Таким образом, предложенный алгоритм показал более качественные результаты восстановления спектра и в одномерном случае.

Стоит отметить, что разработанный алгоритм базируется на использовании регуляризационного слагаемого, отражающего в том числе непрерывность и гладкость по каждому из параметров многомерного распределения. Поэтому он может быть применен для подобных распределений, что подтверждается проведенным анализом. К распределениям, удовлетворяющим перечисленным свойствам, например, относятся и спектры космических лучей, в которых наблюдаются изменения показателя при разных энергиях. Разработанный алгоритм при восстановлении оценки истинного распределения сохраняет эту особенность (“излом” спектра).

5. Заключение. В работе изложен подход, позволяющий адаптировать регуляризационные алгоритмы обратной свертки (в том числе распространенный в физике частиц SVD-алгоритм) для применения в более широком классе случаев. В частности, можно отметить описание и применение алгоритма обратной свертки, позволяющего восстанавливать гладкие многомерные спектры, сохраняя возможность применения и в одномерном случае. Возможность применения предложенного алгоритма к распределениям, для которых, например, характерны заметные немонотонные изменения по одной или нескольким переменным, требует отдельного изучения.

На данном этапе отмечается, что для рассмотренных в работе исходных данных представленный модифицированный алгоритм не уступает и даже превосходит исходные версии алгоритмов по точности восстановления спектра (например, по средней относительной погрешности в бинах). Также для многомерного случая он позволяет строить достаточно точные оценки спектров для матрицы миграций, не удовлетворяющих жестким требованиям диагональности. Это дает возможность предполагать перспективность предложенного подхода и возможность его дальнейшей адаптации для решения актуальных прикладных задач.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 19-72-10161).

1. V. Blobel, in *Proc. of the 1984 CERN School of Computing*, CERN 85-09, p. 88.
2. V. Blobel, hep-ex/0208022.
3. G. Cowan, in *Proc. Conf. on Advanced Statistical Techniques in Particle Physics*, ed. by M. R. Whalley and L. Lyons, IPPP/02/39, Durham (2002).
4. F. Span'o, EPJ Web Conf. **55**, 03002 (2013).
5. S. Schmitt, arXiv:1611.01927v2, EPJ Web Conf. **137**, 11008 (2017).
6. G. Zech, arXiv:1607.06910.
7. Ю. В. Богомолов, В. В. Алексеев, О. А. Леванова, А. Г. Майоров, В. В. Малахов, УФН 2022 (принята к печати); doi: <https://doi.org/10.3367/UFN.2022.05.039189> (english <https://doi.org/10.3367/UFN.2022.05.039189>).
8. А. Ю. Егоров, Я. А. Бердников, В. А. Бакаев, И. М. Никитчина, Науч.-тех. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки **12**(3), 123 (2019).
9. S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A. M. Sirunyan et al. (CMS Collaboration), Phys. Lett. B **709**, 28 (2012).

10. M. Aguilar, D. Aisa, D. Alpat et al. (AMS Collaboration), Phys. Rev. Lett. **114**, 171103 (2015).
11. F. P. An, A. B. Balantekin, H. R. Band et al. (Daya Bay Collaboration), arXiv:2102.04614, Chin. Phys. C **45**(7), 073001 (2021).
12. Д. Е. Карманов, И. М. Ковалев, И. А. Кудряшов, А. А. Курганов, А. Д. Панов, Д. М. Подорожный, А. Н. Турундаевский, О. А. Васильев, Письма в ЖЭТФ **111**(7), 435 (2020).
13. H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer, *Regularization of Inverse Problems*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2000).
14. J. Kaipio and E. Somersalo *Statistical and Computational Inverse Problems*, Springer, N.Y. (2005).
15. G. Cowan, *Statistical Data Analysis*, Clarendon Press, Oxford (1998).
16. T. Adye, *Proceedings of the PHYSTAT 2011 Workshop, CERN, Geneva, Switzerland, January 2011*, CERN-2011-006; arXiv:1105.1160.
17. M. Arratia, A. Butter, M. Campanelli, V. Croft, A. Ghosh, D. Gillberg, K. Lohwasser, B. Malaescu, V. Mikuni, B. Nachman, J. Rojo, J. Thaler, and R. Winterhalder, arXiv:2109.13243.
18. G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah et al. (ATLAS collaboration), Eur. Phys. J. C **72**, 2039 (2012).
19. V. Verzi, D. Ivanov, and Y. Tsunesada, Prog. Theor. Exp. Phys. **2017**(12), 12A103 (2017).
20. F. Li, Zh. Gu, L. Ge, H. Li, X. Tang, X. Lang, and B. Hu, Results in Physics **13**, 102211 (2019).
21. O. Adriani, G. C. Barbarino, G. A. Bazilevskaia et al. (PAMELA Collaboration), Phys. Rep. **544**(4), 30 (2014).
22. L. Brenner, P. Verschuuren, R. Balasubramanian, C. Burgard, V. Croft, G. Cowan, and W. Verkerke, arXiv:1910.14654.
23. B. W. Rust, D. T. Ingersoll, and W. R. Burrus, *A User's Manual for the FERDO and FERD Unfolding Codes*, Oakridge National Laboratory, Oak Ridge (1983).
24. P. Vischia, arXiv:2009.02913.
25. M. Kuusela and P. B. Stark, arXiv:1512.00905.
26. G. D'Agostini, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **362**, 487 (1995).
27. M. Kuusela and V. M. Panaretos, Annals of Appl. Stat. **9**(3), 1671 (2015).
28. A. Hoecker and V. Kartvelishvili, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **372**, 469 (1996).
29. S. Schmitt, J. Instrum. **7**(10), T10003 (2012).
30. P. Baron, Acta Phys. Pol. B **51**(6), 1241 (2020).
31. Официальный сайт пакета ROOT <https://root.cern.ch/>.

32. Официальный сайт пакета RooUnfold <http://hepunix.rl.ac.uk/adye/software/unfold/RooUnfold.html>.
33. A. Andreassen, P. T. Komiske, E. M. Metodiev, B. Nachman, and J. Thaler, Phys. Rev. Lett. **124**(18), 182001 (2020); arXiv:1911.09107.
34. V. Blobel, OPAL Technical Note TN361, 28 (1996).
35. N. Milke, M. Doert, S. Klepser, D. Mazin, V. Blobel, and W. Rhode, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **697**, 133 (2013).
36. J. Bourbeau and Z. Hampel-Arias, J. Open Source Softw. **3**(26), 741 (2018).
37. M. Pivk and F. R. Le Diberder, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **555**, 356 (2005).
38. A. N. Tikhonov, Soviet Math. Dokl. **4**, 1035 (1963).

Заметки о влиянии КХД и электрослабых поправок на соотношение между полюсными и бегущими массами топ-кварка

А. Л. Катаев⁺¹⁾, В. С. Молокоедов^{+*×°1)}

⁺Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

^{*}Научно-исследовательский вычислительный центр, МГУ, 119991 Москва, Россия

[×]Московский центр фундаментальной и прикладной математики, 119992 Москва, Россия

[°]Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 4 мая 2022 г.

После переработки 4 мая 2022 г.

Принята к публикации 11 мая 2022 г.

Приводится аналитическое представление однопетлевой электрослабой поправки к соотношению между полюсными и бегущими в $\overline{\text{MS}}$ -схеме массами топ-кварка в виде разложения по массам частиц Стандартной Модели в схеме Флейшера–Егерлейнера, где вакуумное среднее хиггсовского поля перенормируется. Подчеркивается важность учета и электрослабых, и КХД эффектов в рассматриваемое соотношение. Отмечается, что в данной схеме пренебрежение электрослабыми поправками приводит к сдвигу на 10 ГэВ в разнице между полюсной и бегущей массами t -кварка. Эта величина существенно превышает современные погрешности значения рассматриваемого соотношения, следующие из обработки данных Тэватрона и БАК.

DOI: 10.31857/S1234567822120023, EDN: imhisx

1. Введение. Масса топ-кварка является важным теоретическим параметром, который извлекается из экспериментальных данных Тэватрона и БАК (см., например, [1] и обзоры [2–4]). Среди различных определений перенормируемых масс топ-кварка наиболее часто используются полюсные и бегущие массы. Полюсная масса M_t определяется в схеме перенормировок на массовой поверхности (on-shell (OS)) из условия наличия полюса перенормированного пропагатора t -кварка в минковской времениподобной области при $p^2 = M_t^2$. Бегущая масса топ-кварка $\overline{m}_t(\mu^2)$, зависящая от масштаба перенормировки μ , определяется в модифицированной $\overline{\text{MS}}$ -схеме минимальных вычитаний, связанной с процедурой размерной регуляризации.

Полюсная масса – конечная величина, которая, однако, подвержена влиянию больших пертурбативных поправок КХД [5]. Этот эффект связан с проявлением инфракрасных (ИК) ренормалонгов [5–7]. Они приводят к тому, что пертурбативные коэффициенты соотношения между полюсной M_t и бегущей массой $\overline{m}_t(\mu^2)$ факториально растут с увеличением порядка теории возмущений (ТВ) в КХД [5–12]. Данная особенность обуславливает асимптотическое поведение ряда ТВ для рассматриваемого соотношения

в КХД. В связи с этим, в конкретных физических исследованиях важно знать, когда эта асимптотическая структура начнет проявляться. Оценки вкладов высших порядков ТВ к $M_t/\overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$ -отношению в КХД, выполненные в [12] при помощи результатов работы [13], указывают на то, что первые проявления его асимптотической природы наблюдаются только с седьмого порядка ТВ. Однако, в Стандартной Модели (СМ) также необходимо учитывать электрослабые (ЭС) поправки. В OS-схеме они функционально зависят от полюсных масс частиц СМ, таких как топ-кварк, W и Z -бозоны и бозон Хиггса. Эта зависимость от масс особенно важна на масштабе $\mu^2 \sim M_t^2$, где массы M_W , M_Z , M_H несколько меньше M_t . Поэтому, изучение возможной асимптотической структуры $M_t/\overline{m}_t(M_t^2)$ -соотношения в ЭС секторе представляется более сложной задачей, чем в случае чистой КХД. Далее мы увидим, что учет этих эффектов может превышать вклады КХД поправок.

В СМ отношение $M_t/\overline{m}_t(\mu^2)$ содержит три типа поправок:

$$\frac{M_t}{\overline{m}_t(\mu^2)} = 1 + \delta^{\text{QCD}}(\mu^2) + \delta^{\text{EW}}(\mu^2) + \delta^{\text{QCD} \times \text{EW}}(\mu^2), \quad (1)$$

где δ^{QCD} , δ^{EW} , $\delta^{\text{QCD} \times \text{EW}}$ – КХД, ЭС и смешанные КХД–ЭС вклады ТВ соответственно. Они имеют следующий вид:

¹⁾e-mail: kataev@ms2.inr.ac.ru; viktor_molokoedov@mail.ru

$$\begin{aligned}\delta^{\text{QCD}}(\mu^2) &= \sum_{n \geq 1} \delta_n^{\text{QCD}}(\mu^2) \left(\frac{\alpha_s(\mu^2)}{4\pi} \right)^n, \\ \delta^{\text{EW}}(\mu^2) &= \sum_{n \geq 1} \delta_n^{\text{EW}}(\mu^2) \left(\frac{\alpha(\mu^2)}{4\pi \sin^2 \theta_W(\mu^2)} \right)^n, \\ \delta^{\text{QCD} \times \text{EW}}(\mu^2) &= \sum_{n \geq 2} \sum_{k=1}^{n-1} \delta_{k, n-k}^{\text{QCD} \times \text{EW}}(\mu^2) \times \\ &\quad \times \left(\frac{\alpha_s(\mu^2)}{4\pi} \right)^k \left(\frac{\alpha(\mu^2)}{4\pi \sin^2 \theta_W(\mu^2)} \right)^{n-k}.\end{aligned}\quad (2)$$

Здесь $\alpha_s(\mu^2) = g_s^2(\mu^2)/4\pi$, $\alpha(\mu^2) = e^2(\mu^2)/4\pi$; g_s и e – константы связи калибровочных групп $SU(3)_c$ и $U(1)_{em}$ соответственно, $\sin \theta_W(\mu^2)$ – синус угла Вайнберга. Все эти параметры определены в $\overline{\text{MS}}$ -схеме. В этом случае зависящие от масштаба коэффициенты $\delta_n^{\text{EW}}(\mu^2)$, $\delta_{k, n-k}^{\text{QCD} \times \text{EW}}(\mu^2)$ являются функциями бегущих масс топ-кварка, заряженных W и нейтральных бозонов Z и H .

В настоящее время КХД поправки δ_1^{QCD} , δ_2^{QCD} , δ_3^{QCD} и δ_4^{QCD} известны благодаря вычислениям, выполненным в [14–19] соответственно. Чистые ЭС вклады δ_1^{EW} [20] и δ_2^{EW} [21, 22] были получены в аналитическом и полуаналитическом виде соответственно. Смешанная двухпетлевая КХД-ЭС поправка $\delta_{1,1}^{\text{QCD} \times \text{EW}}$ известна благодаря аналитическим вычислениям, выполненным в [23, 24].

Как уже упоминалось в работах [22–24], электрослабые эффекты не являются пренебрежимо малыми для соотношения между полюсными и бегущими массами топ-кварка в теоретически выделенной схеме Флейшера–Егерлейнера (ФЕ) [25]. В этой схеме вакуумное среднее $v(\mu^2)$ хиггсовского поля перенормируется и входит в определение бегущей $\overline{\text{MS}}$ массы следующим образом: $\overline{m}_t(\mu^2) = y_t(\mu^2)v(\mu^2)/\sqrt{2}$ (здесь $y_t(\mu^2)$ – бегущая юкавская константа связи топ-кварка). При этом, в однопетлевом приближении ЭС поправка к $M_t/\overline{m}_t(M_t^2)$ превышает $\mathcal{O}(\alpha_s)$ КХД вклад, который имеет противоположный знак: $|\delta_1^{\text{EW}}(M_t^2)| \gtrsim |\delta_1^{\text{QCD}}(M_t^2)|$. Утверждение о важности учета электрослабых эффектов в различные физические величины ранее было сделано в ряде работ (см. [26–29] и ссылки в них). Похожая ситуация, когда ЭС вклад доминирует над первой ненулевой поправкой КХД, была обнаружена в [26] для ρ -параметра СМ (отношение амплитуд нейтральных и заряженных слабых токов при низких энергиях), а точнее для величины $\Delta\rho = 1 - 1/\rho$, в широкой области значений неизвестной тогда массы бозона Хиггса от 60 ГэВ до 1 ТэВ.

Несмотря на важность ЭС эффектов, мы продемонстрируем, что по факту *они все еще либо недо-*

оцениваются, либо вообще не учитываются при переходе от полюсной к бегущей массе топ-кварка в современной феноменологически ориентированной литературе. На это указывают приведенные ниже явные оценки и ссылки на работы по этой тематике, включая результаты различных коллабораций Тэватрона и БАК, суммируемые в регулярно переиздаваемом сборнике свойств элементарных частиц PDG. В случаях, когда рассматривается переход от M_t к $\overline{m}_t(\mu^2)$, учитываются только эффекты КХД (см., например, экспериментальные работы [30–32]), а ЭС вклады опускаются. Данная работа посвящена обсуждению и разъяснению этой проблемы.

2. Роль электрослабых эффектов.

2.1. Однопетлевой анализ. На однопетлевом уровне пертурбативное соотношение между полюсной и бегущей массами t -кварка в СМ выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{M_t}{\overline{m}_t(\mu^2)} &= 1 + \delta_1^{\text{QCD}}(M_t^2/\mu^2) \frac{\alpha_s(\mu^2)}{4\pi} + \\ &+ \delta_1^{\text{EW}}(M_t^2/\mu^2) \frac{\alpha(\mu^2)}{4\pi \sin^2 \theta_W(\mu^2)},\end{aligned}\quad (4)$$

где $\alpha_s(\mu^2)$, $\alpha(\mu^2)$, $\sin^2 \theta_W(\mu^2)$ определены в $\overline{\text{MS}}$ -схеме. Отметим, что мы не будем различать полюсные и бегущие массы частиц в выражениях для $\delta_1^{\text{QCD}}(M_t^2/\mu^2)$ и $\delta_1^{\text{EW}}(M_t^2/\mu^2)$, поскольку это приводит к превышению рассматриваемой нами однопетлевой точности. То же самое касается и масштабов $\mu^2 = M_t^2$ и $\mu^2 = \overline{m}_t^2(\overline{m}_t^2)$. Данные утверждения можно наглядно проиллюстрировать на примере решения однопетлевого ренормгруппового (РГ) уравнения, определяющего эффект бега константы связи сильного взаимодействия в случае шести активных ароматов кварков ($n_f = 6$): $\alpha_s(M_t^2) \approx \frac{\alpha_s(\overline{m}_t^2)}{1 - 7\alpha_s(\overline{m}_t^2)/(4\pi) \ln(\overline{m}_t^2/M_t^2)} \approx \frac{\alpha_s(\overline{m}_t^2)}{1 - 7 \cdot 0.1/(4\pi) \ln(162.5^2/172.4^2)} \approx \frac{\alpha_s(\overline{m}_t^2)}{1 + 0.0066} \approx \alpha_s(\overline{m}_t^2)$. Пренебрежимо малое число в знаменателе соответствует $\mathcal{O}(\alpha_s)$ -поправке к константе связи в однопетлевом приближении.

В данной работе мы будем использовать следующие значения полюсных масс частиц СМ: $M_t \approx 172.4$ ГэВ, $M_H \approx 125.10$ ГэВ, $M_W \approx 80.38$ ГэВ, $M_Z \approx 91.19$ ГэВ [1].

Однопетлевая $\mathcal{O}(\alpha_s)$ поправка КХД к отношению $M_t/\overline{m}_t(\mu^2)$ была вычислена много лет назад в [14] и равна:

$$\delta_1^{\text{QCD}} = C_F \left(4 - 3 \ln \frac{M_t^2}{\mu^2} \right).\quad (5)$$

В фундаментальном представлении алгебры Ли калибровочной группы $SU(N_c)$ с количеством цветов

N_c квадратичный оператор Казимира равен $C_F = (N_c^2 - 1)/(2N_c)$. Для частного случая цветовой группы $SU(3)$, реализуемой в природе, $C_F = 4/3$.

Однопетлевая $\mathcal{O}(\alpha)$ ЭС поправка к отношению $M_t/\bar{m}_t(\mu^2)$ была посчитана в [20] почти три десятилетия назад. В этой работе она была представлена в общей форме, справедливой для произвольного тяжелого кварка. Поскольку в то время масса бозона Хиггса не была известна, эта поправка была вычислена для различных возможных соотношений между массами частиц, дающими вклад в δ_1^{EW} . Также она выражалась через синус и косинус угла слабого смешивания, электрические заряды кварков и третьи компоненты слабого изospина. Мы используем это представление для случая t -кварка в реальной области масс, где $M_t > M_H/2$, $M_t > M_Z/2$, и выражаем δ_1^{EW} через полюсные массы топ-кварка, калибровочных бозонов и бозона Хиггса. Это приводит нас к следующему результату²⁾:

$$\delta_1^{\text{EW}} = \delta_1^{\text{EW}, (0)} + \delta_1^{\text{EW}, (L)} \ln \frac{M_t^2}{\mu^2}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \delta_1^{\text{EW}, (0)} = & -\frac{23}{72} - \frac{M_t^2}{M_W^2} + \frac{25}{36} \frac{M_W^2}{M_t^2} + \\ & + \frac{1}{2} \frac{M_W^2}{M_H^2} + \frac{1}{2} \frac{M_H^2}{M_W^2} - \frac{5}{9} \frac{M_Z^2}{M_t^2} + \frac{4}{9} \frac{M_Z^2}{M_W^2} + \\ & + \frac{17}{72} \frac{M_Z^4}{M_W^2 M_t^2} + \frac{1}{4} \frac{M_Z^4}{M_W^2 M_H^2} - \boxed{N_c \frac{M_t^4}{M_W^2 M_H^2}} + \\ & + \frac{3}{2} \frac{M_W^2}{M_H^2} \ln \frac{M_t^2}{M_W^2} + \frac{1}{16} \frac{M_H^4}{M_W^2 M_t^2} \ln \frac{M_t^2}{M_H^2} - \\ & - \frac{1}{8} \frac{M_t^2}{M_W^2} \ln \frac{M_t^2}{M_t^2 - M_W^2} - \frac{1}{4} \frac{M_W^2}{M_t^2} \left(\frac{M_W^2}{M_t^2} - \frac{3}{2} \right) \times \\ & \times \ln \frac{M_W^2}{M_t^2 - M_W^2} + \left(\frac{3}{4} \frac{M_Z^4}{M_W^2 M_H^2} + \frac{2}{9} \frac{M_W^2 M_Z^2}{M_t^4} - \right. \\ & \left. - \frac{5}{18} \frac{M_Z^4}{M_t^4} - \frac{3}{16} \frac{M_Z^4}{M_W^2 M_t^2} + \frac{17}{144} \frac{M_Z^6}{M_W^2 M_t^4} \right) \times \\ & \times \ln \frac{M_t^2}{M_Z^2} + \frac{M_Z^2}{M_t^2} \left(\frac{10}{9} + \frac{5}{9} \frac{M_Z^2}{M_t^2} - \frac{8}{9} \frac{M_W^2}{M_Z^2} - \right. \\ & \left. - \frac{7}{72} \frac{M_Z^2}{M_W^2} - \frac{4}{9} \frac{M_W^2}{M_t^2} - \frac{17}{72} \frac{M_Z^4}{M_W^2 M_t^2} \right) \times \\ & \times \left(\frac{4M_t^2}{M_Z^2} - 1 \right)^{1/2} \arccos \left(\frac{M_Z}{2M_t} \right) + \\ & + \frac{1}{8} \frac{M_H^4}{M_W^2 M_t^2} \left(\frac{4M_t^2}{M_H^2} - 1 \right)^{3/2} \arccos \left(\frac{M_H}{2M_t} \right), \quad (7) \end{aligned}$$

²⁾ В пределе $M_B^2/M_t^2 \ll 1$ (здесь $B = W, Z, H$) он согласуется с результатами [33].

$$\begin{aligned} \delta_1^{\text{EW}, (L)} = & \frac{1}{3} + \frac{3}{8} \frac{M_t^2}{M_W^2} - \frac{1}{3} \frac{M_Z^2}{M_W^2} - \frac{3}{8} \frac{M_H^2}{M_W^2} - \\ & - \frac{3}{2} \frac{M_W^2}{M_H^2} - \frac{3}{4} \frac{M_Z^4}{M_W^2 M_H^2} + \boxed{N_c \frac{M_t^4}{M_W^2 M_H^2}}. \quad (8) \end{aligned}$$

Выражения (7)–(8) приведены в приближении, когда действительно малыми вкладками, связанными с массовыми эффектами [20] лептонов (e, μ, τ) и других более легких кварков (u, d, s, c, b), пренебрегают.

Используя вышеприведенные значения полюсных масс M_t, M_W, M_Z, M_H , мы приходим к следующему численному виду поправки $\delta_1^{\text{EW}3)}$:

$$\delta_1^{\text{EW}} = -24.26 + 25.80 \ln \frac{M_t^2}{\mu^2}. \quad (9)$$

Обратим внимание на один интересный факт. Наибольшие вклады в выражениях (7)–(8) обусловлены диаграммами, имеющими вид “головастиков”, а самые значительные из этих вкладов обведены в рамку. Последние возникают благодаря диаграмме, изображенной на рис. 1, и равны слагаемому

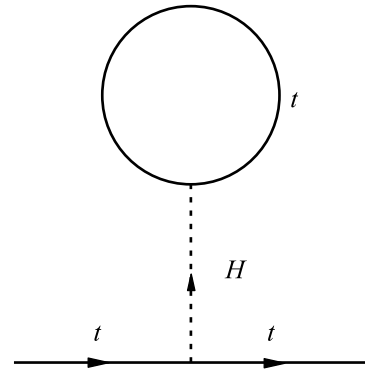


Рис. 1. Однопетлевая вакуумная диаграмма, вносящая наибольший вклад в коэффициент δ_1^{EW}

$N_c M_t^4/(M_W^2 M_H^2) \approx 26.21$, которое практически полностью определяет итоговые значения коэффициентов $\delta_1^{\text{EW}, (0)}$ и $\delta_1^{\text{EW}, (L)}$ (см. (9)). Оно содержит три усиливающих множителя: число цветов $N_c = 3$, дроби $M_t^2/M_W^2 \approx 4.6$ и $M_t^2/M_H^2 \approx 1.9$. Включение “головастиков” в схему ФЭ в множество собственно-энергетических диаграмм Фейнмана в теории с нарушенной калибровочной симметрией необходимо для сохранения калибровочной инвариантности соотношения между M_t и $\bar{m}_t(\mu^2)$ [20, 22–26, 34]. Вариант $\overline{\text{MS}}$ -схемы перенормировки, в которой суммарный вклад всех “головастиков” равен нулю, был изучен

³⁾ Данное выражение согласуется с численными результатами работ [23, 24].

в [27, 28]. Однако, как было показано в этих работах, применение данной схемы приводит к существенной зависимости от калибровки.

Рассмотрим теперь выражение (4) на масштабе $\mu^2 = M_t^2$. Для получения численных значений $\alpha_s(M_t^2)$, $\alpha(M_t^2)$, $\sin^2 \theta_W(M_t^2)$, используем следующие начальные данные $\alpha_s(M_Z^2) \approx 0.1179$, $\alpha^{-1}(M_Z^2) \approx 127.952$, $\sin^2 \theta_W(M_Z^2) \approx 0.231$ [1], эволюционируемые на масштаб массы топ-кварка.

Соответствующие РГ уравнения, определяющие бег констант связи α_s и α в СМ в однопетлевом приближении (см., например, работы [35, 22, 34] и ссылки в них), выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu^2 \frac{\partial a_s}{\partial \mu^2} &= - \left(11 - \frac{2}{3} n_f \right) a_s^2, \\ \mu^2 \frac{\partial a}{\partial \mu^2} &= \left(-7 + \frac{4}{3} n_G + \frac{20}{27} n_G N_c \right) a^2, \end{aligned} \quad (10)$$

где $a_s = \alpha_s/4\pi$, $a = \alpha/4\pi$, n_f – число ароматов кварков, n_G – количество поколений фермионов, N_c – число цветов. В СМ зависимость $a = e^2/16\pi^2$ от масштаба может быть определена исходя из бега константы g группы $SU(2)_L$, константы g' группы $U(1)_Y$ и соотношения $1/e^2 = 1/g^2 + 1/g'^2$. Вклад $4n_G/3$ в (10) соответствует β -функции КЭД в однопетлевом приближении; член $20n_G N_c/27$ – вклад верхних и нижних типов кварков в поколениях с числом n_G ; слагаемое -7 – эффект взаимодействия фотона с W -бозоном.

При переходе с масштаба $\mu^2 = M_Z^2$ на $\mu^2 = M_t^2$ фиксируем $n_f = 5$, $n_G = 3$, $N_c = 3$. В таком случае, решения уравнений (10) принимают вид:

$$\begin{aligned} \alpha_s(\mu^2) &\approx \frac{\alpha_s(M_Z^2)}{1 - \frac{23}{3} \frac{\alpha_s(M_Z^2)}{4\pi} \ln \frac{M_Z^2}{\mu^2}}, \\ \alpha(\mu^2) &\approx \frac{\alpha(M_Z^2)}{1 + \frac{11}{3} \frac{\alpha(M_Z^2)}{4\pi} \ln \frac{M_Z^2}{\mu^2}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Используя вышеприведенные значения для $\alpha_s(M_Z^2)$, $\alpha^{-1}(M_Z^2)$ и подставляя их в (11), получаем $\alpha_s(M_t^2) \approx 0.108$, $\alpha^{-1}(M_t^2) \approx 127.58$.

Сдвигка значения синуса угла слабого смешивания, определенного в \overline{MS} -схеме, с начальной точки нормировки $\mu^2 = M_Z^2$ в конечную $\mu^2 = M_t^2$ осуществляется нами при помощи следующей формулы, полученной в [36]:

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta_W(M_t^2) &\approx \\ &\approx \frac{\alpha(M_t^2)}{\alpha(M_Z^2)} \sin^2 \theta_W(M_Z^2) + \frac{21}{44} \left(1 - \frac{\alpha(M_t^2)}{\alpha(M_Z^2)} \right) + \\ &+ \frac{\alpha(M_t^2)}{4\pi} \left(\frac{625}{132} \ln \frac{M_t^2}{M_Z^2} + \frac{18}{11} \ln \frac{\alpha(M_t^2)}{\alpha(M_Z^2)} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Применение формулы (12) дает приближенное значение $\sin^2 \theta_W(M_t^2) \approx 0.234$ (по сравнению с начальным значением $\sin^2 \theta_W(M_Z^2) \approx 0.231$ на масштабе массы Z -бозона).

Используя теперь выражения (5), (9) совместно с найденными выше значениями $\alpha_s(M_t^2)$, $\alpha^{-1}(M_t^2)$, $\sin^2 \theta_W(M_t^2)$, приходим к численной форме записи соотношения между полюсными и бегущими массами топ-кварка, полученного в рамках ФЕ-схемы в первом порядке ТВ:

$$\frac{M_t}{\overline{m}_t(M_t^2)} \approx 1 + \mathcal{O}(\alpha_s) - \mathcal{O}(\alpha) = 0.981 < 1 (!?). \quad (13)$$

Видно, что однопетлевая ЭС поправка превышает КХД поправку, и ее учет изменяет знак суммарного вклада в отношение (13), вычисленного в первом порядке ТВ. Данный эффект также следует из результатов [24] и [22] при $M_H = 125$ ГэВ.

Похожая ситуация выявляется и для ширины распада бозона Хиггса в два фотона из результатов работы [37], где впервые была вычислена четырехпетлевая поправка КХД и приведено численное значение двухпетлевого ЭС вклада (см. также оригинальные статьи [38, 39], где этот ЭС вклад был явно вычислен). Из этих работ следует, что эта ЭС поправка по величине очень близка к двухпетлевому вкладу КХД (а также значительно больше четырехпетлевых эффектов КХД) и имеет противоположный по отношению к нему знак.

Вернемся к обсуждению отношения $M_t/\overline{m}_t(M_t^2)$ (13). Его численный вид находится в полном согласии с результатами [24, 22]. Отметим, что в разности между массами M_t и $\overline{m}_t(M_t^2)$ (или между M_t и $\overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$ ⁴) величина $\mathcal{O}(\alpha)$ ЭС вклада составляет порядка 10 ГэВ. Ясно, что эта большая поправка значительно превышает все существующие погрешности в определении параметров, входящих в (4) и (7)–(8), таких как константы связи, $\sin^2 \theta_W$, массы частиц.

В свою очередь, из результатов различных коллабораций, например, D0 (см. [30]), CMS (см. [31]) и ATLAS (см. [32]) следует, что представленные в данных работах соотношения между M_t и \overline{m}_t включают

⁴Как уже было упомянуто ранее, в первом порядке ТВ $\overline{m}_t(M_t^2) \approx \overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$ в ур. (4).

в себя *лишь* КХД поправки без учета электрослабых эффектов⁵⁾. Этот факт вызывает некоторую настороженность и поднимает вопросы о величине бегущих масс топ-кварка, полученных из экспериментальных данных БАК и Тэватрона, об их представлении в текущем выпуске PDG, а также об учете ЭС эффектов в отношении $M_t/\bar{m}_t(\mu^2)$.

Рассмотрим теперь зависимость КХД и ЭС поправок в ур. (4) от масштаба в области выше порога рождения топ-кварка, а точнее в промежутке $M_t \leq \mu \leq 2M_t$. Чтобы избежать превышения точности рассматриваемого в данном разделе однопетлевого приближения, следует учитывать зависимость от масштаба только в коэффициентах δ_1^{QCD} (5) и δ_1^{EW} (9), пренебрегая при этом бегом других параметров, входящих в ур. (4). Для наиболее правдоподобной оценки в дальнейшем мы будем фиксировать значения α_s , α и $\sin^2 \theta_W$ на масштабе массы топ-кварка, полагая $\alpha_s(\mu^2) \approx \alpha_s(M_t^2)$, $\alpha(\mu^2) \approx \alpha(M_t^2)$, $\sin^2 \theta_W(\mu^2) \approx \sin^2 \theta_W(M_t^2)$ на всем интервале $M_t \leq \mu \leq 2M_t$ при $n_f = 5$.

Пренебрегая пороговыми эффектами, не учитываемыми на однопетлевом уровне, и используя вышеприведенные значения $\alpha_s(M_t^2)$, $\alpha^{-1}(M_t^2)$, $\sin^2 \theta_W(M_t^2)$ и выражения (5), (9), получаем рис. 2, демонстрирующий зависимость $M_t/\bar{m}_t(\mu^2)$ от масштаба в первом порядке ТВ в СМ.

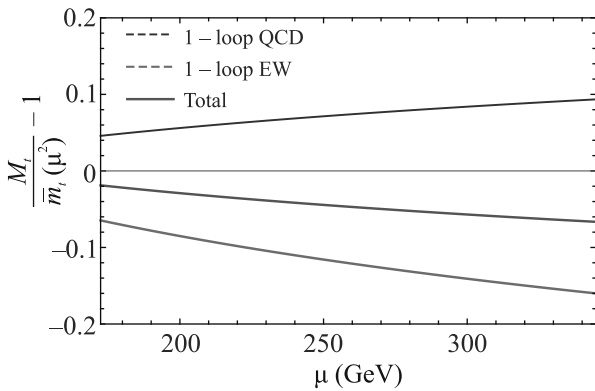


Рис. 2. (Цветной онлайн) Однопетлевые КХД и ЭС поправки к $M_t/\bar{m}_t(\mu^2) - 1$ в интервале $M_t \leq \mu \leq 2M_t$

Из этого рисунка видно, что изучаемая однопетлевая ЭС поправка доминирует над поправкой КХД во всей области $M_t \leq \mu \leq 2M_t$. Более того, она про-

тивоположна ему по знаку. Таким образом, суммарная поправка первого порядка ТВ оказывается отрицательной.

Следует также отметить, что однопетлевой ЭС вклад δ_1^{EW} (9) может быть *формально* обращен в нуль на масштабе $\mu_0^2 = M_t^2 \exp(-0.94) \approx (108 \text{ ГэВ})^2$. В этом случае можно рассматривать только КХД поправку, которая на данном масштабе станет равной $\delta_1^{\text{QCD}} \approx 1.6$. Интересно, что если оставить в (7)–(8) лишь лидирующий по величине вклад “головастика”, изображенного на рис. 1, то μ_0^2 перейдет в очень близкий масштаб $\tilde{\mu}_0^2 = M_t^2 \exp(-1)$. Однако, и μ_0 , и $\tilde{\mu}_0$ лежат ниже масштаба массы топ-кварка, где, как правило, не используется бегущая масса $\bar{m}_t(\mu^2)$, обычно рассматриваемая в области малых расстояний.

В настоящее время среди низкомасштабных обобщений бегущей $\overline{\text{MS}}$ массы тяжелого кварка понятие MSR-схемной массы $m_q^{\text{MSR}}(R^2)$ [41, 10] является одним из наиболее популярных. MSR-масса может быть продолжена до масштаба R , лежащего ниже массы рассматриваемого тяжелого кварка (в нашем случае – топ-кварка). На практике эта возможность осуществляется в КХД благодаря линейной зависимости разности полюсной и MSR-массы $M_q - m_q^{\text{MSR}}(R^2) = R \sum_{n \geq 1} \delta_n^{\text{MSR}} a_s^n(R^2)$ от масштаба R .

В первом порядке ТВ мы предлагаем рассмотреть следующее OS-MSR соотношение для топ-кварка, имеющее ту же линейную зависимость от R и расширяющее его КХД версию [10] на случай СМ:

$$M_t - m_t^{\text{MSR}}(R^2) = R \left(\frac{16}{3} \frac{\alpha_s(R^2)}{4\pi} - 24.26 \frac{\alpha(R^2)}{4\pi \sin^2 \theta_W(R^2)} \right). \quad (14)$$

Здесь коэффициенты $16/3$ и -24.26 есть независимые от РГ логарифмов члены в выражениях (5) и (9) соответственно. Заметим, что вклады “головастиков” не исчезают. В уравнении (14) они все еще содержатся в константном коэффициенте -24.26 первой ЭС поправки.

Используя теперь выражение (14), формулы (11) на масштабе $\mu^2 = R^2 = \mu_0^2$, определенном выше, и соотношение (12) с $R^2 = \mu_0^2$ вместо M_t^2 , получаем:

$$\frac{M_t}{m_t^{\text{MSR}}(\mu_0^2)} \approx 1 + \frac{\mathcal{O}(\alpha_s)}{0.03} - \frac{\mathcal{O}(\alpha)}{0.04}. \quad (15)$$

Таким образом, в рассматриваемом здесь подходе даже при $\mu_0 \approx 108 \text{ ГэВ}$ однопетлевая ЭС поправка, входящая в OS-MSR отношение (15), сравнима с поправкой КХД первого порядка ТВ. Упомянем также, что оба эти вклада немного меньше, чем те, которые приведены в (13) для соотношения $M_t/\bar{m}_t(M_t^2)$.

⁵⁾В самом деле, лишь трехпетлевые эффекты КХД рассматриваются в соотношении между полюсными и бегущими массами топ-кварка в работе [30] (см. формулу (3)) и в [31] (см. с. 23), где используется программа RunDec [40]. В работе [32] принимаются во внимание лишь однопетлевые вклады КХД (см. заключение этой статьи и сноску # 9).

2.2. *Оценки высших порядков теории возмущений.* Напомним, что к настоящему моменту времени в уравнении (1) вычислены не только однопетлевые поправки, но также и двух- [15, 16], трех- [17, 18], четырехпетлевые [19] КХД, смешанные двухпетлевые $\mathcal{O}(\alpha_s)$ КХД-ЭС [23, 24] и двухпетлевые $\mathcal{O}(\alpha^2)$ ЭС [21, 22] поправки. Учитывая эти результаты, можно получить следующее *приближенное выражение* для $M_t/\bar{m}_t(M_t^2)$ в схеме ФЕ, нормированное на масштабе полюсной массы t -кварка⁶:

$$\frac{M_t}{\bar{m}_t(M_t^2)} \approx 1 + 0.046 + 0.013 + 0.004 + 0.002 - \\ - 0.065 + 0.002 + 0.005 = 1.007 (!?) \quad (16)$$

Приближенные значения $\mathcal{O}(\alpha_s)$ и $\mathcal{O}(\alpha^2)$ вкладов непосредственно следуют из [23, 22]. Однако, поскольку используемое в этой работе значение полюсной массы топ-кварка слегка отличается от тех, которые применялись в [23, 22], то и обсуждаемые двухпетлевые поправки также немного отличаются от их аналогов, представленных в указанных работах.

Выражение (16) демонстрирует, что сумма одно- и двухпетлевых ЭС и смешанных КХД-ЭС поправок почти полностью компенсируется первыми четырьмя вкладками КХД. Отметим, что в отличие от $\mathcal{O}(\alpha)$ слагаемого, члены $\mathcal{O}(\alpha_s)$ и $\mathcal{O}(\alpha^2)$ положительны и сопоставимы с величиной $\mathcal{O}(\alpha_s^3)$ вклада. Таким образом, включение электрослабых эффектов в схеме ФЕ сильно влияет на величину суммарной поправки к соотношению между полюсной и бегущей массами топ-кварка также и в более высоких порядках ТВ.

Следует также упомянуть, что упрощенный случай, когда величины M_H, M_t предполагаются значительно большими, чем M_W, M_Z , рассматривался в [21, 22]. В этом приближении величина двухпетлевой ЭС поправки оказывается в 2 раза меньше истинного значения и сравнима с величиной $\mathcal{O}(\alpha_s^4)$ вклада. Кроме того, явный независимый расчет [33] позволяет сделать вывод, что не только однопетлевой ЭС член, представленный в уравнениях (7)–(8), полностью согласуется с его формой записи в виде разложения по

⁶ На масштабе $\mu^2 = \bar{m}_t^2(\bar{m}_t^2)$ КХД часть соотношения между M_t и \bar{m}_t имеет вид: $M_t/\bar{m}_t(\bar{m}_t^2) \approx 1 + 0.046 + 0.010 + 0.003 + 0.001$, где значение бегущей $\overline{\text{MS}}$ массы взято из PDG(20) и равно $\bar{m}_t(\bar{m}_t^2) = 162.5$ ГэВ. Соответствующее значение $\alpha_s(\bar{m}_t^2) = 0.1084$ константы связи сильного взаимодействия определяется при помощи представления в виде четырехпетлевого разложения по обратным степеням логарифмов с учетом условий сшивки (см. [12]). КХД часть выражения (16) с $\mu^2 = M_t^2$ незначительно отличается от аналогичного с $\mu^2 = \bar{m}_t^2(\bar{m}_t^2)$.

малому параметру $M_B^2/M_t^2 \ll 1$ (здесь $B = W, Z, H$), но также и двухпетлевой КХД-ЭС вклад, полученный в [23, 24]. Этот факт является дополнительным подтверждением надежности результатов сложных двухпетлевых вычислений, выполненных в [23, 24].

Перейдем к сравнению значения отношения $M_t/\bar{m}_t(M_t^2)$, приведенного в (16), с аналогичным $M_t/\bar{m}_t(\bar{m}_t^2)$ -отношением, следующим из результатов обработки экспериментальных данных Тэватрона [30] и БАК [31, 32], где одновременно определялась и полюсная, и бегущая в $\overline{\text{MS}}$ -схеме масса t -кварка (как уже было отмечено в сноске #6, различные нормировки $\mu^2 = M_t^2$ и $\mu^2 = \bar{m}_t^2(\bar{m}_t^2)$ не будут существенно изменять результат). Для этой цели опишем вкратце как фиксируются значения этих масс и насколько они точны.

Как известно, полюсная масса t -кварка чаще всего отождествляется с ее Монте-Карло (МС) аналогом (см., например, работы [30–32] и ссылки в них). Эта МС масса M_t^{MC} извлекается из экспериментальных данных по рождению топ-кварков в $p\bar{p}$ -столкновениях на Тэватроне (коллораации CDF и D0) (см., например, [42, 43]) и в pp -столкновениях на БАК (коллораации ATLAS и CMS) (см., например, [32, 31]). Она используется при сравнении измеренных сечений с предсказываемыми при помощи генераторов событий МС, включающих симуляции партонных ливней для моделирования эффектов адронизации (см. обзоры [2–4]). Масса МС определяется таким образом, чтобы быть наиболее согласованной с экспериментальными данными об инвариантной массе продуктов распада. Возникает концептуальный вопрос, как связать параметр M_t^{MC} с полюсной массой топ-кварка в рамках СМ. В настоящее время этот вопрос чрезвычайно актуален, поскольку текущая погрешность определения массы M_t^{MC} оказывается меньше, чем неопределенность ее теоретической интерпретации, которая по порядку величины составляет около $0.5 \div 1$ ГэВ [2–4, 44]⁷.

Например, анализ, выполненный коллаборацией ATLAS БАК в [32] на основе сопоставления МС массы топ-кварка с ее полюсным аналогом в процессе $t\bar{t} + 1$ -струя, приводит к следующему значению M_t с погрешностями различных типов: $M_t = 171.1 \pm 0.4(\text{stat}) \pm 0.9(\text{syst})_{-0.3}^{+0.7}(\text{theor})$ ГэВ (по сравнению со средним значением PDG(20) $M_t = 172.4 \pm 0.7$ ГэВ,

⁷ Отметим также другой интересный вопрос о возможной связи между широко используемыми в настоящее время МС и полюсной массами топ-кварка с их аналогом, который может быть определен из инвариантных масс $W^+b, W^-\bar{b}$ процесса $pp \rightarrow W^+W^-b\bar{b}$ и ширины распада t -кварка (см. работу [45] и ссылки в ней).

которое мы использовали в нашей работе). Данная теоретическая погрешность включает в себя вышеупомянутые неопределенности в интерпретации МС массы.

Наряду с полюсной, определяются также значения бегущей массы топ-кварка [30–32] путем переопределения M_t его аналогом в $\overline{\text{MS}}$ -схеме. Например, современное значение бегущей массы топ-кварка, полученное коллаборацией ATLAS [32], равно $\overline{m}_t(\overline{m}_t^2) = 162.9 \pm 0.5(\text{stat}) \pm 1.0(\text{syst})_{-1.2}^{+2.1}(\text{theor})$ ГэВ (по сравнению со средним значением $\overline{m}_t(\overline{m}_t^2) = 162.5_{-1.5}^{+2.1}$ ГэВ, взятым из PDG(20)).

Изучение поведения сечения $\sigma(t\bar{t})$ в pp -столкновения позволяет напрямую определить значение $\overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$ [46–49]. В этих работах данные сечения с учтенными поправками СМ, первоначально параметризованные через полюсные массы частиц, выражаются через массы в $\overline{\text{MS}}$ -схеме без учета ЭС эффектов.

Найдем теперь значение отношения $M_t/\overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$, которое следует из результатов, например, коллаборации ATLAS [32] по одновременному определению полюсной и бегущей массы топ-кварка. Используя вышеприведенные значения этих масс, получаем, что $M_t/\overline{m}_t(\overline{m}_t^2) = 1.050_{-0.012}^{+0.017}$ (по сравнению с $M_t/\overline{m}_t(\overline{m}_t^2) = 1.061_{-0.011}^{+0.014}$, которое вытекает из усредненных данных PDG(20)). Отсюда явно видно, что в пределах полосы ошибок оба эти значения противоречат тому, что представлено в (16). Эта проблема также наблюдается для отношения $M_t/\overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$, значение которого следует из аналогичного анализа коллабораций D0 и CMS (см., например, [30] и [31]). Причина этого несоответствия связана с большой величиной ЭС поправок, включенных в (16) в рамках схемы ФЕ, но не учитываемых в процессе определения бегущей массы топ-кварка, рассмотренном выше. Перейдем к более подробному обсуждению этого вопроса и выясним, где именно теряются эти ЭС эффекты.

3. Обсуждения. Из уравнения (16) следует, что однопетлевой ЭС вклад в схеме ФЕ в среднем в 4–6 раз превышает среднеквадратичные погрешности, указанные выше для отношения $M_t/\overline{m}_t(\overline{m}_t^2)$, значение которого определяется из результатов обработки данных БАК (а также Тэватрона и PDG(20)). Тем не менее, как уже было отмечено ранее, этот ЭС эффект игнорируется членами различных коллабораций, когда в исследованиях осуществляется переход от полюсной к бегущей в $\overline{\text{MS}}$ -схеме массе топ-кварка [1, 30–32].

В различных феноменологически ориентированных работах этот эффект не учитывается, когда се-

чение $\sigma(t\bar{t})$, изначально параметризованное через полюсные массы частиц и содержащее поправки СМ, переписывается в терминах массы в $\overline{\text{MS}}$ -схеме. В процессе этого преобразования в соотношении между M_t и \overline{m}_t учитываются *только* эффекты КХД⁸⁾. С нашей точки зрения, анализ, проведенный в разделе 2, указывает на то, что исследования, выполненные в этих работах, также должны быть дополнены включением ЭС поправок к рассматриваемому соотношению масс топ-кварка. Как следует из (16), они могут привести к существенному сдвигу значений получаемых там бегущих масс топ-кварка.

В заключение следует подчеркнуть, что, вообще говоря, в ЭС секторе понятие бегущей массы кварка в $\overline{\text{MS}}$ -схеме может быть определено несколькими способами. Обсудим вкратце основные подходы, рассматриваемые в литературе для его определения. В этой работе мы использовали $\overline{\text{MS}}$ массу топ-кварка в схеме ФЕ [25] согласно соотношению $\overline{m}_t(\mu^2) = y_t(\mu^2)v(\mu^2)/\sqrt{2}$, которое возникает в спонтанно нарушенной фазе. Как уже упоминалось выше, эта схема позволяет сохранить явную калибровочную инвариантность в соотношении между полюсной и бегущей массой топ-кварка. При этом необходимо учитывать вклады “головастиков”, обеспечивающих выполнение данного свойства (см. [20–24]).

Другой подход, где используется соотношение $\overline{m}_t(\mu^2) = y_t(\mu^2)v_{\text{eff}}(\mu^2)/\sqrt{2}$, приводит к бегущей массе, зависящей от калибровки [27, 28]. Здесь эффективное вакуумное среднее $v_{\text{eff}}(\mu^2)$ определяется из условия минимизации эффективного потенциала поля Хиггса. В случае применения данной схемы перенормировок соотношение между полюсной и бегущей массой не содержит больших вкладов диаграмм-головастиков, но существенно зависит от калибровки [27, 28].

Еще одна возможность состоит в рассмотрении соотношения $\overline{m}_t(\mu^2) = y_t(\mu^2)v_0/\sqrt{2}$ с фиксированным значением $v_0 = (\sqrt{2}G_F)^{-1/2} \approx 246$ ГэВ, где постоянная Ферми G_F является константой связи эффективной низкоэнергетической теории с четырехфермионным взаимодействием. Ее значение обычно находится из экспериментальных данных по распаду $\mu \rightarrow \nu_\mu \bar{\nu}_e e$ [1]. В таком калибровочно-инвариантном подходе масса t -кварка бежит как юкавская константа связи $y_t(\mu^2)$, умноженная на μ -независимый фактор $v_0/\sqrt{2}$, и также не зависит от вкладов “головастиков” [20–22, 24]. Это приводит к значительно мень-

⁸⁾См. ур. (42)–(44) в [46]; обсуждения ниже ур. (5) в [47], где был выполнен обновленный анализ работы [46]; ур. (9)–(11) в [48]; ур. (8)–(12) в [49].

шим ЭС поправкам, чем в схеме ФЕ [21]. Однако, отсутствие бега вакуумного среднего постулируется “руками”, и фиксированное значение v_0 не изменяется при переходе из низкоэнергетической области в высокоэнергетическую, где определяется масса топ-кварка.

Таким образом, в настоящее время в ЭС секторе нет однозначного определения бегущей массы топ-кварка. В данной работе мы использовали ее первое определение, которое, однако, приводит к большим ЭС поправкам к соотношению между M_t и $\overline{m}_t(M_t^2)$, не учитываемым при анализе данных Тэватрона и БАК. Изучение ЭС эффектов в других схемах продолжается.

4. Заключение. Включение известных двухпетлевых электрослабых поправок в анализ соотношения между полюсной и бегущей в \overline{MS} -схеме массой t -кварка существенно влияет на величину суммарной поправки СМ между этими параметрами в рамках схемы Флейшера–Егерлейнера, которая, с теоретической точки зрения, является наиболее естественной среди прочих в пертурбативных исследованиях СМ. Оказывается, что суммарные четырехпетлевые КХД и двухпетлевые ЭС поправки практически полностью компенсируют друг друга, приводя к соотношению $M_t \approx \overline{m}_t(M_t^2)$. Этот факт находится в серьезном несоответствии с результатами одновременного определения полюсных и бегущих масс топ-кварка, следующими как из анализа данных БАК, так и Тэватрона, где учитываются только эффекты КХД в соотношении между M_t и \overline{m}_t . Если принять во внимание все современные погрешности, входящие в определение этих массовых параметров, то этот вывод не изменится. Более того, ЭС эффекты для рассматриваемого соотношения игнорируются в феноменологически ориентированных работах, в которых сечение $\sigma(t\bar{t})$, первоначально параметризованное через полюсную массу t -кварка, затем переписывается в терминах \overline{MS} -массы, которая впоследствии определяется численно. Это вызывает некоторую настороженность и поднимает определенные вопросы о значениях зависящих от масштаба масс топ-кварка, полученных из данных БАК и Тэватрона, и об их представлении в текущем выпуске группы PDG. Фактически, эти результаты должны быть дополнены учетом ЭС поправок (в любой из схем, в которой рассматривается перенормировка бегущей массы), а извлеченная при этом масса должна быть надлежащим образом определена в зависимости от применения конкретной схемы в СМ.

Мы благодарны Ф. Егерлейнеру и М. Ю. Калмыкову за полезные комментарии и разъяснения,

которые были приняты во внимание в процессе написания этой работы. Также мы признательны А. Б. Арбузову и в особенности Н. В. Красникову за воодушевляющие и плодотворные обсуждения.

Работа В. С. Молокоедова поддержана грантом Российского научного фонда # 21-71-30003 (исследование представления однопетлевой ЭС поправки) и грантом Московского центра фундаментальной и прикладной математики # 075-15-2019-1621 (численный анализ).

1. P. A. Zyla, R. M. Barnett, J. Beringer et al. (Particle data Collaboration), PTEP **2020**(8), 083C01 (2020).
2. P. Nason, in *From My Vast Repertoire...: Guido Altarelli's Legacy*, ed. by S. Forte, A. Levy, and G. Ridolfi, World Scientific, Singapore (2019), p. 123; arXiv:1712.02796 [hep-ph].
3. G. Corcella, Front. Phys. **7**, 54 (2019); arXiv:1903.06574 [hep-ph].
4. A. H. Hoang, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **70**, 225 (2020); arXiv:2004.12915 [hep-ph].
5. M. Beneke and V. M. Braun, Nucl. Phys. B **426**, 301 (1994); arXiv:hep-ph/9402364 [hep-ph].
6. I. I. Y. Bigi, M. A. Shifman, N. G. Uraltsev, and A. I. Vainshtein, Phys. Rev. D **50**, 2234 (1994); arXiv:hep-ph/9402360 [hep-ph].
7. M. Beneke, Phys. Rep. **317**, 1 (1999); arXiv:hep-ph/9807443 [hep-ph].
8. A. Pineda, JHEP **0106**, 022 (2001); hep-ph/0105008.
9. M. Beneke, P. Marquard, P. Nason, and M. Steinhauser, Phys. Lett. B **775**, 63 (2017); arXiv:1605.03609 [hep-ph].
10. A. H. Hoang, A. Jain, C. Lepenik, V. Mateu, M. Preisser, I. Scimemi, and I. W. Stewart, JHEP **1804**, 003 (2018); arXiv:1704.01580 [hep-ph].
11. A. L. Kataev and V. S. Molokoedov, JETP Lett. **108**(12), 777 (2018); arXiv:1811.02867 [hep-ph].
12. A. L. Kataev and V. S. Molokoedov, Eur. Phys. J. C **80**(12), 1160 (2020); arXiv:1807.05406 [hep-ph].
13. P. Ball, M. Beneke, and V. M. Braun, Nucl. Phys. B **452**, 563 (1995); arXiv:hep-ph/9502300 [hep-ph].
14. R. Tarrach, Nucl. Phys. B **183**, 384 (1981).
15. N. Gray, D. J. Broadhurst, W. Grafe, and K. Schilcher, Z. Phys. C **48**, 673 (1990).
16. L. V. Avdeev and M. Y. Kalmykov, Nucl. Phys. B **502**, 419 (1997); hep-ph/9701308.
17. K. Melnikov and T. van Ritbergen, Phys. Lett. B **482**, 99 (2000); hep-ph/9912391.
18. K. G. Chetyrkin and M. Steinhauser, Nucl. Phys. B **573**, 617 (2000); hep-ph/9911434.
19. P. Marquard, A. V. Smirnov, V. A. Smirnov, M. Steinhauser, and D. Wellmann, Phys. Rev. D **94**(7), 074025 (2016); arXiv:1606.06754 [hep-ph].

20. R. Hempfling and B. A. Kniehl, *Phys. Rev. D* **51**, 1386 (1995); arXiv:hep-ph/9408313 [hep-ph].
21. B. A. Kniehl and O.L. Veretin, *Nucl. Phys. B* **885**, 459 (2014); Erratum: *Nucl. Phys. B* **894**, 56 (2015); arXiv:1401.1844 [hep-ph].
22. B. A. Kniehl, A. F. Pikelner, and O.L. Veretin, *Nucl. Phys. B* **896**, 19 (2015); arXiv:1503.02138 [hep-ph].
23. F. Jegerlehner and M. Y. Kalmykov, *Nucl. Phys. B* **676**, 365 (2004); arXiv:hep-ph/0308216 [hep-ph].
24. F. Jegerlehner, M. Y. Kalmykov, and B. A. Kniehl, *Phys. Lett. B* **722**, 123 (2013); arXiv:1212.4319 [hep-ph].
25. J. Fleischer and F. Jegerlehner, *Phys. Rev. D* **23**, 2001 (1981).
26. A. I. Bochkarev and R. S. Willey, *Phys. Rev. D* **51**, 2049 (1995); arXiv:hep-ph/9407261 [hep-ph].
27. S. P. Martin, *Phys. Rev. D* **93**(9), 094017 (2016); arXiv:1604.01134 [hep-ph].
28. S. P. Martin and D. G. Robertson, *Phys. Rev. D* **100**(7), 073004 (2019); arXiv:1907.02500 [hep-ph].
29. G. Passarino, *Acta Phys. Polon. B* **52**, 533 (2021); arXiv:2104.13569 [hep-ph].
30. V. M. Abazov, B. Abbott, B. S. Acharya et al. (D0 Collaboration), *Phys. Lett. B* **703**, 422 (2011); arXiv:1104.2887 [hep-ex].
31. A. M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam et al. (CMS Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **79**(5), 368 (2019); arXiv:1812.10505 [hep-ex].
32. G. Aad, B. Abbott, D. C. Abbott et al. (ATLAS Collaboration), *JHEP* **11**, 150 (2019); arXiv:1905.02302 [hep-ex].
33. D. Eiras and M. Steinhauser, *JHEP* **02**, 010 (2006); arXiv:hep-ph/0512099 [hep-ph].
34. F. Bezrukov, M. Y. Kalmykov, B. A. Kniehl, and M. Shaposhnikov, *JHEP* **10**, 140 (2012); arXiv:1205.2893 [hep-ph].
35. F. Jegerlehner, M. Y. Kalmykov, and O. Veretin, *Nucl. Phys. B* **658**, 49 (2003); arXiv:hep-ph/0212319 [hep-ph].
36. J. Erler and M. J. Ramsey-Musolf, *Phys. Rev. D* **72**, 073003 (2005); arXiv:hep-ph/0409169 [hep-ph].
37. J. Davies and F. Herren, *Phys. Rev. D* **104**(5), 053010 (2021); arXiv:2104.12780 [hep-ph].
38. G. Degrossi and F. Maltoni, *Nucl. Phys. B* **724**, 183 (2005); arXiv:hep-ph/0504137 [hep-ph].
39. S. Actis, G. Passarino, C. Sturm, and S. Uccirati, *Nucl. Phys. B* **811**, 182 (2009); arXiv:0809.3667 [hep-ph].
40. K. G. Chetyrkin, J. H. Kuhn, and M. Steinhauser, *Comput. Phys. Commun.* **133**, 43 (2000); arXiv:hep-ph/0004189 [hep-ph].
41. A. H. Hoang, A. Jain, I. Scimemi, and I. W. Stewart, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 151602 (2008); arXiv:0803.4214 [hep-ph].
42. CDF and D0, arXiv:1608.01881 [hep-ex].
43. V. M. Abazov, B. Abbott, B. S. Acharya et al. (D0 Collaboration), *Phys. Rev. D* **95**(11), 112004 (2017); arXiv:1703.06994 [hep-ex].
44. B. Bachu, A. H. Hoang, V. Mateu, A. Pathak, and I. W. Stewart, *Phys. Rev. D* **104**(1), 014026 (2021); arXiv:2012.12304 [hep-ph].
45. A. Baskakov, E. Boos, and L. Dudko, *Phys. Rev. D* **98**(11), 116011 (2018); arXiv:1807.11193 [hep-ph].
46. U. Langenfeld, S. Moch, and P. Uwer, *Phys. Rev. D* **80**, 054009 (2009); arXiv:0906.5273 [hep-ph].
47. S. Alekhin, A. Djouadi, and S. Moch, *Phys. Lett. B* **716**, 214 (2012); arXiv:1207.0980 [hep-ph].
48. J. Fuster, A. Irlles, D. Melini, P. Uwer, and M. Vos, *Eur. Phys. J. C* **77**(11), 794 (2017); arXiv:1704.00540 [hep-ph].
49. S. Catani, S. Devoto, M. Grazzini, S. Kallweit, and J. Mazzitelli, *JHEP* **08**(08), 027 (2020); arXiv:2005.00557 [hep-ph].

Всегда ли существует форм-фактор в излучении Смита–Парселла?

Д. Ю. Сергеева^{+*}, А. А. Тищенко^{+×◦1)}

⁺Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

^{*}Международная научно-образовательная лаборатория радиационной физики,
Национальный исследовательский университет “БелГУ”, 308034 Белгород, Россия

[×]Национальный исследовательский университет “ИТМО”, 197101 С.-Петербург, Россия

[◦]Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 апреля 2022 г.

После переработки 30 апреля 2022 г.

Принята к публикации 4 мая 2022 г.

Общепринятый подход учета когерентности от сгустков заряженных частиц состоит в умножении интенсивности излучения от одной частицы на форм-фактор сгустка, учитывающий его размеры, форму и распределение частиц. В настоящей работе мы показываем, что в поляризованном излучении для широкого класса структур, таких как фотонные кристаллы и метаповерхности, этот подход, вообще говоря, некорректен. Построена теория когерентного излучения Смита–Парселла от таких структур. Показано, что общепринятый подход работает только при выполнении двух условий: 1) точка наблюдения лежит в плоскости, содержащей траекторию движения сгустка и нормаль к поверхности мишени; 2) радиус сгустка намного меньше эффективного радиуса действия собственного поля движущегося электрона.

DOI: 10.31857/S1234567822120035, EDN: imkkgv

1. Введение. Когерентность в излучении пучков заряженных частиц – это основное отличие синхротронов 3-го и особенно 4-го поколения от более ранних, и ключевое явление в физике самых ярких источников излучения, построенных на сегодня человеком – лазеров на свободных электронах. Кроме того, именно когерентность излучения лежит в основе работы систем диагностики размеров электронных сгустков на современных ускорителях и коллайдерах. Действительно, при постановке любых экспериментов по регистрации переходного излучения [1], дифракционного излучения и более известного его частного случая – излучения Смита–Парселла (ИСП), излучения Вавилова–Черенкова [2–4] используются сгустки заряженных частиц, и на этапе сравнения измеренных кривых с расчетными при обработке данных необходимо учитывать, как размеры и форма сгустка влияют на распределение интенсивности по углам и частотам. Кроме того, в существующих источниках электромагнитного излучения задействующих механизм генерации ИСП (например, оротрон [5]) эффекты когерентности также важны.

Существует общепринятый подход в теории, как учесть эффекты когерентности. Он заключается в расчете распределения интенсивности по углам

и частотам для одного электрона и последующем умножении одночастичной интенсивности на форм-фактор сгустка. Последний есть сумма двух слагаемых – когерентного и некогерентного [6] – и содержит всю информацию о форме и размерах сгустка. Обычно некогерентное слагаемое принимается равным числу электронов сгустка, а когерентный – квадрату числа электронов, умноженному на квадрат модуля фурье-образа функции распределения электронов в сгустке. В работе [6] было показано, что для краевых типов излучения, например, ИСП, дифракционного черенковского и дифракционного излучения когерентное и некогерентное слагаемые форм-фактора другие. В частности, показано, что некогерентный форм-фактор также содержит информацию о поперечных размерах сгустка, а когерентное отличается от просто фурье-образа функции распределения. Существенно, что, как мы указывали в работе [6], эти выводы верны для мишеней, однородных вдоль поверхности в направлении, поперечном движению электронного сгустка.

В этой статье мы покажем, что если мишень имеет неоднородность в направлении, перпендикулярном движению электронного сгустка, то в ИСП и дифракционном излучении идеология умножения одночастичной интенсивности на форм-фактор не всегда неверна и укажем пределы ее применимости. Для

¹⁾e-mail: tishchenko@mephi.ru

этого проведем расчет поля ИСП от электронного сгустка от мишени, периодической в двух направлениях – вдоль и перпендикулярно движению сгустка. Мишени такого рода – метаповерхности, фотонные кристаллы – сегодня стали предметом активных исследований ввиду возможности конструировать оптические свойства поверхности, управляя спектром плазмонных резонансов, ИСП, конструируя микро- и наноантенны [7], разрабатывать новые типы оптических модуляторов [8] и фильтров [9], и т.д. В физике генерации излучения свободными электронами структуры такого типа также вызывают большое внимание [10–12], как в плане диагностики релятивистских электронных пучков, так и в плане конструирования новых источников излучения.

2. Общепринятый подход. ИСП возбуждается при пролете заряженных частиц вблизи мишени, которая имеет периодичность в направлении движения заряда. ИСП было экспериментально зарегистрировано в 1953 г. [13] и позже детально изучено теоретически и экспериментально для дифракционных решеток разных профилей и из разных материалов [14–16]. Дифракционным излучение называют, если неоднородность вдоль движения пучка произвольная или неперIODическая.

Часто, для учета эффектов когерентности, обусловленных наличием электронного сгустка, пользуются следующим алгоритмом. Рассчитывается интенсивность излучения от одного электрона I_1 , а затем она умножается на форм-фактор сгустка F . Форм-фактор берут в виде [1]:

$$F = N_e + N_e(N_e - 1)F_{\text{coh}}, \quad (1)$$

где N_e – число электронов в сгустке, F_{coh} – квадрат модуля фурье-образа функции распределения электронов в сгустке $f(\mathbf{r}_e)$:

$$F_{\text{coh}} = \left| \int d^3r_e \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_e) f(\mathbf{r}_e) \right|^2, \quad (2)$$

\mathbf{k} – волновой вектор излучения. Такой вид форм-фактора годится для синхротронного излучения, включая излучение на отдельных магнитах и в ондуляторах, или излучения от мишеней, размер которых можно считать бесконечными в направлении, поперечном движению сгустка (вдоль оси OY). Интегрирование ведется по радиус-векторам электрона относительно центра сгустка \mathbf{r}_e .

Для дифракционного излучения или ИСП форм-фактор имеет вид [6]:

$$F = N_e F_{\text{inc}} + N_e(N_e - 1)F_{\text{coh}}, \quad (3)$$

где

$$F_{\text{inc}} = \int d^3r_e |\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_e)|^2 f(\mathbf{r}_e), \quad (4)$$

$$F_{\text{coh}} = \left| \int d^3r_e \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_e) f(\mathbf{r}_e) \right|^2, \quad (5)$$

и $\mathbf{q} = (\beta^{-1}, n_y, -i\gamma^{-1}\beta^{-1}\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2 n_y^2})\omega/c$, где c – скорость света в вакууме, ω – частота излучения, $\beta = v/c$, v – скорость электронов сгустка, γ – Лоренц-фактор электронов, n_y – y -компонента единичного волнового вектора излучения.

В работе [6] было показано, что такое отличие формулы от формулы обусловлено разбросом расстояний от электронов до мишени, см. рис. 1. Собственное поле электронов убывает с расстоянием, поэтому электроны, находящиеся на разном расстоянии от мишени, по-разному поляризуют мишень. Коротко можно сказать, что разница обусловлена наличием разных импакт-параметров. Импакт-параметр – это кратчайшее расстояние между траекторией электрона и мишенью, см. h_1 и h_2 на рис. 1.

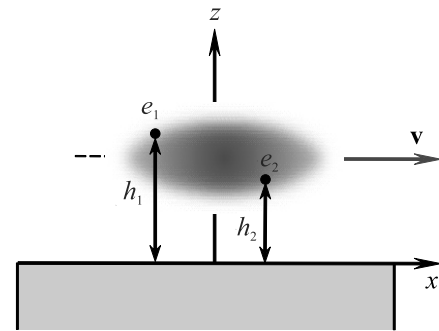


Рис. 1. (Цветной онлайн) Генерация дифракционного излучения или излучения Смита–Парселла. Сгусток движется вдоль оси Ox с постоянной скоростью \mathbf{v} . Электроны сгустка e_1 и e_2 находятся на разных расстояниях от мишени h_1 и h_2 , вносят разный вклад в поляризацию мишени собственным полем

В качестве примера рассмотрим дву-периодическую мишень – двумерный фотонный кристалл. Часто такого рода мишени также называют метаповерхностями. Строго говоря, приставка “мета” должна бы означать, что длина волны значительно превышает не только размеры отдельных элементов, но и расстояние между ними [17], однако сегодня, особенно в западной литературе, этим условием пренебрегают, имея в виду под метаповерхностями искусственно собираемые двумерные структуры с возможностью конструирования нужных оптических свойств. Мы, для некоторой строгости, здесь все же будем придерживаться термина двумерный фотонный кристалл

(2D photonic crystal, или photonic crystal slab). Кристалл будем рассматривать именно двумерным, чтобы не вдаваться в вопрос о влиянии запрещенных зон внутри кристалла на характеристики ИСП (этот вопрос был с помощью численного анализа рассмотрен в серии работ Ohtaka с соавторами, см. [18–22]).

На рисунке 2 изображена схема возбуждения ИСП при пролете электронного сгустка (синяя

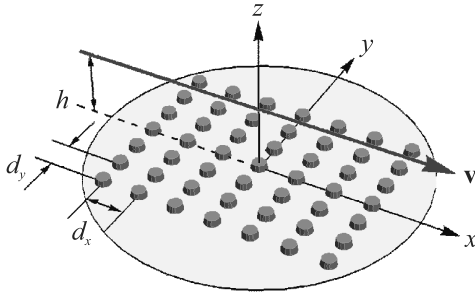


Рис. 2. (Цветной онлайн) Система координат и схема возбуждения излучения Смита–Парселла электронным пучком от метаповерхности

стрелка) над поверхностью двумерного фотонного кристалла. Поверхность представляет собой упорядоченный набор субволновых частиц, т.е. частиц, характерный размер которых L много меньше длины волны излучения λ : $L \ll \lambda$. Частицы расположены в плоскости, параллельной траектории электронов. Выберем систему координат таким образом, чтобы эта плоскость совпадала с плоскостью XY , начало координат лежало в центре мишени, а сгусток двигался вдоль оси OX с постоянной скоростью. Частицы расположены периодически в двух направлениях: вдоль траектории движения сгустка с периодом d_x и перпендикулярно траектории с периодом d_y . Суммарное число частиц конечно и равно N .

Радиус-векторы частиц мишени, изображенной на рис. 2, можно представить в виде:

$$\mathbf{R}_m = d_x m_x \mathbf{e}_x + d_y m_y \mathbf{e}_y \equiv X_m \mathbf{e}_x + Y_m \mathbf{e}_y, \quad (6)$$

где индексы m_x и m_y – целые числа, отсчитывающие частицы мишени вдоль осей OX и OY , соответственно. Например, можно задать частицы таки образом, чтобы m_x и m_y принимали значения от $-(N_{x,y}-1)/2$ до $(N_{x,y}-1)/2$. Тогда общее число элементов вдоль осей OX и OY равно N_x и N_y , а полное число элементов решетки есть $N = N_x N_y$.

В выбранной системе координат скорость задается величиной $\mathbf{v} = (v, 0, 0)$. Для сгустков ультрарелятивистских электронов в первом приближении можно не учитывать дисперсию по скоростям и энергиям.

Это значит, все электроны будут описываться таким же вектором скорости. Центр сгустка при движении находится на постоянном расстоянии h от плоскости мишени.

Для рассматриваемой геометрии выражение для спектрально-углового распределения излучения от одного электрона I_1 было получено в работе [23]. Умножим это выражение на форм-фактор и для удобства выпишем полную формулу для спектрально-углового распределения излучения от сгустка:

$$I = I_{\text{inc}} + I_{\text{coh}}, \quad (7)$$

где

$$I_{\text{inc}} = \frac{e^2 \omega^2 |\alpha(\omega)|^2}{\pi^2 c^3 \beta^4 \gamma^2} S k^4 N_e \iint dy_e dz_e \times \\ \times e^{-2 \frac{\omega z_e}{\gamma v} \sqrt{1 + \gamma^2 \beta^2 n_y^2}} f_{tr} \times$$

$$\times \left\{ \left| \sum_{m_y} e^{-i d_y m_y k_y} \mathbf{P}_m \right|^2 - \left| \sum_{m_y} e^{-i d_y m_y k_y} \frac{\mathbf{k} \mathbf{P}_m}{k} \right|^2 \right\}, \quad (8)$$

$$I_{\text{coh}} = \frac{e^2 \omega^2 |\alpha(\omega)|^2}{\pi^2 c^3 \beta^4 \gamma^2} k^4 \times$$

$$\times \left| \iint dy_e dz_e e^{-i k_y y_e - z_e \frac{\omega}{\gamma v} \sqrt{1 + \gamma^2 \beta^2 n_y^2}} f_{tr} \right|^2 \times \\ \times N_e (N_e - 1) S F_l \times$$

$$\times \left\{ \left| \sum_{m_y} e^{-i d_y m_y k_y} \mathbf{P}_m \right|^2 - \left| \sum_{m_y} e^{-i d_y m_y k_y} \frac{\mathbf{k} \mathbf{P}_m}{k} \right|^2 \right\}, \quad (9)$$

Для получения этих выражений мы пренебрегли корреляциями между электронами и разделили функцию распределения электронов в сгустке $f(\mathbf{r}_e)$ на две функции распределения в продольном направлении (вдоль оси OX) $f_l \equiv f(x_e)$ и в поперечном направлении $f_{tr} \equiv f(y_e, z_e)$:

$$f(\mathbf{r}_e) = f_l(x_e) f_{tr}(y_e, z_e). \quad (10)$$

Это позволило выделить продольный форм-фактор в виде отдельного множителя

$$F_l = \left| \int dx_e f_l \exp\left(-i \omega \frac{x_e}{v}\right) \right|^2. \quad (11)$$

Функции $f(\mathbf{r}_e)$, $f_l(x_e)$ и $f_{tr}(y_e, z_e)$ нормированы на единицу. Продольный форм-фактор (11) входит только в слагаемое, описывающее когерентное излучение.

В выражениях (8)–(9) e – заряд электрона, $\alpha(\omega)$ – функция поляризуемости частиц, составляющих мишень, k – модуль волнового вектора излучения,

$$\mathbf{P}_m = \frac{\mathbf{v}}{v\gamma} K_0 \left(\frac{\omega}{v\gamma} \rho_m \right) + i \frac{\boldsymbol{\rho}_m}{\rho_m} K_1 \left(\frac{\omega}{v\gamma} \rho_m \right), \quad (12)$$

$$\boldsymbol{\rho}_m = Y_m \mathbf{e}_y - h \mathbf{e}_z. \quad (13)$$

Здесь $K_{0,1}$ – модифицированные функции Бесселя (функции Макдональда) нулевого и первого порядков. Отметим, что векторы \mathbf{P}_m и $\boldsymbol{\rho}_m$ не зависят от переменной интегрирования \mathbf{r}_e , т.е. от положения электрона в сгустке. Суммирование по индексу m_x в результате математических преобразований привело к возникновению множителя S :

$$S = \frac{\sin^2(d_x N_x (k_x - \omega/v)/2)}{\sin^2(d_x (k_x - \omega/v)/2)}. \quad (14)$$

Фактор S – характерный множитель для ИСП, в основном определяющий вид спектрального и углового распределения излучения. Условие максимальности фактора S дает дисперсионное соотношение:

$$\lambda s = d_x (\beta^{-1} - n_x), \quad (15)$$

где s – целое число ($s > 0$). Выражение (15) совпадает с классическим дисперсионным соотношением ИСП от обычной дифракционной решетки [13].

3. Последовательный подход. Найдем спектрально-угловую плотность излучения последовательным подходом: рассчитаем поле излучения от каждого электрона и усредним по положениям всех электронов сгустка. Схема возбуждения излучения и мишень такие, как и выше, см. рис. 2.

Одночастичная теория ИСП от рассматриваемых структур была подробно описана нами в недавних работах [23, 24]. Для расчета характеристик излучения от сгустка необходимо аналогично вычислить поля излучения для каждого электрона, а затем усреднить их суперпозицию по положениям электронов. Несмотря на сходство выражений с одночастичной теорией, для целостности изложения кратко приведем здесь схему вычисления поля излучения для N_e электронов.

Плотность токов, соответствующая одному электрону, который в начальный момент времени находится в точке с координатами $\mathbf{r}_e + h \mathbf{e}_z = (x_e, y_e, z_e + h)$, может быть записана в виде:

$$\mathbf{j}_e^0(\mathbf{r}, t) = ev \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t - \mathbf{r}_e - h \mathbf{e}_z), \quad (16)$$

где e – заряд электрона, δ – дельта-функция. Собственное поле движущегося электрона определяется

плотностью тока (16) и его фурье-образ выражается формулой:

$$\mathbf{E}_e^0(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{ie\omega}{\pi v^2 \gamma} \exp \left[i\omega \frac{x - x_e}{v} \right] \times \left\{ \frac{\mathbf{v}}{v\gamma} K_0 \left(\frac{\omega \rho_e}{v\gamma} \right) + i \frac{\boldsymbol{\rho}_e}{\rho_e} K_1 \left(\frac{\omega \rho_e}{v\gamma} \right) \right\}, \quad (17)$$

где ω – частота, $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$ – Лоренц-фактор электронов, $\beta = v/c$, c – скорость света в вакууме, K_0 и K_1 – модифицированные функции Бесселя нулевого и первого порядков, и введен вектор

$$\boldsymbol{\rho}_e = (y - y_e) \mathbf{e}_y + (z - z_e - h) \mathbf{e}_z. \quad (18)$$

Под действием внешнего поля типа (17) в частицах мишени наводится динамическая поляризация, и как следствие происходит излучение. В условиях малости размера частиц по сравнению с длиной волны излучения и пренебрежимо малого взаимодействия между частицами наведенную плотность тока в частицах мишени можно описывать выражением

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{d}(\mathbf{R}_m, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m). \quad (19)$$

Здесь суммирование ведется по всем частицам мишени, \mathbf{R}_m – координата m -й частицы мишени, а $\mathbf{d}(\mathbf{R}_m, t)$ – дипольный момент в точке \mathbf{R}_m , фурье-образ которого определяется выражением:

$$\mathbf{d}(\mathbf{r}, \omega) = \alpha(\omega) \sum_e \mathbf{E}_e^0(\mathbf{r}, \omega), \quad (20)$$

где суммирование ведется по всем N_e электронам сгустка, а функция $\alpha(\omega)$ является поляризуемостью частиц и характеризует отклик частицы на внешнее воздействие (все частицы мишени для упрощения предполагаются идентичными, что не ограничивает общности рассмотрения).

Фурье-образ поля излучения является решением системы уравнений Максвелла и определяется фурье-образом плотности тока (19):

$$\mathbf{E}^{\text{rad}}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{4\pi i}{\omega} \left(\mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{[\mathbf{q}, \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega)]}{q^2 - k^2} \right), \quad (21)$$

где $k = \omega/c$. На далеких расстояниях, т.е. когда $kr \gg 1$, фурье-образ поля излучения примет вид:

$$\mathbf{E}^{\text{rad}}(\mathbf{r}, \omega) = -i \frac{(2\pi)^3}{\omega} \frac{e^{ikr}}{r} [\mathbf{k}, [\mathbf{k}, \mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega)]]. \quad (22)$$

Собирая окончательно все приведенные выше формулы, получим явный вид выражения для поля излучения электронного сгустка от дупериодической мишени:

$$\mathbf{E}^{\text{rad}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{ie\omega}{\pi v^2 \gamma} \alpha(\omega) \frac{e^{ikr}}{r} \times$$

$$\times \sum_e e^{-i\omega \frac{x_e}{v}} \sum_m e^{i(\omega \frac{y}{v^2} - \mathbf{k}) \mathbf{R}_m [\mathbf{k}, [\mathbf{k}, \mathbf{P}_{me}]]}, \quad (23)$$

где введены обозначения:

$$\mathbf{P}_{me} = \frac{\mathbf{v}}{v\gamma} K_0 \left(\frac{\omega \rho_{me}}{v\gamma} \right) + i \frac{\rho_{me}}{\rho_{me}} K_1 \left(\frac{\omega \rho_{me}}{v\gamma} \right), \quad (24)$$

$$\rho_{me} = (Y_m - y_e) \mathbf{e}_y - (h + z_e) \mathbf{e}_z. \quad (25)$$

Таким образом, поле излучения, генерируемое сгустком, зависит от всех возможных разностей координат электронов и частиц мишени ρ_{me} . Эти векторы ρ_{me} имеют смысл эффективного импакт-параметра: кратчайшее расстояние от траектории e -го электрона до m -го элемента мишени, см. рис. 3.

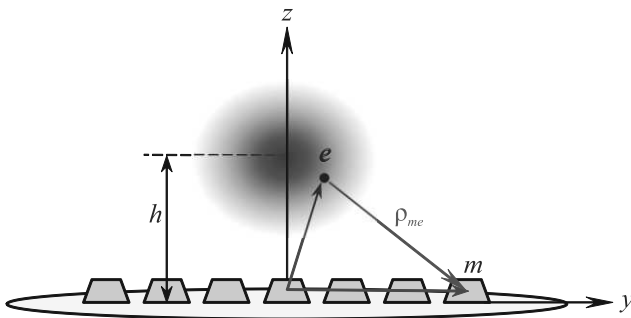


Рис. 3. (Цветной онлайн) Геометрический смысл вектора ρ_{me} как эффективного импакт-параметра

Спектрально-угловое распределение энергии излучения на далеких расстояниях определяется квадратом модуля поля излучения (23) и принимает вид:

$$\frac{d^2 W(\mathbf{n}, \omega)}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2 c}{\pi^2 v^4 \gamma^2} |\alpha(\omega)|^2 \times \left| \sum_e e^{-i\omega \frac{x_e}{v}} \sum_m e^{i(\omega \frac{y}{v^2} - \mathbf{k}) \mathbf{R}_m [\mathbf{k}, [\mathbf{k}, \mathbf{P}_{me}]]} \right|^2. \quad (26)$$

Пользуясь известным свойством сумм, разделим квадрат модуля суммы по всем электронам на два слагаемых: первое, содержащее все диагональные члены, и второе, содержащее все недиагональные члены. Тогда спектрально-угловое распределение энергии излучения также представится в виде суммы некогерентного и когерентного слагаемых, где некогерентное слагаемое принимает вид:

$$\frac{d^2 W_{\text{inc}}(\mathbf{n}, \omega)}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2 c}{\pi^2 v^4 \gamma^2} |\alpha(\omega)|^2 \times \sum_e \left| \sum_m e^{i(\omega \frac{y}{v^2} - \mathbf{k}) \mathbf{R}_m [\mathbf{k}, [\mathbf{k}, \mathbf{P}_{me}]]} \right|^2, \quad (27)$$

а когерентное слагаемое запишется в виде:

$$\frac{d^2 W_{\text{coh}}(\mathbf{n}, \omega)}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2 c}{\pi^2 v^4 \gamma^2} |\alpha(\omega)|^2 \times \left(\sum_e e^{-i\omega \frac{x_e}{v}} \sum_m e^{i(\omega \frac{y}{v^2} - \mathbf{k}) \mathbf{R}_m [\mathbf{k}, [\mathbf{k}, \mathbf{P}_{me}]]} \right) \times \left(\sum_{e' \neq e} e^{i\omega \frac{x_{e'}}{v}} \sum_m e^{-i(\omega \frac{y}{v^2} - \mathbf{k}) \mathbf{R}_m [\mathbf{k}, [\mathbf{k}, \mathbf{P}_{me}^*]]} \right), \quad (28)$$

где верхний индекс * означает комплексное сопряжение.

Далее необходимо провести усреднение выражений (27)–(28) по координатам всех электронов сгустка с некоторой весовой функцией – функцией распределения электронов в сгустке $f(\mathbf{r}_e)$. Усреднение сведется к интегрированию выражений (27)–(28) по $d^3 r_e$. Таким образом, спектрально-угловое распределение излучения от сгустка принимает вид:

$$\left\langle \frac{d^2 W(\mathbf{n}, \omega)}{d\omega d\Omega} \right\rangle = \left\langle \frac{d^2 W_{\text{inc}}(\mathbf{n}, \omega)}{d\omega d\Omega} \right\rangle + \left\langle \frac{d^2 W_{\text{coh}}(\mathbf{n}, \omega)}{d\omega d\Omega} \right\rangle, \quad (29)$$

где угловые скобки означают усреднение, или в более короткой форме:

$$I' = I'_{\text{inc}} + I'_{\text{coh}}. \quad (30)$$

Здесь некогерентное слагаемое определяется выражением:

$$I'_{\text{inc}} = \frac{e^2 \omega^2 c}{\pi^2 v^4 \gamma^2} k^4 |\alpha(\omega)|^2 S N_e \iint dy_e dz_e f_{tr} \times \left\{ \left| \sum_{m_y} e^{-ik_y d_y m_y} \mathbf{P}_{me} \right|^2 - \left| \sum_{m_y} e^{-ik_y d_y m_y} \frac{\mathbf{k} \mathbf{P}_{me}}{k} \right|^2 \right\}, \quad (31)$$

а когерентное имеет вид:

$$I'_{\text{coh}} = \frac{e^2 \omega^2 c}{\pi^2 v^4 \gamma^2} k^4 |\alpha(\omega)|^2 S N_e (N_e - 1) F_l \times \left\{ \left| \sum_{m_y} e^{-ik_y d_y m_y} \iint dy_e dz_e f_{tr} \mathbf{P}_{me} \right|^2 - \left| \sum_{m_y} e^{-ik_y d_y m_y} \iint dy_e dz_e f_{tr} \mathbf{P}_{me} \right|^2 \right\}. \quad (32)$$

В формулах (31)–(32) N_e – число электронов в сгустке. Как и ожидалось, интенсивность когерентного излучения пропорциональна N_e^2 , а некогерентного –

N_e . Из анализа общих выражений (31)–(32), без конкретизации формы сгустка и геометрии мишени, можно заключить, что, вопреки общепринятому мнению, некогерентное излучение содержит информацию о размерах сгустка, причем только о поперечных. В свою очередь когерентное излучение определяется как поперечными, так и продольными размерами сгустка. Отметим, что в отличие от рассмотренного выше подхода, здесь векторы \mathbf{P}_{me} и ρ_{me} зависят от положения электронов в сгустке, т.е. от переменной интегрирования.

4. Сравнение двух подходов. Найдем условия, при которых совпадают интенсивности, полученные с помощью двух описанных выше подходов. Отбрасывая одинаковые множители, видим, что выражение (8) совпадает с (31), а (9) с (32), если

$$\mathbf{P}(\rho_m) e^{-ik_y y_e} e^{-z_e \frac{\omega}{\gamma v} \sqrt{1+\gamma^2 \beta^2 n_y^2}} \approx \mathbf{P}(\rho_m - \mathbf{r}_{e\perp}), \quad (33)$$

где $\mathbf{r}_{e\perp} = y_e \mathbf{e}_y + z_e \mathbf{e}_z$. Заметим, что левая часть зависит от углов наблюдения, а правая нет.

Убывающая экспонента в левой части выражения (33) максимальна при $n_y = 0$. Положив $n_y = 0$, получим, что условие (33) можно разбить на два:

$$K_0 \left(\frac{\omega}{v\gamma} \rho_m \right) e^{-z_e \frac{\omega}{\gamma v}} \approx K_0 \left(\frac{\omega}{v\gamma} |\rho_m - \mathbf{r}_{e\perp}| \right), \quad (34)$$

$$\frac{\rho_m}{\rho_m} K_1 \left(\frac{\omega}{v\gamma} \rho_m \right) e^{-z_e \frac{\omega}{\gamma v}} \approx \frac{\rho_m - \mathbf{r}_{e\perp}}{|\rho_m - \mathbf{r}_{e\perp}|} K_1 \left(\frac{\omega}{v\gamma} |\rho_m - \mathbf{r}_{e\perp}| \right). \quad (35)$$

Эти условия выполнены, если

$$z_e \frac{\omega}{\gamma v} \ll 1, \quad r_{e\perp} \ll \rho_m. \quad (36)$$

Данные неравенства должны быть выполнены для любого m_y . Можно заменить второе из неравенств (36) на более жесткое, содержащее максимальное значение ρ_m . Тогда для сгустка с радиусом вместо r_0 получим:

$$z_e \ll \frac{\gamma\beta\lambda}{2\pi}, \quad r_0 \ll \sqrt{\left(\frac{L_y}{2}\right)^2 + h^2}. \quad (37)$$

Здесь $L_y = d_y N_y$ – ширина мишени. Для эффективной генерации ИСП импакт-параметр должен быть меньше, чем эффективный радиус действия собственного поля электронов: $h < \gamma\beta\lambda/(2\pi)$. Тогда два условия (37) дают одно:

$$r_0 \ll \frac{\gamma\beta\lambda}{2\pi}. \quad (38)$$

Таким образом, общий подход справедлив только при регистрации излучения в плоскости, содержащей

траекторию электрона и нормаль к мишени $n_y = 0$ и для пучков, поперечные размеры которых много меньше, чем эффективный радиус действия собственного поля электронов $\gamma\beta\lambda/(2\pi)$. Первое условие не существенно ограничивает общность, так как в плоскости $n_y = 0$ интенсивность излучения максимальна или сравнима с другими направлениями. Второе условие, довольно строгое, физически означает, что размеры сгустка должны быть настолько малы, что вклад в поляризацию мишени всех электронов одинаков. Это означает, что на эксперименте вклад поперечных размеров сгустка в распределение излучения по углам и частотам пренебрежимо мал. При выполнении условия (38) поперечные форм-факторы

$$F_{\text{coh},tr} = \left| \iint dy_e dz_e \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_e) f_{tr} \right|^2, \quad (39)$$

$$F_{\text{inc},tr} = \iint dy_e dz_e |\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_e)|^2 f_{tr}, \quad (40)$$

практически неотличимы от единицы: $F_{\text{coh},tr} \approx F_{\text{inc},tr} \approx 1$ [6]. Заметим, что сравнение теории с экспериментом показало хорошее совпадение теоретических и экспериментальных кривых [25] именно в этих условиях.

Если такая мишень используется для диагностики поперечных размеров сгустка или условия таковы, что поперечные размеры вносят вклад в полные распределения интенсивности, то подход с умножением одночастичного распределения на форм-фактор некорректен.

Закключение. Исследован вопрос об учете эффектов когерентности в излучении Смита–Парселла от электронных ультрарелятивистских сгустков. Проведен расчет поля излучения, возбуждаемого сгустком от двумерного фотонного кристалла. На этом примере показано, что общепринятый подход учета эффектов когерентности, основанный на умножении интенсивности излучения от одного электрона на форм-фактор сгустка, работает для неоднородных в поперечном направлении мишеней только при выполнении двух условий: 1) точка наблюдения лежит в плоскости, содержащей траекторию движения сгустка и нормаль к поверхности мишени; 2) радиус сгустка намного меньше эффективного радиуса действия собственного поля движущегося электрона $\gamma\beta\lambda/(2\pi)$.

Первое из этих условий не является критичным, поскольку в этой плоскости интенсивность излучения наибольшая, и оно выполняется в большинстве экспериментов. Второе условие сильно ограничивает область применимости общепринятого подхода: он

остаётся верным только в том случае, когда размеры сгустка не влияют на распределение интенсивности по углам и частотам. Если эти два условия не выполнены, то необходимо последовательно рассчитывать поля излучения от каждого электрона, а потом усреднять его по положениям электронов в сгустке. Расчет изложен в части 3 данной статьи.

Такая разница в двух подходах объясняется возникновением целого набора импакт-параметров даже для одного электрона – каждый электрон сгустка находится на разных расстояниях от разных элементов мишени, по-разному их поляризует, что дает разный вклад в распределение интенсивности по углам и частотам.

Сделанные выводы справедливы для дифракционного излучения или излучения Смита–Парселла от мишеней, которые имеют неоднородности в перпендикулярном направлении к траектории сгустка; именно такого рода мишенями являются широко исследуемые сегодня метаповерхности и фотонные кристаллы.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант # 21-72-00113 (Д. Сергеева, части 2, 3) и грант # 17-72-20013 (А. Тищенко, части 1, 4).

1. А. П. Потылицын, Письма в ЖЭТФ **103**, 762 (2016).
2. А. П. Потылицын, Б. А. Алексеев, А. В. Вуколов, М. В. Шевелев, А. А. Балдин, В. В. Блеко, П. В. Каратаев, А. С. Кубанкин, Письма в ЖЭТФ **115**, 474 (2022).
3. R. Kieffer, L. Bartnik, M. Bergamaschi, V. V. Bleko, M. Billing, L. Bobb, J. Conway, M. Forster, P. Karataev, A. S. Konkov, R. O. Jones, T. Lefevre, J. S. Markova, S. Mazzoni, Y. Padilla Fuentes, A. P. Potylitsyn, J. Shanks, and S. Wang, Phys. Rev. Lett. **121**, 054802 (2018).
4. P. Karataev, G. Naumenko, A. Potylitsyn, M. Shevelev, and K. Artyomov, Results in Physics **33**, 105079 (2022).
5. В. П. Шестопалов, *Дифракционная электроника*, Вища школа, Харьков (1976).
6. А. А. Тищенко, Д. Ю. Сергеева, Письма в ЖЭТФ **110**, 636 (2019).
7. П. Тонкаев, Ю. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **112**, 658 (2020).
8. Z. Miao, Q. Wu, X. Li, Q. He, K. Ding, Z. An, Y. Zhang, and L. Zhou, Phys. Rev. X **5**, 041027 (2015).
9. A. C. Overvig, S. C. Malek, and N. Yu, Phys. Rev. Lett. **125**, 017402 (2020).
10. Y. Kurman and I. Kaminer, Nature Phys. **16**, 868 (2020).
11. A. Pizzi, G. Rosolen, L. J. Wong, R. Ischebeck, M. Soljačić, T. Feurer, and I. Kaminer, Adv. Sci. **7**, 1901609 (2020).
12. Y. Kurman, R. Dahan, H. H. Sheinfux, K. Wang, M. Yannai, Y. Adiv, O. Reinhardt, L. H. Tizei, S. Y. Woo, and J. Li, Science **372**, 1181 (2021).
13. S. J. Smith and E. M. Purcell, Phys. Rev. **92**, 1069 (1953).
14. V. P. Shestopalov, *The Smith-Purcell effect*, Nova Science Publishers, N.Y. (1998).
15. P. Rullhusen, X. Artru, and P. Dhez, *Novel Radiation Sources Using Relativistic Electrons*, World Scientific, Singapore (1998).
16. A. P. Potylitsyn, M. I. Ryazanov, M. N. Strikhanov, and A. A. Tishchenko, *Diffraction Radiation from Relativistic Particles*, Springer Tracts in Modern Physics, Springer-Verlag, Berlin (2010), v. 239.
17. В. Г. Веселаго, УФН **181**, 1201 (2011).
18. N. Horiuchi, T. Ochiai, J. Inoue, Y. Segawa, Y. Shibata, K. Ishi, Y. Kondo, M. Kanbe, H. Miyazaki, F. Hinode, S. Yamaguti, and K. Ohtaka, Phys. Rev. E **74**, 056601 (2006).
19. S. Yamaguti, J. Inoue, O. Haerberlé, and K. Ohtaka, Phys. Rev. B **66**, 195202 (2002).
20. T. Ochiai and K. Ohtaka, Phys. Rev. B **69**, 125106 (2004).
21. K. Yamamoto, R. Sakakibara, S. Yano, Y. Segawa, Y. Shibata, K. Ishi, T. Ohsaka, T. Hara, Y. Kondo, H. Miyazaki, F. Hinode, T. Matsuyama, S. Yamaguti, and K. Ohtaka, Phys. Rev. E **69**, 045601(R) (2004).
22. T. Ochiai and K. Ohtaka, Opt. Express **13**, 7683 (2005).
23. D. Yu. Sergeeva, A. A. Tishchenko, and M. N. Strikhanov, Nucl. Instrum. and Methods B **402**, 206 (2017).
24. D. I. Garaev, D. Yu. Sergeeva, and A. A. Tishchenko, Phys. Rev. B **103**, 075403 (2021).
25. D. Yu. Sergeeva, A. S. Aryshev, A. A. Tishchenko, K. E. Popov, N. Terunuma, and J. Urakawa, Opt. Lett. **46**, 544 (2021).

Реализация протокола оптической квантовой памяти в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$

М. М. Миннегалиев¹⁾, К. И. Герасимов, Т. Н. Сабиров, Р. В. Урманчиев, С. А. Моисеев

Казанский квантовый центр, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева, 420111 Казань, Россия

Поступила в редакцию 29 апреля 2022 г.

После переработки 11 мая 2022 г.

Принята к публикации 12 мая 2022 г.

Экспериментально реализован протокол квантовой памяти на основе восстановления сигнала подавленного эха (ROSE) в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ на телекоммуникационной длине волны для входных световых полей с малым числом фотонов. Достигнута эффективность хранения 44 % при времени хранения 40 мкс. Входной импульс содержал в среднем ~ 340 фотонов, а восстановленный эхо-сигнал ~ 150 фотонов, при отношении сигнал/шум = 4. Показано, что основной источник шума – спонтанное излучение атомов, оставшихся в возбужденном состоянии из-за неидеальности параметров двух рефразирующих импульсов. Обсуждаются способы увеличения отношения сигнал/шум для реализации эффективной квантовой памяти для однофотонных световых полей.

DOI: 10.31857/S1234567822120047, EDN: imkkqt

Разработка эффективной многокубитовой квантовой памяти (КП) является одной из ключевых задач в оптических квантовых технологиях [1]. КП вызывает особый интерес для создания на ее основе квантового повторителя, необходимого для увеличения дальности работы квантовых коммуникаций [2]. КП также полезна для использования в качестве источников или детекторов однофотонных состояний, в создании универсального квантового компьютера и в квантовой метрологии [3]. За последние два десятилетия были предложены разные протоколы для эффективной записи и считывания фотонных кубитов из ячейки КП [4, 5]. Схема КП, основанная на использовании высокоэффективного обращенного фотонного эха в оптически плотной среде [6], нашла активное применение в разработке ряда протоколов ее реализации в твердотельных системах [7], где были продемонстрированы перспективные возможности для сохранения многоимпульсных световых полей. Один из таких протоколов КП основан на восстановлении сигнала подавленного эха (*revival of silenced echo* – ROSE протокол) [8].

Протокол ROSE наиболее близок к классической схеме двухимпульсного фотонного эха, где к сигнальному и рефразирующему импульсу добавляется второй рефразирующий импульс, благодаря чему сигнал фотонного эха излучается в неинвертированной системе [9]. При этом излучение первичного фотонно-

го эха подавляется, например, путем подбора специальных условий фазового синхронизма, геометрии распространения волновых векторов сигнального и контролирующего полей, как было показано в работах [8, 10], а высокоэффективное восстановление сигнального импульса происходит в сигнале эха, излучаемом в обратном к сигнальному импульсу направлении в соответствии со схемой оригинального протокола [6]. Такая схема КП позволяет работать с малофотонными сигнальными полями [11, 12], реализовывать адресную запись и считывание входных импульсов [12], позволила достичь на практике высокой эффективности восстановления сигнала в свободном пространстве [13], а также в резонаторе [12, 14] и в интегральных структурах [15]. Схема ROSE относительно проста в реализации, поскольку не требует сложной процедуры подготовки начального квантового состояния атомов, но достижение высокой эффективности восстановления входного сигнала требует достаточно большого поглощения и времени когерентности на оптическом переходе атомов.

Перспективными материалами для создания оптической КП являются кристаллы, активированные редкоземельными ионами, оптические переходы которых могут обладать большими временами когерентности (до единиц миллисекунд) при криогенных температурах [16, 17]. Оптический переход ионов эрбия $^4I_{15/2} - ^4I_{13/2}$ интересен тем, что его длина волны перехода ($\lambda = 1536$ нм в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$) лежит в окне прозрачности стандартного телеком-

¹⁾e-mail: mansur@kazanqc.org

муникационного оптоволокна. Время когерентности этого оптического перехода достигает 1.4 мс во внешнем магнитном поле при времени жизни возбужденного оптического состояния $T_1 \sim 14$ мс и величине неоднородного уширения перехода 500 МГц [18]. Наличие сверхтонких подуровней $^{167}\text{Er}^{3+}$ также дает возможность реализации долгоживущей КП на спиновых состояниях ионов, где время когерентности между спиновыми состояниями может достигать 1 с, как было показано в работе [19].

Фотонно-кристаллические резонаторы в кристалле $\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ [20–22] открывают возможности не только для усиления взаимодействия фотонов с ионами эрбия, но и для изготовления интегральных оптических структур, что важно для практических приложений КП и других квантовых устройств, создаваемых в таких кристаллах. В частности, при помощи такого резонатора в кристалле $\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$, был реализован источник одиночных фотонов [22]. Кроме того, применяя резонансное микроволновое излучение, удалось инициализировать различные начальные спиновые состояния четырех ионов эрбия [23], что расширяет возможности создания оптического чипа КП [24] и реализации многорезонаторной схемы КП [25] на таком кристалле, открывает пути проведения квантового процессинга на долгоживущих спиновых кубитах. Недавно в этом кристалле была реализована оптическая КП на фотонном эхе с неоднородным уширением в виде периодической частотной гребенки (AFC-протокол) [26], где была продемонстрирована эффективность $\sim 22\%$ восстановления однофотонных световых сигнальных импульсов для времени хранения 0.8 мкс. В работе [13] экспериментально был реализован ROSE-протокол в подобном кристалле с большим временем хранения 16 мкс и большей эффективностью восстановления входного сигнала 40%, но лишь для ярких световых импульсов. Поскольку устройства КП предполагают эффективную работу с однофотонными световыми полями, то представляет большой интерес реализация ROSE-протокола для световых импульсов с малым числом фотонов, а также дальнейшее улучшение его базовых параметров – эффективности и времени хранения, что и является предметом исследования настоящей работы.

В данной работе мы экспериментально реализовали ROSE протокол КП в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ с эффективностью восстановления сигнального импульса $\sim 44\%$ при времени хранения 40 мкс, который содержал в себе ~ 340 фотонов, при этом сигнал светового эха содержал около 150 фотонов при отношении сигнала эха к шуму ~ 4 . В начале были прове-

дены эксперименты с яркими световыми импульсами, содержащими $\sim 10^8$ фотонов, при этом эффективность восстановления сигнального импульса составила $\sim 54\%$ для того же времени хранения 40 мкс. Далее мы исследовали эффективность восстановления входного сигнала в зависимости от интенсивности двух контролирующих лазерных импульсов, осуществляющих рефазировку оптической когерентности ионов эрбия, возбуждаемой сигнальным световым импульсом и поведение оптических квантовых шумов при переходе к сигнальным импульсам с малым числом фотонов. На основе анализа полученных данных, мы предлагаем практически реализуемые способы уменьшения квантовых шумов, возникающих во время излучения эхо-сигнала, которые позволят перейти к работе с однофотонными сигнальными световыми полями.

Источником лазерного излучения в экспериментальной установке служил перестраиваемый одночастотный диодный лазер (Toptica STL-1500), настроенный на длину волны $\lambda = 1536.46$ нм, соответствующую квантовому переходу $^4I_{15/2}(0) \rightarrow ^4I_{13/2}(0)$ ионов эрбия. Импульсы лазерного излучения взаимодействовали с образцом кристалла $^{167}\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ ($c = 0.005\%$), находящегося при температуре 1.3 К в камере криостата замкнутого цикла со встроенным сверхпроводящим магнитом. Сигнальный и контролирующие (рефазировочные) лазерные импульсы распространялись в противоположных направлениях вдоль оси b кристалла длиной 5 мм. При этом входной сигнал (показан красным на рис. 1) был поляризован вдоль оси D2 кристалла. Учитывая анизотропию кристалла, была выбрана поляризация сигнального импульса вдоль оси D2 кристалла, что увеличило поглощение сигнального излучения примерно в два раза и позволило добиться большей эффективности восстановления входного сигнала. Контролирующее лазерное излучение (показано зеленым на рис. 1) было поляризовано вдоль оси D1 кристалла, ортогонально сигнальному излучению. В этом случае контролирующий импульс испытывает меньшее поглощение при распространении в среде, взаимодействуя с теми же атомами, что и сигнальный импульс. В пучке контролирующего импульса была дополнительно применена линза (Eksma Optics GTN-3.6-1.75FA-IR), которая трансформировала профиль пучка из гауссовой формы в супергауссовую (так называемую “top-hat”) форму, где вариация интенсивности в поперечном сечении профиля пучка была минимальна, что позволило достигнуть более равномерного распределения интенсивности, а значит и частоты Раби контролирующего импуль-

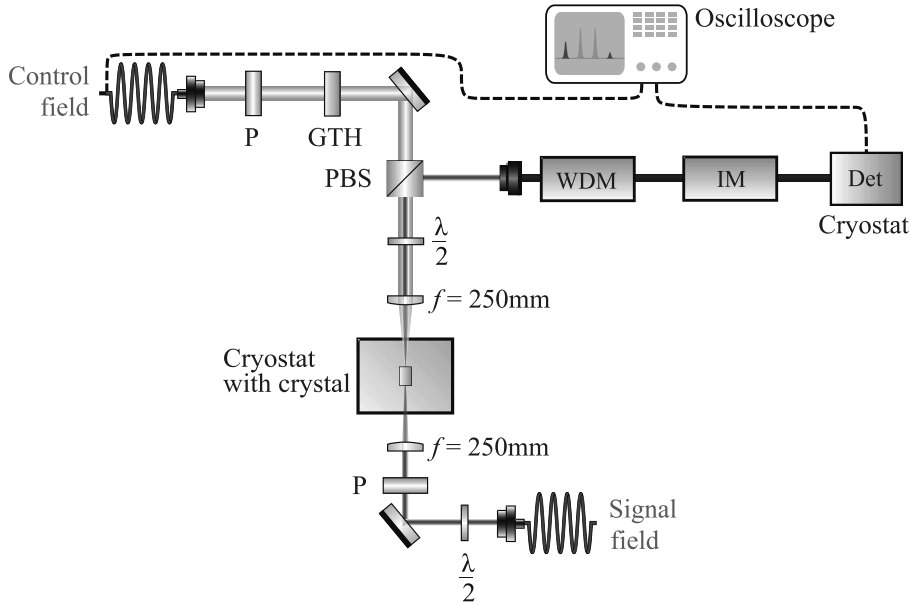


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. P – поляризатор; GTH – преобразователь профиля пучка; PBS – поляризационный светоделитель; WDM – волоконный спектральный фильтр; IM – амплитудный модулятор; Det – лавинный фотодиод или сверхпроводниковый детектор одиночных фотонов в криостате; $\lambda/2$ – полуволновая пластинка, f – фокусное расстояние линзы

са во всем поперечном профиле контролирующего пучка.

Эксперимент проводился во внешнем магнитном поле ($H = 2\text{ кГс}$), направленном под углом 140° к оси D1 кристалла, благодаря чему удалось увеличить время когерентности оптического перехода. Для увеличения интенсивности, задаваемое диодным лазером, контролирующее излучение дополнительно пропускалось через эрбиевый волоконный усилитель (Keopsys CEFA-C-PB-LP-SM), что позволило увеличить максимальную мощность контролирующего излучения в непрерывном режиме до 90 мВт непосредственно перед самим криостатом. Импульсы сигнального и контролирующего излучения формировались при прохождении непрерывного излучения диодного лазера через акустооптические модуляторы (АОМ). Для измерения входного сигнального импульса и излучаемого сигнала эха был использован фотодетектор на основе лавинного фотодиода (Thorlabs APD110C/M), сигнал с которого поступал на осциллограф (Tektronix DPO 7104C). В экспериментах по сохранению малофотонных сигнальных импульсов, лавинный фотодиод был заменен на сверхпроводниковый детектор одиночных фотонов (Scotel SSPD). В последнем случае в детектирующий канал был также добавлен волоконный фильтр. Этот фильтр не пропускал излучение с длинами волн, которые соответствовали люминесценции с оптического возбужденного уровня ${}^4I_{13/2}(0)$ на возбужденные уровни

основного мультиплета ${}^4I_{15/2}(n > 0)$. Таким образом, на детектор попадало только излучение с частотой, соответствующей бесфоновой линии люминесценции, совпадающей с рабочим оптическим переходом. Схема экспериментальной установки после прохождения акустооптических модуляторов приведена на рис. 1.

На рисунке 2 представлены экспериментальные данные по сохранению в ROSE протоколе сигнального импульса, содержащего $\sim 10^8$ фотонов. Временная форма сигнального импульса задавалась в виде Гаусса с длительностью 2 мкс и представлена в виде черной кривой при $t = 0$ на рис. 2. Отклонение от симметричного гауссового профиля обусловлено свойствами используемого детектора (см. также рис. 5). Непоглощенная часть входного импульса показана синей кривой. Контролирующие импульсы подаются в моменты времени $t = 10\text{ мкс}$ и $t = 30\text{ мкс}$. В качестве таких рефразирующих импульсов мы использовали лазерные импульсы с амплитудной и частотной модуляцией [12, 27], электрическое поле $\varepsilon(t)$ и несущая частота $\omega(t)$ которых имели следующий вид:

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \text{sech}(\beta(t - t_0)), \quad (1)$$

$$\omega(t) = \omega_0 + \mu\beta \tanh(\beta(t - t_0)), \quad (2)$$

где параметры β и μ определяют длительность импульса (β^{-1}) и его спектральную ширину ($2\mu\beta$). Такие импульсы позволяют эффективно инвертировать

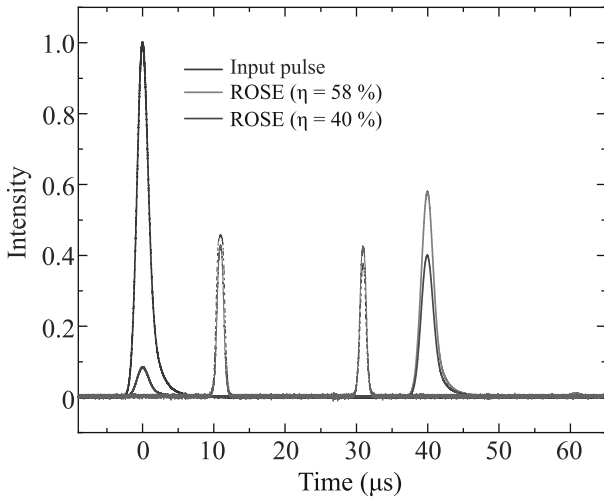


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сигнал восстановления подавленного эха (оранжевая и синяя кривые при $t = 40$ мкс), полученный в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ ($c = 0.005\%$). Синяя кривая соответствует случаю идентичных рефразирующих импульсов (показаны фиолетовой кривой), оранжевая – случаю разных по интенсивности рефразирующих импульсов (показаны коричневой штриховой кривой). Эффективность восстановления эха составила 40% в случае симметричных рефразирующих импульсов и 58% в случае разных интенсивностей. Время хранения составило 40 мкс, а поглощение $\alpha L = 2.4$. При $t = 0$ показан входной импульс (черная сплошная кривая) и его непоглощенная часть (синяя сплошная кривая)

ансамбль атомов, резонансные частоты которых лежат в спектральном интервале $2\mu\beta$. Такое возбуждение происходит при выполнении условия адиабатичности эволюции вектора Блоха $\mu\beta^2 \ll \Omega_0^2$, и достаточно слабого затухания атомной когерентности: $T_2\beta \gg 1$, где Ω_0 – частота Раби, T_2 – время когерентности оптического перехода. В наших экспериментах параметры лазерных импульсов варьировались в диапазоне $\beta = 2\pi \times (100 \div 400 \text{ кГц})$ и $\mu = 0.5 \div 1.5$ так, чтобы спектральный интервал протяжки частоты контролирующих импульсов перекрывал спектр сигнального импульса.

Эффективность восстановления сигнала подавленного эха η определяется как отношение энергии в сигнале эха к энергии входного импульса. В наших экспериментах она составила 40% для времени хранения 40 мкс в случае идентичных контролирующих импульсов (синяя кривая на рис. 2), при величине оптической плотности образца $\alpha L = 2.4$ и времени когерентности оптического перехода $T_M = 280$ мкс ($x = 1.35$), где T_M – время фазовой памяти Мимса [28]. Максимальную теоретически достижи-

мую эффективность в используемой геометрии распространения лазерных пучков, при идеальных рефразирующих импульсах, можно оценить по формуле $\eta_{\max}(\alpha L) = (\alpha L)^2 e^{-\alpha L} e^{-2\left(\frac{2\tau}{T_M}\right)^x}$, которая не превышает 54% из-за перепоглощения сигнала эха в оптически плотной среде, где 2τ – время хранения и $T_M \gg 2\tau$. Отметим, что при использовании различных по интенсивности контролирующих импульсов, когда интенсивность первого рефразирующего импульса больше, чем второго, эффективность восстановления входного сигнала увеличилась до 58% (оранжевая кривая на рис. 2). Такое поведение объясняется в соответствии с уравнением (12) (см. ниже), а именно, уменьшение поглощения сигнала эха в просветленной среде превалирует над уменьшением амплитуды фазурующей поляризации при отклонении импульсной площади контролирующих импульсов.

Далее было исследовано поведение эффективности восстановления входного сигнала в зависимости от интенсивности контролирующих импульсов. Результаты измерения эффективности восстановления входного импульса представлены на рис. 3а в виде карты. Как видно на рис. 3а, существует область параметров, где эффективность восстановления больше 45%, причем это происходит, когда интенсивность первого рефразирующего импульса больше, чем второго. На рисунке 3б черными квадратами показаны результаты измерения эффективности восстановления входного сигнала в схеме ROSE для случая равных интенсивностей рефразирующих импульсов $I = I_2 = I_3$, т.е. диагональных элементов результатов, приведенных на рис. 3а. В этом случае, с увеличением интенсивности импульсная площадь рефразирующих импульсов приближается к π в более широком спектральном диапазоне, приводя к увеличению эффективности восстановления входного сигнала и к его насыщению [29].

Анализ полученной экспериментальной зависимости эффективности восстановления сигнала фотонного эха от интенсивности рефразирующих импульсов проводилось нами на основе подхода теоремы площадей для фотонного эха [30, 31]. Ранее этот подход уже был успешно применен нами для анализа протокола восстановления сигнала подавленного эха в резонаторе [12]. Этот подход привлекателен тем, что позволяет получить аналитические зависимости для площадей импульса фотонного эха и импульсов, участвующих в генерации фотонного эха. Стоит отметить, что этот подход применим для малых площадей входного импульса $\theta_1(z)$ и импульса восста-

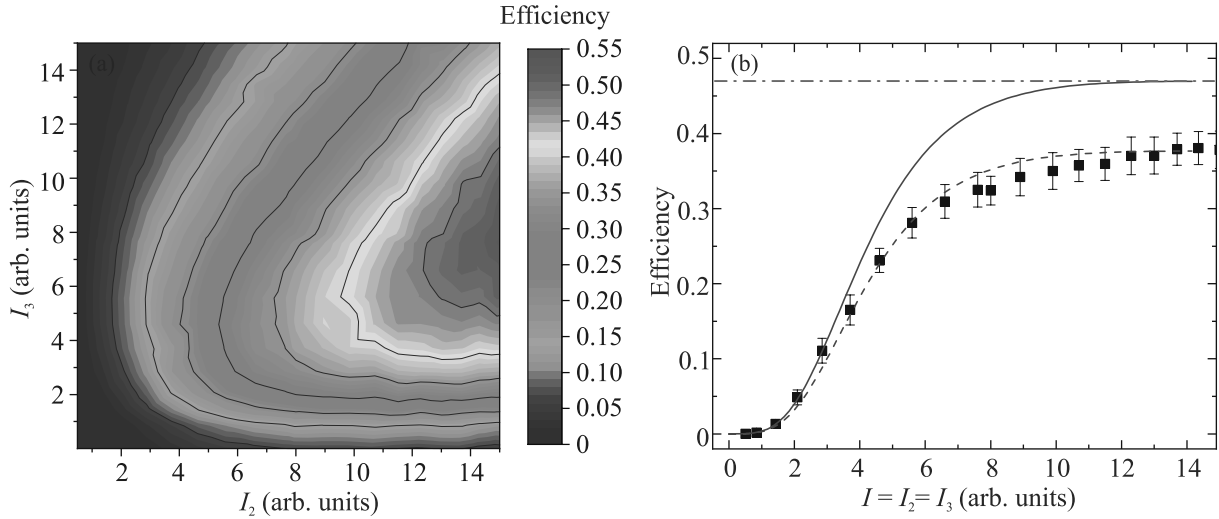


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Результаты измерения эффективности восстановления входного импульса в оптической памяти в зависимости от интенсивности первого (\$I_2\$) и второго (\$I_3\$) рефразирующих импульсов; (б) – Экспериментальная (черные квадраты) зависимость эффективности ROSE-эха от интенсивности двух идентичных рефразирующих лазерных импульсов и ее теоретическая оценка (синяя сплошная кривая). Синяя штриховая кривая соответствует теоретической кривой, умноженной на фактор 0.8, а серая штрих-пунктирная линия максимальной эффективности для оптической плотности образца \$\alpha L = 2.4\$, времени когерентности оптического перехода \$T_M = 280\$ мкс (\$x = 1.35\$) и используемой геометрии. Значения на оси \$x\$ соответствуют интенсивности идентичных рефразирующих импульсов

новленного эха \$\theta_{re}(z)\$, когда спектр импульса много меньше неоднородного уширения, а форма эхосигнала повторяет форму входного импульса и величина \$\theta_{re}(z)\$ описывает также интенсивность импульса эха, пропорциональную \$\theta_{re}^2(z)\$. Для первых трех световых импульсов имеют место известные уравнения для импульсных площадей входного (\$\theta_1\$) и рефразирующих (\$\theta_2, \theta_3\$) импульсов [32]

$$\partial_z \theta_1(z) = -\frac{\alpha}{2} \sin \theta_1(z), \quad (3)$$

$$\partial_z \theta_2(z) = \frac{\tilde{\alpha}}{2} \cos \theta_1(z) \sin \theta_2(z), \quad (4)$$

$$\partial_z \theta_3(z) = \frac{\tilde{\alpha}}{2} \cos \theta_1(z) \cos \theta_2(z) \sin \theta_3(z), \quad (5)$$

где \$\alpha\$ и \$\tilde{\alpha}\$ – коэффициенты резонансного поглощения для сигнального и контролирующего световых импульсов, \$\theta_n(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \Omega_n(t, z) dt\$ – площадь рассматриваемого импульса \$n = 1, 2, 3\$.

Уравнение (4) получается аналогично (3), учитывая изменение разности населенностей атомного перехода уже после воздействия двух импульсов и направления распространения второго и третьего импульсов света. В случае сигнальных импульсов с малым числом фотонов (\$\theta_1(0) \ll 1\$), полученная система уравнений позволяет нам записать решение для площади входного и рефразирующих импульсов как:

$$\theta_1(z) = \theta_1(0) e^{-\frac{\alpha}{2} z}, \quad (6)$$

$$\theta_2(z) = 2 \operatorname{arctg} \left[\operatorname{tg} \frac{\theta_2(L)}{2} e^{-\frac{\tilde{\alpha}}{2}(L-z)} \right], \quad (7)$$

$$\theta_3(z) = 2 \operatorname{arctg} \left[\operatorname{tg} \frac{\theta_3(L)}{2} \exp \left(-\frac{\tilde{\alpha}}{2} \int_z^L \cos \theta_2(z) dz \right) \right]. \quad (8)$$

Импульсную площадь сигнала эха находим, решая уравнение для импульсной площади эха [31, 33]:

$$\partial_z \theta(z) = \frac{\alpha}{2} \left(2v_0(z) \cos^2 \frac{\theta(z)}{2} + w_0(z) \sin \theta(z) \right), \quad (9)$$

где \$v_0(z)\$, \$w_0(z)\$ – фазирующиеся компоненты резонансной поляризации и инверсии [31, 33]. В момент восстановления сигнала подавленного эха \$v_0(z) = -\Gamma_\tau \sin \theta_1(z) \sin^2 \frac{\theta_2(z)}{2} \sin^2 \frac{\theta_3(z)}{2}\$, \$w_0(z) = -\cos \theta_1(z) \cos \theta_2(z) \cos \theta_3(z)\$, где \$\Gamma_\tau = e^{-\left(\frac{2\tau}{T_M}\right)^x}\$. Подставляя эти значения в уравнение для площади сигнала фотонного эха, получаем уравнение для импульсной площади сигнала восстановленного эха (\$\theta_{re}\$):

$$\begin{aligned} \partial_z \theta_{re}(z) = & \\ = \frac{\alpha}{2} \left(-2\Gamma_\tau \sin \theta_1(z) \sin^2 \frac{\theta_2(z)}{2} \sin^2 \frac{\theta_3(z)}{2} \cos^2 \frac{\theta_{re}(z)}{2} - \right. & \\ \left. - \cos \theta_1(z) \cos \theta_2(z) \cos \theta_3(z) \sin \theta_{re}(z) \right). & \quad (10) \end{aligned}$$

Используя решения (6)–(8) в (10), получим уравнение для площади восстановленного сигнала подавленного фотонного эха в следующем виде:

$$\partial_z \theta_{\text{re}}(z) = -\alpha \{A(z)\theta_{\text{re}}(z) + B(z)\theta_1(0)\}, \quad (11)$$

где

$$A(z) = \frac{1}{2} \cos \theta_2(z) \cos \theta_3(z),$$

$$B(z) = \Gamma \tau e^{-\frac{\alpha}{2}z} \sin^2 \frac{\theta_2(z)}{2} \sin^2 \frac{\theta_3(z)}{2}.$$

Решение уравнения (11) имеет вид $\theta_{\text{re}}(z) = \theta_1(0)T(z)$, где

$$T(z) = -\alpha \int_0^z dz' B(z') \exp \left[-\alpha \int_{z'}^z A(z'') dz'' \right]. \quad (12)$$

Уравнение для рефразирующих импульсов и их решения (7), (8) справедливы для световых импульсов с единственной несущей частотой. Тем не менее, мы использовали решения (7), (8) для приближенного описания поведения импульсной площади контролируемых импульсов с фазовой модуляцией, принимая во внимание не очень большую величину оптической плотности среды ($\tilde{\alpha}L = 1$). Ранее в работе [34] было получено аналитическое решение уравнений Блоха при взаимодействии одиночного двухуровневого атома с используемым нами контролирующим импульсом с протяжкой частоты. Используя это решение, можно найти инверсию атома после взаимодействия с таким импульсом и оценить импульсную площадь $\theta_0 = \arccos[-w(t = -\infty)]$, соответствующую импульсу с этим значением амплитуды ε_0 и диапазоном протяжки $2\mu\beta$. Величину θ_0 мы принимаем за начальную площадь рефразирующих импульсов $\theta_2(0)$, $\theta_3(0)$ в полученных решениях (7), (8), (12). При использовании контролируемых импульсов с протяжкой частоты возникла необходимость учесть особенности и неидеальность в их создании. При проведении экспериментов мы подавали на АОМ желаемую форму импульса, чтобы его интенсивность зависела от времени как $I(t) \sim \varepsilon^2(t) = \varepsilon_0^2 \text{sech}^2(\beta(t - t_0))$. Однако из-за нелинейности передаточной функции модулятора реальная форма импульса отличалась от секанса. При малых интенсивностях огибающая импульса имела форму $\text{sech}^3(\beta(t - t_0))$, в то время как при больших интенсивностях эта форма сохранялась только для переднего и заднего фронта импульса, а его середина становилась менее острой и была ближе к $\text{sech}^{1.7}(\beta(t - t_0))$. Для того, чтобы учесть это обстоятельство при расчете теоретической кривой на рис. 3b зависимости интенсивности сигнала эха от

интенсивности контролируемых импульсов, по оси абсцисс мы откладывали величину $\sim \varepsilon^{2.5}$.

При помощи описанной процедуры расчета и используя (12), нам удалось получить теоретическую оценку эффективности $T^2(L)$ (синяя сплошная кривая на рис. 3b) в зависимости от интенсивности симметричных рефразирующих импульсов. С ростом интенсивности рефразирующих импульсов эта кривая насыщается и совпадает с уровнем максимальной эффективности $\eta_{\text{max}} = 47\%$ (серая штрих-пунктирная кривая), которая достигается для оптической плотности образца $\alpha L = 2.4$, времени когерентности оптического перехода $T_M = 280$ мкс ($x = 1.35$) и используемой геометрии. Стоит отметить, что экспериментальные результаты (черные квадраты на рис. 3b) качественно описываются кривой $0.8 \cdot T^2(L)$ (синяя штриховая кривая). Фактор 0.8 может быть вызван неидеальной экспериментальной реализацией рефразирующих импульсов, который был описан выше. Для дальнейшего исследования потребуется более детальное изучение возможностей применения метода теоремы площадей для анализа распространения контролируемых импульсов с амплитудной и частотной модуляцией. Также представляет интерес изучить влияние коллективных эффектов во время возбуждения системы атомов рефразирующими импульсами, которые в оптически плотной среде могут существенно повлиять на эффективность реализации протокола [35].

Для реализованной схемы было измерено восстановление спектра поглощения после воздействия первого и второго рефразирующих лазерных импульсов, используя зондирование поглощения атомов в спектральном диапазоне формирования сигнала эха. Зондирование осуществлялось подачей дополнительного импульса излучения в сигнальном пучке, имеющего длительность 100 мкс, частота которого сканировалась в диапазоне 3 МГц в окрестности рабочей спектральной области рефразирующих импульсов. Результаты измерений представлены на рис. 4. Черная линия соответствует поглощению $\alpha L \approx 2.4$ до действия контролируемых импульсов. После применения первого рефразирующего импульса в спектре поглощения (синяя сплошная кривая на рис. 4) наблюдается инверсия состояния атомов в интервале частотных отстроек от -0.4 МГц до 0.5 МГц. Как видно на рис. 4 (желтая сплошная линия), после применения обоих рефразирующих импульсов наблюдается значительное восстановление поглощения, примерно равному $\alpha L \approx 1.5$ внутри рабочей спектральной области рефразирующих импульсов (~ 600 кГц), что позволило оценить их эффективность $\sim 80\%$.

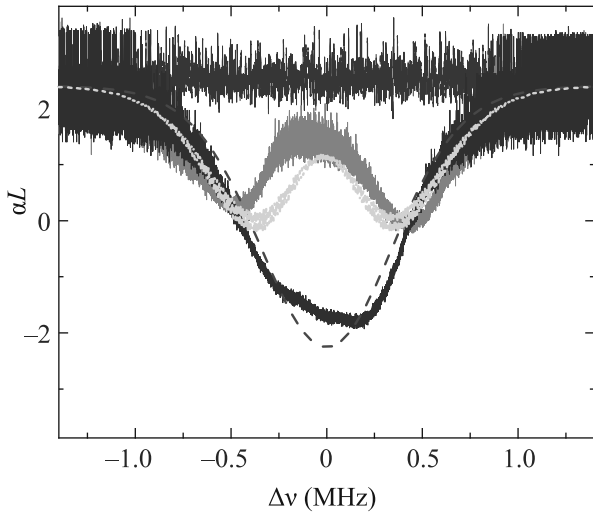


Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментальные спектры областей остаточного возбуждения (просветления) в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ ($c = 0.005\%$, $T = 1.3\text{ K}$) после применения одного (синяя сплошная кривая, $I_2 = 14$) и двух (желтая сплошная кривые, $I_2 = I_3 = 14$) рефазировующих импульсов с амплитудной и частотной модуляцией. Пунктирными и точечными линиями (синий и желтый цвет соответственно) приведены результаты численных расчетов уравнения Блоха для рефазировующих импульсов, интенсивность которых совпадает со значениями приведенных на рис. 3б. Черная кривая соответствует поглощению в этой спектральной области на оптическом переходе $^4\text{I}_{15/2}(0) - ^4\text{I}_{13/2}(0)$ ($\lambda = 1536.46\text{ nm}$) ионов эрбия

Этот уровень поглощения соответствует лишь просветлению оптического перехода, при котором возможно использование данного протокола КП для сохранения световых импульсов, так как не происходит усиления сигнала фотонного эха при распространении в такой среде. Пунктирными и точечными линиями (синий и желтый цвет соответственно) приведены результаты численных расчетов уравнения Блоха для рефазировующих импульсов, интенсивность которых совпадает со значениями, приведенных на рис. 3б. Стоит также отметить, что внутри спектральной области сигнальных импульсов, величина поглощения остается почти постоянной при использовании лазерных импульсов с амплитудной и частотной модуляцией, что обеспечивает сохранение временной формы эхо-сигнала. На приграничных областях спектра присутствуют довольно широкие области остаточного просветления, которые вносят наиболее существенный вклад в квантовый шум, вызываемый спонтанным излучением возбужденных атомов, находящихся в этом диапазоне спектра. Такой квантовый шум можно значительно подавить,

используя дополнительный оптический фильтр, который будет пропускать сигнал эха внутри рабочей спектральной области рефазировующих импульсов. В качестве такого фильтра может выступить дополнительный внешний резонатор или такой же кристалл, с инициализированным спектральным провалом.

Далее мы реализовали протокол оптической квантовой памяти в схеме ROSE для входного сигнального импульса, который в среднем содержал ~ 340 фотонов. Результаты представлены на рис. 5.

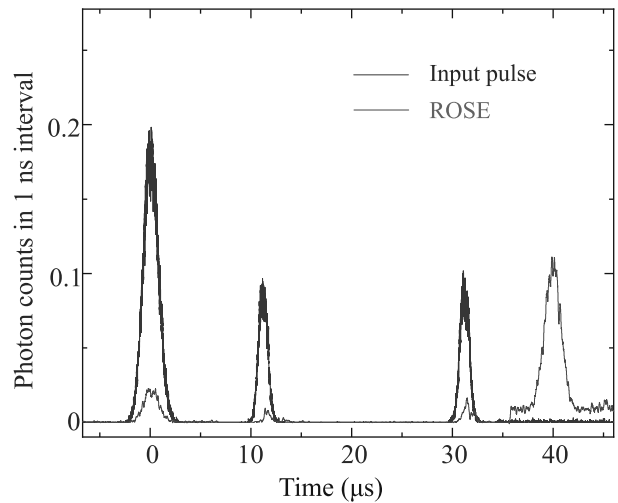


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сигнал восстановленного эха (синяя кривая при $t = 40\text{ мкс}$) содержал в среднем 150 фотонов при подаче входного импульса (черная сплошная кривая при $t = 0$), содержащего в среднем 340 фотонов. Непоглощенная часть входного сигнала (синяя сплошная кривая) содержала около 40 фотонов. Эффективность восстановления сигнала эха составила 40%. Шум от спонтанного излучения за время излучения эхо сигнала эха (4 мкс) содержал в среднем 40 фотонов. При использовании одного рефазировующего импульса в шуме содержалось ~ 100 фотонов за 4 мкс

Черная кривая при $t = 0\text{ мкс}$ на рис. 5 соответствует входному импульсу. После применения двух рефазировующих импульсов в моменты времени $t = 10\text{ мкс}$ и $t = 30\text{ мкс}$, мы наблюдали сигнал фотонного эха (синяя кривая в момент времени $t = 40\text{ мкс}$), который содержал около 150 фотонов. Эффективность восстановления сигнала эха составила 44%. Квантовый шум за время длительности сигнала эха (за 4 мкс) содержал в среднем 40 фотонов. Шум в основном был вызван спонтанным излучением атомов, находящихся в возбужденном состоянии из-за неидеальности рефазировки контролирующими импульсами.

Отметим несколько возможных способов улучшить полученные результаты. Во-первых, можно использовать оптический резонатор в режиме высокоточного согласования связи [12, 36]. Благодаря этому возможно увеличение эффективности восстановления входного сигнала до 70 % при таких же параметрах времени когерентности оптического перехода и рефразирующих импульсов, что и в настоящей работе. В таком резонаторе можно также уменьшить величину поглощения оптического перехода более чем в 10 раз, что дает возможность уменьшить уровень квантовых шумов, вызванных спонтанным излучением, так как будет задействовано меньшее число рабочих атомов. Увеличение добротности резонатора, согласование его спектральной ширины со спектральной шириной сигнального излучения [36, 37] и быстрый контроль его резонансной частоты позволит существенно подавить шумы спонтанного излучения от атомов, находящихся в приграничной области частот. Фильтрация остаточного просветления на краях спектра поглощения, вызванного воздействием рефразирующих импульсов, может быть также усилена, использованием внешнего оптического резонатора, или выжиганием спектрального провала в дополнительном фильтрующем кристалле $\text{Er}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$. Еще один способ заключается в том, чтобы из области остаточного просветления заранее удалить атомы дополнительным лазерным излучением, инициализирующим начальный спектр поглощения атомов. Это позволит снизить квантовые шумы, вызванные спонтанным излучением, более чем в 4 раза [38]. Стоит отметить, что в этом кристалле подобная инициализация спектра поглощения была продемонстрирована в работе [26] для AFC протокола КП. В-третьих, увеличение магнитного поля и интенсивности рефразирующих импульсов должно позволить достичь лучшего качества рефразирующих импульсов, следовательно, и меньшего уровня квантовых шумов в рабочей спектральной ширине КП. Перечисленные способы модификации изучаемой схемы КП могут быть практически реализованы и позволят существенно подавить квантовые шумы и добиться высокой эффективности оптической квантовой памяти. Предложенные модификации экспериментальной реализации позволяют в будущем ожидать реализацию КП в схеме восстановления сигнала подавленного эха для однофотонных световых импульсов высокой эффективности и отношения сигнал/шум.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-72-00115.

1. K. Heshami, D.G. England, P.C. Humphreys, P. J. Bustard, V. M. Acosta, J. Nunn, and B. J. Sussman, *J. Mod. Opt.* **63**, 2005 (2016).
2. N. Sangouard, C. Simon, H. de Riedmatten, and N. Gisin, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 33 (2011).
3. F. Bussi eres, N. Sangouard, M. Afzelius, H. De Riedmatten, and W. Tittel, *J. Mod. Opt.* **60**, 1519 (2013).
4. T. Chaneli ere, G. Hetet, and N. Sangouard, *Quantum Optical Memory Protocols in Atomic Ensembles, in Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, Academic Press (2018), v. 67, p. 77.
5. A.I. Lvovsky, B. C. Sanders, and W. Tittel, *Nat. Photonics* **3**, 706 (2009).
6. S. A. Moiseev and S. Kr oll, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 173601 (2001).
7. W. Tittel, M. Afzelius, T. Chaneli ere, R.L. Cone, S. Kr oll, S. A. Moiseev, and M. Sellars, *Laser Photon. Rev.* **4**, 244 (2009).
8. V. Damon, M. Bonarota, A. Louchet-Chauvet, T. Chaneli ere, and J.-L. Le Gou et, *New J. Phys.* **13**, 093031 (2011).
9. J. Ruggiero, J.-L. Le Gou et, C. Simon, and T. Chaneli ere, *Phys. Rev. A* **79**, 053851 (2009).
10. K. I. Gerasimov, M. M. Minnegaliev, S. A. Moiseev, R. V. Urmancheev, T. Chaneliere, and A. Louchet-Chauvet, *Opt. Spectrosc.* **123**, 211 (2017).
11. M. Bonarota, J. Dajczgewand, A. Louchet-Chauvet, J.-L. Le Gou et, and T. Chaneli ere, *Laser Phys.* **24**, 094003 (2014).
12. M. M. Minnegaliev, K. I. Gerasimov, R. V. Urmancheev, A. M. Zheltikov, and S. A. Moiseev, *Phys. Rev. B* **103**, 174110 (2021).
13. J. Dajczgewand, J.-L. Le Gou et, A. Louchet-Chauvet, and T. Chaneliere, *Opt. Lett.* **39**, 2711 (2014).
14. M. M. Minnegaliev, K. I. Gerasimov, R. V. Urmancheev, and S. A. Moiseev, *Quantum Electron.* **48**, 894 (2018).
15. C. Liu, Z.-Q. Zhou, T. Zhu, L. Zheng, M. Jin, X. Liu, P.-Y. Li, J. Huang, Y. Ma, T. Tu, T.-S. Yang, C.-F. Li, and G. Guo, *Optica* **7**, 192 (2020).
16. C. W. Thiel, T. B ottger, and R. L. Cone, *J. Lumin.* **131**, 353 (2011).
17. R. M. Macfarlane, *J. Lumin.* **100**, 1 (2002).
18. T. Bottger, *Laser Frequency Stabilization to Spectral Hole Burning Frequency References in Erbium-Doped Crystals: Material and Device Optimization*, Montana State University (2002).
19. M. Ran ci c, M. P. Hedges, R. L. Ahlefeldt, and M. J. Sellars, *Nat. Phys.* **14**, 50 (2017).
20. E. Miyazono, I. Craiciu, A. Arbabi, T. Zhong, and A. Faraon, *Opt. Express* **25**, 2863 (2017).
21. T. Zhong, J. Rochman, J. M. Kindem, E. Miyazono, and A. Faraon, *Opt. Express* **24**, 536 (2016).

22. A. M. Dibos, M. Raha, C. M. Phenicie, and J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 243601 (2018).
23. S. Chen, M. Raha, C. M. Phenicie, S. Ourari, and J. D. Thompson, *Science* **370**, 592 (2020).
24. I. Craiciu, M. Lei, J. Rochman, J. G. Bartholomew, and A. Faraon, *Optica* **8**, 114 (2021).
25. S. A. Moiseev, N. S. Perminov, and A. M. Zheltikov, *JETP Lett.* **115**, 353 (2022).
26. J. S. Stuart, M. Hedges, R. Ahlefeldt, and M. Sellars, *Phys. Rev. Res.* **3**, L032054 (2021).
27. F. De Seze, F. Dahes, V. Crozatier, I. Lorgeré, F. Bretenaker, and J. L. Le Gouët, *Eur. Phys. J. D* **33**, 343 (2005).
28. W. B. Mims, *Phys. Rev.* **168**, 370 (1968).
29. A. L. Guo, T. Tu, G. C. Guo, and C. F. Li, *Phys. Rev. A* **104**, 1 (2021).
30. S. L. McCall and E. L. Hahn, *Phys. Rev.* **183**, 457 (1969).
31. S. A. Moiseev, M. Sabooni, and R. V. Urmancheev, *Phys. Rev. Res.* **2**, 012026 (2020).
32. L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, Wiley, N.Y. (1976).
33. S. A. Moiseev, *Opt. Spectrosc.* **62**, 180 (1987).
34. F. T. Hioe, *Phys. Rev. A* **30**, 2100 (1984).
35. A. I. Trubilko and A. M. Basharov, *JETP Lett.* **111**, 672 (2020).
36. S. A. Moiseev, S. N. Andrianov, and F. F. Gubaidullin, *Phys. Rev. A* **82**, 022311 (2010).
37. E. S. Moiseev, A. Tashchilina, S. A. Moiseev, and B. C. Sanders, *New J. Phys.* **23**, 063071 (2021).
38. Y. Z. Ma, M. Jin, D. L. Chen, Z. Q. Zhou, C. F. Li, and G. C. Guo, *Nat. Commun.* **12**, 1 (2021).

Рост двумерных гексагональных решеток в модели кристаллического фазового поля¹⁾

В. Е. Анкудинов⁺²⁾, П. К. Галенко^{*×}

⁺Институт физики высоких давлений РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

^{*}Friedrich-Schiller-Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät, D-07743 Jena, Germany

[×]Уральский федеральный университет, кафедра теоретической и математической физики, 620002 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 24 апреля 2022 г.

После переработки 1 мая 2022

Принята к публикации 2 мая 2022 г.

В работе при помощи модели кристаллического фазового поля исследована кристаллизация переохлажденной метастабильной однородной фазы в сотовидную (шестиугольную) периодическую решетку. Численно полученные скорости фронта кристаллизации сотовидной решетки сравниваются с аналитическим решением в форме бегущей волны. Рост сотовидной решетки при кристаллизации переохлажденной жидкой фазы описывается с помощью модели второго порядка точности (двухмодовой), в которой раздельно учитываются амплитуды первой и второй подрешеток. Формированию сотовидной решетки предшествует образование метастабильной треугольной, при этом кинетика фронта кристаллизации определяется симметрией растущей фазы и величиной движущей силы.

DOI: 10.31857/S1234567822120059, EDN: immzni

Модель кристаллического фазового поля (КФП-модель [1]) была сформулирована для описания континуальных переходов между однородными и периодическими фазами на диффузионных временах аналогично переходу Ландау–Бразовского [2]. КФП-модель является первым приближением теории функционала плотности [3], а по математической форме имеет непосредственную общность с теорией слабой кристаллизации [2, 4, 5]. Модель находит применение в широком спектре задач: исследовании упорядочения структур на микронных масштабах, описании движения фронтов кристаллизации и формирования дендритов, расчете формы и энергии границ зерен, описании коллоидного затвердевания, перемещения дислокаций, пластического течения, стеклообразования, эпитаксиального роста [6, 7]. Также с помощью КФП исследуется формирование метастабильных периодических состояний [8], где возможно образование фаз с особыми свойствами [9].

Развитие модели позволило описать периодические графеноподобные структуры и решетки кагоме [10], обнаруженные при исследовании упорядочения коллоидных систем и плазмы [11, 12]. Анализ

таких двумерных систем основан на описании формирования гексагональных решеток [13, 14, 15], что для графеноподобных структур формально сводится к искусственно сконструированной парной корреляционной функции с анизотропными компонентами. Такое представление значительно усложняет анализ и ставит вопрос о применимости структурной КФП-модели [15, 13] к процессу кристаллизации (даже если упругие свойства периодической фазы количественно воспроизводят экспериментальные значения). Сама возможность построения сотовидной решетки в семействе уравнений типа Свифта–Хоэнберга для двухмодовой формы оператора (4) была показана численно в [16], также она была получена в трехмодовой формулировке [10]. В упругом приближении использование двухмодовой формы для описания графена обусловлено определяющей ролью взаимодействия с атомами второй координационной сферы при описании спектра колебательных мод [17].

В настоящей работе проанализирован рост кристаллов гексагональной сингонии в переохлажденную жидкую фазу. Вводится общая двухмодовая форма модели КФП, описывающая кристаллизацию в гексагональную структуру при минимальном наборе векторов сотовидной (шестиугольной) решетки. Найденная форма амплитудной записи КФП-модели позволяет получить аналитическое решение в виде

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

²⁾e-mail: vladimir@ankudinov.org

бегущей волны. Амплитудное уравнение записано в общей форме [18, 19], это позволяет исследовать кинетику формирования различных решеток (в общем случае гексагональных и кубических) из переохлажденной жидкости. Метод расширен для описания решеток с дополнительным базисом и может быть применен в трехмерном случае.

Свободная энергия и уравнение динамики КФП. В модели КФП параметром порядка является безразмерное поле атомной плотности (концентрации) $n(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)/\rho_0 - 1$. Свободная энергия в случае изолированной системы состоит из двух вкладов $F(n) = F_{\text{id}}(n) + F_{\text{ex}}(n)$, где F_{id} соответствует идеальной компоненте, описывающей фазовый переход, F_{ex} – избыточной свободной энергии, связанной с обменным вкладом. В качестве F_{id} принимается разложение в форме Ландау для Больцмановского газа вблизи $n(\mathbf{r}) = 0$, имеющее форму двухъямного $n^2 - n^3 - n^4$ потенциала [1]. Разложим функциональную производную F_{ex} вокруг малого изменения $\rho(\mathbf{r}, t)$ до второго слагаемого включительно, которое является парной корреляционной функцией C_2 . Тогда получим свертку, позволяющую описывать процесс плавления и кристаллизации в виде [20, 21]:

$$F_{\text{ex}}(n) = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}) C_2(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n(\mathbf{r}'). \quad (1)$$

В континуальном пределе разработано приближение, позволяющее обосновать применение статистической теории к процессу плавления и кристаллизации с использованием микроскопических характеристик системы [20, 21]. Аналогичная запись C_2 в обратном пространстве была выполнена для описания кристаллизации твердых сфер [22]. Полная свободная энергия в модели КФП имеет вид [23]:

$$F(n) = \int \left[\frac{n}{2} \mathcal{L}_R n - \frac{a}{3} n^3 + \frac{v}{4} n^4 \right] d\mathbf{r}, \quad (2)$$

где \mathcal{L} – дифференциальный оператор, полученный с помощью градиентного разложения ур. (1). Этот оператор может быть представлен в одномодовом приближении при $R = 1$ (одна подрешетка) как:

$$\mathcal{L}_1 \equiv \Delta B_0 + B_0^x (\nabla^2 + q_0^2)^2. \quad (3)$$

Для описания более сложных структур, таких как ГЦК или сотовидная решетка, требуется двухмодовое $R = 2$ разложение (две подрешетки) более высокого порядка [16]:

$$\mathcal{L}_2 \equiv \Delta B_0 + B_0^x (r_0 + (\nabla^2 + q_0^2)^2) (r_1 + (\nabla^2 + q_1^2)^2). \quad (4)$$

Коэффициенты r_0 , r_1 , q_0 , q_1 позволяют подогнать форму пика парной корреляционной функции к экс-

периментальной или полученной с помощью молекулярной динамики, как это, например, сделано в работе [19]. Коэффициенты q_0 и q_1 соответствуют равновесным значениям параметров подрешеток первой и второй координационных сфер, а r_0 и r_1 напрямую влияют на стабильность кристаллических структур [19, 24, 16]. Градиентное разложение позволяет описывать кристаллизацию и плавление как в двумерных, так и в трехмерных системах [20–22]. При этом форма свободной энергии КФП (2) в одномодовом приближении с оператором (3) схожа с энергией периодической фазы в теории слабой кристаллизации [2, 4]. Движущая сила $\Delta B_0 = B_0^\ell - B_0^x$ в КФП определена как разница между модулем объемной упругости жидкости B_0^ℓ и модулем упругости кристалла B_0^x . С помощью подхода, предложенного в моделях фазового поля [19, 18], управляющий параметр ΔB_0 можно рассматривать как переохлаждение. Введем безразмерное переохлаждение $\varepsilon = \Delta T/T_m$, где $\Delta T = T_m - T$, а T_m – температура плавления, при которой достигается равенство энергий жидкой и кристаллической фазы. Таким образом:

$$\Delta T = T_m (\Delta B_0 - \Delta B_0^*) / \Delta B_0^*; \quad \varepsilon = (\Delta B_0 - \Delta B_0^*) / \Delta B_0^*, \quad (5)$$

здесь ΔB_0^* – движущая сила, соответствующая T_m , которая может быть получена с помощью коэффициентов ур. (2) как $\Delta B_0^* = 2a^2/(9v)$ [23].

Модифицированная модель кристаллического поля (МКФП) [6, 8] применяется, когда необходимо описывать высокоскоростные границы раздела фаз [25] при значительных по величине движущих силах перехода. В частности, МКФП учитывает релаксацию потока \mathbf{J} атомной плотности n как независимой кинетической переменной с релаксационным временем τ [26, 27]. Такой вид уравнения, отличающийся от традиционного уравнения КФП [1] наличием второй производной по времени в левой части, был альтернативно предложен для одновременного учета упругой релаксации и атомной диффузии [28]. В итоге динамическое уравнение МКФП-модели запишем в виде

$$\tau \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \frac{\partial n}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{\delta F}{\delta n} \right], \quad (6)$$

где M – мобильность параметра порядка, устанавливающая масштабы времени t . Уравнение (6) включает функциональную производную свободной энергии (2), равную химическому потенциалу системы $\mu(n) = \delta F(n)/\delta n$, и подразумевает условие невозрастания $F(n)$ во времени.

Введение флуктуаций в уравнение движения КФП позволяет описывать зарождение новой фазы и моделировать динамику фазового превращения [29]. Ввод стохастического источника, который инициирует затвердевание переохлажденной жидкости аналогично теории слабой кристаллизации [2, 4], в общем случае является весьма нетривиальной задачей [30]. В дальнейшем предположим малый вклад тепловых флуктуаций в общую энергию системы и сконцентрируемся на основополагающей роли переохлаждения как движущей силы, поскольку высота межфазного барьера в рассматриваемой системе высока, $a/3 \gtrsim 1$ [см. ур. (2)].

Амплитудное разложение кристаллического фазового поля. Для описания динамики периодической фазы представим периодическое поле $n(\mathbf{r}, t)$ в виде отдельных гармоник, соответствующих определенной кристаллической симметрии [18, 31]:

$$n = n_0 + \sum_j \eta_j(\mathbf{r}, t) e^{i \mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r}} + \sum_j \eta_j^*(\mathbf{r}, t) e^{-i \mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r}}, \quad (7)$$

здесь n_0 – среднее значение параметра порядка n , η_j – амплитуды КФП, η_j^* – комплексно сопряженные амплитуды. Симметрия конкретной кристаллической решетки задается набором векторов \mathbf{G}_j в обратном пространстве, которые в случае трехмерной решетки можно записать следующим образом:

$$\mathbf{G}_j = h\mathbf{q}_1 + k\mathbf{q}_2 + l\mathbf{q}_3, \quad (8)$$

здесь $(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)$ – вектора обратной решетки, а (h, k, l) – индексы Миллера. Подставляя (7) в ур. движения (6) получим набор уравнений:

$$\left(\tau \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \eta_j = M \Lambda_j \left[\frac{\delta F}{\delta \eta_j^*} \right], \quad (9)$$

здесь оператор Λ_j в длинноволновом приближении можно аппроксимировать как

$$\Lambda_j = \nabla^2 + 2i\mathbf{G}_j \cdot \nabla - \mathbf{G}_j^2 \approx -\mathbf{G}_j^2. \quad (10)$$

Данная аппроксимация приведет к огрублению и пренебрежению высокочастотными гармониками, при этом положение и скорость межфазной границы по-прежнему могут быть весьма точно определены [18, 31, 32]. В данном приближении предполагается, что при интегрировании по элементарной ячейке амплитуды η_j принимаются одинаковыми по величине в каждой из подрешеток. Двухмодовый оператор (4) примет следующий вид:

$$\mathcal{L}_2 = \Delta B_0 + B_0^x (r_0 + (\nabla^2 + 2i\mathbf{G}_j \cdot \nabla - \mathbf{G}_j^2 + q_0^2)^2) \times (r_1 + (\nabla^2 + 2i\mathbf{G}_j \cdot \nabla - \mathbf{G}_j^2 + q_1^2)^2). \quad (11)$$

В дальнейшем для удобства введем два новых обозначения: оператор $\mathcal{G}_j \equiv \nabla^2 + 2i\mathbf{G}_j \cdot \nabla$, а также разницу в величине равновесных параметров первой и второй подрешеток $\beta = q_1^2 - q_0^2$. В случае $r_0 = r_1 = 0$ в длинноволновом приближении двухмодовый оператор \mathcal{L}_2 для уравнений (6), соответствующих всему набору возможных \mathcal{G}_j , ур. (8) примет форму:

$$\mathcal{L}_2 \approx \Delta B_0 + B_0^x \beta^2 \mathcal{G}_j^2. \quad (12)$$

Гексагональные решетки. Амплитудное представление динамических уравнений треугольной решетки было получено в [18], в дальнейшем аналогично были рассмотрены трехмерные кубические кристаллы [31, 19]. Одномодовый оператор \mathcal{L}_1 в первом приближении при равных по модулю векторах позволяет описать только простейшие структуры: в двумерном случае – треугольную, полосчатую [1, 21]; в трехмерном случае – ОЦК, стержневую и полосчатую [23, 33]. Рассмотрим гексагональную сотовидную (шестиугольную) решетку, состоящую из двух вложенных треугольных подрешеток с базисами \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 :

$$\mathbf{a}_1 = a_0 \langle 1, 0 \rangle; \quad \mathbf{a}_2 = a_0 \langle 1/2, \sqrt{3}/2 \rangle; \quad (13)$$

$$\mathbf{b}_1 = \langle 0, 0 \rangle; \quad \mathbf{b}_2 = a_0 \langle 1/2, -1/2\sqrt{3} \rangle. \quad (14)$$

Обратная решетка имеет также треугольную структуру с волновыми векторами:

$$\mathbf{q}_1 = q_{eq} \langle 1, -1/\sqrt{3} \rangle; \quad \mathbf{q}_2 = q_{eq} \langle 0, 2/\sqrt{3} \rangle. \quad (15)$$

Воспользуемся набором индексов Миллера: $(h, k) = (1, 0), (0, 1), (-1, 1)$, модуль $|\mathbf{G}_{1..3}| = 1$. Помимо базового набора, соответствующего одномодовому приближению, для воспроизведения сотовидной (шестиугольной) решетки потребуются дополнительный набор векторов, соответствующий двухмодовому приближению (см. рис. 1), $|\mathbf{G}_{4..6}| = 2/\sqrt{3}$:

$$\mathbf{G}_4 = 2q_{eq}/\sqrt{3} \langle 0, 1 \rangle; \quad \mathbf{G}_5 = 2q_{eq}/\sqrt{3} \langle \sqrt{3}/2, 1/2 \rangle; \quad (16)$$

$$\mathbf{G}_6 = \mathbf{G}_5 - \mathbf{G}_4.$$

Для треугольной решетки в двухмодовом приближении потребуются дополнительный набор векторов:

$$\mathbf{G}_4 = \mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2; \quad \mathbf{G}_5 = \mathbf{G}_3 - \mathbf{G}_1; \quad \mathbf{G}_6 = \mathbf{G}_2 + \mathbf{G}_3. \quad (17)$$

Подставляя \mathbf{G}_i в поле (7), а затем в амплитудные ур. (6), получим набор уравнений движения (9) в длинноволновом приближении (10) и (12). Просуммировав и усреднив по амплитудам при $q_{eq} = 1$, получим окончательные уравнения (см. дополнительный материал).

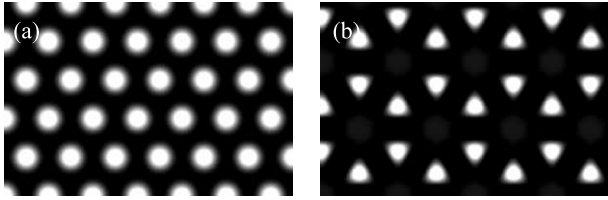


Рис. 1. Построенное в безразмерных координатах распределение плотности n , ур. (7) для: (а) – треугольной и (б) – сотовидной (шестиугольной) решеток по ур. (15), (16)

В развитие настоящего формализма отметим, что влияние флуктуаций в среднеполевых моделях определяется корреляционной длиной r_c параметра порядка, уменьшающейся с приближением к температуре T_m . В двухмодовой модели влияние флуктуаций на отдельные моды возможно в случае приближения масштаба устойчивости L к величине $1/\mathbf{G}_{4..6}$. Для значений $1/\alpha \gg 1$ [см. ур. (18)–(21)] влияние может оказаться значительным и требует дополнительного рассмотрения. При этом некоррелированные тепловые флуктуации в двухмодовой модели аналогично с одномодовой приводят к переходу первого рода при немалости параметра a [4, 23].

Усреднение амплитуд КФП и длинноволновое приближение. Для того, чтобы сформулировать обобщенное уравнение движения границы кристалла в жидкую фазу и записать уравнение в виде бегущей волны, необходимо сделать еще одно допущение. Так как в длинноволновом приближении локальной анизотропией растущей фазы пренебрегается, мы можем допустить равенство амплитуд фазового поля в различных направлениях. При этом, в случае двухмодового приближения, амплитуды КФП могут отличаться в зависимости от выбранного набора векторов для различных подрешеток. Таким образом, для первой моды (первой подрешетки) при $\mathbf{G}_j, j = 1..3$ мы приравниваем амплитуды к ϕ ; для второй подрешетки при $j = 4..6$ амплитуды могут отличаться и будут равны ξ :

$$|\eta_j| = \{\phi, \text{ для } j = 1..3; \quad \xi, \quad j = 4..6\}. \quad (18)$$

Предположим линейную зависимость $\xi \simeq \alpha\phi$, которая верна в области амплитуд $\phi \sim 1$, но может включать зависимость от параметров свободной энергии и должна быть вычислена при помощи минимизации F (см. рис. 6 в работе [19]). Подставляя $\xi \simeq \alpha\phi$ в уравнения движения (6) и суммируя по всем амплитудам, получим следующее уравнение движения для сотовидной кристаллической решетки:

$$\begin{aligned} \frac{3+3\alpha}{M} \left(\tau \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \phi = B_0^x \left(2 + \frac{32}{9}\alpha \right) \nabla^2 \phi - \\ - \Delta B_0 (3 + 4\alpha)\phi + 2a(3 + 4\alpha^2)\phi^2 - \\ - 12v(5\alpha^3 + 6\alpha^2 + 8\alpha + 15/4)\phi^3. \end{aligned} \quad (19)$$

Соответствующая этому уравнению движения свободная энергия будет записана следующим образом:

$$\begin{aligned} F_{\text{hon}} = \int dr \left[\frac{B_0^x}{3} \left(\sum_{j=1}^3 |\mathcal{G}_j \phi|^2 + \alpha^2 \sum_{j=4}^6 |\mathcal{G}_j \phi|^2 \right) + \right. \\ \left. + 3\Delta B_0 (1 + \alpha^2)\phi^2 - 4a(1 + \alpha^3)\phi^3 + \right. \\ \left. + 45/2v (\alpha^4 + 16/5\alpha^2 + 1)\phi^4 \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Усредненное уравнение движения (19) в длинноволновом приближении позволяет описывать динамику распространения фронта кристаллической сотовидной фазы в жидкую. Разложение свободной энергии около равновесного значения параметра порядка $\phi = \phi_{eq}$ в первом приближении дает $\alpha \simeq q_0^2/q_1^2$. Тогда для $\alpha = 3/4$ уравнение (19) сводится к

$$\begin{aligned} \frac{1}{M} \left(\tau \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \phi = \frac{8}{9} B_0^x \nabla^2 \phi - \frac{8}{7} \Delta B_0 \phi + \\ + 2a\phi^2 - \frac{975}{28} v \phi^3. \end{aligned} \quad (21)$$

В одномодовом случае, при использовании набора векторов $\mathbf{G}_{1..3}$, уравнение (21) упрощается до уравнения треугольной структуры, если учесть $\beta = 1$:

$$\frac{1}{M} \left(\tau \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \phi = 2B_0^x \nabla^2 \phi - \Delta B_0 \phi + 2a\phi^2 - 15v\phi^3. \quad (22)$$

Это уравнение аналогично приведенному в [18, 19]. Используя дополнительный набор векторов (17), можно получить уравнение роста треугольной структуры в двухмодовом приближении (см. коэффициенты в табл. 1).

Обобщенное уравнение движения и его аналитическое решение. Для определения скорости фронтов кристаллизации использовалась методика, аналогичная той, что применялась при расчете роста кубических кристаллов [18, 19]. В этом случае предполагается, что кристаллическая фаза с заданной плотностью и симметрией растет в жидкую переохлажденную фазу. Тогда обобщенное динамическое уравнение модифицированной модели КФП в длинноволновом приближении принимает вид дифференциального уравнения:

$$\frac{1}{M} \left(\tau \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \right) \phi = \tilde{B}_0^x \nabla^2 \phi - \Delta \tilde{B}_0 \phi + \tilde{a}\phi^2 - \tilde{v}\phi^3, \quad (23)$$

Таблица 1. Сравнение коэффициентов уравнений движения (23), полученных для различных решеток в результате усреднения по амплитудам КФП. Отдельные вклады усредненных амплитудных уравнений движения приведены в дополнительных материалах

Решетка \ Коэффициенты	\tilde{B}_0^x	$\Delta\tilde{B}_0$	\tilde{a}	\tilde{v}
Сотовидная, ур. (21)	$8B_0^x/9$	$8\Delta B_0/7$	$2a$	$975v/28$
Треугольная, ур. (22)	$2B_0^x$	ΔB_0	$2a$	$15v$
Треугольная (2-мод)	$12B_0^x$	$3\Delta B_0/2$	$15a/2$	$111v/2$

где коэффициенты \tilde{B}_0^x , $\Delta\tilde{B}_0$, \tilde{a} , \tilde{v} рассчитываются исходя из симметрии, заданной векторами \mathbf{G}_j , описывающими растущий кристалл, а затем – на основе термодинамических свойств и структурного фактора. Это уравнение показывает, что динамика кристаллизации решеток различной симметрии различается из-за коэффициентов, вычисленных при помощи различного вклада и наборов амплитуд для каждой симметрии. Из уравнений (21) и (22) видно, что они отличаются только коэффициентами и оба соответствуют форме ур. (23), полученной для роста трехмерных ОЦК и ГЦК решеток [19].

Уравнение (23) имеет решение в виде бегущей волны в форме [34]: $\psi(u) = A[1 - \tanh(u/Z)]$ для межфазной границы, движущейся со скоростью $V = \tilde{V}V_0$ в системе координат $u = x - Vt$. Подобные решения часто используются в моделях фазового поля [35]. Запишем решение этого уравнения [18, 19]:

$$\tilde{V} = \frac{\tilde{V}_m}{\sqrt{1 + \tilde{V}_m^2/\tilde{V}_\phi^2}}, \quad \tilde{V}_m = \frac{\sqrt{2}}{4} \left(3\sqrt{\tilde{b}^2 - 4} - \tilde{b} \right), \quad (24)$$

\tilde{V}_m – максимальная скорость движения фронта, ограниченная временем релаксации τ потока:

$$\tilde{V}_\phi = \sqrt{Mt_0/\tau}, \quad \tilde{b} = \tilde{a}/\sqrt{\tilde{v}|\Delta\tilde{B}_0|}. \quad (25)$$

Амплитуда межфазной границы A и ее ширина Z :

$$A = \frac{1}{4} \left(\tilde{b} + \sqrt{\tilde{b}^2 - 4} \right), \quad Z = \frac{4\sqrt{2(1 - \tilde{V}^2/\tilde{V}_\phi^2)}}{\tilde{b} + \sqrt{\tilde{b}^2 - 4}}. \quad (26)$$

Масштабные преобразования ур. (23) заданы как

$$\begin{aligned} \zeta &= \sqrt{\tilde{B}_0^x/|\Delta\tilde{B}_0|}, \quad t_0 = |\Delta\tilde{B}_0|^{-1}, \quad V_0 = \zeta/t_0, \\ \phi_0 &= \sqrt{|\Delta\tilde{B}_0|/\tilde{v}}, \quad \tilde{t} = Mt/t_0, \quad \tilde{\nabla} = \zeta^{-1}\nabla, \\ \psi &= \phi/\phi_0, \quad \tilde{x} = \zeta^{-1}x. \end{aligned} \quad (27)$$

Скорость роста. Рассмотрим безразмерные скорости роста треугольной и сотовидной структур, для этого учтем значения коэффициентов табл. 1. В расчетах использовались модельные параметры $M = 1$,

$\tau = 0.1$, $B_0^x = 1$, $a = 1$, $v = 0.1$. Приведенные скорости роста треугольного и сотовидного кристаллов значительно отличаются при высоких движущих силах $|\varepsilon|$ и зависят от времени релаксации.

При движущих силах $\varepsilon \neq 0$ кинетика роста и плавления треугольной решетки является наиболее интенсивной по сравнению с гексагональной, см. рис. 2. Этот факт объясняется влиянием разницы об-

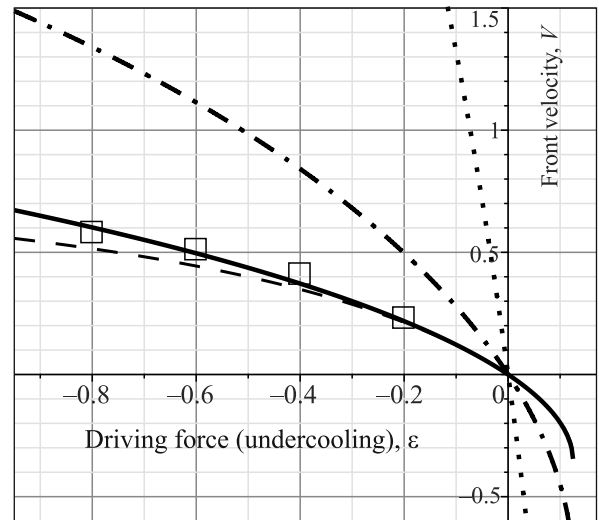


Рис. 2. Безразмерная скорость роста сотовидной (непрерывная линия для $\tau = 0.1$, штриховая – для $\tau = 1$) и треугольной (штрих-пунктирная линия – в одномодовом приближении, пунктирная – в двухмодовом) решеток, найденная из решения в виде бегущей волны (24) амплитудного уравнения КФП (23). Коэффициенты, соответствующие различным структурам, определены в табл. 1. $\varepsilon < 0$ соответствует кристаллизации, ур. (5). Результаты численных расчетов обозначены \square

ратных векторов первой и второй подрешеток $\beta = q_1^2 - q_0^2$. Бóльшее значение β соответствует более плотной упаковке первой и второй координационных сфер. Суммирование вкладов амплитуд КФП при получении ур. (19) прямо указывает на зависимость вкладов второй моды от β ($\beta = 1/3$ для сотовидной и $\beta = 2$ для двухмодовой треугольной решетки).

Таким образом, решетка с более плотным взаимным расположением атомов первой и второй координационных сфер получает больший вклад от вторичных мод и растет быстрее, если сравнивать треугольную и сотовидную структуры. Следует особо отметить, что данная тенденция наблюдается так же и для кубических решеток. В двухмодовом приближении ОЦК решетка, имеющая более плотную упаковку первой и второй координационных сфер, растет и плавится быстрее ГЦК решетки [19].

Расчеты по кинетике роста, рис. 2, согласуются с выводами [33], где показано, что при описании кристаллизации из изотропной жидкости с помощью формализма Ландау наиболее выгодной и формирующейся в первую очередь структурой является та, чьи вектора обратной решетки образуют замкнутый цикл. Это связано с тем, что при амплитудном разложении функционала свободной энергии периодической фазы определяющим вкладом обладает кубический член n^3 , принимающий максимальные значения при наличии замкнутого цикла векторов $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = 0$ [33, 10]. В двумерном случае такой первично образующей является треугольная решетка, а в трехмерном – ОЦК, что, действительно, констатируется в ряде работ [36, 37]. Как видно из табл. 1, вклад параметра \tilde{a} максимален именно для двухмодовой треугольной решетки и, наряду с \tilde{V}_0^* , определяет первичное формирование метастабильной треугольной фазы. Это значит, что геометрически более “простая” треугольная фаза кристаллизуется и плавится быстрее, чем “сложная” сотовидная структура. Важно отметить, что в моделях КФП, помимо наличия членов третьего порядка в разложении $F(n)$, явно не учитывается ориентационный порядок, а жидкая фаза является изотропной, поэтому механизм плавления Березинского–Костерлица–Таулеса не может быть учтен, система плавится посредством перехода первого рода [38].

Кроме прочего, на интенсивность роста любой структуры влияет время релаксации τ потока атомной плотности (см. рис. 2). Увеличение τ приводит к понижению скорости роста, что связано с релаксацией дополнительной кинетической переменной. Такая зависимость от τ наблюдается и при росте кубических решеток [19, 25]. Предельная величина $\tau_m = 8\tilde{v}/\tilde{a}^2$, определяющая малость вклада второй производной в кинетику фронта, может быть получена из разложения V при малых ϵ [19].

Для проверки верности аналитических решений в виде бегущих волн КФП-уравнение (6) с двухмодовым оператором (4) решалось численно. Моделирование выполнялось методом конечных элементов

(КЭ) в пакете COMSOL Multiphysics [39] в двумерной области размерами 450×380 с максимальным размером КЭ $\ell = 1.3$. В домене задавались изолированные граничные условия и точечное начальное возмущение. Положение фронта определено по изменению поля химического потенциала, при этом скорость усреднялась по направлениям роста. Для расчетов использовались те же параметры, что и для получения рис. 2, а величины $q_0 = 1, q_1 = 2/\sqrt{3}$ соответствовали модулям векторов $\mathbf{G}_{1..6}$ из ур. (16). Структура стабилизировалась при $r_0 = 0.00, r_1 = -0.25$. Результаты моделирования двухмодового уравнения КФП (6) приведены на рис. 3. Скорость движения

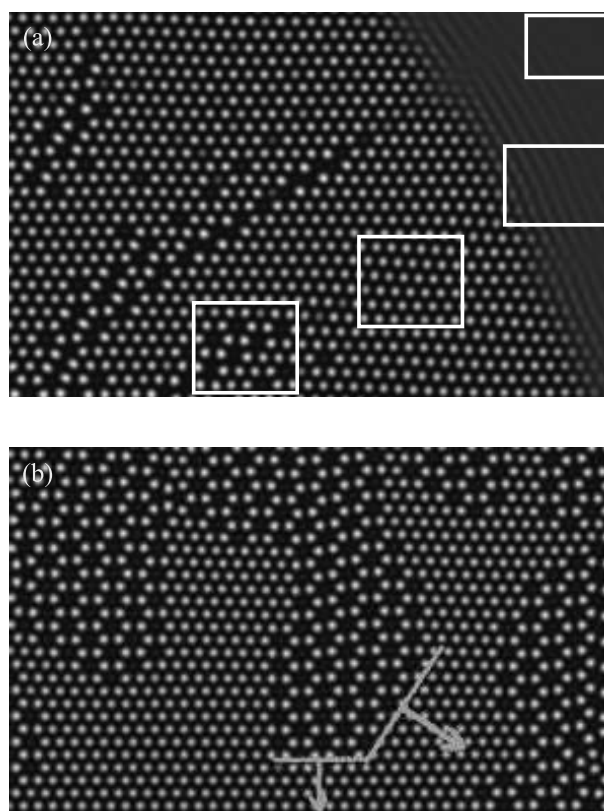


Рис. 3. (Цветной онлайн) Результаты численных расчетов по двухмодовой модели КФП, демонстрирующие кристаллизацию в гексагональную сотовидную решетку через полосчатую и треугольную, $\epsilon = -0.2$. (а) – Начальный этап кристаллизации $t = 100$. Рамками выделены (сверху вниз) однородная жидкость, полосчатая, треугольная и сотовидная структуры соответственно. (б) – Границы фронта сотовидной решетки на промежуточном этапе кристаллизации $t = 1500$

фронта сотовидной структуры ур. (24) соответствует результатам численных расчетов, см. рис. 3. При этом скорость роста первичной треугольной решетки в численных расчетах совпадает с кривой роста двух-

модовой треугольной, обозначенной “Triangle two-mode”. Несмотря на значительно более высокую скорость формирования первичной треугольной решетки, для данных движущих сил равновесной является именно сотовидная, что может быть определено с помощью термодинамического подхода [23]. Сопоставление решений в виде бегущей волны с численным решением уравнения КФП показывает применимость принятых приближений и аналитического решения (24) для оценки кинетики формирования сложных решеток с дополнительным базисом (решеток не Браве).

Выводы. Исследовано формирование двумерной сотовидной решетки в модели кристаллического фазового поля (КФП). В приближении малой анизотропии вклады амплитуд КФП приняты одинаковыми и усреднены в пределах соответствующих подрешеток. Полученное с помощью численной минимизации соотношение для амплитуд первой и второй подрешеток позволяет воспроизвести сотовидную структуру. Динамика формирования сотовидной решетки описывается амплитудными уравнениями движения фронта кристаллизации в длинноволновом приближении. Аналитическое решение этих уравнений получено в виде бегущей волны. Прямыми численными расчетами двухмодового уравнения КФП выполнена проверка этих решений.

Получено соответствие между наблюдаемыми скоростями роста промежуточной метастабильной треугольной и конечной сотовидной структурами. Кинетика формирования структур соответствует предсказаниям теории кристаллизации изотропной жидкости. В трехмерном случае формальное описание гексагональных не Браве решеток может привести к проявлению существенной анизотропии из-за значительного расстояния при укладке слоев атомной плотности. Тогда коэффициент оператора B_0^x , определяющего модуль упругости кристалла, может оказаться значительно анизотропным, а принятое допущение о равенстве величин амплитуд в каждой из подрешеток может оказаться не применимым и потребует учета анизотропии.

Сформулированная методика, полученные решения и результаты настоящего исследования могут быть применены для анализа формирования метастабильных и равновесных фаз с гексагональной сингонией (нитрид бора), сотовидной структурой (графен), а также двумерного плавления.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда # 21-73-00263, <https://rscf.ru/project/21-73-00263/>.

1. K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, and M. Grant, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 245701 (2002).
2. С. А. Бразовский, *ЖЭТФ* **68**, 175 (1975).
3. A. J. Archer, D. J. Ratliff, A. M. Rucklidge, and P. Subramanian, *Phys. Rev. E* **100**, 022140 (2019).
4. В. В. Лебедев, А. Р. Муратов, *ФТТ* **32**, 837 (1990).
5. E. I. Kats, V. V. Lebedev, and A. R. Muratov, *Phys. Rep.* **228**, 1 (1993).
6. П. К. Галенко, В. Е. Анкудинов, И. О. Стародумов, *Высокоскоростная динамика в методе фазового поля: микроскопика*, ИКИ, М.–Ижевск (2021).
7. H. Emmerich, H. Löwen, R. Wittkowski, T. Gruhn, G. I. Tóth, G. Tegze, and L. Gránásy, *Adv. Phys.* **61**, 665 (2012).
8. P. K. Galenko and K. R. Elder, *Phys. Rev. B* **83**, 064113 (2011).
9. D. M. Herlach, *Mater. Sci. Eng. Rep. R* **12**, 177 (1994).
10. S. K. Mkhonta, K. R. Elder, and Z. F. Huang, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 35501 (2013).
11. N. Osterman, D. Babič, I. Poberaj, J. Dobnikar, and P. Ziherl, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 248301 (2007).
12. G. B. Jo, J. Guzman, C. K. Thomas, P. Hosur, A. Vishwanath, and D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 045305 (2012).
13. K. L. Elder, M. Seymour, M. Lee, M. Hilke, and N. Provatas, *Phil Trans. A* **376**, 1 (2018).
14. R. Kondo, *Phys. Rev. B* **104**, 014112 (2021).
15. M. Seymour and N. Provatas, *Phys. Rev. B* **93**, 035447 (2016).
16. R. Lifshitz and D. M. Petrich, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1261 (1997).
17. А. Н. Ипатов, Д. А. Паршин, Д. А. Конюх, *ЖЭТФ* **4**, 534 (2021).
18. P. K. Galenko, F. Iunes Sanches, and K. R. Elder, *Phys. D* **308**, 1 (2015).
19. V. Ankudinov, K. R. Elder, and P. K. Galenko, *Phys. Rev. E* **102**, 062802 (2020).
20. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Lett. A* **75**, 88 (1979).
21. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **92**, 331 (1992).
22. T. V. Ramakrishnan and M. Yussouff, *Phys. Rev. B* **19**, 2775 (1979).
23. В. Е. Анкудинов, П. К. Галенко, Н. В. Кропотин, М. Д. Кривилев, *ЖЭТФ* **149**, 343 (2016).
24. A. Emdadi, M. A. Zaeem, and E. Asadi, *Comput. Mater. Sci.* **123**, 139 (2016).
25. P. K. Galenko and D. Jou, *Phys. Rep.* **818**, 1 (2019).
26. P. Galenko, D. Danilov, and V. Lebedev, *Phys. Rev. E* **79**, 51110 (2009).
27. P. K. Galenko, H. Gomez, N. V. Kropotin, and K. R. Elder, *Phys. Rev. E* **88**, 13310 (2013).
28. P. Stefanovic, M. Haataja, and N. Provatas, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 225504 (2006).

29. G.I. Tóth, G. Tegze, T. Pusztai, G. Tóth, and L. Gránásy, *J. Phys. Condens. Matter* **22**, 364101 (2010).
30. V. Ankudinov, I. Starodumov, N. P. Kryuchkov, E. V. Yakovlev, S. O. Yurchenko, and P. K. Galenko, *Mathematical Methods in the Applied Sciences* **44**, 12185 (2021).
31. K. R. Elder, Z. F. Huang, and N. Provatas, *Phys. Rev. E* **81**, 011602 (2010).
32. N. Goldenfeld, B. P. Athreya, and J. A. Dantzig, *Phys. Rev. E* **72** (2005).
33. S. Alexander and J. McTague, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 702 (1978).
34. I. G. Nizovtseva and P. K. Galenko, *Phil. Trans. R. Soc. A* **376**, 20170202 (2018).
35. В. Г. Лебедев, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 256 (2022).
36. C. Desgranges and J. Delhommelle, *J. Chem. Phys.* **126**, 054501 (2007).
37. Y. Liu, H. Nie, R. Bansil, M. Steinhart, J. Bang, and T. P. Lodge, *Phys. Rev. E* **73**, 061803 (2006).
38. В. Н. Рыжков, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *УФН* **187**, 921 (2017).
39. COMSOL Multiphysics® Software v. 6.0., Comsol AB (Stockholm, Sweden, 2022).

Фазовая логика на основе джозефсоновских π -контактов

А. А. Максимовская^{+,*}, В. И. Ружицкий^{+,**}, Н. В. Кленов^{+,**¹⁾}, С. В. Бакурский[×], М. Ю. Куприянов[×],
И. И. Соловьев^{+,**×}

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

^{*} Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 103030 Москва, Россия

[×] Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына МГУ, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 апреля 2022 г.

После переработки 6 мая 2022 г.

Принята к публикации 7 мая 2022 г.

Переход к джозефсоновским цифровым схемам с представлением информации в виде скачков фазы сверхпроводящего параметра порядка на гетероструктурах обещает радикальный рост степени интеграции при сохранении высокого быстродействия и энергоэффективности. Однако изготовить на практике воспроизводимые бистабильные джозефсоновские контакты, необходимые для функционирования ранее предложенных базовых блоков фазовой логики, пока не представляется возможным. Для решения этой проблемы в статье предложена и проанализирована в рамках резистивной модели джозефсоновских гетероструктур концепция фазовой логики на основе π -контактов. Потенциальная энергия таких контактов имеет единственный минимум, при разности параметров порядка электродов, равной π . Показано, что использование π -контактов позволяет реализовать весь набор логических устройств, необходимых для работы цифровых вычислительных устройств на основе фазовой логики.

DOI: 10.31857/S1234567822120060, EDN: imtefq

Введение. Цифровая сверхпроводниковая электроника, использующая особенности эффектов Джозефсона и макроскопической квантовой интерференции в сверхпроводниковых цепях, позволяет создавать перспективные аналого-цифровые и цифро-аналоговые преобразователи, децимационные фильтры, времяизмерительные системы, корреляторы, арифметико-логические устройства с уникальными показателями быстродействия и энергоэффективности [1–12]. При типичном значении тактовой частоты 20 ГГц мощность динамической диссипации в расчете на один джозефсоновский контакт может быть доведена до 13 нВт [2]. Также джозефсоновские устройства могут стать незаменимыми помощниками при работе со сверхпроводниковыми квантовыми вычислительными системами [13–18].

Для широкого применения цифровых схем на основе быстрой одноквантовой (БОК) логики с представлением информации в виде наличия/отсутствия кванта магнитного потока Φ_0 в сверхпроводящем контуре логической ячейки, критически важно уменьшить их характерные размеры. Существующие оценки [19] для максимальной плотности элементов в схемах, использующих геометриче-

скую индуктивность для хранения информации и сверхпроводящие “полоски” для соединений, дают порядка 10^7 джозефсоновских контактов на квадратный сантиметр. Дальнейшее уменьшение планарных размеров ячеек и расстояний между ними является проблематичным из-за почти экспоненциального роста взаимных индуктивностей и перекрестных помех. Особенно значима проблема миниатюризации в джозефсоновских схемах, предназначенных для работы при сверхнизких температурах в гибридных квантово-классических вычислителях, где необходимо уменьшать критический ток гетероструктур, чтобы избежать лишнего нагрева криогенной системы.

Перспективным решением обозначенной проблемы является переход к так называемой *фазовой логике*, в основе которой лежат два основных принципа:

- информация хранится в фазе бистабильного джозефсоновского элемента, а не в наличии/отсутствии кванта магнитного потока в базовой ячейке;

- в схемотехнических решениях отсутствуют соединительные индуктивности: электрические цепи содержат только джозефсоновские контакты.

Пара логических состояний “0” и “1” может быть получена даже с использованием одного бистабильного джозефсоновского контакта [20–24]. В этом

¹⁾e-mail: nvklenov@gmail.com

случае хранящий информацию элемент логических устройств сводится к этому одиночному контакту. Его состояние определяется тем, в каком из двух минимумов энергии, соответствующих скачку фазы параметра порядка (*фазе элемента*) $\varphi = \varphi_0$ или $\varphi = \varphi_1$, он в данный момент находится. Распространению информации соответствует волна изменения фазы сверхпроводящего параметра порядка, а не распространения флуксона.

На основе предложенного подхода были разработаны компактные, энергоэффективные схемы, полезные для практической реализации фазовой логики и памяти [25, 26]. Было показано, что характерные планарные размеры цифровых устройств могут быть на порядок меньше традиционных БОК-реализаций (площадь на чипе под 8-битный сумматор можно уменьшить с более чем 200 мкм² до 22 мкм²) [25]. К сожалению, до настоящего времени вопросы изготовления бистабильных джозефсоновских контактов с заданными и воспроизводимыми параметрами находятся лишь в стадии разработки.

В данной статье мы продемонстрируем, что работоспособные цифровые схемы фазовой логики могут быть сконструированы на основе комбинаций из 0- и π -контактов (со сдвинутой на π ток-фазовой зависимостью), обеспечивающих бистабильность базового блока необходимую для работы этой логики. Необходимо отметить, что технология изготовления 0- и π -контактов в настоящее время достаточно хорошо отработана [27–31].

Общие принципы работы схем фазовой логики. На рисунке 1 представлена схема базового блока фазовой логики, на которой в виде восьми-конечных крестов представлены элементы с двумя устойчивыми физически различимыми состояниями, которым соответствуют фазы минимумов потенциальной энергии φ_0 и φ_1 ($0 \leq \varphi_1 < \pi$ и $\pi \leq \varphi_2 < 2\pi$). Особо подчеркнем отсутствие в базовом блоке индуктивностей, предназначенных для хранения квантов магнитного потока. В подводящих джозефсоновских передающих линиях (all-JJTL) также все соединительные геометрические индуктивности заменены на джозефсоновские.

Информация в данном базовом блоке хранится в фазе элемента J_m : его потенциальная энергия имеет два минимума при $\varphi = \varphi_1$ и $\varepsilon = \varphi_2$ соответственно. Джозефсоновские контакты J_{in} и J_{out} являются входным и выходным портами схемы. Элемент J_l соединяет хранящий информацию элемент блока J_m с выходом схемы J_{out} . Его параметры в первую очередь влияют на механизм считывания состояния. Бистабильный элемент J_v соединяет вход

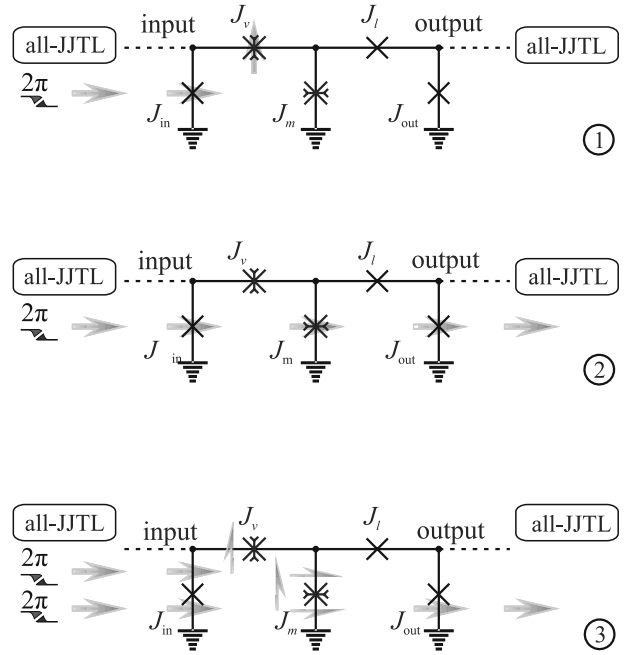


Рис. 1. (Цветной онлайн) Базовый блок схем фазовой логики на бистабильных контактах, функционирующий в следующих режимах: 1 – ограничитель; 2 – линия передачи; 3 – цифровой делитель частоты. Стрелками на схемах показано распространение волн тока и фазы

схемы с J_m , играя роль преобразователя фазы на входе блока.

В зависимости от параметров преобразователя фазы (в качестве которого может выступать как один бистабильный контакт J_v , так и последовательное соединение пары джозефсоновских гетероструктур [32]) базовый блок может реализовать все режимы, необходимые для реализации наиболее распространенных цифровых устройств. Разберем далее динамические процессы в базовом блоке для следующих режимов работы: ограничитель, линия передачи, цифровой делитель частоты.

В *режиме ограничителя* (рис. 1(1)) пришедший скачок фазы сверхпроводящего параметра порядка генерирует во входной ячейке (input) токи, которые приводят к изменению фазы на контакте J_{in} и элементе-преобразователе J_v на $\sim 2\pi$. Но соотношения между джозефсоновскими энергиями и характерными временами процессов для J_v и J_m таково, что преобразователь фазы переключается между устойчивыми состояниями раньше элемента, хранящего информацию. Элемент J_m и выходная ячейка в целом (output) остаются в этом режиме в своем исходном равновесном состоянии. Скачок разности фаз на выходе блока не формируется. Последо-

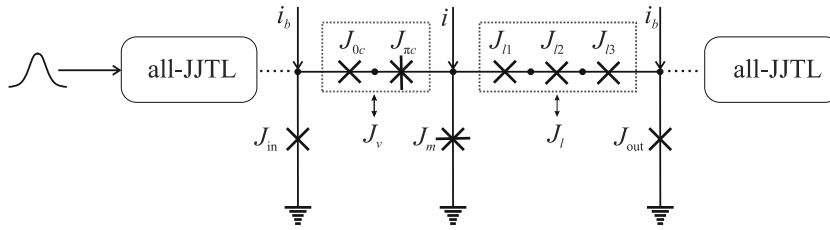


Рис. 2. (Цветной онлайн) Базовый блок схем фазовой логики на основе π -контактов, обозначенных на схеме шестиконечными крестами

вательные переключения джозефсоновских контактов (J_{in}) и бистабильных элементов (J_v) показаны на рис. 1(1) стрелками.

В режиме *линии передачи* (рис. 1(2)) преобразователь J_v переключается медленно, и поданная на вход волна скачков фазы создает через него большой ток, изменяя фазы контакта J_{in} , а также центрального элемента J_m и выходной ячейки J_{out} на $\sim 2\pi$. Входной импульс, переносящий изменение фазы на 2π , проходит в этом случае через базовый блок, не меняя его состояния. Последовательные переключения джозефсоновских контактов (J_{in} , J_{out}) и бистабильных элементов (J_m) также показаны на рис. 1(2) стрелками.

Для промежуточных значений скорости переключения между устойчивыми состояниями (φ_{0v} и φ_{1v}) преобразователь J_v под действием пришедшей на вход информации и хранящий информацию элемент J_m успевает изменить свою фазу с φ_0 на φ_1 . В результате состояние базового блока в целом изменяется с “0” на “1”, т.е. происходит операция “запись”. На рисунке 1(3) это символизирует половина стандартной стрелки. Отметим, что амплитуды импульса тока, возникающего в выходной ячейке ($J_l - J_{out}$), после одной пришедшей на вход волны скачков фазы не хватает для переключения контакта J_{out} . Однако после переключения базового элемента J_m изменилось состояние выходной ячейки: в ней начал циркулировать ток (что можно использовать для “считывания” информации). И когда циркулирующий ток суммируется с импульсом тока, вызванным следующей волной изменения фазы, поданной на вход, J_{out} переключается между своими устойчивыми состояниями (с фазами 0 и 2π) и генерирует волну изменения фазы в выходную линию. При этом хранящий информацию элемент J_m возвращается из состояния “1” в состояние “0”. На рисунке 1(3) это символизирует вторая половина стандартной стрелки. Можно заключить, что в данном случае базовый блок работает в качестве цифрового *делителя частоты* пополам: каждый второй импульс проходит на выход схемы.

Было показано [25], что на основе схем с описываемым функционалом возможна реализация логических элементов, памяти с разрушающим и неразрушающим считыванием, RS- и T-триггеров, полусумматоров и более сложных компонент вычислительных устройств.

Схемы фазовой логики на основе π -контактов. В ряде работ [21, 33–36] было показано, каким образом сосуществование 0- и π -контактов позволяет получить бистабильный φ -контакт. Ключевая идея данной статьи состоит в том, что требуемые бистабильные элементы блока фазовой логики можно создать, комбинируя относительно простые в изготовлении джозефсоновские 0- и π -контакты. На рисунке 2 представлен вариант базового логического блока, в котором преобразователь фазы J_v выполнен в виде комбинации 0- и π -контактов (J_{0c} , $J_{\pi c}$). В качестве центрального элемента блока J_m также можно использовать π -структуру.

Суммарная джозефсоновская энергия входной ячейки, состоящей из контактов J_{in} , J_{0c} , $J_{\pi c}$ и J_m , как функция разности фаз на переходах J_{in} и J_m , обладает двумя локальными минимумами (см. рис. 3). Видно, что в устойчивых состояниях фаза на π -контактах равна $\pi + 2\pi n$, а на 0-контактах $-2\pi n$, где n – целое.

В этом случае во входной ячейке у нас четное число π -контактов, суммарный набег фазы параметра порядка по контуру равен $2\pi n$ и отсутствует циркулирующий ток. Это исключает нежелательное обратное влияние на другие блоки, а также позволяет удобно подключать схемы фазовой логики к стандартным элементам БОК-логики. Отметим, что бистабильную входную ячейку можно было бы получить без использования π -контактов, вводя вместо них большое количество последовательно соединенных 0-структур, обеспечивающих требуемый набег фазы параметра порядка.

В выходной ячейке имеется нечетное число π -контактов, так что разность между фазой J_m и фазой 0-контактов создает в ней циркулирующий ток,

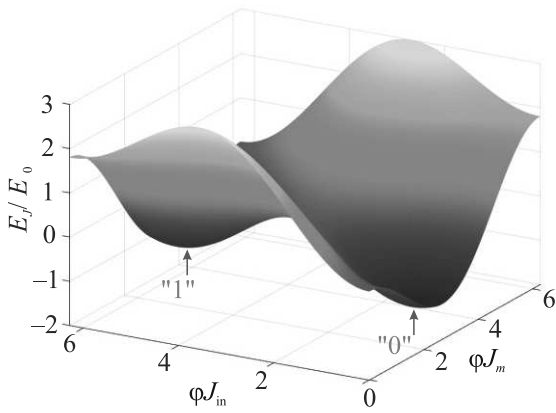


Рис. 3. (Цветной онлайн) Джозефсоновская энергия входной ячейки и центрального элемента базового блока фазовой логики на 0- и π -контактах (в режиме делителя частоты) как функция фазы в гетероструктурах J_m и J_{in} . Особо выделены устойчивые логические состояния “0” и “1” для рассматриваемой системы. Критические токи контактов J_{0C} и $J_{\pi C}$ составляют соответственно 1.2 и -0.35 от критического тока контакта J_{in} . Нормированные токи питания: $i_b = 0.77$, $i = 0.4$

который может протекать в двух направлениях, что позволяет считывать состояние блока. Это навязывает падение фазы параметра порядка π на элементе J_l . Оказалось, что для устойчивой работы схемы оптимальным является реализация такого элемента в виде стека, состоящего из трех последовательно включенных контактов J_{l1-3} .

Чтобы продемонстрировать работоспособность всех перечисленных выше ключевых режимов обработки информации, рассмотрим динамические процессы в базовом блоке, представленном на рис. 2. При моделировании процессов управления и считывания состояния базового блока мы будем рассматривать передающие линии, состоящие только из джозефсоновских контактов, all-JJTL [25]. Система дифференциальных уравнений с учетом баланса токов для каждого узла была записана в рамках обобщенной резистивной модели и решалась с использованием методов Рунге–Кутты 4-го и 5-го порядков, а также метода Гаусса для разрешения систем линейных уравнений. Для j -го джозефсоновского контакта в составе блока уравнение движения имеет вид:

$$i_{\Sigma j} = i_{Cj} \sin(\varphi_j) + \alpha_j \dot{\varphi}_j + \ddot{\varphi}_j, \quad (1)$$

где $i_{\Sigma j}$ – суммарный затекающий в контакт ток, i_{Cj} – критический ток, α_j – коэффициент демпфирования (затухания). Все токи нормированы на критический

ток входного контакта; точка означает, что дифференцирование происходит по времени τ , нормированному на характерное время входного контакта τ_C .

На рисунке 4а–с представлены зависимости фазы на контактах блока от времени для каждого из режимов, возникающие после того, как на вход поступают последовательно волны изменения фазы.

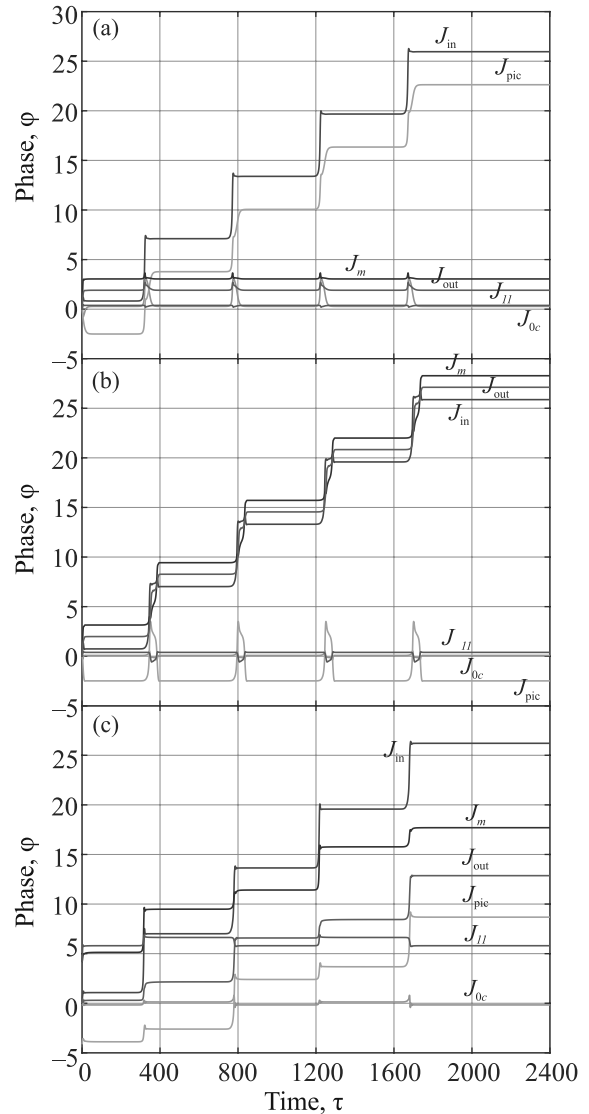


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости фазы на контактах блока от нормированного на τ_C времени для режимов: (а) – 1 – ограничитель, $i_{\pi C} = -0.05$, $i_{0C} = 0.1$; (б) – 2 – линия передачи, $i_{\pi C} = -0.2$, $i_{0C} = 1.2$; (в) – 3 – цифровой делитель частоты, $i_{\pi C} = -0.35$, $i_{0C} = 1.2$. Нормированные токи питания указаны на рис. 3; $\alpha_{0C} = 0.8$, $\alpha_{\pi C} = 0.9$

Так, в режиме ограничителя (рис. 4а), когда критический ток контакта $J_{\pi C}$ чуть меньше, чем у J_{0C} , именно π -структура является “слабым местом” во

входной ячейке, на котором происходит скачок фазы на $\sim 2\pi$. В этом случае фазы контактов J_m и J_{out} практически не меняются. В режиме *линии передачи* (рис. 4b) каждая волна изменения фазы на входе меняет фазу контактов J_m и J_{out} на 2π , а затем распространяется в выходную линию передачи. Импульсы проходят через базовый блок, не меняя его состояния: в конце приведенного для иллюстрации расчета $\pi + 8\pi$. В режиме *деления частоты пополам* каждый импульс на входе меняет фазу контакта J_m на $\sim \pi$ (т.е. в данном случае $\varphi_1 \approx \pi$ и $\varphi_2 \approx 2\pi$), но лишь каждый второй – фазу контакта J_{out} на 2π .

Выбирать режим работы блока (ограничитель, линия передачи, цифровой делитель частоты) мы можем за счет выбора величин критических токов 0-контакта, i_{0C} , и π -контакта, $i_{\pi C}$ (рис. 5). Наглядно

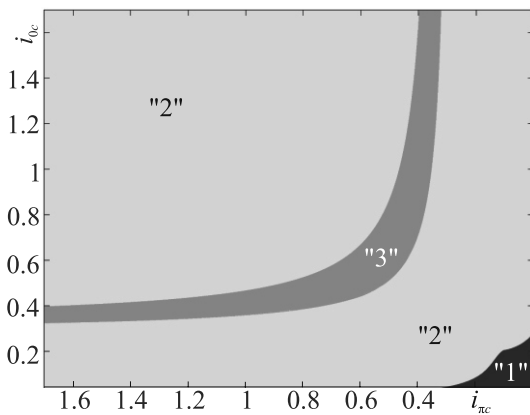


Рис. 5. (Цветной онлайн) Режимы работы базового блока фазовой логики на 0- и π -контактах на плоскости параметров контактов преобразователя фазы во входной ячейке: $i_{\pi C}$, i_{0C} . Синим цветом обозначен режим ограничителя ("1"), желтым – линии передачи ("2"), голубым цветом – режим деления частоты пополам ("3"). Нормированные токи питания и коэффициенты демпфирования как на рис. 3 и 4

видно, что режим ограничителя реализуется, когда переключения между соседними устойчивыми состояниями в преобразователе фазы во входной ячейке происходят раньше, чем в J_m . Из уравнения движения (1) видно, что скорость изменения фазы на контакте определяется параметром α_j . Однако если у медленного контакта относительно маленький критический ток, то он может начать переключаться раньше. Для режима деления частоты пополам нужны промежуточные значения быстродействия этого элемента в предлагаемом блоке фазовой логики.

Практическая реализация базового блока фазовой логики на π -контактах. Джозефсоновские 0-контакты на практике – это, обычно, туннельные гетероструктуры сверхпроводник–

изолятор–сверхпроводник (SIS) типа “сэндвич”. Совместимые с БОК-схемами и квантовыми регистрами π -контакты создают в виде гетероструктур сверхпроводник–ферромагнетик–сверхпроводник (SFS) с достаточно большим критическим током и малым сопротивлением в нормальном состоянии [27, 28, 37, 38]. Как следствие, такие джозефсоновские π -контакты имеют малое характерное напряжение и низкую характерную частоту [39–42]. Учет низкого быстродействия π -контактов в сравнении с 0-контактами показал замедление работы ячейки. На рисунке 6 видно, что длительность одного рабочего такта схемы увеличилась примерно в полтора раза. Также мы зафиксировали и сужение области деления частоты пополам на плоскости параметров контактов в составе преобразователя фазы (рис. 5). Решить эту проблему можно за счет перехода к стекам, отталкиваясь от концепции гетероструктуры сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник–ферромагнетик (SISFS). Для таких составных контактов характерные напряжение и частота имеют тот же порядок, что и для туннельных джозефсоновских контактов, используемых в логических схемах БОК-логики [39–42].

Также перспективной представляется использование наноразмерных (с площадью 18000–30000 нм²) джозефсоновских контактов с областью слабой связи из нормального металла, выполненной в виде мостика переменной толщины [43, 44]. Поскольку в предложенном базовом блоке функциональная геометрическая индуктивность всюду заменена на джозефсоновскую, такое решение даст особенно заметный выигрыш в компактности разрабатываемых цифровых устройств. π -контакты в рамках этого подхода можно получить, если использовать в области слабой связи дополнительные слои магнитного изолятора.

Заключение. Предложенная схема позволяет реализовать весь функционал схем фазовой логики без использования трудных в изготовлении бистабильных [45] джозефсоновских контактов. При этом удается сохранить и одно из ключевых преимуществ рассматриваемого подхода – малые планарные размеры схем и, как следствие, возможность добиваться высокой степени интеграции для джозефсоновских цифровых устройств. Для уменьшения планарных размеров предложенного блока джозефсоновские контакты (например, контакты J_{1-3} в выходной ячейке) могут быть выполнены в виде компактного стека [46].

Планарный размер предложенного базового блока можно оценить как сумму площадей всех джо-

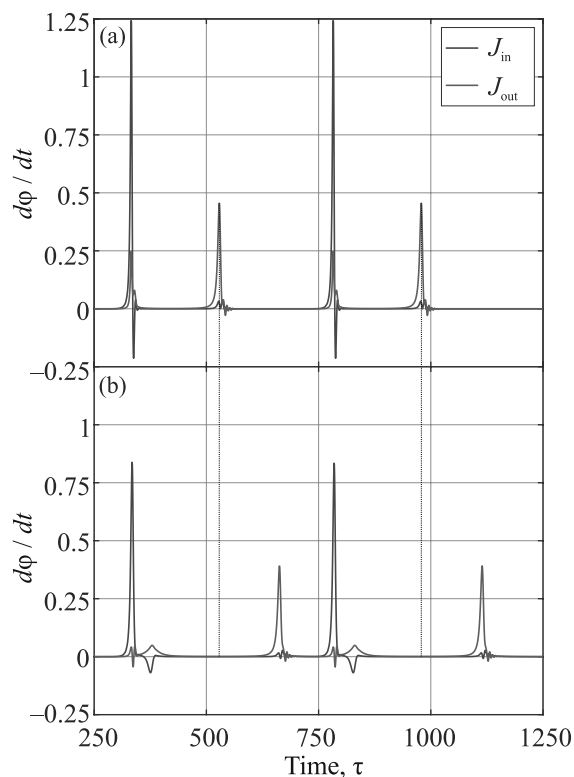


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимости от времени нормированного напряжения, $d\varphi/dt$, на входе и выходе базового π -блока для: (a) – одинаковых сопротивлений 0- и π -контактов ($\alpha_{0C} = 0.8$, $\alpha_{\pi C} = 0.9$, $\alpha_m = 1$); (b) – малого сопротивления π -контактов ($\alpha_{0C} = 0.8$, $\alpha_{\pi C} = 9$, $\alpha_m = 10$). Синим цветом обозначены импульсы на входе, красным цветом – на выходе блока

зефсоновских контактов схемы и сумму площадей соединений между ними. Если допустить, что площади всех контактов равны S , и такую же площадь занимают соединения, то тогда площадь базового блока составит $14S$. В случае технологии МПТ LL для туннельных структур сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник $S \approx 0.4 \text{ мкм}^2$ [47], а площадь базового блока составит примерно 5.6 мкм^2 . В случае наноразмерного джозефсоновского контакта с областью слабой связи из нормального металла, выполненной в виде мостика переменной толщины [43], искомая площадь составит $S \approx 0.018 \text{ мкм}^2$, а площадь базового блока составит 0.252 мкм^2 . Обозначенные ориентиры делают весьма актуальной перспективы практической реализации схемы джозефсоновской фазовой логики на основе π -контактов.

Моделирование динамических процессов в блоках фазовой логики выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда # 20-12-00130; доступ к необходимой научно-технической литературе по-

лучен при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы МГУ “Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина”.

1. D. S. Holmes, A. L. Ripple, and M. A. Manheimer, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **23**, 1701610 (2013).
2. O. A. Mukhanov, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **21**, 760 (2011).
3. F. Kirichenko, I. V. Vernik, J. A. Vivalda, R. T. Hunt, and D. T. Yohannes, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **25**, 1300505, (2015).
4. S. K. Tolpygo, *Low Temp. Phys.* **42**, 361 (2016).
5. I. I. Soloviev, N. V. Klenov, S. V. Bakurskiy, M. Y. Kupriyanov, A. L. Gudkov, and A. S. Sidorenko, *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 2689 (2017).
6. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, R. Rastogi, S. Zarr, A. L. Day, E. Golden, T. J. Weir, A. Wynn, and L. M. Johnson, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**, 1102513 (2019).
7. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, T. J. Weir, A. Wynn, D. E. Oates, L. M. Johnson, and M. A. Gouker, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **26**, 1 (2016).
8. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, S. Zarr, T. J. Weir, A. Wynn, A. L. Day, L. M. Johnson, and M. A. Gouker, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **27**, 1100815 (2017).
9. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, D. E. Oates, R. Rastogi, S. Zarr, A. L. Day, T. J. Weir, A. Wynn, and L. M. Johnson, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **28**, 1100212 (2018).
10. V. K. Semenov, Y. A. Polyakov, and S. K. Tolpygo, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**, 1302809 (2019).
11. A. Inamdar, J. Ravi, S. Miller, S. S. Meher, M. E. Çelik, and D. Gupta, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **31**(5), 1301307 (2021).
12. C. L. Ayala, T. Tanaka, R. Saito, M. Nozoe, N. Takeuchi, and N. Yoshikawa, *IEEE J. Solid-State Circuits* **56**(4), 1152 (2020).
13. P. Krantz, M. Kjaergaard, F. Yan, T. P. Orlando, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, *Appl. Phys. Rev.* **6**(2), 021318 (2019).
14. I. I. Soloviev, N. V. Klenov, A. L. Pankratov, L. S. Revin, E. Il'ichev, and L. S. Kuzmin, *Phys. Rev. B* **92**, 014516 (2015).
15. A. Opremcak, I. V. Pechenezhskiy, C. Howington, B. G. Christensen, M. A. Beck, E. Leonard Jr., J. Suttle, C. Wilen, K. N. Nesterov, G. J. Ribeill, T. Thorbeck, F. Schlenker, M. G. Vavilov, B. L. T. Plourde, R. McDermott, *Science* **361**(6408), 1239 (2018).
16. C. Howington, A. Opremcak, R. McDermott, A. Kirichenko, O. A. Mukhanov, and B. L. Plourde, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**(5), 1 (2019).
17. L. Howe, M. Castellanos-Beltran, A. J. Sirois, D. Olaya, J. Biesecker, P. D. Dresselhaus, S. P. Benz, and P. F. Hopkins, *arXiv preprint arXiv:2111.12778* (2021).

18. M. V. Bastrakova, N. V. Klenov, V. I. Ruzhickiy, I. I. Soloviev, and A. M. Satanin, *Supercond. Sci. Technol.* **35**(5), 055003 (2022).
19. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, R. Rastogi, S. Zarr, A. L. Day, T. J. Weir, A. Wynn, and L. M. Johnson, arXiv preprint arXiv:1704.07683 (2017).
20. A. Buzdin and A. Koshelev, *Phys. Rev. B* **67**, 220504 (2003).
21. S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, T. Yu. Karminskaya, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Supercond. Sci. Technol.* **26**(1), 015005–1 (2013).
22. A. Pal, Z. H. Barber, J. W. A. Robinson, and M. G. Blamire, *Nat. Commun.* **5**, 3340 (2014).
23. S. V. Bakurskiy, V. I. Filippov, V. I. Ruzhickiy, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Phys. Rev. B* **95**(9), 094522–1 (2017).
24. M. J. A. Stoutimore, A. N. Rossolenko, V. V. Bolginov, V. A. Oboznov, A. Y. Rusanov, D. S. Baranov, N. Pugach, S. M. Frolov, V. V. Ryazanov, and D. J. van Harlingen, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 177702 (2018).
25. I. I. Soloviev, V. I. Ruzhickiy, S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, M. Yu. Kupriyanov, A. A. Golubov, O. V. Skryabina, and V. S. Stolyarov, *Phys. Rev. Appl.* **16**(1), 014052 (2021).
26. I. Salameh, E. G. Friedman, and S. Kvatinsky, *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs* (2022), doi: 10.1109/TCSII.2022.3162723.
27. V. V. Ryazanov, V. A. Oboznov, A. Y. Rusanov, A. V. Veretennikov, A. A. Golubov, and J. Aarts, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2427 (2001).
28. T. Kontos, M. Aprili, J. Lesueur, F. Gent, B. Stephanidis, and R. Boursier, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137007 (2002).
29. V. A. Oboznov, V. V. Bol'ginov, A. K. Feofanov, V. V. Ryazanov, and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 197003 (2006).
30. A. A. Bannykh, J. Pfeiffer, V. S. Stolyarov, I. E. Batov, V. V. Ryazanov, and M. Weides, *Phys. Rev. B* **79**(5), 054501 (2009).
31. V. V. Bolginov, A. N. Rossolenko, A. B. Shkarin, V. A. Oboznov, and V. V. Ryazanov, *J. Low Temp. Phys.* **190**(5–6), 302 (2018).
32. A. A. Golubov, M. Y. Kupriyanov, and E. Il'ichev, *Rev. Mod. Phys.* **76**(2), 411 (2004).
33. R. G. Mints, *Phys. Rev. B* **57**, R3222 (1998).
34. N. G. Pugach, E. B. Goldobin, R. Kleiner, and D. Koelle, *Phys. Rev. B* **81**, 104513 (2010).
35. E. Goldobin, D. Koelle, and R. Kleiner, *Phys. Rev. B* **91**(21), 214511 (2015).
36. D. M. Heim, N. G. Pugach, M. Yu. Kupriyanov, E. Goldobin, D. Koelle, R. Kleiner, N. Ruppelt, M. Weides, and H. Kohlstedt, *New J. Phys.* **17**(11), 113022 (2015).
37. A. K. Feofanov, V. A. Oboznov, V. V. Bol'ginov, J. Lisenfeld, S. Poletto, V. V. Ryazanov, A. N. Rossolenko, M. Khabipov, D. Balashov, A. B. Zorin, P. N. Dmitriev, V. P. Koshelets, and A. V. Ustinov, *Nature Phys.* **6**, 593 (2010).
38. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, R. Rastogi, S. Zarr, A. L. Day, E. Golden, T. J. Weir, A. Wynn, and L. M. Johnson, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**(5), 1101208 (2019).
39. T. I. Larkin, V. V. Bol'ginov, V. S. Stolyarov, V. V. Ryazanov, I. V. Vernik, S. K. Tolpygo, and O. A. Mukhanov, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 222601 (2012).
40. S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, V. V. Bol'ginov, V. V. Ryazanov, I. V. Vernik, O. A. Mukhanov, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 192603 (2013).
41. S. V. Bakurskiy, N. V. Klenov, I. I. Soloviev, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *Phys. Rev. B* **88**(14), 144519 (2013).
42. L. N. Karelina, R. A. Hovhannisyan, I. A. Golovchanskiy, V. I. Chichkov, A. Ben Hamida, V. S. Stolyarov, L. S. Uspenskaya, Sh. A. Erkenov, V. V. Bolginov, and V. V. Ryazanov, *J. Appl. Phys.* **130**(17), 173901 (2021).
43. I. I. Soloviev, S. V. Bakurskiy, V. I. Ruzhickiy, N. V. Klenov, M. Yu. Kupriyanov, A. A. Golubov, O. V. Skryabina, and V. S. Stolyarov, *Phys. Rev. Appl.* **16**(4), 044060 (2021).
44. L. N. Karelina, V. V. Bolginov, Sh. A. Erkenov, S. V. Egorov, I. A. Golovchanskiy, V. I. Chichkov, A. Ben Hamida, and V. V. Ryazanov, *JETP Lett.* **112**(11), 705?709 (2020).
45. V. I. Ruzhickiy, A. A. Maksimovskaya, I. I. Soloviev, S. V. Bakurskiy, and N. V. Klenov, *JETP* **132**(5), 800 (2021).
46. M. A. Castellanos-Beltran, D. I. Olaya, A. J. Sirois, P. D. Dresselhaus, S. P. Benz, and P. F. Hopkins, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**, 1300705 (2019).
47. S. K. Tolpygo, V. Bolkhovskiy, R. Rastogi, S. Zarr, E. Golden, T. J. Weir, L. M. Johnson, V. K. Semenov, and M. A. Gouker, *A 150-nm process node of an eightNb-layer fully planarized process for superconductor electronics*, in *Applied Superconductivity Conference, ASC 2020 Virtual Conference Superconductivity*, News Forum (SNF) **49**(14), STP669 Wk1EOr3B?0 (2021); <https://snf.ieeeesc.org/issues/snfissue-no49-march-2021>.

Механизм формирования запрещенных зон спиновых волн в связанных маггонных кристаллах

М. А. Морозова^{1*}, Н. Д. Лобанов¹⁾, О. В. Матвеев⁺, С. А. Никитов^{1*}

⁺Саратовский государственный университет, 410012 Саратов, Россия

^{*}Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009, Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 марта 2022 г.

После переработки 6 мая 2022 г.

Принята к публикации 6 мая 2022 г.

В работе представлены результаты теоретического исследования особенностей распространения спиновых волн в слоистой периодической структуре в виде маггонных кристаллов с периодической системой канавок на поверхности, разделенных диэлектрическим слоем. Выявлен механизм формирования запрещенных зон в спектре спиновых волн в исследуемой структуре. Показано, что в области первого брэгговского резонанса возможно формирование одной, двух, трех либо четырех запрещенных зон. Положение, ширина запрещенных зон и частотный интервал между зонами определяется соотношением геометрических и магнитных параметров маггонных кристаллов.

DOI: 10.31857/S1234567822120072, EDN: imtlwq

Введение. Маггонные кристаллы (МК) – искусственные периодические структуры на основе ферромагнитных пленок [1–3]. Спектр спиновых волн, распространяющихся в таких структурах, ввиду наличия пространственного периода содержит набор запрещенных зон для волновых чисел, удовлетворяющих условию брэгговского резонанса. К настоящему времени предложен ряд способов управления характеристиками запрещенных зон: за счет изменения геометрических параметров структур [4], использования двухкомпонентных МК [5], за счет нарушения периодичности [6] и создания дефектов [7], посредством создания температурного градиента [8]. В частности, показаны способы создания динамических маггонных кристаллов, в которых возможно “включение” и “выключение” запрещенных зон посредством электрического тока в периодически созданных металлических [9] и сегнетоэлектрических структурах [10]. Наличие запрещенных зон (ЗЗ) позволяет создавать на основе маггонных кристаллов перестраиваемые магнитным полем устройства для обработки информации и генерации сигналов в микроволновом диапазоне [4, 11–13].

Связанные волноведущие системы широко используются в физике для расширения функциональных возможностей устройств [14], поскольку появляется дополнительный управляющий параметр – связь между слоями. В частности, в случае двух

связанных ферромагнитных волноведущих структур связь приводит к существованию двух нормальных волн в структуре – симметричной и антисимметричной, распространяющихся с различными фазовыми и групповыми скоростями [15, 16]. В связанных периодических структурах ввиду расщепления дисперсионных характеристик увеличивается количество запрещенных зон в спектре, что показано в работах [17–19]. Исследование свойств связанных структур является актуальной задачей в связи с возможностью их использования в устройствах направленного ответвления [20, 21], деления мощности [22], а также в качестве элементов маггонных сетей [23].

В настоящей работе приводятся результаты исследования для слоистой периодической структуры в виде маггонных кристаллов с периодической системой канавок на поверхности, разделенных диэлектрическим слоем. Особое внимание уделяется механизму формирования запрещенных зон в зависимости от соотношения геометрических и магнитных параметров маггонных кристаллов.

Модель и основные уравнения. Рассмотрим периодическую структуру, схема которой приведена на рис. 1, в виде двух связанных одномерных кристаллов МК-2 и МК-1, разделенных диэлектрическим слоем толщиной D . МК-1 и МК-2 представляют собой ферромагнитную пленку с намагниченностью насыщения $M_{0,1,2}$, толщиной $a_{1,2}$, соответственно. На поверхность МК-1 и МК-2 нанесена периодическая структура с периодом $L_{1,2}$ в виде канавок глубиной

¹⁾e-mail: nl_17@mail.ru

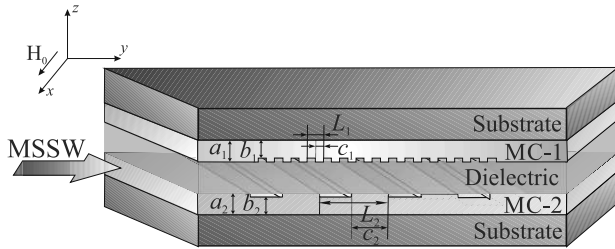


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема ферромагнитной структуры в виде одномерных МК-1 и МК-2, разделенных диэлектрическим слоем

$\Delta_{1,2} = a_{1,2} - b_{1,2}$ и шириной $c_{1,2}$ соответственно. МК-1 и МК-2 сдвинуты относительно друг друга в направлении оси y на величину Φ . Связь между МК-1 и МК-2 осуществляется через высокочастотные магнитные поля. Система помещена во внешнее магнитное поле \mathbf{H}_0 , направленное вдоль оси x , при этом в МК-1 и МК-2 вдоль оси y распространяются медленные спиновые волны – поверхностные магнитостатические волны (ПМСВ). В отсутствие связи, рассматриваемая система представляет собой одиночные МК-1 и МК-2. Предполагается, что в направлении осей x и y , структура бесконечна.

Представим внутреннее магнитное поле для каждого слоя $\mathbf{H}_{1,2}$ в следующем виде:

$$\mathbf{H}_{1,2}(t) = \mathbf{H}_0 + \mathbf{h}_{1,2} + K\mathbf{h}_{2,1}, \quad (1)$$

где $\mathbf{h}_{1,2}$ – переменные ВЧ магнитные поля в каждом из слоев, соответственно, K – коэффициент связи, определяющий связь между ВЧ магнитными полями каждого слоя.

Рассмотрим две несвязанные ферромагнитные пленки без модуляции толщины ФП-1 и ФП-2, нижняя граница которых расположена при $z = 0$. Введем магнитостатические потенциалы внутри ФП-1 и ФП-2 и вне ФП-1 и ФП-2 $\psi_{1,2}^i (\mathbf{h}_{1,2} = \text{grad } \psi_{1,2}^i) \psi_{1,2}^e$. Так как рассматриваемая структура бесконечна в направлении оси x ($\partial/\partial x = 0$), уравнения Максвелла в магнитостатическом приближении $\text{div}(\mathbf{h}_{1,2} + 4\pi\mathbf{m}_{1,2}) = 0$ будут иметь вид:

$$\frac{\partial^2 \psi_{1,2}^i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_{1,2}^i}{\partial z^2} = -4\pi \left(\frac{\partial m_{y1,2}}{\partial y} + \frac{\partial m_{z1,2}}{\partial z} \right)$$

– внутри ФП-1 и ФП-2,

$$\frac{\partial^2 \psi_{1,2}^e}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_{1,2}^e}{\partial z^2} = 0$$

– вне ФП-1 и ФП-2.

Электродинамические граничные условия на верхней и нижней поверхностях ФП-1 и ФП-2

определяют непрерывность тангенциальных компонент магнитного поля и нормальных компонент магнитной индукции. В линейном случае граничные условия будут иметь вид:

$$\psi_{1,2}^i = \psi_{1,2}^e,$$

$$\frac{\partial \psi_{1,2}^i}{\partial z} + 4\pi m_{z1,2} = \frac{\partial \psi_{1,2}^e}{\partial z}.$$

Воспользуемся уравнением Ландау–Лифшица с учетом соотношения (1) и приведенных граничных условий, в результате получим следующую систему волновых уравнений для двух связанных однородных ферромагнитных пленок без модуляции толщины:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial m_{+1,2}}{\partial t} - j\omega_H m_{+1,2} + \\ & + j\omega_{M1,2} \left[\frac{n_{-1,2} - m_{+1,2}}{2} + jd_{1,2} \frac{\partial m_{-1,2}}{\partial y} \right] + \\ & + j\omega_{M1,2} K \left[\frac{m_{-2,1} - m_{+2,1}}{2} - jd_{1,2} \frac{\partial m_{-2,1}}{\partial y} \right] = 0, \end{aligned}$$

где $m_{+1,2} = m_{y1,2} + jm_{z1,2}$ и $m_{-1,2} = m_{y1,2} - jm_{z1,2}$.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial m_{-1,2}}{\partial t} + j\omega_H m_{-1,2} - j\omega_{M1,2} \times \\ & \times \left[\frac{m_{+1,2} - m_{-1,2}}{2} + K \left(\frac{m_{+2,1} - m_{-1,2}}{2} \right) \right] = 0, \end{aligned}$$

где $\omega_{M1,2} = \gamma 4\pi M_{01,02}$; $\omega_H = \gamma H_0$; γ – гиромагнитное соотношение; $K = \exp[-kD]$, где k – постоянная распространения ПМСВ в структуре.

Для переменных компонент намагниченности в каждом слое $m_{1,2} = m_{y1,2}/M_{01,2}$ система примет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 m_{1,2}}{\partial t^2} + \omega_H(\omega_H + \omega_{M1,2})m_{1,2} - \\ & + j\frac{\omega_{M1,2}d_{1,2}}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left(m_{1,2} + \frac{d_{2,1}}{d_{1,2}} K m_{2,1} \right) = 0. \quad (2) \end{aligned}$$

Учтем, что толщины $d_{1,2}$ каждой пленки являются периодической функцией, зависящей от продольной координаты y . В этом случае толщину пленки можно представить в виде:

$$d_{1,2}(y) = d_{01,02} + \delta_{1,2}(y), \quad (3)$$

где $d_{01,02}$ – эффективная толщина пленок,

$$\delta_{1,2}(y) = \delta_{1,2}(y + L) = \begin{cases} \Delta_{1,2}, & 0 \leq y \leq c_{1,2}, \\ 0, & c_{1,2} \leq y \leq L_{1,2}. \end{cases}$$

Этой системой задается переменная составляющая $\delta_{1,2}(y)$ для МК-1, МК-2. Индексы 1, 2 в (3) относятся к МК-1 и МК-2, соответственно.

Представим $\delta_{1,2}(y)$ в (3) в виде ряда Фурье $\delta_{1,2}(y) = \sum_{n_{1,2}=-\infty}^{\infty} \delta_{n_{1,2}} e^{2\pi n_{1,2} \frac{y}{L_{1,2}}}$ и ограничимся тремя первыми членами разложения ($n_{1,2} = 0, \pm 1$). Такое ограничение вполне допустимо, так как в дальнейшем будет учитываться только резонансное взаимодействие прямых и встречных волн в полосе первого брэгговского резонанса, когда постоянные распространения волн меняются в интервале $0 \leq k L_{1,2} \leq 2\pi$. Тогда периодическая функция $d_{1,2}(y)$ будет иметь вид [24]:

$$d_{1,2} = d_{01,02} \left[1 + \delta d_{1,2} \cos \left(\frac{\pi}{L_{1,2}} y + \Phi_{1,2} \right) \right], \quad (4)$$

где $\delta d_{1,2} = \frac{2\Delta d_{1,2}}{\pi d_{01,02}} \sin \left(\frac{\pi(L_{1,2} - c_{1,2})}{L_{1,2}} \right)$, $d_{01,02} = a_{1,2} + \frac{\Delta_{1,2}(L_{1,2} - c_{1,2})}{L_{1,2}}$ – параметры, зависящие только от геометрических размеров структуры. Далее будем считать, что меняется положение МК-1 относительно МК-2, т.е. $\Phi_1 = 0$, $\Phi_2 = \Phi$.

После подстановки соотношения (4), система (2) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 m_{1,2}}{\partial t^2} + \omega_H(\omega_H + \omega_{M1,2})m_{1,2} - \\ & - \frac{\omega_{M1,2}^2 d_{01,02}}{2k} \left[1 + \delta d_{1,2} \cos \left(\frac{\pi}{L_{1,2}} y + \Phi_{1,2} \right) \right] \times \\ & \times \frac{\partial}{\partial y} \left(m_{1,2} + \frac{d_{02,01}}{d_{01,02}} k m_{2,1} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Система уравнений (5) представляет собой систему связанных уравнений с периодически изменяющимися коэффициентами. Для решения полученной системы используется подход, основанный на методе связанных волн, который заключается в том, что волны, распространяющиеся в прямом и встречном направлениях в периодической системе, рассматриваются независимо, а периодическая структура обеспечивает их связь [25]. Тогда решение уравнений (5) можно представить в виде суммы пространственных гармоник:

$$m_{1,2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_{1n,2n} \exp[-jk_n y], \quad (6)$$

где A_{1n} , A_{2n} – комплексные амплитуды гармоник, а $0 \leq k_n L \leq 2\pi$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) – постоянные

распространения. В первой зоне Бриллюэна ($0 \leq k_n L_{1,2} \leq 2\pi$) будем учитывать только нулевые гармоники прямых волн ($n = 0$) и “-1” гармоники встречных волн ($n = -1$). В этом случае решение волновых уравнений (5), с учетом (6) для каждого из кристаллов может быть представлено в виде суммы прямых и встречных волн:

$$m_{1,2} = A_{1,2} \exp[j(\omega t - k_0 y)] + B_{1,2} \exp[j(\omega t + k_{1,2}^- y)], \quad (7)$$

где $A_{1,2}$ и $B_{1,2}$ – амплитуды огибающих прямых и встречных волн в МК-1 и МК-2; k_0 – постоянная распространения нулевой гармоники; $k_{1,2}^- = -k_0 + \frac{2\pi}{L}$ – относится к “-1” гармонике; ω – частота. Подставляя соотношения (7) в соответствующие волновые уравнения для МК-1 и МК-2 (5), получим алгебраическую систему уравнений для амплитуд прямых и встречных волн:

$$\begin{cases} j \left(\frac{\partial A_1}{\partial t} + \beta_{1,2} \frac{\partial A_{1,2}}{\partial y} \right) + D_{1,2}^+ A_{1,2} + \\ + \beta_{1,2} k_0 K A_{2,1} + \theta_{1,2}^- B_{1,2} + \theta_{1,2}^- K B_{2,1} = 0, \\ j \left(\frac{\partial B_1}{\partial t} - \beta_{1,2} \frac{\partial B_{1,2}}{\partial y} \right) + D_{1,2}^- B_{1,2} + \\ + \beta_{1,2} k_{1,2}^- K B_{2,1} + \theta_{1,2}^+ A_{1,2} + \theta_{1,2}^+ K A_{2,1} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} D_{1,2}^- &= -\omega^2 + \omega_H^2 + \omega_{M1,2} \omega_H + \beta_{1,2} k_{1,2}^-, \\ D_{1,2}^+ &= -\omega^2 + \omega_H^2 + \omega_{M1,2} \omega_H + \beta_{1,2} k_0, \\ \beta_{1,2} &= \frac{\omega_{M1,2}^2 d_{01,02}}{2}, \quad \theta_{1,2}^\pm = e^{\pm i(\psi_{1,2})} \delta_{1,2}^\pm; \\ \delta_{1,2}^+ &= \beta_{1,2} k_0 \frac{\delta d_{1,2}}{2}, \quad \delta_{1,2}^- = \beta_{1,2} k_{1,2}^- \frac{\delta d_{1,2}}{2}, \\ \psi_1 &= 0, \quad \psi_2 = \Psi = \frac{2\pi}{L} \Phi \end{aligned}$$

– фазовые сдвиги в каждом МК.

Приравнявая детерминант полученной системы к нулю, получим дисперсионное соотношение для ПМСВ в исследуемой структуре в виде:

$$\begin{pmatrix} D_1^+ & \beta_1 k_0 K & \theta_1^- & \theta_1^- K \\ \beta_2 k_0 K & D_2^+ & \theta_2^- K & \theta_2^- \\ \theta_1^+ & \theta_1^+ K & D_1^- & \beta_1 k_{1,2}^- K \\ \theta_2^+ K & \theta_2^+ & \beta_2 k_{2,2}^- K & D_2^- \end{pmatrix} = 0. \quad (9)$$

Диагональные компоненты определителей $D_{1,2}^\pm$ в (9), приравненные к нулю, представляют собой дисперсионные соотношения для прямой и встречной ПМСВ в однородных пленках без модуляции параметров [26]. Недиагональные компоненты, пропорциональные коэффициенту связи K , описывают связь

между волнами в МК-1 и МК-2, $\theta_{1,2}^{\pm}$ – параметры связи между прямыми и встречными волнами в каждом МК, $\theta_{1,2}^{\pm}$ зависят от сдвига между МК-2 и МК-1. Отметим, что при $K \neq 0$ и $\delta_{1,2}^{\pm} = 0$ уравнение (9) описывает дисперсионное соотношение для ПМСВ в структуре из двух связанных однородных пленок без модуляции параметров [26]. При $K = 0$ и $\delta_{1,2}^{\pm} \neq 0$ в (9) приходим к дисперсионным уравнениям для ПМСВ в МК-1 и МК-2 в отсутствии связи между ними [24]. При $\delta_{1,2}^{\pm} = 0$, структура МК-1 представляет собой однородную пленку [27–29].

Результаты численного моделирования.

Дисперсионное соотношение (9) использовалось для исследования особенностей формирования запрещенных зон в структуре МК-1/МК-2 при распространении поверхностной МСВ.

Результаты расчета дисперсионных характеристик представлены на рис. 2, где по горизонтальной оси отложена величина $\text{Re}(k_0)$ (сплошные линии) (при обозначении оси на рисунке введена замена $k_0 \rightarrow k$). Огибающие внутри закрашенных областей (пунктирные кривые на рис. 2b и c) соответствуют значениям $\text{Im}(k_0)$, определяющим постоянные затухания волн в структуре. Расчеты проводились при следующих параметрах $a_{1,2} = 10$ мкм, $c_{1,2} = a_{1,2}/2$, $\Delta_{1,2} = 1$ мкм, $D = 25$ мкм, $M_{0,1,2} = 140$ Гс, $H_0 = 800$ Э, $\Psi = 0$ и разных отношениях L_1/L_2 .

В случае связанных однородных пленок ($\delta d_{1,2} = 0$ и $K \neq 0$), как известно [25], дисперсионная кривая для МСВ расщепляется на две нормальные моды – симметричную и антисимметричную. Дисперсионные характеристики для этих волн в отсутствие связи между ними при $\delta d_{1,2} = 0$ показаны черными линиями на рис. 2a: 1 – для симметричной прямой волны; 2 – для антисимметричной прямой волны; 1' – для симметричной встречной волны; 2' – для антисимметричной встречной волны.

При $\delta d_{1,2} \neq 0$ на частотах фазового синхронизма взаимодействие четырех описанных типов волн возможно формирование ЗЗ (закрашенные области на рис. 2b, c). В случае, если $L_1/L_2 \neq 1$, как видно из рис. 2b, c имеет место формирование четырех ЗЗ (*s*, *as*, *s-as*, *as-s*). Запрещенная зона *s* (синяя закрашенная область) формируется за счет взаимодействия прямой и отраженной симметричных МСВ; запрещенная зона *as* (зеленая закрашенная область) формируется за счет взаимодействия прямой и отраженной антисимметричных МСВ; запрещенная зона *s-as* (красная закрашенная область) формируется за счет взаимодействия прямой симметричной и отраженной антисимметричной МСВ; запрещенная зона *as-s* (оранжевая закрашенная область) формируется

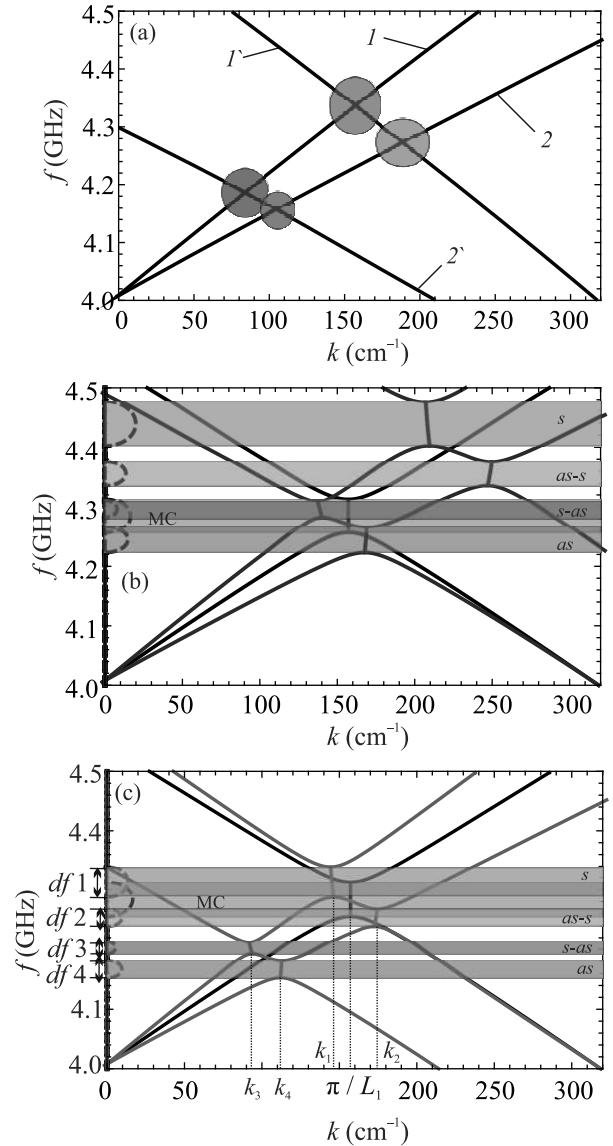


Рис. 2. (Цветной онлайн) Дисперсионные характеристики ПМСВ: (a) – в структуре МК-1/МК-2 при $L_1/L_2 = 0.5$ и $\delta d_{1,2} = 0$; (b) ? в структуре МК-1/МК-2 при $L_1/L_2 = 0.5$ (синие кривые) и в одиночном МК (черные кривые); (c) – в структуре МК-1/МК-2 при $L_1/L_2 = 1.5$ (красные кривые) и в одиночном МК (черные кривые) ($L_1 = 200$ мкм, $a_{1,2} = 10$ мкм, $c_{1,2} = L_{1,2}/2$, $\Delta_{1,2} = 1$ мкм, $D = 25$ мкм, $M_{0,1,2} = 140$ Гс, $H_0 = 800$ Э, $\Psi = 0$)

за счет взаимодействия прямой антисимметричной и отраженной симметричной МСВ. На частотах, соответствующих запрещенным зонам $\text{Im}(k)$, мнимые волновые числа $\text{Im}(k)$ отличны от 0 (на рис. 2b, c пунктирные полуэллипсы), что свидетельствует о затухании волн. Черными кривыми на рис. 2b, c показаны дисперсионные характеристики одиночного

МК-1. В этом случае, за счет взаимодействия прямой и отраженной волн формируется одна ЗЗ (mc , показана серой заливкой) при волновом числе, соответствующему первому брэгговскому резонансу $k_{B_1} = \frac{\pi}{L_1}$.

Из рисунка 2b видно, что, в структуре МК-1/МК-2 при $L_1/L_2 < 1$ одна ЗЗ (зона s , ширина зоны df_1) выше по частоте, чем ЗЗ одиночного МК-1 (mc), три зоны ($as-s$, $s-as$ и as , шириной df_2 , df_3 и df_4) – ниже по частоте, чем ЗЗ одиночного МК-1. Из рисунка 2c видно, что, при $L_1/L_2 > 1$ одна зона (as) ниже по частоте, чем ЗЗ одиночного МК-1, три зоны (s , $as-s$ и $s-as$) – выше по частоте, чем ЗЗ одиночного МК-1.

Заметим, что если в структуре возбуждается только одна симметричная нормальная волна (например, для структуры, состоящей из двух МК с одинаковыми эффективными толщинами и намагниченностями, сигнал одинаковой амплитуды подается в МК-1 и МК-2 в фазе [14]), то будет иметь место формирование только одной запрещенной зоны для симметричных волн (зоны s). Если подавать сигнал одинаковой амплитуды в противофазе, то будет иметь место формирование также одной запрещенной зоны (зоны as). При возбуждении обеих нормальных волн (при этом сигнал подается только либо в МК-1, либо в МК-2) формируются все четыре запрещенные зоны (зоны s , $as-s$, $s-as$ и as).

Из рисунка 2b,с видно, что волновые числа, при которых происходит формирование запрещенных зон – $k_{1,2,3,4}$, отличаются от величин $k_{B_1} = \frac{\pi}{L_1} = 157 \text{ см}^{-1}$ и $k_{B_2} = \frac{\pi}{L_2}$. На рисунке 3a приведена зависимость волновых чисел $k_{1,2,3,4}$ от отношения периодов L_1/L_2 . Видно, что $k_1 = k_4 = k_B$ только при $L_1/L_2 = 1$, при $L_1/L_2 \neq 1$ все четыре волновые числа различны.

На рисунке 3b представлена зависимость ширины и положения запрещенных зон от соотношения периодов L_1/L_2 (при $L_1 = 200 \text{ мкм}$ и изменении L_2). Видно, что при $L_1/L_2 = 1$ имеет место формирование только двух ЗЗ (s и as). При уменьшении $L_1/L_2 < 1$ характеристики as и $s-as$ практически не меняются, а зоны s и $as-s$ резко смещаются в высокочастотную область. При увеличении $L_1/L_2 > 1$, наоборот, характеристики s и $as-s$ практически не меняются, а зоны as и $s-as$ резко смещаются в низкочастотную область.

Зависимости ширины запрещенных зон s (синие кривые), as (зеленые кривые), $s-as$ (красные кривые), $as-s$ (оранжевые кривые) от сдвига Ψ приведены на рис. 4a. Пунктирными кривыми показаны зависимости для случая $L_1/L_2 = 1$, сплошными для $L_1/L_2 < 1$. Видно, что сдвиг $\Psi = \pi$ приводит к

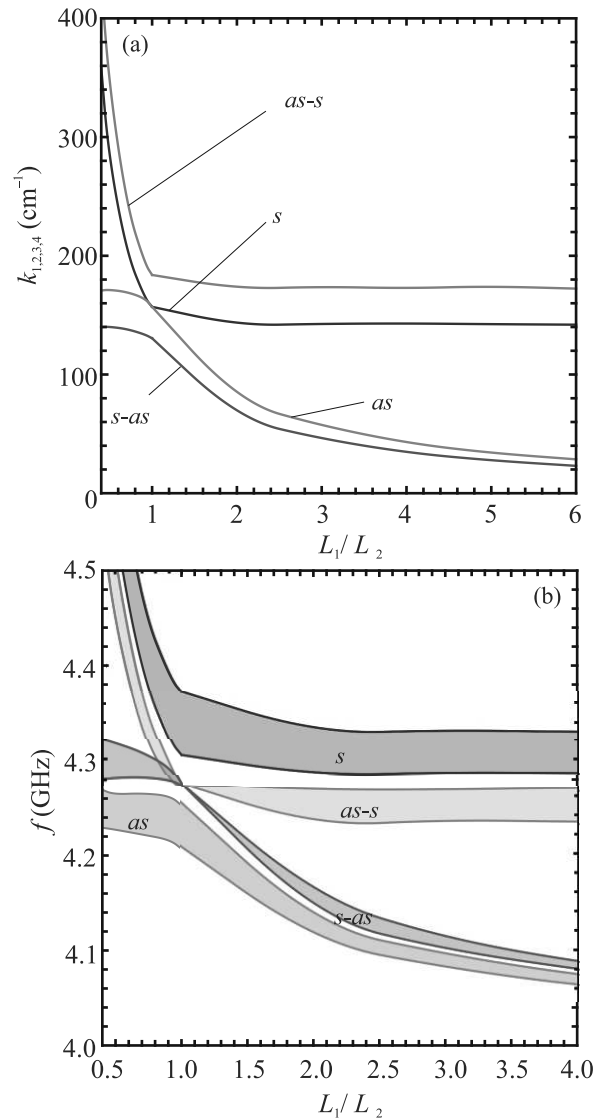


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость от отношения периодов L_1/L_2 : (a) – волновых чисел, при которых происходит формирование запрещенных зон – k_1 (синяя кривая), k_2 (зеленая кривая), k_3 (красная кривая), k_4 (оранжевая кривая); (b) – ширины и положения запрещенных зон s (синяя заливка), as (зеленая заливка), $s-as$ (красная заливка), $as-s$ (оранжевая заливка). Остальные параметры такие же, как на рис. 2

уменьшению ширины s и $s-as$ (в случае $L_1/L_2 = 1$ до 0), ширины зон $s-as$ и $as-s$ при этом увеличиваются.

Зависимости ширины запрещенных зон s , as , $s-as$, $as-s$ ($df_{1,2,3,4}$, соответственно) от отношения намагниченностей M_{01}/M_{02} при $L_1/L_2 < 1$ и $\psi = 0$ приведены на рис. 4b. Пунктирными кривыми показаны зависимости для случая $L_1/L_2 = 1$, сплошными для $L_1/L_2 = 0.5$. Видно, что при $L_1/L_2 = 1$ измене-

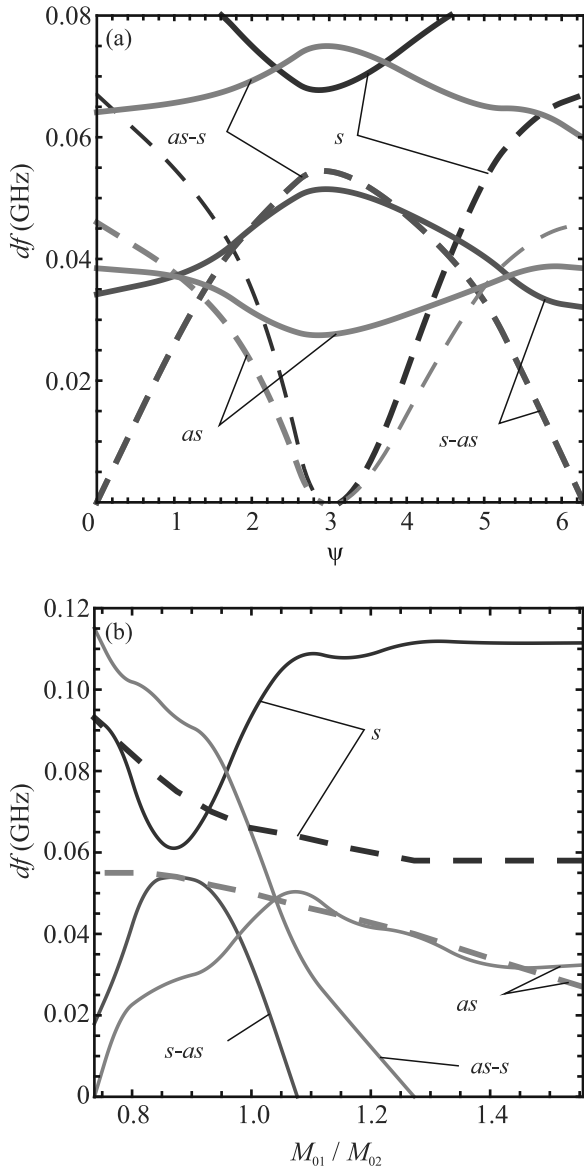


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость ширины ЗЗ s (синие кривые), as (зеленые кривые), $s-as$ (красные кривые), $as-s$ (оранжевые кривые) от: (а) – сдвига Ψ при $L_1/L_2 = 1$ (пунктирные кривые), $L_1/L_2 = 0.5$ (сплошные кривые); (б) – соотношения намагниченностей при $\Psi = 0$ и $L_1/L_2 = 1$ (пунктирные кривые), $L_1/L_2 = 0.5$ (сплошные кривые). Остальные параметры такие же, как на рис. 2

ние M_{01}/M_{02} влияет только на ширину s и as . При $L_1/L_2 \neq 1$ увеличение намагниченности M_{01}/M_{02} приводит, кроме того, к исчезновению $s-as$ и $as-s$ (в случае $L_1/L_2 = 1$ $s-as$ и $as-s$ не формируются). В результате при $M_{01}/M_{02} < 1.07$ имеет место формирование всех четырех ЗЗ (s , as , $as-s$, $s-as$), при $M_{01}/M_{02} < 1.27$ формируются только три ЗЗ (s , $as-s$, $s-as$), при $M_{01}/M_{02} > 1.27$ имеет место формирование двух ЗЗ (s , as).

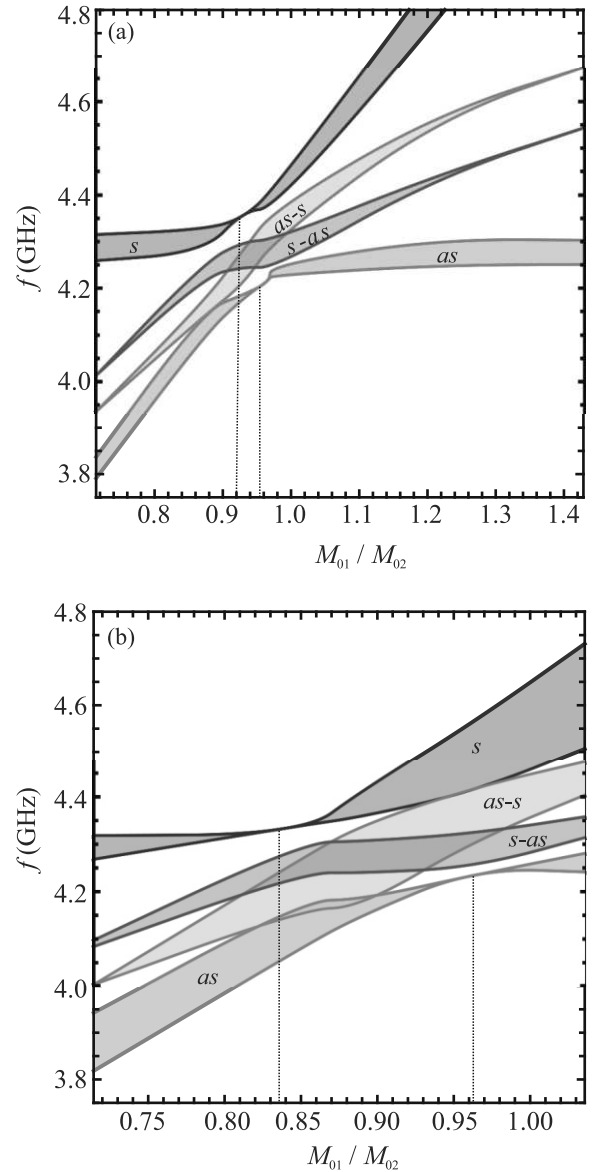


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость ширины и положения ЗЗ от отношения намагниченностей M_{01}/M_{02} при: (а) – $\Delta_2 = 4$ мкм; (б) – $\Delta_2 = 1$ мкм, ($\Psi = \pi$, $a_{1,2} = 10$ мкм, $c_{1,2} = L_{1,2}/2$, $\Delta_1 = 4$ мкм $D = 25$ мкм, $L_1/L_2 = 0.7$, $H_0 = 800$ Э)

На рисунке 5 проиллюстрирована зависимость ширины и положения запрещенных зон от отношения намагниченностей (M_{01}/M_{02}) при $L_1/L_2 < 1$ и $\Psi = \pi$. Видно, что добавление фазового сдвига позволяет расширить возможности по управлению количеством формирующихся ЗЗ. Так, зоны $s-as$ и $as-s$ формируются только при $0.7 < M_{01}/M_{02} < 1.4$. При $M_{01}/M_{02} = 0.95$ частотные диапазоны $s-as$ и $as-s$ полностью перекрываются. При $M_{01}/M_{02} = 0.94$ ширина зоны s уменьшается до нуля, а при $M_{01}/M_{02} =$

= 0.96 ширина as уменьшается до нуля. Таким образом, в зависимости от соотношения намагниченностей можно добиться формирования: четырех ЗЗ (s , as , $s-as$ и $as-s$), трех ЗЗ (s , $s-as$, $as-s$ либо as , $s-as$, $as-s$), двух ЗЗ (s и as). Как видно из рис. 5b увеличение отношения глубин канавок ($\Delta_1/\Delta_2 = 4$) позволяет добиться исчезновения зоны s и as в большем диапазоне M_{0_1}/M_{0_2} .

Заключение. В работе выяснены особенности формирования запрещенных зон в периодических слоистых ферромагнитных структурах на основе магнетонных кристаллов. Показано, что в структуре, состоящей из двух связанных МК, разделенных слоем диэлектрика, в полосе первого брэгговского резонанса возможно формирование нескольких запрещенных зон. Механизм формирования запрещенных зон связан с взаимодействием на частотах фазового синхронизма прямых и встречных нормальных волн связанной структуры. Запрещенные зоны формируются при волновых числах и частотах, отличных от брэгговских волновых чисел и частот для МК-1 и МК-2 в отсутствие связи между ними.

Положение запрещенных зон, ширина запрещенных зон, частотный интервал между зонами, а также количество запрещенных зон определяются соотношением периодов МК-1 и МК-2, величиной сдвига между МК-1 и МК-2, отношением намагниченностей МК-1 и МК-2. В частности, возможно формирование одной, двух, трех либо четырех запрещенных зон в зависимости от соотношения геометрических и магнитных параметров МК-1 и МК-2. В случае, если структура симметричная, формируются две запрещенные зоны для симметричных и антисимметричных волн.

Таким образом, связанная периодическая структура на основе магнетонных кристаллов с периодической системой канавок на поверхности значительно расширяет функциональные возможности по управлению частотно-селективными свойствами ферромагнитных структур, которые могут использоваться в СВЧ-электронике в качестве перестраиваемых СВЧ-фильтров, фазовращателей, линий задержки.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда грант # 19-79-20121 (построение теоретической модели) и Российского фонда фундаментальных исследований грант # 19-29-03049-мк (проведение численных расчетов).

1. S. A. Nikitov, P. Tailhadesand, and C. S. Tsai, *J. Magn. Mater.* **236**, 320 (2001).
2. V. V. Kruglyak, S. O. Demokritov, and D. Grundler, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 264001 (2006).

3. A. A. Serga, A. V. Chumak, and B. Hillebrands, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 264002 (2010).
4. M. Krawczyk and D. Grundler, *J. Phys.: Condens. Matter.* **26**, 123202 (2014).
5. M. Krawczyk, S. Mamica, M. Mruczkiewicz, J. W. Klos, S. Tacchi, M. Madami, G. Gubbiotti, G. Duerr, and D. Grundler, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46**, 495003 (2013).
6. C. H. O. Costa and M. S. Vasconcelos, *J. Phys.: Condens. Matter.* **25**, 286002 (2013).
7. V. V. Kruglyak, M. L. Sokolovskii, V. S. Tkachenko, and A. N. Kuchko, *J. Appl. Phys.* **99**, 08C906 (2006).
8. T. Langner, D. A. Bozhko, S. A. Bunyaev, G. N. Kakazei, A. V. Chumak, A. A. Serga, B. Hillebrands, and V. I. Vasyuchka, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 344002 (2018).
9. A. V. Chumak, T. Neumann, A. A. Serga, B. Hillebrands, and M. P. Kostylev, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 205005 (2009).
10. И. А. Устинова, А. А. Никитин, А. Б. Устинов, *ЖТФ* **86**, 155 (2016).
11. S. A. Nikitov, D. V. Kalyabin, I. V. Lisenkov, A. N. Slavin, Yu. N. Barabanenkov, S. A. Osokin, A. V. Sadovnikov, E. N. Beginin, M. A. Morozova, Yu. P. Sharaevsky, Yu. A. Filimonov, Yu. V. Khivintsev, S. L. Vysotsky, V. K. Sakharov, and E. S. Pavlov, *Phys. Usp.* **58**, 1002 (2015).
12. A. V. Chumak, A. A. Serga, and B. Hillebrands, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50**, 244001 (2017).
13. S. Klingler, P. Pirro, T. Brächer, B. Leven, B. Hillebrands, and A. V. Chumak, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 212406 (2015).
14. W. H. Louisell, *Coupled Mode and Parametric Electronics*, John Wiley, N.Y. (1960).
15. H. Sasaki and N. Mikoshiba, *J. Appl. Phys.* **52**, 3546 (1981).
16. P. Grunberg and K. Mika, *Phys. Rev. B* **27**, 2955 (1983).
17. M. A. Morozova, S. V. Grishin, A. V. Sadovnikov, Y. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, *IEEE Trans. Magn.* **50**, 1 (2014).
18. M. A. Morozova, A. Y. Sharaevskaya, O. V. Matveev, E. N. Beginin, and Y. P. Sharaevskii, *Phys. Wave Phenom.* **24**, 1 (2016).
19. M. A. Morozova, A. Y. Sharaevskaya, A. V. Sadovnikov, S. V. Grishin, D. V. Romanenko, E. N. Beginin, Y. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, *J. Appl. Phys.* **120**, 223901 (2016).
20. A. Y. Annenkov, S. V. Gerus, and S. I. Kovalev, *Tech. Phys.* **43**, 216 (1998).
21. Q. Wang, P. Pirro, R. Verba, A. Slavin, B. Hillebrands, and A. V. Chumak, *Sci. Adv.* **4**, e1701517 (2018).
22. A. V. Sadovnikov, E. N. Beginin, M. A. Morozova, A. Y. Sharaevskaya, S. V. Grishin, S. E. Sheshukova, and S. A. Nikitov, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 042407 (2016).

23. A. V. Sadovnikov, S. Davies, S. V. Grishin, V. V. Kruglyak, D. V. Romanenko, Y. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 192406 (2015).
24. S. B. Glybovski, S. A. Tretyakov, P. A. Belov, Y. S. Kivshar, and C. R. Simovski, *Phys. Rep.* **634**, 1 (2016).
25. S. Vysotskii, G. Dudko, V. Sakharov, Y. Khivintsev, Y. Filimonov, N. Novitskii, A. Stognij, and S. Nikitov, *Acta Phys. Pol.* **133**, 508 (2018).
26. S. L. Vysotskii, Y. V. Khivintsev, V. K. Sakharov, G. M. Dudko, A. V. Kozhevnikov, S. A. Nikitov, N. N. Novitskii, A. I. Stognij, and Y. A. Filimonov, *IEEE Magn. Lett.* **8**, 3706104 (2017).
27. S. E. Sheshukova, M. A. Morozova, E. N. Beginin, Y. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, *Phys. Wave Phenom.* **21**, 304 (2013).
28. D. Marcuse, *Light Transmission Optics*, Van Nostrand Reinhold Company, N.Y. (1972).
29. А. В. Вашковский, В. С. Стальмахов, Ю. П. Шаравский, *Магнитостатические волны в электронике СВЧ*, изд-во Сарат. ун-та, Саратов (1993).

Динамика решетки Bi_2Te_3 и колебательные моды в рамановском рассеянии топологических изоляторов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$

Н. А. Абдуллаев^{a,b}, И. Р. Амирасланов^{a,b}, З. С. Алиев^a, З. А. Джахангирли^{a,b}, И. Ю. Складнева^c,
Е. Г. Ализаде^a, Е. Н. Алиева^{b,a}, М. М. Отроков^{d,e}, В. Н. Зверев^f, Н. Т. Мамедов^{a1}), Е. В. Чулков^{g,h1})

^a Институт физики Национальной Академии Наук Азербайджана, AZ1141 Баку, Азербайджан

^b Бакинский Государственный Университет, AZ1148 Баку, Азербайджан

^c Томский Государственный Университет, 634050 Томск, Россия

^d Centro de Fisica de Materiales (CFM-MPC), Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, 20018 Donostia-San Sebastian, Basque Country, Spain

^e IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48011 Bilbao, Spain

^f Институт физики твердого тела Российской академии наук, 142432 Черноголовка, Россия

^g Санкт-Петербургский Государственный Университет, 198504 С.-Петербург, Россия

^h Departamento de Polimeros y Materiales Avanzados: Fisica, Quimica y Tecnologia, Facultad de Ciencias Quimicas, Universidad del Pais Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 9 апреля 2022 г.

После переработки 11 мая 2022 г.

Принята к публикации 12 мая 2022 г.

Работа посвящена экспериментальному исследованию и симметричному анализу колебательных мод активных в рамановском рассеянии ван-дер-ваальсовских топологических изоляторов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, где n представляет количество пятислойных пакетов Те-Ві-Те-Ві-Те между двумя соседними семислойными пакетами Те-Ві-Те-Мп-Те-Ві-Те. Методом конфокальной рамановской спектроскопии исследуются кристаллические структуры с $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ и ∞ . Проводится сравнение экспериментальных частот колебательных мод одинаковой симметрии с изменением n . Параллельно, теоретически рассматривается динамика решетки свободных пленок, состоящих из одного, трех и четырех пятислойных пакетов, а также объемных Bi_2Te_3 ($n = \infty$) и MnBi_2Te_4 ($n = 0$). Колебательные моды последних двух систем имеют одинаковую симметрию, но разные поля смещений, которые, в случае активности моды в рамановском рассеянии, не содержат смещений атомов марганца для любого конечного n . Показывается, что две колебательные моды, в низкочастотной области спектра ($35\text{--}70\text{ см}^{-1}$) структур с $n = 1, 2, 3, 4, 5$ и 6 практически отвечают динамике решетки n -го количества свободных пятислойных пакетов Bi_2Te_3 . По этой причине остальные две колебательные моды, которые наблюдаются в высокочастотной области спектра ($100\text{--}140\text{ см}^{-1}$) и которые экспериментально неразличимы в смысле принадлежности к тому или иному пакету или к обоим пакетам одновременно, следует также предписывать колебаниям в пятислойных пакетах при неподвижных атомах семислойных пакетов.

DOI: 10.31857/S1234567822120084, EDN: imxnfw

1. Введение. До открытия первого собственного антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 с температурой Нееля 25.4 К [1] рассматривались разные возможности создания магнитной щели в точке Дирака и реализации фазы квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ). Самый простой способ решения такой задачи был реализован, как теоретически [2, 3], так и экспериментально [4], путем допирования магнитными атома-

ми немагнитного топологического изолятора (ТИ). Однако из-за неоднородного распределения магнитных атомов в реальных ТИ магнитная щель нерегулярно менялась вдоль поверхности [5], что обуславливает низкую температуру реализации КАЭХ. Другой способ, так называемый эффект магнитной близости, формирующийся вблизи границы раздела ТИ/ферромагнитный полупроводник, приводит в общем случае к смещению топологического поверхностного состояния в глубь ТИ и соответственно к ослаблению магнитного эффекта [6, 7]. Этот недоста-

¹) e-mail: n.mamedov.physics@bsu.edu.az;
evguenivladimirovich.tchouklov@ehu.eus

Таблица 1. Пространственная группа симметрии, параметры решетки и последовательность чередования пятислойных и семи-слойных пакетов для каждого члена серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$

$\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$	n	Пространственная группа	Параметры решетки		Последовательность атомных пакетов
			a (Å)	c (Å)	
Bi_2Te_3	∞	$R\text{-}3m$	4.386	30.497	-5-
MnBi_2Te_4	0	$R\text{-}3m$	4.3304(1)	40.956(2)	-7-
MnBi_4Te_7	1	$P\text{-}3m1$	4.3601(1)	23.798(2)	-5-7-
$\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$	2	$R\text{-}3m$	4.3685(2)	101.870(7)	-5-5-7-
$\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$	3	$R\text{-}3m$	4.3927(8)	132.336(24)	-5-5-5-7-
$\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$	4	$P\text{-}3m1$	4.3701(7)	54.304(9)	-5-5-5-5-7-
$\text{MnBi}_{12}\text{Te}_{19}$	5	$R\text{-}3m$	4.377	199.410	-5-5-5-5-5-7-
$\text{MnBi}_{14}\text{Te}_{22}$	6	$R\text{-}3m$	4.379	223.908	-5-5-5-5-5-5-7-

ток удается преодолеть в значительной степени при нанесении на поверхность немагнитного ТИ ультратонкой пленки ферромагнитного изолятора, обладающего кристаллической структурой и атомным составом, подобными таковым в исходном ТИ [6, 8–11]. Появление MnBi_2Te_4 во многом сняло проблему создания магнитной щели в спектре поверхностных топологических состояний и, одновременно, дало старт началу исследований целой серии кристаллических аналогов MnBi_2Te_4 , известных сегодня как $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, где n представляет количество пятислойных пакетов Te-Bi-Te-Bi-Te (ПСП) между двумя соседними семислойными пакетами $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$ (ССП) в структуре с данным n [12].

Важность исследований этой серии, как естественных гетероструктур была впервые подчеркнута в работе, посвященной поверхностным топологическим состояниям, магнитным и транспортным свойствам $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ [13] и, в дальнейшем, нашла отражение во многих работах [12, 14–24], включая работы по рамановскому рассеянию [12, 19–24]. Однако динамика решетки, равно как и другие свойства структур с n выше трех остаются до сих пор неисследованными. Открытым пока остается и вопрос о существенном несоответствии между количеством мод, активных в рамановском рассеянии, которое должно наблюдаться в рамках симметричного анализа объемного кристалла, и таковым наблюдаемым для структур с $n = 1, 2, 3$. Следует отметить, что хотя структуры $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ при комнатной температуре являются парамагнитными, их топология остается нетривиальной и в этом случае [25, 26].

В настоящей работе представлены результаты исследований рамановского рассеяния для топологических изоляторов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 0, 1, \dots, 6, \infty$. Параллельно, теоретически рассмотрена динамика решетки одного, трех и четырех

ПСП Bi_2Te_3 , а также объемных Bi_2Te_3 ($n = \infty$) и MnBi_2Te_4 ($n = 0$). В совокупности, полученные результаты позволили установить весьма необычную динамику решетки топологически нетривиальных систем $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, которая позволяет объяснить вышеупомянутое несоответствие.

2. Получение и рентгеновский анализ образцов. Монофазные образцы каждого члена серии скальвались под оптическим микроскопом из кристаллических слитков $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, выращенных методом Бриджмена–Стокбаргера из предварительно синтезированных поликристаллических фаз каждого состава. Процедура синтеза и условия выращивания отличались от таковых для MnBi_2Te_4 [12] только процентным содержанием начальных компонент и небольшим изменением температуры выращивания, в соответствии с требуемым n . Дифрактограммы от плоскостей $(000l)$, подтверждающие соответствие структуры каждого из исследованных образцов требуемому n были получены используя рентгеновский дифрактометр BRUKER XRD D2 Phaser (Cu, $K_{\alpha 1}$; $5 \leq 2\theta \leq 100^\circ$). Фазовый состав и структурный анализ образцов проводился с использованием программных пакетов EVA и TOPAS-4.2. Структурные данные, полученные по каждому члену серии приведены в табл. 1.

3. Методика экспериментальных и теоретических исследований рамановского рассеяния. Рамановское рассеяние исследовалось с помощью конфокальной установки Nanofinder 30 (Tokyo Instruments, Japan) с дифракционной решеткой 1800 штрих/мм и спектральным разрешением 0.5 см^{-1} . Рассеяние возбуждалось на длине волны 532 нм излучением второй гармоники Nd:YAG лазера с максимальной мощностью 10 мВт. Диаметр лазерного пятна на образце не превышал 4 мкм. Детектирование сигнала проводилось в режиме счета фотонов CCD камерой, охлажденной до тем-

Таблица 2. Полное колебательное представление для каждого члена n серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$. N – количество атомов в элементарной ячейке. В скобках после спектроскопического обозначения дана теоретико-групповая симметрия каждого представления в точке Γ (центр зоны Бриллюэна). Колебания E_u и E_g дважды вырождены

n	N	Полное колебательное представление $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$		
		Оптическая часть		Акустическая часть
		Инфракрасные моды	Рамановские моды	
∞	5	$2A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+2E_u(\Gamma_3^-)$	$2A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+2E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
0	7	$3A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+3E_u(\Gamma_3^-)$	$3A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+3E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
1	12	$6A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+6E_u(\Gamma_3^-)$	$6A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+6E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
2	17	$8A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+8E_u(\Gamma_3^-)$	$8A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+8E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
3	22	$11A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+11E_u(\Gamma_3^-)$	$11A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+11E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
4	27	$13A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+13E_u(\Gamma_3^-)$	$13A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+13E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
5	32	$16A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+16E_u(\Gamma_3^-)$	$16A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+16E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$
6	37	$18A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+18E_u(\Gamma_3^-)$	$18A_{1g}(\Gamma_1^+)$ $+18E_g(\Gamma_3^+)$	$A_{2u}(\Gamma_2^-)$ $+E_u(\Gamma_3^-)$

пературы -100°C . Временной промежуток сбора сигнала не превышал 1 мин, а сам сигнал отфильтровывался с использованием краевых фильтров LP03-532RU-50 (Semrock Company). Расположение фильтров (<https://www.semrock.com/filter-spectra-at-non-normal-angles-of-incidence.aspx>) позволяло регистрировать 100% рамановского сигнала в области $40\text{--}5000\text{ см}^{-1}$ и не менее 50% сигнала в области $35\text{--}40\text{ см}^{-1}$. Измерения проводились в геометрии обратного рассеяния. Полученные спектры приводятся в работе в нормализованном виде.

Теоретические расчеты проводились в рамках теории возмущений функционала плотности. В случае MnBi_2Te_4 использовался псевдопотенциальный метод в рамках кода AVINIT [27] с базисом плоских волн. Для Bi_2Te_3 мы использовали псевдопотенциальный подход и смешанный базис [28, 29], в котором валентные состояния представлены в виде комбинации плоских волн и локальных орбиталей s - и p -типа в узлах Bi и Te, что позволило уменьшить энергию обрезания для плоских волн до 10 Ry без потери точности. Для обменно-корреляционного функционала использовалось PBE приближение [30]. Все рассчитанные величины получены с учетом спин-орбитального взаимодействия [31]. При интегрировании по зоне Бриллюэна мы использовали неоднородную сетку k -точек, очень плотную 96×96 вблизи цен-

тра зоны (для малых диапазонов импульса) и крупную 12×12 для остальной части зоны Бриллюэна.

Полное колебательное представление для каждого члена n серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ приведено в табл. 2.

4. Результаты и обсуждение. Соединения с $n = \infty$ и $n = 0$ являются концевыми членами серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ и их структуры содержат либо только пятислойные, либо только семислойные атомные пакеты, ПСП и ССП, соответственно (табл. 1, последняя колонка). Спектры рамановского рассеяния этих членов приведены на рис. 1.

Идентификация мод для MnBi_2Te_4 (рис. 1, розовая кривая) основана на сравнении экспериментальных спектров с расчетными частотами и симметрией фононов в точке Γ (рис. 2) и согласуется с данными недавней работы [24], где дополнительно проведены измерения поляризации наблюдаемых фононов. Для Bi_2Te_3 (рис. 1, голубая кривая) наблюдаемые моды идентифицированы на основе сравнения с расчетными частотами и симметрией мод, представленных на рис. 3.

Как видно из рис. 2 и 3, при одинаковой симметрии колебательных мод, поля смещений в MnBi_2Te_4 и Bi_2Te_3 , равно как и во всех остальных членах серии разные. На обоих рисунках горизонтальные смещения атомов происходят в плоскости слоев, а верти-

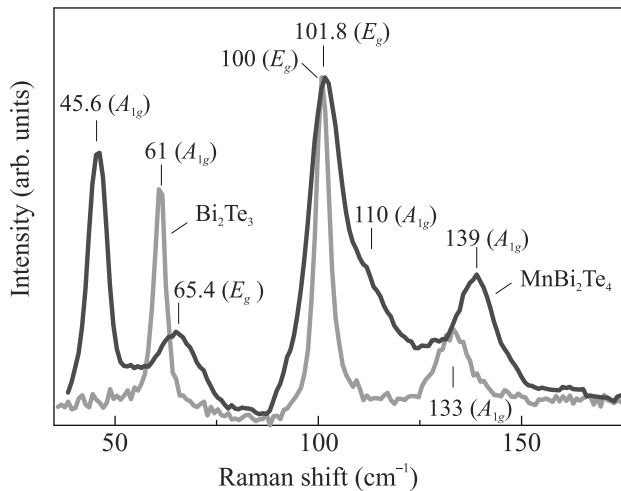


Рис. 1. (Цветной онлайн) Частоты и симметрия фоновых мод, наблюдаемых в Рамановском рассеянии MnBi_2Te_4 (розовая кривая) и Bi_2Te_3 (голубая кривая)

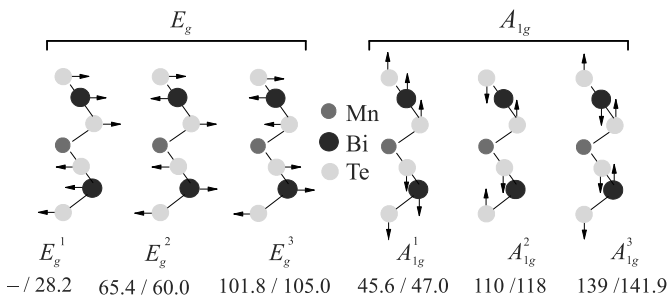


Рис. 2. (Цветной онлайн) Поля смещений раман-активных колебательных мод MnBi_2Te_4 . Наблюдаемые частоты в см^{-1} приведены внизу каждой моды, вместе с расчетными, указанными после наклонной (/)

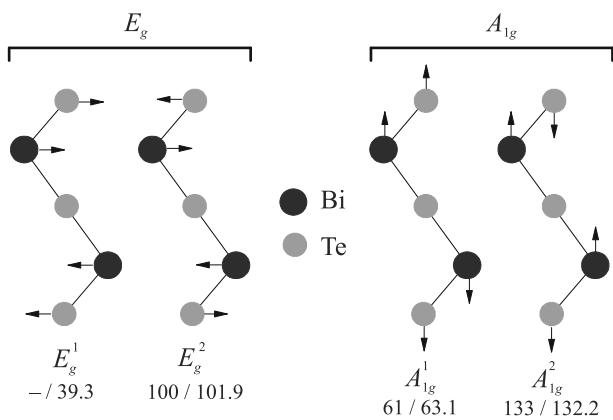


Рис. 3. (Цветной онлайн) Поля смещений раман-активных колебательных мод Bi_2Te_3 . Наблюдаемые частоты в см^{-1} приведены внизу каждой моды, вместе с расчетными, указанными после наклонной (/)

кальные перпендикулярно этой плоскости. Для простоты указаны только направления смещения каждого атома. Атомы Mn не участвуют в колебаниях, активных в рамановском рассеянии.

Как видно из табл. 2, ожидаемое количество мод в спектрах рамановского рассеяния членов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 0$ (MnBi_2Te_4) и $n = \infty$ (Bi_2Te_3) составляет 6 и 4, соответственно. В спектрах же, приведенных на рис. 2, наблюдаются только 5 из 6 и 3 из 4 ожидаемых рамановских мод, соответственно. Как следует из сопоставления данных на рис. 1 и табл. 2, недостающей модой для каждого материала является мода E_g симметрии.

Проявление этой низкочастотной моды в рамановском рассеянии объемного Bi_2Te_3 затрудняется инструментальными ограничениями (см. предыдущий раздел) и при определенной интенсивности сигнала ее регистрация оказывается невозможной. По крайней мере, в целом ряде работ [32–37], эта мода не наблюдалась. В то же время существуют работы [38–41], которые сообщают о наблюдении в Bi_2Te_3 моды с E_g симметрией и частотой 36.5 см^{-1} . В MnBi_2Te_4 низкочастотная E_g мода с расчетной частотой 28.2 см^{-1} (рис. 2, E_g^1) ни в одной из опубликованных до сих пор работ не наблюдалась. Поэтому в дальнейших рассуждениях мы будем пользоваться расчетным значением частоты этой моды.

На рисунке 4 приведены спектры рамановского рассеяния всех членов серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$. Как следует из этого рисунка, наиболее значительные изменения в спектре происходят при переходе от MnBi_2Te_4 ($n = 0$) к MnBi_4Te_7 ($n = 1$).

Спектры MnBi_4Te_7 ($n = 1$) и MnBi_2Te_4 ($n = 0$) представлены на рис. 5 (черные точки) вместе с результатами разложения этих спектров на составляющие (сплошные зеленые линии).

Обратимся к самым низкочастотным модам на рис. 2 (E_g^1, A_{1g}^1) для MnBi_2Te_4 и рис. 3 (E_g^1, A_{1g}^1) для Bi_2Te_3 с синфазными смещениями атомов Bi и Te и сравним их с самыми низкочастотными модами в спектрах MnBi_4Te_7 и MnBi_2Te_4 (рис. 5, верхний и нижний спектры, соответственно), которые также легко идентифицируются как E_g^1 и A_{1g}^1 моды.

В MnBi_4Te_7 эти моды оказываются сдвинутыми (более чем на 20 %) в сторону больших частот по сравнению с MnBi_2Te_4 . Такое существенное увеличение частоты при замене одного ССП в MnBi_2Te_4 на один ПСП Bi_2Te_3 явно связано с уменьшением количества атомов, участвующих в синфазных смещениях, что имеет место при переходе от MnBi_2Te_4 к Bi_2Te_3 (сравни E_g^1 и A_{1g}^1 моды на рис. 2 и 3).

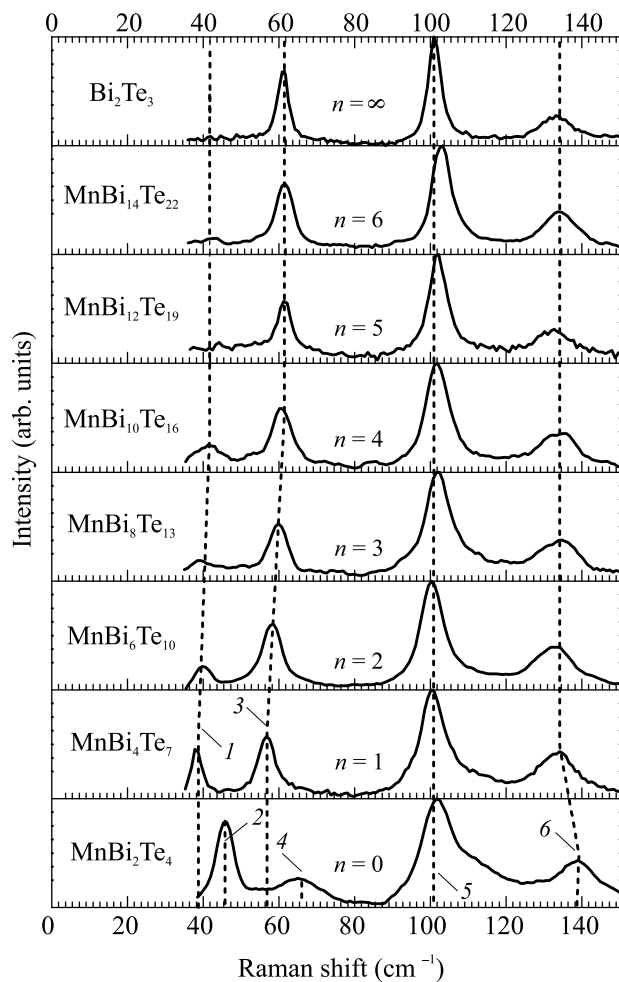


Рис. 4. Эволюция рамановских спектров $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с изменением n . Пунктирные линии 1, 3, 5 и 6 соединяют моды одинаковой симметрии и пересекают нижнюю и верхнюю горизонтальные оси следующим образом: 1 – 38 и 41 cm^{-1} ; 3 – 57.4 и 61 cm^{-1} ; 5 – 101 и 101 cm^{-1} ; 6 – 139 и 133 cm^{-1} соответственно. Пунктирные линии 2 и 4 пересекают нижнюю горизонтальную ось при 45.8 и 65.4 cm^{-1} соответственно. (Мода с частотой 110 cm^{-1} в MnBi_2Te_4 на рис. 4 не указана)

Как свидетельствуют результаты разложения спектров на компоненты (рис. 5, сплошные зеленые линии), вопреки ожидаемому количество мод, наблюдаемых для MnBi_4Te_7 ($n = 1$) явно меньше, чем для MnBi_2Te_4 ($n = 0$). При этом полностью отсутствует какое-либо дополнительное уширение основных мод, обусловленное ростом количества атомов в элементарной ячейке и появлением с ростом n большего количества мод (табл. 2, вторая и четвертая колонки, соответственно). Суперпозиция таких близких по частоте мод должна была бы привести к уширению основных линий. Как показывают результаты разложения и анализ уширения

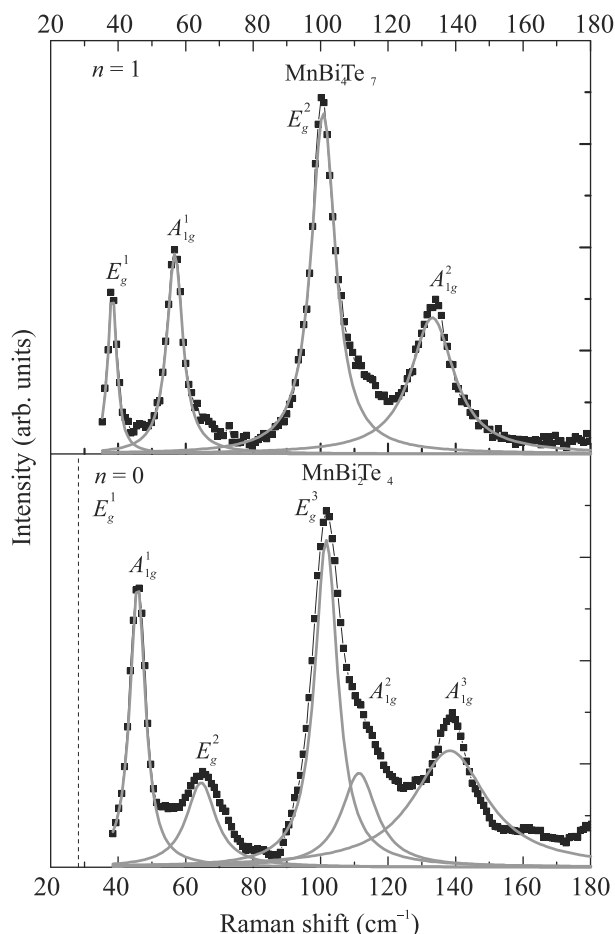


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сравнение данных настоящей работы для структур с $n = 1$ (верхний спектр) и $n = 0$ (нижний спектр). Результаты разложения спектров на составляющие показаны сплошными зелеными линиями. Вертикальная прерывистая линия показывает расчетное положение самой низкочастотной моды E_g^1 в MnBi_2Te_4 [12]

составляющих компонент, проведенный для всех спектров на рис. 4, начиная с $n = 1$, с ростом n количество мод в спектрах $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ не изменяется и составляет 4. Примечательно, что количество мод для MnBi_4Te_7 ($n = 1$) могло бы достигать 12-ти, а для $\text{MnBi}_{14}\text{Te}_{22}$ 36-ти (табл. 2, данные для $n = 1$ и $n = 6$ в четвертой колонке).

Таким образом, если количество мод в экспериментальных спектрах MnBi_2Te_4 полностью согласуется с данными симметричного анализа для объемного кристалла, то на первый взгляд их количество в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$ противоречит этим данным. Это противоречие снимается, если предположить, что колебательные моды в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$ полностью или почти полностью вырождены по частоте.

Таблица 3. Частоты Раман-активных колебательных мод, наблюдаемых для разного количества ПСП в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ – первые пять колонок, и их расчетные частоты для разного количества ПСП Bi_2Te_3 – следующие пять колонок

ПСП $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$	E_g	A_{1g}	E_g	A_{1g}	ПСП Bi_2Te_3	E_g	A_{1g}	E_g	A_{1g}
	см^{-1}					см^{-1}			
1	38	57	100.5	134	1	36.0	50.5	102	136.5
2	38.5	60	101.5	134	2	–	–	–	–
3	40	60.5	101.5	134	3	36.5	53.0	102.4	136.1
4	41	61	101	134	4	37.2	56.2	101.2	137.2
5	41*)	61	101	133	5	–	–	–	–
6	41*)	61	102.5	135	6	–	–	–	–
∞	41*)	61	100	133	∞	39.3	63.1	101.9	132.3

*) Не наблюдается и принята равной частоте для $n = 4$.

Низкочастотные моды E_g^1 и A_{1g}^1 в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$ соответствуют E_g^1 и A_{1g}^1 колебаниям n -го числа ПСП Bi_2Te_3 , что согласуется с данными наших расчетов, проведенных выборочно для одного, трех и четырех ПСП Bi_2Te_3 и приведенных в табл. 3.

Действительно, как видно из табл. 3, расчетные значения частот этих мод для одного ПСП Bi_2Te_3 практически совпадают с наблюдаемыми частотами мод с аналогичной симметрией в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 1$. Частоты этих мод с повышением количества ПСП Bi_2Te_3 от 1 до 4 имеют тенденцию к повышению, аналогично наблюдаемой для низкочастотных мод в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ при изменении n от 1 до 4 (рис. 4).

Таким образом, совокупность полученных данных по колебательным модам, активным в рамановском рассеянии свидетельствует о том, что часть динамики решетки $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$, связанная, по крайней мере с низкочастотными модами, определяется динамикой решетки n -го количества ПСП Bi_2Te_3 .

С этим хорошо согласуются и данные экспериментальных исследований рамановского рассеяния сверхтонких пленок Bi_2Te_3 , выращенных газотранспортным методом на подложках Si/SiO₂ или флуорофлогопитовой слюды [41]. Аналогично описанной выше низкочастотной E_g моде в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$, низкочастотная E_g мода наблюдалась для двух ПСП Bi_2Te_3 (минимальное количество ПСП, исследованных в работе [41]) и ее интенсивность стремительно падала с дальнейшим увеличением числа ПСП. Разница в $\sim 2 \text{ см}^{-1}$ между частотами этой моды для случая $n = 2$ в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (табл. 3, 38.5 см^{-1}) и двух ПСП Bi_2Te_3 (36.5 см^{-1} [37]), видимо, обусловлена технологическим фактором. В первом случае подложка, необходимая для получения одного (двух и т.д.) ПСП Bi_2Te_3 (второй случай)

отсутствует и полученная структура свободна от ее влияния. Точно так же, как для $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$, в случае одного и более слоев Bi_2Te_3 , положение низкочастотной A_{1g} моды испытывает небольшой сдвиг в сторону больших частот с увеличением числа ПСП Bi_2Te_3 . Полное сравнение наших данных по $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с n , отличным от нуля и данных [41] по Bi_2Te_3 с разным количеством ПСП приведено на рис. 6. Ясно видно, что влияние подложки, заметное для случая $n = 2$, быстро убывает с ростом n и для $n > 3$ практически не наблюдается.

Согласно расчетам (табл. 3, девятая колонка) высокочастотная мода E_g в Bi_2Te_3 не испытывает дисперсию частоты при изменении числа ПСП Bi_2Te_3 , аналогично подобным модам в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ на рис. 4, частота которых (101 см^{-1}) с ростом n не изменяется. Хотя и имеется совпадение частоты (101 см^{-1}) мод с симметрией E_g , соединенных прерывистой линией 5 на рис. 4, ставить знак равенства между этими модами и относить их к колебаниям, связанным с ССП MnBi_2Te_4 или ПСП Bi_2Te_3 в MnBi_4Te_7 нельзя. В рамках имеющихся экспериментальных данных эти моды неразличимы.

Похожая ситуация наблюдается и для самой высокочастотной моды A_{1g} как для Bi_2Te_3 (табл. 3, десятая колонка), так и для подобных мод на рис. 4. Высокочастотные моды, имеющие одинаковую симметрию A_{1g} , но разные частоты 139 см^{-1} (MnBi_2Te_4) и 136 см^{-1} (MnBi_4Te_7) и соединенные прерывистой линией 6 на рис. 4, строго говоря, также неразличимы с точки зрения принадлежности к ССП MnBi_2Te_4 или ПСП Bi_2Te_3 или к обоим одновременно. Небольшое (2%) уменьшение частоты этой высокочастотной моды при появлении одного ПСП Bi_2Te_3 в MnBi_2Te_4 ($n = 0$) и образовании MnBi_4Te_7 ($n = 1$) не может быть решающим для выбора какого-то одного из вышеприведенных вариантов принадлежности этой моды. Тем не менее, факт наличия низкочастотных

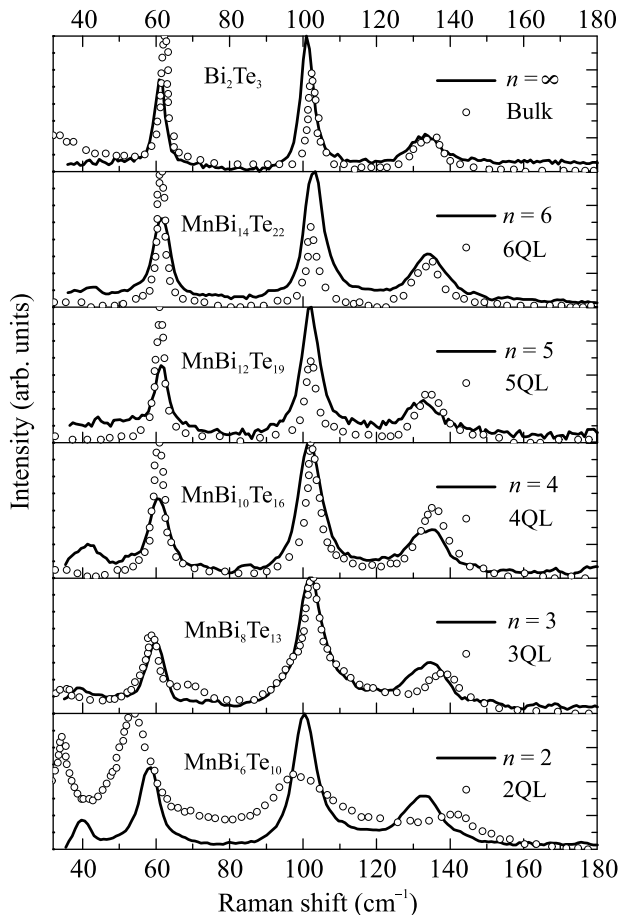


Рис. 6. Сравнение данных настоящей работы для $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 2, 3, 4, 5, 6$ и ∞ (сплошные кривые) с данными [41] (кружки) для объемного Bi_2Te_3 и двух (2QL), трех (3QL), четырех (4QL), пяти (5QL), шести (6QL) ПСП Bi_2Te_3

мод, связанных с колебаниями именно в пятислойных пакетах, диктует необходимость появления и высокочастотных мод этих пакетов. По этой причине, высокочастотные моды также следует отнести к колебаниям атомов Bi и Te в пятислойных пакетах при неподвижных атомах в семислойных пакетах. Этого же требует предельный переход к спектру Bi_2Te_3 , который в противном случае окажется невозможным.

3. Заключение. Колебательные моды, активные в рамановском рассеянии системы $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$ в исследованной области спектра оказываются практически вырожденными по частоте. Вследствие этого, количество наблюдаемых мод ограничено и равно четырем, как в случае Bi_2Te_3 . Вырождение охватывает как низкочастотные моды с синфазными смещениями атомов, так и высокочастотные с антифазными смещениями атомов. В обоих случаях колебательные моды отвечают смещени-

ям атомов Bi и Te в ПСП при неподвижных или почти неподвижных атомах в ССП. Отметим, что неподвижность атомов Bi и Te в ССП никак не связана с симметрией, в отличие от центрального Mn , который в силу симметричности своего положения не участвует в колебаниях, активных в рамановском рассеянии для любого n в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$.

В целом, реализуется интересная ситуация, в которой ССП MnBi_2Te_4 практически “молчат”, но это молчание не связано с симметрией и не имеет никакого отношения к “молчанию” так называемых “*silent modes*”, неактивных как в рамановском рассеянии, так и в ИК (инфракрасном) отражении (поглощении) и имеющих отличные от нуля смещения атомов. Нам неизвестны примеры подобного поведения колебательных мод в слоистых кристаллах.

Отсутствие вклада магнитных атомов Mn в рамановские спектры решеточных колебаний указывает на необходимость исследований ИК спектров $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$. Согласно нашим оценкам, верхняя граница частот дипольных колебаний с участием Mn составляет приблизительно 200 cm^{-1} .

В контексте данной работы, которая основана на данных, полученных при комнатной температуре, связь между колебательными модами и магнитными фазовыми переходами отсутствует. Однако такая связь может вскрыться при низкотемпературных исследованиях всей серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ и данные настоящей работы послужат отправной точкой для анализа полученных результатов. Работа в этом направлении нами уже начата.

Авторы выражают благодарность Р. Хейду за обсуждение работы. Работа выполнена при финансовой поддержке академии наук Азербайджана в рамках проекта NovelMTI.

Е. В. Чулков благодарит за поддержку проект # 90383050 Санкт-Петербургского Государственного Университета.

1. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
2. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **94**, 629 (2011).
3. J. Henk, M. Flieger, I. V. Maznichenko, I. Mertig, A. Ernst, S. V. Ereemeev, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 076801 (2012).
4. S.-Y. Xu, M. Neupane, Ch. Liu et al. (Collaboration), *Nat. Physics* **8**, 616 (2012).
5. I. Lee, Ch. K. Kima, J. Lee, S. J. L. Billinge, R. Zhong, J. A. Schneeloch, T. Liu, T. Valla, J. M. Tranquada, G. Gu, and J. C. S. Davis, *PNAS* **112**, 1316 (2015).

6. S. V. Ereemeev, V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **88**, 144430 (2013).
7. V. N. Men'shov, I. A. Shvets, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **110**, 771 (2019).
8. W. Luo and X.-L. Qi, *Phys. Rev. B* **87**, 085431 (2013).
9. М. М. Отроков, Т. В. Меньщикова, И. П. Русинов, М. Г. Бергнори, В. М. Кузнецов, Е. В. Чулков, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 275 (2017).
10. M. M. Otrokov, T. V. Menshchikova, M. G. Vergniory, I. P. Rusinov, A. Yu. Vyazovskaya, Yu. M. Koroteev, G. Bihlmayer, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, and E. V. Chulkov, *2D Mater.* **4**, 025082 (2017).
11. E. K. Petrov, I. V. Silkin, T. V. Menshchikova, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **109**, 121 (2019).
12. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova, A. V. Shevelkov, N. A. Abdullayev, Z. A. Jahangirli, E. N. Orujlu, M. M. Otrokov, N. T. Mamedov, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, *J. Alloys Compd.* **789**, 443 (2019).
13. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, D. Estyunin et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **5**, 54 (2020).
14. J. Wu, F. Liu, M. Sasase, K. Ienaga, Y. Obata, R. Yukawa, K. Horiba, H. Kumigashira, S. Okuma, T. Inoshita, and H. Hosono, *Sci. Adv.* **5**, eaax9989 (2019).
15. C. Hu, X. Zhou, P. Liu, J. Liu, P. Hao, E. Emmanouilidou, H. Sun, Y. Liu, H. Brawer, A. P. Ramirez, H. Cao, Q. Liu, D. Dessau, and N. Ni, *Nat. Commun.* **11**, 97 (2020).
16. S. Tian, S. Gao, S. Nie et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **102**, 035144 (2020).
17. J.-Q. Yan, Y. H. Liu, D. Parker, Y. Wu, A. A. Aczel, M. Matsuda, M. A. McGuire, and B. C. Sales, *Phys. Rev. Materials* **4**, 054202 (2020).
18. C. Hu, L. Ding, K. N. Gordon et al. (Collaboration), *Sci. Adv.* **6**(30), eaba4275 (2020).
19. R. Lu, H. Sun, S. Kumar et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **11**, 011039 (2021).
20. P. Rani, A. Saxena, R. Sultana, V. Nagpal, S. Islam, S. Patnaik, and V. P. S. Awana, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **32**, 3705 (2019).
21. H. Li, Sh. Liu, Ch. Liu, J. Zhang, Y. Xu, R. Yu, Y. Wu, Y. Zhang, and S. Fan, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 556 (2020).
22. M. Rodriguez-Vega, A. Leonardo, and G. A. Fiete, *Phys. Rev. B* **102**, 104102 (2020).
23. C. Pei, Y. Xia, J. Wu, Y. Zhao, L. Gao, T. Ying, B. Gao, N. Li, W. Yang, D. Zhang, H. Gou, Y. Chen, H. Hosono, G. Li, and Y. Qi, *Chin. Phys. Lett.* **37**, 066401 (2020).
24. J. Choe, D. Lujan, M. Rodriguez-Vega, Z. Ye, A. Leonardo, J. Quan, T. N. Nunley, L.-J. Chang, Sh.-F. Lee, J. Yan, G. A. Fiete, R. He, and X. Li, *Nano Lett.* **21**, 6139 (2021).
25. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **5**, eaa5685 (2019).
26. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
27. X. Gonze, J. M. Beuken, R. Caracas et al. (Collaboration), *Mater. Sci.* **25**, 478 (2002).
28. S. G. Louie, K.-M. Ho, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **19**, 1774 (1979).
29. R. Heid and K. P. Bohnen, *Phys. Rev. B* **60**, R3709 (1999).
30. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
31. R. Heid, K.-P. Bohnen, I. Y. Sklyadneva, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **81**, 174527 (2010).
32. W. Richter, H. Kohler, and C. R. Becker, *Phys. Stat. Sol. (b)* **84**, 619 (1977).
33. L. M. Goncalves, C. Couto, P. Alpuim, A. G. Rolo, F. Völklein, and J. H. Correia, *Thin Solid Films* **518**, 2816 (2010).
34. N. A. Abdullaev, N. M. Abdullaev, A. M. Kerimova, S. Sh. Kahramanov, A. I. Bayramov, H. Miyamoto, K. Wakita, N. T. Mamedov, and S. A. Nemov, *Semiconductors* **46**, 1140 (2012).
35. Z. I. Badalova, N. A. Abdullayev, G. H. Azhdarov, Kh. V. Aliguliyeva, S. Sh. Gahramanov, S. A. Nemov, and N. T. Mamedov, *Semiconductors* **53**, 291 (2019).
36. D. L. Mo, W. B. Wang, and Q. Cai, *Nanoscale Res. Lett.* **11**, 354 (2016).
37. V. Chis, I. Yu. Sklyadneva, K. A. Kokh, V. A. Volodin, O. E. Tereshchenko, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **86**, 174304 (2012).
38. W. Kullmann, J. Geurts, W. Richter, N. Lehner, H. Rauh, U. G. Eichhorn, and R. Geick, *Phys. Stat. Sol. (b)* **125**, 131 (1984).
39. K. M. F. Shahil, M. Z. Hossain, D. Teweldebrhan, and A. A. Balandin, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 153103 (2010).
40. Ch. Wang, X. Zhu, L. Nilson, J. Wen, G. Wang, X. Shan, Q. Zhang, Sh. Zhang, J. Jia, and Q. Xue, *Nano Res.* **6**, 688 (2013).
41. Y. Zhao, X. Luo, J. Zhang, J. Wu, X. Bai, M. Wang, J. Jia, H. Peng, Z. Liu, S. Y. Quek, and Q. Xiong, *Phys. Rev. B* **90**, 245428 (2014).

Higher rank 1 + 1 integrable Landau–Lifshitz field theories from associative Yang–Baxter equation

K. Atalikov^{+*1)}, A. Zotov^{+×1)}

⁺*Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences, 119991 Moscow, Russia*

^{*}*Institute for Theoretical and Experimental Physics of National Research Centre “Kurchatov Institute”, 117218 Moscow, Russia*

[×]*National Research University Higher School of Economics, 119048 Moscow, Russia*

Submitted 27 April 2022
 Resubmitted 30 April 2022
 Accepted 30 April 2022

DOI: 10.31857/S1234567822120096, EDN: inhozv

We suggest a generalization of the Landau–Lifshitz equation

$$\partial_t S = c_1[S, J(S)] + c_2[S, \partial_x^2 S],$$

$$S = \sum_{k=1}^3 S_k \sigma_k, \quad J(S) = \sum_{k=1}^3 S_k J_k \sigma_k, \tag{1}$$

where \tilde{c}_1, \tilde{c}_2 and J_1, J_2, J_3 are some constants. The periodic boundary conditions $\mathbf{S}(t, x) = \mathbf{S}(t, x + 2\pi)$ are assumed. The widely known Sklyanin’s result is that this equation is represented in the Zakharov–Shabat (or zero-curvature) form:

$$\partial_t U(z) - \partial_x V(z) + [U(z), V(z)] = 0, \tag{2}$$

$$U(z) = \sum_{k=1}^3 S_k \sigma_k \varphi_k(z),$$

$$V(z) = \sum_{k=1}^3 S_k \sigma_k \frac{\varphi_1(z)\varphi_2(z)\varphi_3(z)}{\varphi_k(z)} + \sum_{k=1}^3 W_k \sigma_k \varphi_k(z), \tag{3}$$

where $\varphi_k(z)$ is a certain set of elliptic functions.

In this paper we propose a construction of 1 + 1 integrable Heisenberg–Landau–Lifshitz type equations in the \mathfrak{gl}_N case. The dynamical variables are matrix elements of $N \times N$ matrix S with the property $S^2 = \text{const} \cdot S$. The Lax pair with spectral parameter is constructed by means of a quantum R -matrix satisfying the associative Yang–Baxter equation. The family of such R -matrices includes the elliptic GL_N Baxter–Belavin R -matrix and its trigonometric and rational degenerations.

Consider expansion of a quantum R -matrix in the classical limit and the expansion of the classical r -matrix near the pole in spectral parameter:

$$R_{12}^{\hbar}(z) = \frac{1}{\hbar} 1_N \otimes 1_N + r_{12}(z) + \hbar m_{12}(z) + O(\hbar^2),$$

$$r_{12}(z) = \frac{1}{z} NP_{12} + r_{12}^{(0)} + O(z). \tag{4}$$

Next, define the following linear maps (here $\overset{2}{A} = 1_N \otimes A$ for $A \in \text{Mat}(N, \mathbb{C})$):

$$A \rightarrow E(A) = \frac{1}{N} \text{tr}_2 \left(r_{12}^{(0)} \overset{2}{A} \right),$$

$$A \rightarrow J(A) = \frac{1}{N} \text{tr}_2 \left(m_{12}(0) \overset{2}{A} \right). \tag{5}$$

Using R -matrix identities one can show that the Lax pair

$$U(z) = L(S, z) = \frac{1}{N} \text{tr}_2 \left(r_{12}(z) \overset{2}{S} \right),$$

$$V(z) = V_1(z) + V_2(z),$$

$$V_1(z) = -c \partial_z L(S, z) + L(SE(S), z) + L(E(S)S, z), \tag{6}$$

$$V_2(z) = -cL(T, z), \tag{7}$$

where $T = -c^{-2}[S, \partial_x S]$, satisfies the Zakharov–Shabat equations identically in spectral parameter and provides the following equations of motion:

$$\partial_t S - \frac{1}{c} [S, \partial_x^2 S] - \partial_x \left(SE(S) + E(S)S \right) =$$

$$= 2s_0[S, J(S)] - \frac{1}{c} [S, E([S, \partial_x S])] - \frac{1}{c} [E(S), [S, \partial_x S]], \tag{8}$$

which is the \mathfrak{gl}_N generalization of the Landau–Lifshitz equation. The derived equation is simplified when the matrix S is of rank 1, i.e. $S = \xi \otimes \psi$ ($S_{ij} = \xi_i \eta_j$). Then the equation takes the form

$$\partial_t S = \frac{1}{c} [S, \partial_x^2 S] + \frac{2c}{N} [S, J(S)] - 2[S, E(\partial_x S)]. \tag{9}$$

The latter one equation can be easily described in the Hamiltonian formalism. Namely, it is the Hamiltonian equation coming from the Poisson brackets

¹⁾e-mail: kantemir.atalikov@yandex.ru; zotov@mi-ras.ru

$\{S_{ij}(x), S_{kl}(y)\} = (S_{kj}(x)\delta_{il} - S_{il}(x)\delta_{kj})\delta(x - y)$ and the Hamiltonian function

$$H = \oint dy \left(\frac{c}{N} \operatorname{tr} \left(S J(S) \right) - \frac{1}{2c} \operatorname{tr} \left(\partial_y S \partial_y S \right) + \operatorname{tr} \left(\partial_y S E(S) \right) \right), \quad S = S(y). \quad (10)$$

The work of A. Zotov is supported by the Russian Science Foundation under grant # 21-41-09011.

This is an excerpt of the article “Higher rank 1 + 1 integrable Landau–Lifshitz field theories from associative Yang–Baxter equation”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022600811.

Влияние активного выпетливания на статистику тройных контактов в модели интерфазных хромосом¹⁾

С. А. Белан^{+*2)}, Д. Е. Старков^{+*}

⁺Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Россия

^{*}Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, факультет физики, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 мая 2022 г.

После переработки 9 мая 2022 г.

Принята к публикации 9 мая 2022 г.

Теоретически исследуется статистика тройных контактов между участками интерфазной хромосомы в присутствии механизма активного выпетливания. Моделируя хроматин как идеальную полимерную цепь с замороженным беспорядком случайных петель, мы находим в рамках однопетлевого приближения выражение для условной вероятности контакта между двумя участками цепи при наличии дополнительного контакта с третьим участком. Анализ полученного выражения показывает нарушение механизмом выпетливания масштабной инвариантности, марковости и гауссовости идеальной цепи, подсказывая пути извлечения характеристик процесса выпетливания из экспериментальных данных касательно частот кратных контактов в интерфазных хромосомах. Кроме того, результаты работы свидетельствуют об ограниченности широко распространенных гауссовых полимерных моделей в вопросе воспроизведения некоторых особенностей конформационной статистики хромосом.

DOI: 10.31857/S1234567822120102, EDN: injkcs

1. Введение. Общая длина цепей ДНК, образующих полный набор хромосом человеческого организма, составляет около 2 м. Все эти макромолекулы упакованы в микрометровом пространстве внутри ядра клетки. Давно известно, что характер пространственной упаковки генетического материала иерархический [1] (см. также [2–5]). Прежде всего, двойная спираль ДНК наматывается на белки-гистоны, образуя структуру типа “бусы на нити”. Комплекс из ДНК, гистоновых белков, а также некоторых других белковых соединений, называется хроматином. Высокоуровневая укладка хроматина зависит от степени транскрипционной активности соответствующего участка генома и от стадии клеточного цикла. В период деления клетки хромосомы конденсируются в хорошо узнаваемые компактные объекты, легко различимые в оптический микроскоп [6]. Однако такое состояние хроматина нельзя назвать типичным, поскольку большую часть своего жизненного цикла клетка проводит в так называемой интерфазе. Грубо говоря, интерфаза – это промежуток времени, в течении которого клетка готовится к последующему делению. На стадии интерфазы хромосомы относительно слабо конденсирова-

ны, и вопрос об их пространственной организации очень долго оставался открытым. Между тем, понимание принципов этой организации чрезвычайно важно для биологии и медицины, так как нарушения в пространственной структуре генома влекут за собой сбои в его функционировании, влияя, в частности, на экспрессию генов, что, в свою очередь, может приводить к тяжелым последствиям для организма как целого [7–10].

Прогресс методов флуоресцентной визуализации и семейства экспериментальных техник определения конформации хромосом позволил получить большое количество характеризующих высоким пространственным и временным разрешением данных касательно структуры и динамики макромолекул ДНК в ядрах живых клеток [11–26]. Анализ этих данных привел к формированию продолжающегося обогащения представления о пространственной структуре генома и вскрытию одного из ключевых определяющих ее механизмов – активного выпетливания. Проведенные в последние несколько лет эксперименты наглядно продемонстрировали, что присутствующие в нуклеоплазме ядер клеток кольцеобразные белковые SMC-белки (конденсин и когезин), связываясь с ДНК, способны в присутствии АТФ проявлять моторную активность, которая приводит к образованию и росту петель ДНК [27–31].

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

²⁾e-mail: sergb27@yandex.ru

Прямое численное моделирование динамики хроматина, рассматриваемого как длинная полимерная цепь, на которой образуются, растут и исчезают петли, позволяет воспроизвести целый ряд характерных особенностей контактных карт, генерируемых для интерфазных клеток млекопитающих на основе данных Hi-C метода (см., например, работы [32–35]). Хорошо аргументированной является точка зрения, что именно процесс выпетливания ответственен за формирование топологически-ассоциированных доменов [36, 37], представляющих собой области контактных карт, в пределах которых участки генома контактируют друг с другом существенно чаще, чем с участками из соседних доменов. Считается, что топологически-ассоциированные домены играют важную роль в регуляции генной активности, обеспечивая преимущественную активацию энхансером тех генов, что расположены внутри одного с ним домена [10, 37, 38].

Вскрытие молекулярного механизма активного выпетливания открывает перспективы построения аналитической теории, способной систематизировать существующие экспериментальные данные, касающиеся пространственной структуры и динамики хромосом. Так, в недавней теоретической работе [39] было показано, что простые полимерные модели, явно учитывающие присутствие созданных когезиновыми комплексами петель, способны объяснить профиль экспериментально наблюдаемой зависимости вероятности парных контактов между участками интерфазного хроматина на масштабе генетических расстояний вплоть до размеров топологически-ассоциированных доменов. Данная работа нацелена на дальнейшее развитие этого теоретического подхода в направлении обобщения извлекаемых из него предсказаний на более широкий круг экспериментальных данных. А именно, здесь мы исследуем влияние механизма активного выпетливания на статистику тройных контактов. В рамках модели идеальной полимерной цепи с беспорядком петель нами получена вероятность контакта между двумя участками хроматина при условии наличия контакта с третьим участком. Мотивацией исследования служит появление экспериментальных методов детектирования кратных контактов между более чем двумя участками хроматина [25, 40–48].

2. Математическая модель: идеальная цепь с замороженным беспорядком редких петель. Как обсуждалось выше, с учетом установленного механизма активного выпетливания, интерфазный хроматин можно промоделировать как длинную полимерную цепь с динамическими петлями, см. рис. 1.

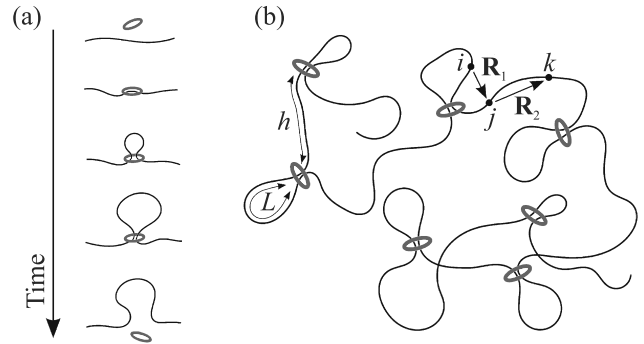


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Образование, рост и исчезновение петли хроматина, созданной моторной активностью когезина. (b) – Полимерная цепь с беспорядком случайных петель как модель интерфазной хромосомы

Процесс роста каждой петли начинается после связывания когезинового комплекса с хроматином, а прекращается либо в момент диссоциации, когда когезин возвращается в окружающую нуклеоплазму, либо в результате блокирования (например, другим SMC-комплексом или CTCF-белком). Важной характеристикой процесса выпетливания является средняя контурная длина петли λ , которая имела бы место в отсутствие взаимодействия SMC-белка с любыми соединениями, которые могут выступать в качестве барьера, препятствующего процессу выпетливания. На разных стадиях клеточного цикла λ по-разному сравнивается со средним контурным расстоянием d между сайтами связывания соседних когезиновых комплексов, определенным как общая протяженность полимерной цепи, деленная на среднее количество SMC-белков, присутствующих на ней в статистически стационарном режиме. Для условий интерфазы справедливо $\lambda \lesssim d$ [34, 49], поэтому для типичной реализации конформации цепи, большинство петель разделены довольно большими зазорами, как показано на рис. 2, а доля вложенных и сросшихся петель мала. В силу стохастичности скорости выпетливания и времени связывания SMC-белка с хроматином результирующую контурную длину петли следует считать случайной величиной. Последнее, а также нерегулярность расположения сайтов связывания SMC-белков с молекулой ДНК, означает, что и контурные длины сегментов полимерной цепи, заключенные между соседними петлями, также должны рассматриваться как случайные величины. В наших аналитических расчетах мы будем рассматривать асимптотический предел $\lambda/d \ll 1$. В этом случае контурные длины петель и зазоров можно считать независимыми случайными величинами, для ко-

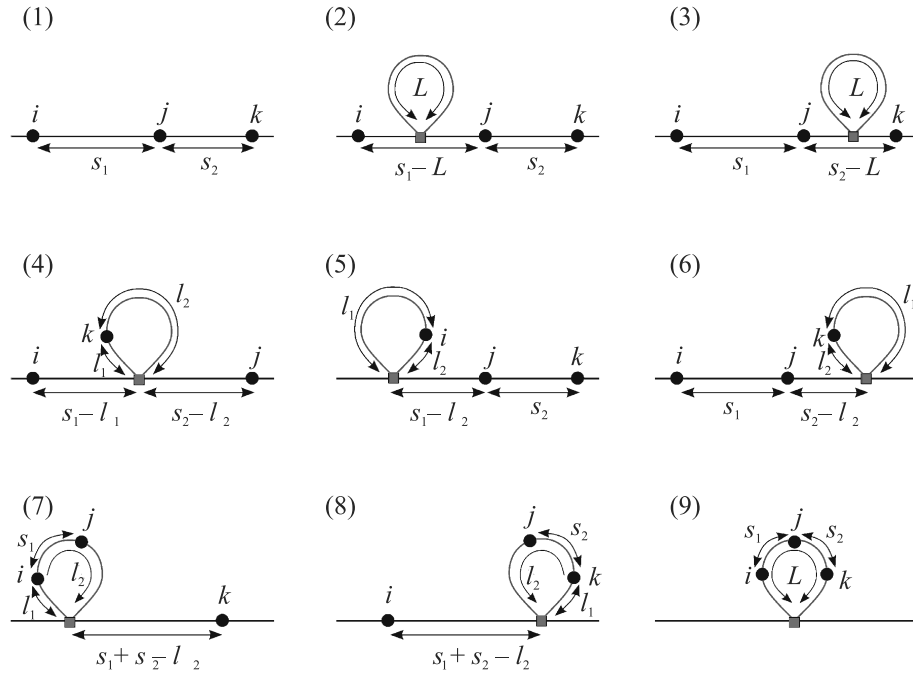


Рис. 2. (Цветной онлайн) Девять классов диаграмм, определяющих однопетлевой ответ для вероятности $p_{jk|ij}(s_1, s_2)$ контакта участков j и k при условии, что в контакте находятся участки i и j (обозначены черными точками), для полимерной цепи с беспорядком петель (обозначены красным), созданных моторной активностью SMC-белков (показаны оранжевыми квадратами в базах петель)

торых мы примем экспоненциальные функции распределения

$$p_{\text{loop}}(L) = \frac{1}{\lambda} \exp\left(-\frac{L}{\lambda}\right), \quad p_{\text{gap}}(h) = \frac{1}{d} \exp\left(-\frac{h}{d}\right). \quad (1)$$

Будем считать, что хроматин представляет собой идеальную цепь с длиной сегмента Куна l_{eff} . Идеальность означает, что мы пренебрегаем любым взаимодействием несвязанных друг с другом сегментов. Как известно, в силу центральной предельной теоремы крупномасштабные статистические свойства конформации любой идеальной цепи аналогичны статистическим свойствам траектории процесса Винера, для которого время измеряется в единицах контурной длины полимера, а коэффициент диффузии равен $D = l_{\text{eff}}/6$ (см., например, [50, 51]). Мы будем опираться на эту аналогию ниже.

Конформация полимерной цепи случайным образом меняется с течением времени за счет тепловых флуктуаций и моторной активности SMC-белков. Простые оценки показывают, что время, необходимое SMC-комплексу для вытягивания петли хроматина, соответствующей участку ДНК из 200 тысяч пар оснований (характерная длина петли в условиях интерфазы согласно [33, 34]), велико по сравнению со временем тепловой релаксации такой петли [39].

Это позволяет считать беспорядок петель замороженным, полагая, что случайные конформации полимерной цепи принадлежат статистически-равновесному ансамблю.

Напомним ключевые для целей нашего рассмотрения крупномасштабные статистические свойства равновесных линейных и кольцевых сегментов идеальной цепи. Функция распределения вероятностей случайного вектора \mathbf{R} , соединяющего два разделенных контурным расстоянием $s \gg l_{\text{eff}}$ участка равновесной цепи, принадлежащих области зазора между петлями, определяется выражением (см. [50, 51])

$$P_{\text{free}}(\mathbf{R}|s) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{\text{free}}^2(s))^{3/2}} \exp\left(-\frac{R^2}{2\sigma_{\text{free}}^2(s)}\right), \quad (2)$$

где $\sigma_{\text{free}}^2(s) = \frac{l_{\text{eff}}^2 s}{3}$. В свою очередь, вероятностное распределение вектора \mathbf{R} между двумя участками, лежащими на петле контурной длины L и разделенными контурным расстоянием s ($l_{\text{eff}} \ll s < L$), определяется выражением (см. [51])

$$P_{\text{coil}}(\mathbf{R}|s, L) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{\text{coil}}^2(s, L))^{3/2}} \exp\left(-\frac{R^2}{2\sigma_{\text{coil}}^2(s, L)}\right), \quad (3)$$

где $\sigma_{\text{coil}}^2(s, L) = \frac{l_{\text{eff}}^2 s(L-s)}{3L}$. Формулы (2) и (3) служат ключевыми строительными блоками диаграмм

ной техники вычислений, к краткому изложению которой мы переходим.

3. Диаграммное разложение для условной вероятности контакта. Будем говорить, что участки цепи с контурными координатами i и j находятся в контакте в рассматриваемый момент времени, если физическое расстояние между ними не превышает некоторого контактного радиуса a . Рассмотрим условную вероятность $Pr[R_1 < a | R_2 < a]$, где $\mathbf{R}_1 \equiv \mathbf{ij}$ и $\mathbf{R}_2 \equiv \mathbf{jk}$, того, что в произвольно выбранный момент времени участки цепи с контурными координатами j и k находятся в контакте, при условии, что в контакте находятся участки j и i . Здесь и далее мы предполагаем, что $i < j < k$. Обозначим через $p_{jk|ij}(s_1, s_2)$ значение $Pr[R_1 < a | R_2 < a]$, усредненное по всем тройкам точек i, j, k при фиксированных разностях $s_1 = j - i$ и $s_2 = k - j$, которые предполагаются малыми в сравнении с полной контурной длиной хромосомы. Вычисление условной вероятности $p_{jk|ij}(s_1, s_2)$ является основной целью этой работы.

В общем случае имеет место бесконечно большой набор сценариев взаимного расположения участков i, j и k , контактами между которыми мы интересуемся, и баз петель, возникших за счет моторной активности SMC-комплексов. Однако, если $\lambda/d \ll 1$, то при вычислении функции $p_{jk|ij}(s_1, s_2)$ в диапазоне контурных расстояний $s_1, s_2 \ll d$ можно принять однопетлевое приближение. Словом, разделение масштабов, обеспечиваемое малостью параметров $\lambda/d, s_1/d$ и s_2/d , позволяет пренебречь вероятностью встретить реализацию ансамбля петель, для которой между участками i и k лежит более одного SMC-комплекса. Таким образом, достаточно рассмотреть 9 вариантов, схематически представленных в виде диаграмм на рис. 2.

С учетом сказанного, условная вероятность контакта может быть записана в следующей форме:

$$p_{jk|ij}(s_1, s_2) = \sum_{\alpha=1}^9 \langle p_{jk|ij}^{(\alpha)}(s_1, s_2 | \{A\}_\alpha) \rangle_{\text{loops}}, \quad (4)$$

где индекс α нумерует диаграммы согласно рис. 2, $p_{jk|ij}^{(\alpha)}(s_1, s_2 | \{A\}_\alpha)$ – это условная вероятность контакта при фиксированной реализации ансамбля случайных петель, $\{A\}_\alpha$ – набор случайных величин, параметризующих соответствующую диаграмму, а угловые скобки $\langle \dots \rangle_{\text{loops}}$ обозначают усреднение по параметрам $\{A\}_\alpha$. Так как беспорядок предполагается замороженным, то усреднение по тепловым флуктуациям предшествует усреднению по статистике случайных петель.

Вклады различных диаграмм в искомую условную вероятность имеют вид

$$\begin{aligned} p_{jk|ij}^{(\alpha)}(s_1, s_2 | \{A\}_\alpha) &= \\ &= \frac{\int_{R_1 \leq a} \int_{R_2 \leq a} d^3 R_1 d^3 R_2 \mathcal{P}_{12}^{(\alpha)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 | \{A\}_\alpha, s_1, s_2)}{\int_{R_1 \leq a} d^3 R_1 \mathcal{P}_1^{(\alpha)}(\mathbf{R}_1 | \{A\}_\alpha, s_1, s_2)} \approx \\ &\approx \frac{4}{3} \pi a^3 \frac{\mathcal{P}_{12}^{(\alpha)}(\mathbf{0}, \mathbf{0} | \{A\}_\alpha, s_1, s_2)}{\mathcal{P}_1^{(\alpha)}(\mathbf{0} | \{A\}_\alpha, s_1, s_2)}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\mathcal{P}_{12}^{(\alpha)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 | \{A\}_\alpha, s_1, s_2)$ – совместная функция распределения случайных векторов \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 , $\mathcal{P}_1^{(\alpha)}(\mathbf{R}_1 | \{A\}_\alpha, s_1, s_2)$ – частная функция распределения вектора \mathbf{R}_1 . Данное выражение записано в предположении, что $a \ll \langle R_1 \rangle, \langle R_2 \rangle$.

Таким образом, поставленная нами задача сводится к поиску условных вероятностей согласно ур. (5) и дальнейшему усреднению полученных выражений по беспорядку случайных петель. Для идеальной цепи описанная программа вычислений может быть реализована до конца. В файле с дополнительными материалами, опираясь на формулы (2) и (3), а также на аналогию между конформацией длинного идеального полимера и формой траектории броуновского движения, мы вычисляем вклады диаграмм и их статистические веса. Следующий раздел посвящен изложению результатов.

4. Результаты. В отсутствии беспорядка случайных петель вероятность контакта между участками j и k при условии, что в контакте находятся участки i и j , имеет вид

$$p_{jk|ij}^{\text{free}}(s_1, s_2) = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \left(\frac{a}{l_{\text{eff}}} \right)^3 \frac{1}{s_2^{3/2}}, \quad (6)$$

и не зависит от s_1 , что является следствием марковского свойства линейной гауссовой цепи со свободными концами. При наличии беспорядка петель условная вероятность контакта на масштабе $s_1, s_2 \ll d$ в однопетлевом приближении оказывается равной

$$p_{jk|ij}(s_1, s_2) = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \left(\frac{a}{l_{\text{eff}}} \right)^3 \frac{1}{s_2^{3/2}} \left(1 + \frac{\lambda}{d} F \left(\frac{s_1}{\lambda}, \frac{s_2}{\lambda} \right) \right), \quad (7)$$

где функция $F(z_1, z_2)$ дана формулой (S85) в файле с дополнительными материалами и требует численного анализа.

Сравнивая уравнения (6) и (7), мы видим, что беспорядок редких петель ведет к появлению линейной по малому параметру λ/d поправки к “невозмущенной” условной вероятности контакта. Эта поправка

оказывается зависящей от отношения s_2/λ , так как петли нарушают масштабную инвариантность цепи, вводя в задачу характерный масштаб λ . Кроме того, поправка зависит от s_1/λ , что отражает разрушение петлями марковости исходной цепи. Отметим также, что в рамках однопетлевого приближения среднее расстояние между петлями $d \gg \lambda$ влияет только на амплитуду поправки, но не на ее функциональный вид.

Для наглядной демонстрации отсутствия масштабной инвариантности и марковского свойства идеальной цепи с беспорядком петель, удобно рассмотреть логарифмическую производную условной вероятности контакта в зависимости от перемасштабированного контурного расстояния s_2/λ . Из уравнений (6) и (7) понятно, что идеальная цепь со свободными концами характеризуется фиксированным значением логарифмической производной $-3/2$, в то время как в присутствии редких случайных петель данная характеристика дается выражением

$$\frac{\partial[\log_{10} p_{jk|ij}(s_1, s_2)]}{\partial[\log_{10} \frac{s_2}{\lambda}]} = -\frac{3}{2} + \frac{\lambda s_2}{d} F'_{z_2} \left(\frac{s_1}{\lambda}, \frac{s_2}{\lambda} \right). \quad (8)$$

Соответствующий график представлен на рис. 3 и показывает, что беспорядок петель проявляется в немонотонности зависимости логарифмической производной условной вероятности парного контакта от кон-

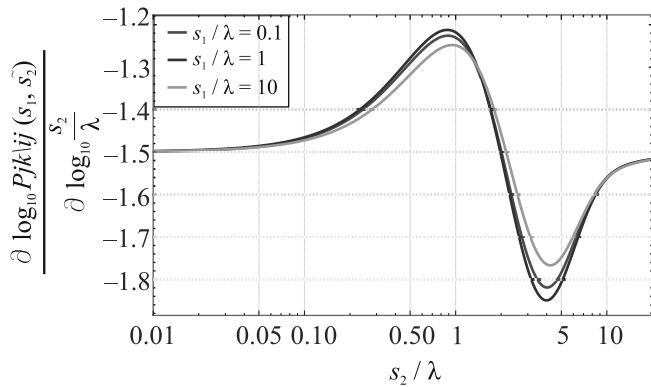


Рис. 3. (Цветной онлайн) Логарифмическая производная условной вероятности контакта как функции от s_2/λ для трех различных значений s_1/λ при фиксированном отношении $\lambda/d = 0.1$

турного расстояния s_2 . Наибольшее отклонение от свойств “невозмущенной” цепи наблюдается на промежуточном масштабе контурных расстояний $s_2 \sim \lambda$, в то время как при $s_2 \ll \lambda$ и $s_2 \gg \lambda$ масштабная инвариантность сохраняется, что связано, соответственно, с нечувствительностью мелкомасштабной статистики конформации цепи к присутствию

петель и с самоусреднением эффекта петель на больших масштабах. Кроме того, профиль логарифмической производной чувствителен к изменению значения переменной s_1 , что свидетельствует об отклонении от марковости. Отметим, однако, что в широком диапазоне значений s_1 положение максимума логарифмической производной условной вероятности парного контакта как функции от s_2 остается близким к среднему размеру петли λ . Указанное наблюдение справедливо независимо от значения d , поскольку, как уже было сказано выше, в силу структуры формулы (7) изменение этой величины не влияет на масштаб графика вдоль горизонтальной оси.

Для более детального исследования корреляций в статистике контактов, нормируем условную вероятность контакта $p_{jk|ij}(s_1, s_2)$ на частную $p_{jk}(s_2) = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \left(\frac{a}{l_{\text{eff}}} \right)^3 \frac{1}{s_2^{3/2}} \left(1 + \frac{\lambda}{d} f \left(\frac{s_2}{\lambda} \right) \right)$ (см. работу [39] и формулы (S86) и (S87) в файле с дополнительными материалами), т.е. рассмотрим отношение

$$I(s_1, s_2) = \frac{p_{jk|ij}(s_1, s_2)}{p_{jk}(s_2)} \approx 1 + \frac{\lambda}{d} \left[F \left(\frac{s_1}{\lambda}, \frac{s_2}{\lambda} \right) - f \left(\frac{s_2}{\lambda} \right) \right]. \quad (9)$$

На рисунках 4 и 5 представлены графики $I(s_1, s_2)$ как функции от s_2/λ и s_1/λ соответственно. Как

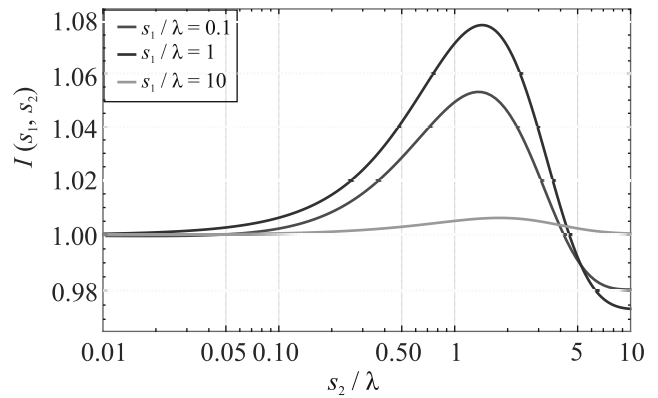


Рис. 4. (Цветной онлайн) Отношение условной вероятности контакта к частной, $I(s_1, s_2)$ (см. ур. (9)), как функция от s_2/λ

и в обсуждавшемся выше случае логарифмической производной, данные зависимости немонотонны, а их экстремумы приходятся на масштабы $s_2 \sim \lambda$ и $s_1 \sim \lambda$.

Интересно отметить, что условие наличия контакта между участками i и j может приводить к уменьшению вероятности контакта между участками j и k . Действительно, из представленных графи-

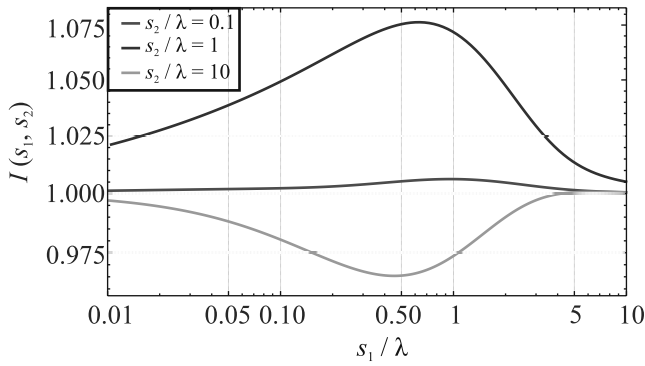


Рис. 5. (Цветной онлайн) Отношение условной вероятности контакта к частной, $I(s_1, s_2)$ (см. ур. (9)), как функция от s_1/λ

ков видно, что $I(s_1, s_2) < 1$ при $s_2 \gg s_1, \lambda$. Это наблюдение идет вразрез с результатами работы [53], где предложенная для описания статистики кратных контактов модель неоднородных петель предсказывала, что $I(s_1, s_2) \geq 1$ для любых значений s_1 и s_2 . Объяснение этого несоответствия состоит в том, что доказательство неравенства $I(s_1, s_2) \geq 1$, представленное в работе [53], опирается на модельную предпосылку о гауссовости статистики хроматина, а потому не может быть распространено на рассматриваемую нами модель. В нашей модели гауссовым свойством обладает только “невозмущенная” (т.е. свободная от петель) цепь, тогда как статистика конформаций цепи со случайными петлями уже не является гауссовой.

5. Заключение. Хорошее совпадение результатов численного моделирования полимерных цепей, подверженных механизму выпетливания, с экспериментальными данными по частотам парных контактов *in vivo* [32–35], а также наблюдение моторной активности SMC-белков методами микроскопии в условиях *in vitro* [27–31], позволяет считать присутствие процесса активного выпетливания в ядрах живых клеток твердо установленным. В то же время, прямое наблюдение методами микроскопии петель, созданных SMC-белками, в условиях живой клетки остается сложной задачей, поскольку хроматин имеет довольно большую плотность, а обсуждаемые петли являются динамическими образованиями. Кроме того, на контактных картах, предоставляемых методиками определения конформации хромосом, контакты, обусловленные петлями, невозможно отличить от доминирующего множества прочих случайных контактов. В этой связи актуальным является развитие аналитических моделей, которые позволяли бы получать количественные оценки для харак-

теристик процесса выпетливания из экспериментальных данных микробиологических экспериментов.

Опыт наших предыдущих работ по этой тематике (см. [39, 52]), показывает, что модель идеального гауссового полимера с беспорядком петель дает качественно верное представление о характере влияния процесса активного выпетливания на статистику парных контактов для хроматина в условиях интерфазы. Здесь эта модель была использована нами для анализа статистики тройных контактов, которая может быть собрана посредством ряда развитых в последнее время экспериментальных методов [25, 40–48].

Полученные результаты подсказывают способ извлечения оценки для средней длины петли на основе экспериментальных данных. А именно, мы обнаружили, что логарифмическая производная условной вероятности парного контакта и отношение условной вероятности к частной, будучи рассмотренными как функции от контурных расстояний, являются монотонными, причем положения экстремумов близки к средней длине петли.

Помимо этого, наш анализ выявил, что при выполнении определенных условий оказывается справедливым неравенство $p_{jk|ij}(s_1, s_2) < p_{jk}(s_2)$ между условной и частной вероятностями контакта, которое, как было показано в публикации [53], невозможно, если моделировать хроматин в рамках гауссовой модели неоднородных петель (Heterogeneous Loop Model). Таким образом, полученные результаты показывают, что часто используемые по соображениям вычислительной простоты гауссовы модели [54–56] могут быть неспособны уловить некоторые интересные особенности статистики контактов участков хромосом.

Отметим в заключение, что, хотя модель идеальной цепи с беспорядком редких петель позволяет относительно легко получить качественное представление касательно влияния активного выпетливания на конформационную статистику хроматина, для достижения количественного согласия с экспериментальными данными могут потребоваться более сложные полимерные модели. В частности, было бы интересно попробовать обобщить представленные однопетлевые вычисления на случай полимерной цепи с произвольной фрактальной размерностью [57], подобно тому как это было сделано в работе [39] для частной вероятности контакта. Кроме того, отдельного исследования требует вопрос о том, способно ли однопетлевое приближение уловить особенности статистики тройных контактов в режиме $\lambda/d \gtrsim 1$.

Работа поддержана Российским научным фондом (РНФ), проект # 20-72-00170.

1. J. H. Gibcus and J. Dekker, *Molecular Cell* **49**(5), 773 (2013).
2. A. Y. Grosberg, S. K. Nechaev, and E. I. Shakhnovich, *Journal de Physique* **49**(12), 2095 (1988).
3. A. Grosberg, Y. Rabin, S. Havlin, and A. Neer, *EPL (Europhysics Letters)* **23**(5), 373 (1993).
4. В. А. Аветисов, Б. Х. Бикулов, О. А. Васильев, С. К. Нечаев, А. В. Чертович, *ЖЭТФ* **36**(3), 566 (2009).
5. Е. Г. Яшина, С. В. Григорьев, *ЖЭТФ* **156**(3), 540 (2019).
6. W. Flemming, *J. Cell Biol.* **25**, 3 (1965).
7. T. Misteli, *Cell* **128**(4), 787 (2007).
8. D. U. Gorkin, D. Leung, and B. Ren, *Cell Stem Cell* **14**(6), 762 (2007).
9. P. H. L. Krijger and W. De Laat, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **17**(12), 771 (2016).
10. D. G. Lupiáñez, K. Kraft, V. Heinrich et al. (Collaboration), *Cell* **161**(5), 1012 (2015).
11. J. Dekker, K. Rippe, M. Dekker, and N. Kleckner, *Science* **295**, 1306 (2002).
12. C. Molenaar, K. Wiesmeijer, N. P. Verwoerd, S. Khazen, R. Eils, H. J. Tanke, and R. W. Dirks, *EMBO J.* **22**(24), 6631 (2003).
13. E. Lieberman-Aiden, N. L. van Berkum, L. Williams et al. (Collaboration), *Science* **326**, 289 (2009).
14. I. Bronstein, Y. Israel, E. Kepten, S. Mai, Y. Shav-Tal, E. Barkai, and Y. Garini, *Phys. Rev. Lett.* **103**(1), 018102 (2009).
15. T. Cremer and M. Cremer, *Cold Spring Harbor perspectives in biology* **2**(3), a003889 (2010).
16. T. Nagano, Y. Lubling, T. J. Stevens, S. Schoenfelder, E. Yaffe, W. Dean, E. D. Laue, A. Tanay, and P. Fraser, *Nature* **502**, 59 (2013).
17. W. A. Bickmore and B. van Steensel, *Cell* **152**(6), 1270 (2013).
18. S. Shachar, T. C. Voss, G. Pegoraro, N. Sciascia, and T. Misteli, *Cell* **162**, 911 (2015).
19. J. Fraser, I. Williamson, W. A. Bickmore, and J. Dostie, *Microbiol. Mol. Biol. Rev.* **79**, 347 (2015).
20. J. Kind, L. Pagie, S. S. de Vries et al. (Collaboration), *Cell* **163**, 134 (2015).
21. H. D. Ou, S. Phan, T. J. Deerinck, A. Thor, M. H. Ellisman, and C. C. O'shea, *Science* **357**(6349), eaag0025 (2017).
22. T. Nagano, Y. Lubling, C. Várnai et al. (Collaboration), *Nature* **547**(7661), 61 (2017).
23. M. E. Oomen, A. K. Hedger, J. K. Watts, and J. Dekker, *Nat. Methods* **17**, 1002 (2020).
24. N. Krietenstein, S. Abraham, S. V. Venev et al., *Mol. Cell* **78**, 554 (2020).
25. R. Kempfer and A. Pombo, *Nat. Rev. Genet.* **21**(4), 207 (2020).
26. L. Mirny and J. Dekker, *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology* a040147 (2021).
27. M. Ganji, I. A. Shaltiel, S. Bisht, E. Kim, A. Kalichava, C. H. Haering, and C. Dekker, *Science* **360**, 102 (2018).
28. I. F. Davidson, B. Bauer, D. Goetz, W. Tang, G. Wutz, and J. M. Peters, *Science* **366**(6471), 1338 (2019).
29. Y. Kim, Z. Shi, H. Zhang, I. J. Finkelstein, and H. Yu, *Science* **366**(6471), 1345 (2019).
30. S. Golfier, T. Quail, H. Kimura, and J. Brugués, *Elife* **9**, e53885 (2020).
31. J. K. Ryu, A. J. Katan, E. O. van der Sluis, T. Wisse, R. de Groot, C. H. Haering, and C. Dekker, *Nat. Struct. Mol. Biol.* **27**(12), 1134 (2020).
32. A. L. Sanborn, S. S. Rao, S.-C. Huang et al. (Collaboration), *Proceedings of the National Academy of Sciences* **112**, E6456 (2015).
33. G. Fudenberg, M. Imakaev, C. Lu, A. Goloborodko, N. Abdennur, and L. A. Mirny, *Cell Rep.* **15**(9), 2038 (2016).
34. G. Fudenberg, N. Abdennur, M. Imakaev, A. Goloborodko, and L. Mirny, *Cold Spring Harbor symposia on quantitative biology* **82**, 45 (2017).
35. L. A. Mirny, M. Imakaev, and N. Abdennur, *Curr. Opin. Cell Biol.* **58**, 142 (2019).
36. J. R. Dixon, S. Selvaraj, F. Yue et al. (Collaboration), *Nature* **485**(7398), 376 (2012).
37. E. P. Nora, B. R. Lajoie, E. G. Schulz et al. (Collaboration), *Nature* **485**, 381 (2012).
38. O. Symmons, V. V. Uslu, T. Tsujimura, S. Ruf, S. Nassari, W. Schwarzer, L. Ettwiller, and F. Spitz, *Genome Res.* **24**, 390 (2014).
39. K. Polovnikov, S. Belan, M. Imakaev, H. B. Brandao, and L. A. Mirny, *bioRxiv preprint* <https://doi.org/10.1101/2022.02.01.478588>; <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.02.01.478588v1.full.pdf>.
40. E. M. Darrow, M. H. Huntley, O. Dudchenko et al. (Collaboration), *Proceedings of the National Academy of Sciences* **113**(31), E4504-E4512 (2016).
41. P. Olivares-Chauvet, Z. Mukamel, A. Lifshitz et al. (Collaboration), *Nature* **540**(7632), 296 (2016).
42. R. A. Beagrie, A. Scialdone, M. Schueler et al. (Collaboration), *Nature* **543**(7646), 519 (2017).
43. B. Bintu, L. J. Mateo, J. H. Su et al. (Collaboration), *Science* **362**(6413), eaau1783 (2018).
44. S. A. Quinodoz, N. Ollikainen, B. Tabak et al. (Collaboration), *Cell* **174**(3), 744 (2018).
45. A. M. Oudelaar, J. O. Davies, L. L. Hanssen et al. (Collaboration), *Nat. Genet.* **50**(12), 1744 (2018).

46. A. Allahyar, C. Vermeulen, B.A. Bouwman et al. (Collaboration), *Nat. Genet.* **50**(8), 1151 (2018).
47. N. Ulahannan, M. Pendleton, A. Deshpande et al. (Collaboration), *bioRxiv* 833590 (2019).
48. C. Vermeulen, A. Allahyar, B.A. Bouwman et al. (Collaboration), *Nat. Protoc.* **15**(2), 364 (2020).
49. A. Goloborodko, J. F. Marko, and L. A. Mirny, *Biophys. J.* **110**(10), 2162 (2016).
50. P. G. De Gennes, *Scaling concepts in polymer physics*, Cornell university press, Ithaca and London (1979).
51. A. Y. Grosberg and A. Khokhlov, *Statistical Physics of Macromolecules*, AIP press, Woodbury, NY (1994).
52. D. Starkov, V. Parfenyev, and S. Belan, *J. Chem. Phys.* **154**(16), 164106 (2021).
53. L. Liu, B. Zhang, and C. Hyeon, *PLoS Comput. Biol.* **17**(12), e1009669 (2021).
54. L. Liu, M. H. Kim, and C. Hyeon, *Biophys. J.* **117**(3), 613 (2019).
55. L. Liu and C. Hyeon, *Nucleic. Acids. Res.* **48**(20), 11486 (2020).
56. J. H. Bak, M. H. Kim, L. Liu, and C. Hyeon, *Comput. Biol.* **17**(3), e1008834 (2021).
57. K. E. Polovnikov, S. Nechaev, and M. V. Tamm, *Phys. Rev. E* **99**(3), 032501 (2019).

Содержание
Том 115, выпуск 11
Поля, частицы, ядра

Nikolaev N.N. Spin of protons in NICA and PTR storage rings as an axion antenna 683

Оптика, лазерная физика

Баженов А.Ю., Никитина М.М., Алоджанц А.П. Сверхизлучательный фазовый переход в микроструктурах с комплексной сетевой архитектурой 685

Ширяев А.А., Екимов Е.А., Прокофьев В.Ю., Кондрин М.В. Температурная зависимость Фано-резонанса в ультрамелких наноалмазах, синтезированных при высоком давлении 692

Ризаев Г.Э., Мокроусова Д.В., Пушкарев Д.В., Шипило Д.Е., Николаева И.А., Панов Н.А., Селезнев Л.В., Косарева О.Г., Ионин А.А. Нарушение осевой симметрии терагерцового излучения из плазмы одноцветного филамента 699

Макаров Г.Н. О возможности эффективной изотопно-селективной ИК диссоциации колебательно-возбужденных бихроматическим лазерным излучением молекул $^{235}\text{UF}_6$ 703

Плазма, гидро- и газодинамика

Тарасенко В.Ф., Бакшт Е.Х., Виноградов Н.П., Козырев А.В., Коковин А.С., Кожевников В.Ю. О механизме генерации импульсов Тричела в воздухе атмосферного давления 710

Конденсированное состояние

Демишев С.В., Самарин А.Н., Карасев М.С., Григорьев С.В., Семенов А.В. Спиновые флуктуации и спин-флуктуационный переход в магнитоупорядоченной фазе моносилцида марганца 717

Мартынов С.Н. Основное состояние орбитально упорядоченного ферромагнетика PbMnVO_4 ... 724

Вейнгер А.И., Забродский А.Г., Лахдеранта Э., Семенихин П.В. Обнаружение ферромагнитных свойств Si:P в области фазового перехода изолятор-металл 730

Дискуссия

Демокритов С.О. Комментарий к статье “Бозе конденсация и спиновая сверхтекучесть магнонов в перпендикулярно намагниченной пленке железо-иттриевого граната” (Письма в ЖЭТФ 112(5), 314 (2020)) 736

Буньков Ю.М. Ответ на комментарий к статье “Бозе-конденсация и спиновая сверхтекучесть магнонов в перпендикулярно намагниченной пленке железо-иттриевого граната” (Письма в ЖЭТФ 112(5), 314 (2020)) 740

Содержание
Том 115, выпуск 12
Поля, частицы, ядра

Богомолов Ю.В., Алексеев В.В., Леванова О.А., Майоров А.Г., Малахов В.В., Язынин С.Г. Модификация регуляризационного SVD-метода обратной свертки 745

Катаев А.Л., Молокоедов В.С. Заметки о влиянии КХД и электрослабых поправок на соотношение между полюсными и бегущими массами топ-кварка 753

Оптика, лазерная физика

Сергеева Д.Ю., Тищенко А.А. Всегда ли существует форм-фактор в излучении Смита–Парселла? 762

Миннегалиев М.М., Герасимов К.И., Сабиров Т.Н., Урманчиев Р.В., Моисеев С.А. Реализация протокола оптической квантовой памяти в кристалле $^{167}\text{Er}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$ 769

Конденсированное состояние

Анкудинов В.Е., Галенко П.К. Рост двумерных гексагональных решеток в модели кристаллического фазового поля 778

Максимовская А.А., Ружицкий В.И., Кленов Н.В., Бакурский С.В., Куприянов М.Ю., Соловьев И.И. Фазовая логика на основе джозефсоновских π -контактов 786

Морозова М.А., Лобанов Н.Д., Матвеев О.В., Никитов С.А. Механизм формирования заперченных зон спиновых волн в связанных магнитных кристаллах 793

Абдуллаев Н.А., Амирасланов И.Р., Алиев З.С., Джахангирли З.А., Складнева И.Ю., Ализаде Е.Г., Алиева Е.Н., Отроков М.М., Зверев В.Н., Мамедов Н.Т., Чулков Е.В. Динамика решетки Bi_2Te_3 и колебательные моды в рамановском рассеянии топологических изоляторов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ 801

Методы теоретической физики

Atalikhov K., Zotov A. Higher rank 1 + 1 integrable Landau–Lifshitz field theories from associative Yang–Baxter equation 809

Биофизика

Белан С.А., Старков Д.Е. Влияние активного выпетливания на статистику тройных контактов в модели интерфейсных хромосом 811