РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ПИСЬМА В ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 112

Выпуск 5

10 сентября 2020

Журнал издается под руководством Отделения физических наук РАН

Адрес редакции	119334 Москва, ул. Косыгина 2
тел./факс	(499)-137-75-89
e-mail	letters@kapitza.ras.ru
Web-страница	http://www.jetpletters.ac.ru

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

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 291 – 296

О вычислении специальной геометрии для Калаби–Яу типа “петля” и двух конструкциях зеркального многообразия

А. А. Артемьев[+*1)], *И. В. Кочергин*[+*1)]

[+]*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, 141701 Черноголовка, Россия*

[*] *Московский физико-технический институт, 142432 Долгопрудный, Россия*

Поступила в редакцию 12 августа 2020 г.
После переработки 12 августа 2020 г.
Принята к публикации 12 августа 2020 г.

Вычислены кэлеровы потенциалы на пространстве модулей комплексных структур для двух многообразий Калаби–Яу, заданных как гиперповерхности во взвешенных проективных пространствах. Найдены зеркальные образы этих многообразий в соответствии с конструкциями Батырева и Берглунда–Хубша, показана их эквивалентность.

DOI: 10.31857/S1234567820170012

Компактификация теории суперструн является одним из возможных способов объединить Стандартную модель и квантовую гравитацию. Известно, что в этом подходе из феноменологических соображений требуется компактификация 6 дополнительных измерений на многообразие Калаби–Яу; низкоэнергетическая теория тогда определяется его специальной кэлеровой геометрией [1]. Важным инструментом в задаче о ее вычислении является гипотеза о существовании зеркальной симметрии: она позволяет провести непрямое вычисление потенциала на пространстве кэлеровых модулей, для которого не существует явных формул. Зеркальным семейством Калаби–Яу к данному называют такое, у которого пространство модулей комплексных структур совпадает с пространством кэлеровых модулей исходного и наоборот.

Доступным для изучения классом многообразий Калаби–Яу являются гиперповерхности во взвешенных проективных пространствах; классификация таких Калаби–Яу приведена в [2]. Для примеров из этого класса уже было получено много результатов (см., например, работы [3–5]). Наша работа имеет целью продолжение исследований в этом направлении; мы вычисляем специальную геометрию для двух примеров из не рассматриваемого ранее типа “петля” (типа 16 согласно классификации [2]), а также строим для этих примеров зеркальные семейства двумя способами и показываем их эквивалентность.

Приведем краткое описание метода вычисления кэлерова потенциала на пространстве модулей комплексных структур Калаби–Яу, заданного нулями многочлена во взвешенном проективном пространстве, развитый в серии работ Алешкина, Белавина, начиная с [6].

Рассматривается взвешенное проективное пространство $\mathbb{P}_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}$ – фактор $\mathbb{C}^5/\{0\}$ по действию $\mathbb{C}^*$, определенному как

$$\mathbb{C}^5 \ni (x_1,x_2,x_3,x_4,x_5) \xrightarrow{\lambda\in\mathbb{C}^*} \\ \xrightarrow{\lambda\in\mathbb{C}^*} (\lambda^{k_1}x_1,\lambda^{k_2}x_2,\lambda^{k_3}x_3,\lambda^{k_4}x_4,\lambda^{k_5}x_5). \quad (1)$$

Нас интересует гиперповерхность, заданная в нем нулями некоторого невырожденного полинома

$$0 = W_0(x) = \sum_{a=1}^{5}\prod_{i=1}^{5} x_i^{M_{ai}} \quad (2)$$

с условиями $\sum\limits_i k_i M_{ai} = d = \sum\limits_i k_i\ \forall a$. Первое равенство – условие квазиоднородности; второе условие необходимо, чтобы заданная поверхность была многообразием Калаби–Яу. Известно, что деформациям комплексной структуры этого многообразия отвечает добавление к W_0 линейной комбинации мономов той же степени квазиоднородности d:

$$W(x,\phi) = W_0(x) + \sum_{i=1}^{h}\phi_i e_i(x). \quad (3)$$

Нужно исключить из множества всех таких мономов те, которые могут быть сгенерированы заменой координат в исходном полиноме, т.е. мономы, пропорциональные элементам из $\langle \frac{\partial W_0}{\partial x_i}\rangle$. В большинстве случаев мономиальными деформациями пространство моду-

1)e-mail: artemev.aa@phystech.edu; kochergin.iv@phystech.edu

лей комплексных структур (локально) исчерпывается (это всегда так для многообразий, заданных полиномом типа петля).

Определим группу "квантовых симметрий" $\mathcal{Q} = \mathbb{Z}_d$ полинома W_0. Ее действие на проективные координаты совпадает с указанным в (1) действием $\mathbb{C}^*$ для параметра $\lambda : \lambda^d = 1$. Тогда рассмотрим так называемое "киральное кольцо" полиномов:

$$R^{\mathcal{Q}} = \frac{\mathbb{C}[x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]^{\mathcal{Q}}}{\langle \partial W_0/\partial x_i \rangle}. \tag{4}$$

Базис в нем задают мономы E_μ, инвариантные под действием "квантовых симметрий" (т.е. степени, кратной d). Это кольцо – конечномерное линейное пространство: после фактора по $\langle \partial W_0/\partial x_i \rangle$ степени квазиоднородности его базисных элементов не больше $3d$. По степеням естественно ввести градуировку: $R^{\mathcal{Q}} = R^0 \oplus R^d \oplus R^{2d} \oplus R^{3d}$; тогда размерности компонент фиксированной градуировки равны $\dim R^{0,d,2d,3d} = (1, h, h, 1)$. Введем также спаривание η (билинейный функционал) на этом кольце, матрица которого в базисе E_μ, $\mu = 1, \ldots, 2h+2$

$$\eta(e_\mu, e_\nu) \equiv \eta_{\mu\nu} = \mathrm{Res}\, \frac{E_\mu E_\nu}{\prod\limits_{i=1}^{5} \partial_i W_0}. \tag{5}$$

В $\mathbb{C}^5$ можно определить $\mathcal{Q}$-инвариантные когомологии $(H_{D\pm})_{\mathcal{Q}}$ оператора $D_\pm = d \pm dW_0 \wedge$. Тогда группа $(H^5_{D\pm})_{\mathcal{Q}}$ изоморфна R^Q как линейное пространство; базис в ней – формы вида $E_\mu(x)\, d^5x$. К ним определяются дуальные гомологии $H_5(\mathbb{C}^5, \mathrm{Re}\, W_0 \to \pm\infty)_{\mathcal{Q}}$, такие, что невырождено спаривание с помощью "осциллирующих интегралов": для $L_a^\pm \in H_5(\mathbb{C}^5, \mathrm{Re}\, W_0 \to \pm\infty)$ оно задается формулой

$$\langle E_\mu d^5x,\, L_a^\pm \rangle = \int\limits_{L_a^\pm} E_\mu e^{\mp W_0(x)}\, d^5x. \tag{6}$$

Между $H_5(\mathbb{C}^5, \mathrm{Re}\, W_0 \to \pm\infty)_{\mathcal{Q}}$ и $H_3(X, \mathbb{R})$, где X – многообразие Калаби–Яу, заданное нулями полинома $W(x, \phi)$, можно построить изоморфизм. Используя его свойства и заданные ранее определения, интересующий нас кэлеров потенциал записывается в удобном для вычислений виде

$$e^{-K_c(X)} = \sigma_\mu^+ \eta_{\mu\lambda} \mathcal{M}_{\lambda\nu} \overline{\sigma_\nu^-}; \tag{7}$$

$$\sigma_\mu^\pm = \int\limits_{\Gamma_\mu^\pm} e^{\mp W(x,\phi)},\ \mathcal{M} = T^{-1}\overline{T},\ T_{a\mu}^\pm = \int\limits_{L_a^\pm} e_\mu e^{\mp W_0}\, d^5x; \tag{8}$$

$$\Gamma_\mu^\pm :\ \int\limits_{\Gamma_\mu^\pm} e^{\mp W_0(x)} e_\nu\, d^5x = \delta_{\mu\nu}. \tag{9}$$

Важно, что циклы $L_a^\pm$ нужно брать вещественными; матрица $\mathcal{M}$ не зависит от их выбора. Перейдем к рассмотрению исследуемых примеров. Рассмотрим взвешенное проективное пространство $\mathbb{P}_{9,26,11,23,20}$ и полином

$$0 = W_0 = x_1^7 x_2 + x_2^3 x_3 + x_3^6 x_4 + x_4^3 x_5 + x_5^4 x_1,$$
$$M = \begin{pmatrix} 7 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Его степень квазиоднородности $d = 89$. Пространство модулей его комплексных структур определяется мономиальными деформациями, удовлетворяющими описанным ранее условиям. Таких мономов всего $h = 7$ и их показатели степеней удобно записать в матрицу S

$$e_l = \prod_{j=1}^{5} x_j^{S_{lj}},\ S = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 2 & 0 & 2 \\ 4 & 0 & 3 & 0 & 1 \\ 5 & 0 & 4 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

В киральном кольце образуют базис $E_1 = 1$, h мономов $E_{l+1} \equiv e_l$ степени d, а также следующие мономы степеней $2d$ и $3d$ (всего $2h + 2 = 16$ мономов E_α):

$$E_{h+1+i} = (e_1^2,\, e_1e_2,\, e_1e_4,\, e_1e_5,\, e_1e_6,\, e_1e_7,\, e_4^2);$$
$$E_{16} = e_1e_2e_7. \tag{12}$$

Можно найти матрицу спаривания η, как в (5); в нашем базисе с точностью до перестановок базисных элементов она единичная антидиагональная.

Рассмотрим в $\mathbb{C}_5$ относительные гомологии $H_5(\mathbb{C}_5,\ \mathrm{Re}\ (W_0) \to \infty)_Q$. Выберем в них базис Γ_μ, дуальный к формам $E_\alpha(x)\, d^5x$ относительно осциллирующих интегралов, согласно (9). Из (8) кэлеров потенциал выражается через величины

$$\sigma_\beta^+(\phi) = \int\limits_{\Gamma_\beta} e^{-W(x,\phi)} = \sum_{m_1, m_2, \ldots, m_h = 0}^{\infty} (-1)^{\sum m_l} \times$$
$$\times \prod_{l=1}^{h} \frac{\phi_l^{m_l}}{m_l!} \int\limits_{\Gamma_\beta} d^5x \prod_{l=1}^{h} e_l^{m_l} e^{-W_0(x)} \tag{13}$$

и аналогичные ряды с другими знаками. Можно эффективно понижать степень подынтегрального выражения, пользуясь тем, что для любой 4-формы Ω

$$\int_{\Gamma_\mu} e^{-W_0}\,(d\Omega - dW_0\wedge\Omega) = \int_{\Gamma_\mu} d(\Omega e^{-W_0}) = 0. \quad (14)$$

Используя эти соотношения, можно получить пять элементарных соотношений для понижения степеней. Обозначая

$$f_\beta(\mathbf{b}\equiv(b_1,b_2,b_3,b_4,b_5)) = \int_{\Gamma_\beta} d^5x\, e^{-W_0} x_1^{b_1}\ldots x_5^{b_5},$$

а также i строку матрицы M как $M_{i\bullet}$, эти пять соотношений можно компактно записать в виде

$$f_\beta(\mathbf{b}) = f_\beta(\mathbf{b}-M_{i\bullet})\cdot B_i(\mathbf{b}),\ i=1,\ldots,5 \quad (15)$$

$$B_i = b_j(M^{-1})_{ji} - \frac{A_i}{17};\ B = \mathbf{b}\cdot(M^{-1}) - \frac{\mathbf{A}}{17}, \qquad \mathbf{A} = (15,12,15,12,14). \quad (16)$$

Если мы имеем произведение мономов вида $\prod_{l=1}^{h} e_l^{m_l}$, то соответствующая ему строка показателей степеней x

$$\mathbf{b}[\mathbf{m}\equiv(m_1,\ldots,m_7)] = \mathbf{m}\cdot S. \quad (17)$$

Соответствующие такому $\mathbf{b}$ коэффициенты B

$$B(\mathbf{b}[\mathbf{m}]) = \mathbf{m}\cdot(SM^{-1}) - \frac{\mathbf{A}}{17}. \quad (18)$$

Для дальнейшего введем обозначения для элементов строки B как функций от набора целых чисел $\mathbf{m}$; в данном случае она имеет вид

$$B(\mathbf{b}[\mathbf{m}]) \equiv \frac{1}{17}\begin{pmatrix}\nu & \rho & \nu & \rho & \mu\end{pmatrix}(\mathbf{m}). \quad (19)$$

Теперь мы хотим переписать общие соотношения (15) так, чтобы они позволили понижать числа m в произведениях такого типа. Такие соотношения приходится искать подбором; они приведены ниже:

$$f_\beta\,(\mathbf{b}[\mathbf{m}]) = \frac{\mu(\mathbf{m})}{17} f_\beta(\mathbf{b}[\mathbf{m}+F_{j\bullet}]) = = \begin{cases} \frac{\nu^2(\mathbf{m})}{17^2} f_\beta(\mathbf{b}[\mathbf{m}+F_{6\bullet}]) \\ \frac{\rho^2(\mathbf{m})}{17^2} f_\beta(\mathbf{b}[\mathbf{m}+F_{7\bullet}]) \end{cases},\ j=1,\ldots,5, \quad (20)$$

$$F = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Редукция по первым 5 формулам понижает μ на 17, а другие два числа (ν и ρ) не меняет; аналогичное верно для других двух способов понижения степени. Таким образом, остаток по модулю 17 у всех трех чисел не меняется в результате такого понижения. Любое из чисел $\mathfrak{m}=\mu \bmod 17$, $\mathfrak{n}=\nu \bmod 17$, $\mathfrak{r}=\rho \bmod 17$ однозначно определяет моном из кирального кольца, к которому мы придем в конце процедуры; можно перенумеровать мономы, например, числом $\beta=\mathfrak{m}\in[1,16]$, тогда $\mathfrak{n}[\beta]=\frac{2\mathfrak{m}}{3}$; $\mathfrak{r}[\beta]=\frac{5\mathfrak{m}}{3}$. Итак, мы приходим к выражению

$$\sigma^+_\beta(\phi) = \sum_{\substack{m_1,\ldots,m_h=0\\ \mathfrak{m}(\mathbf{m})=\beta}}^{\infty} (-1)^{\sum m_l}\left(\prod_l \frac{\phi_l^{m_l}}{m_l!}\right)\times \times \frac{\Gamma(\frac{\mu(\mathbf{m})}{17}+1)}{\Gamma(\frac{\mathfrak{m}(\mathbf{m})}{17})}\frac{\Gamma^2(\frac{\nu(\mathbf{m})}{17}+1)}{\Gamma^2(\frac{\mathfrak{n}(\mathbf{m})}{17})}\frac{\Gamma^2(\frac{\rho(\mathbf{m})}{17}+1)}{\Gamma^2(\frac{\mathfrak{r}(\mathbf{m})}{17})}. \quad (22)$$

Как можно проверить, σ^-_β отличаются фактором $(-1)^{|\beta|}$, где $|\beta|$ – градуировка соответствующего монома в киральном кольце ($|\beta|=0,1,2,3$). Теперь мы должны выбрать базис из вещественных циклов L_a и вычислить матрицу перехода T от Γ к L; из дуальности Γ и E следует, что она дается выражением

$$T_{a\beta} = \int_{L_a} E_\beta\, e^{-W_0} d^5x. \quad (23)$$

Сделаем сперва замену переменных

$$x_i = \prod_{j=1}^{5} y_j^{17(M^{-1})_{ij}}, \quad (24)$$

при которой W_0 перейдет в $W_0(x(y))=\sum y_i^{17}$, а все мономы $E_\alpha(x)$ – в мономы по y с целыми степенями.

Определим одномерный цикл в виде "уголка" условиями (с произвольно заданной ориентацией)

$$C[y,\varphi] = \{\mathrm{Arg}\ y=\varphi \text{ or } \mathrm{Arg}\ y=\varphi+\frac{2\pi}{17}\}. \quad (25)$$

Тогда набор из 16 базисных циклов L_a можно выбрать в виде циклов Лефшеца

$$L_a = C[y_1,\frac{2\pi a}{17}]\times\prod_{i=2}^{5} C[y_i,0],\ a=1,\ldots,16. \quad (26)$$

Очевидно, что они удовлетворяют условию $\mathrm{Re}\ W_0\to \to\infty$, $y\to\infty$. Теперь можно вычислить матрицу T для таких циклов, матрицу $\mathcal{M}=T^{-1}\overline{T}$ и, наконец, матрицу $(\eta\mathcal{M})$ – она оказывается диагональной:

$$(\eta\mathcal{M})_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}\cdot\gamma(\mathfrak{m}[\mu]/17)\gamma^2(\mathfrak{n}[\mu]/17)\gamma^2(\mathfrak{r}[\mu]/17),$$

$$\gamma(x) = \frac{\Gamma(x)}{\Gamma(1-x)}. \tag{27}$$

Мы получаем итоговый ответ (здесь σ_β заданы формулой (22))

$$e^{-K_c(\phi)} = \\ = \sum_{\mu=1}^{16} (-1)^{|\mu|} \gamma\left(\frac{\mu}{17}\right) \gamma^2\left(\frac{\mathfrak{n}[\mu]}{17}\right) \gamma^2\left(\frac{\mathfrak{r}[\mu]}{17}\right) \cdot |\sigma_\mu(\phi)|^2. \tag{28}$$

Второй пример многообразия того же типа задан взвешенным проективным пространством $\mathbb{P}_{25,16,31,36,83}$ и уравнением

$$0 = W_0(x) = x_1^7 x_2 + x_2^{10} x_3 + x_3^5 x_4 + x_4^3 x_5 + x_5^2 x_1 = 0,$$

$$M = \begin{pmatrix} 7 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{29}$$

В тех же обозначениях, что для первого примера, соответствующие ему данные: $d = 191, h = 4$,

$$e_l = \prod_{j=1}^{5} x_j^{S_{lj}},\ S = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & 5 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{30}$$

Базис в киральном кольце

$$E_\alpha = \left(1, e_1, e_2, e_3, e_1e_3, e_4, e_1e_4, \frac{e_1e_3e_4}{e_2}, e_3e_4, e_1e_3e_4\right). \tag{31}$$

Элементы вектор-строки появляющихся при понижении коэффициентов мы обозначим как

$$B(\mathbf{b}[\mathbf{m}]) = \mathbf{m}\cdot(SM^{-1}) - \frac{\mathbf{A}}{11} \equiv \frac{1}{11}\begin{pmatrix}\mu & \mu & \nu & \lambda & \kappa\end{pmatrix}(\mathbf{m}),$$

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m_3 & m_4 \end{pmatrix},\ \mathbf{A} = (10, 10, 9, 8, 7). \tag{32}$$

4 соотношения для понижения степеней в терминах чисел m имеют вид

$$f_\alpha(\mathbf{b}[\mathbf{m}]) = \frac{\mu^2(\mathbf{m})}{11^2} f_\alpha(\mathbf{b}[\mathbf{m} + F_{1\bullet}]) = \\ = \begin{cases} \frac{\nu(\mathbf{m})}{11} f_\alpha(\mathbf{b}[\mathbf{m} + F_{2\bullet}]) \\ \frac{\lambda(\mathbf{m})}{11} f_\alpha(\mathbf{b}[\mathbf{m} + F_{3\bullet}]) \\ \frac{\kappa(\mathbf{m})}{11} f_\alpha(\mathbf{b}[\mathbf{m} + F_{4\bullet}]) \end{cases} \tag{33}$$

$$F = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -2 \\ 0 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Мономы из кирального кольца теперь однозначно задаются любым из чисел

$$\mathfrak{m}(m) = \mu(\mathbf{m}) \mod 11,\ \mathfrak{n}(\mathbf{m}) = \nu(\mathbf{m}) \mod 11, \\ \mathfrak{l}(\mathbf{m}) = \lambda(\mathbf{m}) \mod 11,\ \mathfrak{k}(\mathbf{m}) = \kappa(\mathbf{m}) \mod 11. \tag{35}$$

Занумеровав их, например, числом $\mathfrak{m} = \alpha$, получаем формулу для периодов

$$\sigma_\alpha^+ = \sum_{\substack{m_1,\ldots,m_h=0 \\ \mathfrak{m}(\mathbf{m})=\alpha}}^{\infty} (-1)^{\sum m_a} \left(\prod_a \frac{\phi_a^{m_a}}{m_a!}\right) \frac{\Gamma^2\left(\frac{\mu(\mathbf{m})}{11}+1\right)}{\Gamma^2\left(\frac{\mathfrak{m}(\mathbf{m})}{11}\right)} \times \\ \times \frac{\Gamma\left(\frac{\nu(\mathbf{m})}{11}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{n}(\mathbf{m})}{11}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{\lambda(\mathbf{m})}{11}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{l}(\mathbf{m})}{11}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{\kappa(\mathbf{m})}{11}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{k}(\mathbf{m})}{11}\right)}. \tag{36}$$

Для нахождения матрицы $\mathcal{M}$ мы делаем аналогичную (24) замену $x_i = \prod y_j^{11(M^{-1})_{ij}}$; она обладает теми же свойствами, что раньше. Базис из циклов L_a выбирается аналогичным (25) образом, только теперь C – "угол" раствора $\frac{2\pi}{11}$. Вычислив матрицу $\mathcal{M}$, получаем ответ для кэлерова потенциала

$$e^{-K_c(\phi)} = \sum_{\beta=1}^{10} (-1)^{|\beta|} \gamma^2\left(\frac{\beta}{11}\right) \times \\ \times \gamma\left(\frac{\mathfrak{n}[\beta]}{11}\right) \gamma\left(\frac{\mathfrak{l}[\beta]}{11}\right) \gamma\left(\frac{\mathfrak{k}[\beta]}{11}\right) |\sigma_\beta|^2. \tag{37}$$

Для дальнейшего опишем две конструкции построения зеркального многообразия для Калаби–Яу-гиперповерхностей во взвешенном проективном пространстве.

Первая из них приведена в [2]. Она описывает зеркальное семейство как орбифолд в другом взвешенном проективном пространстве. Имея 5×5 матрицу коэффициентов M, для построения зеркального многообразия нужно:

1. построить полином W' с матрицей показателей $M' = M^T$;
2. найти набор весов k'_i таких, что полином W' квазиоднороден по отношению к ним со степенью $d' = \sum k'_i$; они задают новое взвешенное проективное пространство;
3. определить многообразие X', заданное как гиперповерхность в этом проективном пространстве нулями W';
4. найти полную группу фазовых симметрий A полинома W' и группу его "геометрических

симметрий" G' как фактор A по группе $\mathcal{Q}' = \mathbb{Z}_{d'}$ "квантовых" симметрий полинома W': $G' = A/\mathcal{Q}'$, аналогично определить группу геометрических симметрий G полинома W;

5. при несовпадении G' и $\mathcal{Q}$ взять орбифолд многообразия X' по некоторой дискретной группе H так, чтобы для фактор-многообразия выполнялось $\mathcal{Q}'' = \mathcal{Q}' \times H = G$ и $G'' = G'/H = \mathcal{Q}$.

Вторая – конструкция Батырева – описывает зеркальное многообразие как подмногообразие в торическом, заданное критическими точками некоторого полинома. Она описана и использована, например, в [4]. Торическим называют многообразие вида $(\mathbb{C}^N - Z)/(\mathbb{C}^*)^h$, где действие $(\mathbb{C}^*)^h$ на проективные координаты y_a, $a = 1, \ldots, N$ определяется "матрицей зарядов" Q:

$$y_a \to \prod_{l=1}^{h} \lambda_l^{Q_{la}} y_a, \quad \lambda_l \in \mathbb{C}^*, \tag{38}$$

а Z является инвариантным относительно этого действия множеством. Набор весов Q_{la} в нашем случае определяется следующим образом: показатели степеней входящих в состав полинома мономов вместе с его деформациями задают набор из $h+5$ пятимерных векторов v_a; их координаты задаются матрицей

$$v_{ia} = \left(M^T | S^T\right), \; i = 1, \ldots, 5, \; a = 1, \ldots, h+5. \tag{39}$$

Тогда матрица Q определяется при поиске интегрального базиса из h целочисленных линейных соотношений на эти вектора вида $\sum_{a=1}^{h+5} Q_{la} v_{ia} = 0$. Соотношения задают интегральный базис, если любое целочисленное соотношение на v может быть представлено суммой с целыми коэффициентами соотношений $Q_{l\bullet}$.

В следующей части мы покажем соответствие этих двух конструкций явным построением для наших примеров полиномов, задающих подмногообразие в торическом. Сначала приведем ответ, дающийся конструкцией Берглунда–Хубша; в обоих случаях, как легко проверить, орбифолда брать не нужно и зеркальное многообразие определяется как (для 1 и 2 примеров соответственно)

$$\begin{aligned} 1: &\; \mathbb{P}_{5,2,3,5,2}, \; 0 = V_0 = y_1^3 y_2 + \\ &+ y_2^7 y_3 + y_3^4 y_4 + y_4^3 y_5 + y_5^6 y_1, \; d_M = 17; \end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned} 2: &\; \mathbb{P}_{1,1,2,3,4}, \; 0 = V_0 = y_5 y_1^7 + \\ &+ y_1 y_2^{10} + y_2 y_3^5 + y_3 y_4^3 + y_4 y_5^2, \; d_M = 11. \end{aligned} \tag{41}$$

Выпишем интегральный базис целочисленных соотношений Q для двух наших примеров:

$$1: \; Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$2: \; Q = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{42}$$

Полином, определяющий своими критическими точками подмногообразие в торическом, должен быть инвариантным при действии $(\mathbb{C}^*)^h$, т.е. быть линейной комбинацией мономов $U(y) = \sum f_j(y)$ таких, что

$$f_j = \prod_{a=1}^{h+5} y_a^{P_{aj}}, \; \sum_{a=1}^{h+5} Q_{la} P_{aj} = 0 \;\; \forall j, l. \tag{43}$$

Выберем 5 таких мономов так, чтобы P_{aj} для $a = 1, \ldots, 5$ совпадали с элементами матрицы M_{aj}. Тогда из условия (43) однозначно восстанавливается P_{aj} для $a = 6, \ldots, h+5$ из решения системы линейных уравнений. Из построения матрицы Q следует, что в обоих случаях $P_{aj} = S_{a-5,j}$, $a = 6, \ldots, h+5$. Рассмотрим теперь симметрии торического многообразия с генераторами (для 1 и 2 примеров соответственно)

$$\begin{aligned} &1: \; \mathfrak{Q} = 5Q_1 - 7Q_2 + Q_3 - 2Q_4 - 2Q_6 - 5Q_7; \\ &2: \; \mathfrak{Q} = Q_1 + 2Q_2 + 3Q_3 + 4Q_4. \end{aligned} \tag{44}$$

Эта симметрия тривиально действует на проективные координаты y_a для $a > 6$, а ее действие на первые 5 совпадает с действием $\mathbb{C}^*$ на проективные координаты в соответствующем взвешенном проективном пространстве; скажем, в 1 примере

$$\begin{aligned} \mathfrak{Q}: &\left(y_1 \quad y_2 \quad y_3 \quad y_4 \quad y_5 \quad y_6\right) \to \\ \to &\left(y_1\lambda^2 \quad y_2\lambda^5 \quad y_3\lambda^2 \quad y_4\lambda^5 \quad y_5\lambda^3 \quad y_6\lambda^{-17}\right). \end{aligned} \tag{45}$$

Используя остальные $h-1$ независимых симметрий, можно тривиализовать зависимость от $h-1$ переменной y_a, $a > 6$, обратив их в единицу. После этого для обоих примеров полином $U(y)$ приобретает вид

$$U(y) = y_6 V_0(y_1, \ldots, y_5). \tag{46}$$

Его критические точки определяются условиями $V_0 = 0$ и $y_6 = 0$ (в силу невырожденности W_0). Второе условие, с учетом действия $\mathfrak{Q}$-симметрии, определяет взвешенное проективное пространство, совпадающее с полученным из конструкции Берглунда–Хубша, а первое – нужную гиперповерхность в нем. Мы показали, что конструкции согласованы только в одной точке пространства модулей; но таким же образом можно убедиться, что все семейство с различными комплексными структурами, заданное полиномом с деформациями $V(\psi) = V_0 + \sum \psi_k e_k$, "вкладывается" в торическое многообразие по Батыреву.

Таким образом, основным результатом данной работы является вычисление кэлерова потенциала на пространстве комплексных модулей для двух семейств Калаби–Яу-гиперповерхностей во взвешенном проективном пространстве из не рассматриваемого ранее типа; также построены и описаны двумя способами зеркальные к ним семейства и показана эквивалентность этих двух способов. Полученные нами выражения имеют простую структуру, до определенной степени унифицируемы и позволяют предположить общий вид ответа. Более подробное исследование этого вопроса вместе с проверкой зеркальной версии JKLMR-гипотезы (см. [7]) с использованием полученных результатов мы оставляем для дальнейшей работы.

Мы благодарны А. Белавину и М. Белаковскому за полезные обсуждения.

Работа была проведена при поддержке гранта Российского научного фонда # 18-12-00439.

1. P. Candelas, G. T. Horowitz, A. Strominger, and E. Witten, Nucl. Phys. B **258**, 46 (1985); DOI: https://doi.org/10.1016/0550-3213(85)90602-9.
2. P. Berglund and T. Hübsch, Nucl. Phys. B **393**, 393(1–2), 377 (1993); DOI: 10.1016/0550-3213(93)90250-s; arXiv: hep-th/9201014 [hep-th].
3. K. Aleshkin and A. Belavin, JETP Lett. **108**(10), 705 (2018); DOI: 10.1134/s0021364018220010; aXiv: 1806.02772 [hep-th].
4. K. Aleshkin, A. Belavin, and A. Litvinov, J. Stat. Mech.: Theory Exp. **2019**(3), 034003 (2019); DOI: 10.1088/1742-5468/ab081a; arXiv: 1812.00478 [hep-th].
5. A. A. Belavin and B. A. Eremin, Theor. Math. Phys. **201**(2), 1606 (2019); DOI: 10.1134/s0040577919110060; arXiv: 1907.11102 [hep-th].
6. K. Aleshkin and A. Belavin, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **51**(5), 055403 (2018); DOI: 10.1088/1751-8121/aa9e7a; arXiv: 1706.05342 [hep-th].
7. H. Jockers, V. Kumar, J. M. Lapan, D. R. Morrison, and M. Romo, Commun. Math. Phys. **325**, 1139 (2014); DOI: 10.1007/s00220-013-1874-z; arXiv: 1208.6244.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 297 – 302 © 2020 г. 10 сентября

Генерация оптико-терагерцовых бифотонов и особенности детектирования терагерцовой части излучения при частотно-невырожденном параметрическом рассеянии света

В. Д. Султанов, К. А. Кузнецов, А. А. Леонтьев[1)], *Г. Х. Китаева*

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

Поступила в редакцию 13 июля 2020 г.
После переработки 7 августа 2020 г.
Принята к публикации 8 августа 2020 г.

Исследованы условия генерации и детектирования квантово-коррелированных пар фотонов оптических и терагерцовых частот в процессе параметрического рассеяния света, сильно невырожденного по частоте. Предложен подход, основанный на увеличении частоты оптической накачки, который позволяет с помощью одного терагерцового детектора с ограниченным динамическим диапазоном регистрировать мощность слабых потоков холостых фотонов терагерцовой частоты в широком диапазоне изменения коэффициента параметрического усиления, вплоть до достижения режима спонтанного рассеяния. При удвоении частоты импульсной лазерной накачки экспериментально продемонстрировано уменьшение в 5 раз минимального значения параметрического коэффициента усиления, при котором еще возможна регистрация терагерцовых фотонов охлаждаемым болометром на горячих электронах.

DOI: 10.31857/S1234567820170024

В последнее время все больше внимания уделяется исследованиям в терагерцовой области частот [1–3]. Одним из самых актуальных и мало изученных направлений является генерация квантово-коррелированных оптико-терагерцовых бифотонов. Квантово-коррелированные пары фотонов, генерируемые при спонтанном параметрическом рассеянии (ПР) лазерной накачки в нелинейных кристаллах, в настоящее время активно используются в схемах квантовой информации [4], фотометрии [5] и сенсорики [6–8]. Подавляющее большинство приложений используют бифотоны оптических частот, однако в последнее время растет интерес и к генерации квантово-коррелированных состояний в других диапазонах, от рентгеновского [9] до терагерцового [10]. В оптико-терагерцовой бифотонной паре оптический фотон, имеющий большую частоту, принято называть сигнальным, а терагерцовый фотон с существенно меньшей частотой – холостым. Развиваются спектроскопические приложения ПР в сильно невырожденном по частоте режиме – для определения дисперсионных характеристик в терагерцовом диапазоне как нелинейных кристаллов [11, 12], так и линейных сред [13]. Исследуются возможности применения оптической спектроскопии сигнального излучения ПР для квантовой калибровки спектральной яркости источников терагерцового излучения [14–16], проведены первые измерения параметров “скрытых” объектов, расположенных вне области оптической накачки [17]. При этом все приложения оптико-терагерцовых бифотонов, которые удалось реализовать к настоящему моменту, ограничены схемами, в которых достаточно регистрации только сигнальных фотонов в оптическом канале. В недавно опубликованной работе [18] впервые были проведены прямые измерения интенсивности холостого терагерцового излучения при рекордно низких значениях коэффициента параметрического усиления. Однако ограничения, связанные с предельно достижимыми параметрами современных терагерцовых детекторов, не позволили полностью реализовать условия спонтанного процесса. В настоящей работе мы предлагаем подход, позволяющий перейти к спонтанному режиму ПР без модифицирования детектора в терагерцовой части установки.

Во многих приложениях параметрического рассеяния важна высокая степень коррелированности сигнальных и холостых фотонов. Одной из определяющих характеристик при этом является величина нормированной корреляционной функции интенсивности второго порядка. Поскольку в настоящее время отсутствуют терагерцовые детекторы, способные работать в режиме счета отдельных фотонов, эта функция экспериментально должна определяться по показаниям обычных приемников аналогового (токового) типа:

1)e-mail: aa.leontjev@physics.msu.ru

$$g^{(2)} = \frac{\langle i_s i_i \rangle}{\langle i_s \rangle \langle i_i \rangle}, \tag{1}$$

где $\langle i_s \rangle, \langle i_i \rangle$ – средние значения токов, возникающих в детекторах сигнального и холостого излучения. При этом корреляция токов $\langle i_s i_i \rangle$ экспериментально определяется в рамках процедуры числовой обработки "почти мгновенных" (измеренных за малое время τ) значений токов i_s и i_i, поступающих на вычислительное устройство в течение длительного времени набора статистических данных детекторов сигнального и холостого каналов. В работе [19] был проведено подробное теоретическое описание квантово-механических основ данной процедуры и получено общее выражение, связывающее величину $g^{(2)}$ с параметрами нелинейного кристалла, гауссовского пучка накачки и узкополосных детекторов, настроенных на регистрацию излучения на сопряженных оптических и терагерцовых частотах в пределах соответствующих телесных углов $\Delta\Omega_s$ и $\Delta\Omega_i$ в спонтанном режиме ПР. С достаточно высокой точностью его можно представить в виде

$$g^{(2)} = 1 + \frac{1}{\beta^2 M_L} \frac{\int\limits_{\Delta\Omega_s} d\Omega_s \int\limits_{\Delta\Omega_i} d\Omega_i |f_{is}|^2}{\left(m_{\perp i} \int\limits_{\Delta\Omega_s} d\Omega_s \int d\Omega_{i'} \kappa_{i's} |f_{i's}|^2 \right) \left(\frac{\Delta\Omega_i}{\beta^2} \frac{\langle N_T \rangle}{1 + \langle N_T \rangle} + m_{\perp s} \int\limits_{\Delta\Omega_i} d\Omega_i \int d\Omega_{s'} |f_{is'}|^2 \right)}. \tag{2}$$

В приведенном выражении $\langle N_T \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_i/k_B T) - 1}$ – планковский фактор, равный среднему числу фотонов в одной моде теплового флуктуационного поля на заданной холостой частоте ω_i. Тепловой вклад может существенно уменьшать величину корреляционной функции при температурах кристалла и его окружения T от 10 K и выше [19]. Под интегралами в (2) стоят функции f_{is}, описывающие угловое распределение холостых фотонов с учетом возможного поглощения на терагерцовой частоте. Угловое распределение сигнальных фотонов при этом считается с учетом фактора потерь $\kappa_{is} \geq 1$ [20]. При отсутствии поглощения $\kappa_{is} = 1$, оба распределения одинаковы, а сама функция f_{is} с точностью до коэффициента совпадает с амплитудой бифотона [21]. Коэффициенты $m_{\perp a} \equiv \frac{\pi w_p^2}{(2\pi)^2} k_a^2$ (w_p – радиус поперечного сечения пучка накачки, k_a – волновой вектор холостого или сигнального излучения, $a = i, s$) учитывают угловые плотности плоских поперечных мод на частотах ω_a. Штрихи над индексами означают, что интегрирование производится по всем отмеченным углам в сигнальном и холостом каналах, независимо от углов детектирования соответствующих приемников. M_L – число продольных мод, детектируемых в сигнальном и холостом каналах, определяется соотношением спектральных полос, быстродействием детекторов и схемы перемножения их токов. $\beta \equiv \frac{2\pi\sqrt{\omega_s \omega_i}}{c\sqrt{n_s \cos\theta_{s0} n_i \cos\theta_{i0}}} A_0 \chi L$ – коэффициент параметрического усиления, зависящий от амплитуды поля накачки A_0, действующей компоненты тензора квадратичной восприимчивости χ и длины нелинейного кристалла L, показателей преломления кристалла для сигнального и холостого излучения n_s, n_i, а также углов θ_{a0}, под которыми эти волны распространяются при точном фазовом синхронизме.

В спонтанном режиме ПР должно выполняться условие $\beta \ll 1$. Как видно из выражения (2), для достижения высокой степени корреляции необходимы предельно низкие значения коэффициента параметрического усиления. С целью снижения величины β при ПР в оптическом диапазоне используют схемы с непрерывной накачкой низкой интенсивности. Однако при снижении коэффициента параметрического усиления одновременно падают мощности сигнальных и холостых волн, которые должны регистрироваться детекторами. Использование аналогичных по мощности источников накачки для детектирования оптико-терагерцовых бифотонов в настоящее время невозможно из-за ограничений, связанных с предельной чувствительностью и уровнем шумов современных терагерцовых приемников. В работе [18] для накачки применялся импульсный лазер, путем снижения его пиковой мощности удалось зарегистрировать терагерцовые сигналы, соответствующие $\beta \sim 1$. Дальнейшее снижение мощности накачки приводило к падению показаний детектора ниже уровня шумов.

Тем не менее, уменьшить предельную величину коэффициента β можно и другим способом. Из теории известно [20], что спектральная плотность мощности холостого излучения явным образом зависит от частот сигнальных и холостых фотонов как $P_i \propto \propto (\omega_s)^3(\omega_i)^4$. В сильно невырожденном по частоте случае $\omega_i \ll \omega_s$, частота сигнальных волн очень близка к частоте накачки и $P_i \propto (\omega_p)^3(\omega_i)^4$. Как правило, дополнительный вклад в эту зависимость, связанный с дисперсией оптических параметров кристалла, носит гораздо более слабый характер. Следовательно, при увеличении частоты оптической накачки ω_p мощность холостого излучения на той же терагерцовой частоте должна расти пропорционально третьей степени ω_p. Величина коэффициента β при этом также будет увеличиваться, но гораздо медленнее: $\beta \propto \sqrt{\omega_p}$. Таким образом, путем увеличения частоты оптической накачки можно добиться условий, при которых предельно обнаружимый уровень сигнала одного и того же терагерцового детектора будет соответствовать более низким значениям β, удовлетворяющим условию спонтанного режима. В данной работе этот новый подход был апробирован при переходе на частоту второй гармоники излучения одного и того же лазера накачки.

На рисунке 1 приведена схема экспериментальной установки для измерения мощности холостого излучения ПР на терагерцовых частотах в диапазоне 0.1–3 ТГц. В двух сериях экспериментов был задействован один и тот же твердотельный $Nd^{3+}:YLF$-лазер с диодной накачкой и длиной волны генерации 1046.7 нм, работающий в одномодовом режиме (TEM_{00}), с длительностью импульсов 10 нс и частотой их следования 7 кГц. Основная разница между двумя модификациями установки состояла в том, что в первом случае излучение непосредственно направлялось на нелинейный кристалл и служило накачкой ПР, а во втором случае дополнительно устанавливался нелинейный кристалл-удвоитель частоты, и накачкой служила вторая гармоника излучения лазера на длине волны 523.35 нм. Преобразование частоты осуществлялось в специально ориентированном кристалле-удвоителе $Mg:LiNbO_3$. В обоих случаях радиус поперечного сечения накачки на кристалле-источнике ПР составлял 50 мкм. Сам кристалл был помещен в охлаждаемый гелиевый криостат вместе с болометром на горячих электронах (HEB) производства SCONTEL [22, 23], регистрировавшим холостое излучение ПР. Характерное время отклика болометра составляло 50 пс, эквивалентная мощность шума NEP $\approx 2.5 \cdot 10^{-13}$ Вт $\cdot$ Гц$^{-1/2}$. И кристалл, и чувствительный элемент болометра поддерживались при одинаковой температуре 4.8 К. Входное и выходное окна криостата, предназначенные для ввода и вывода накачки, были снабжены фильтрами ITO [24] для предотвращения проникновения теплового излучения извне. ИК-фильтр (Zitex®G-106) защищал болометр от рассеянного в кристалле оптического излучения накачки. Параметрическое рассеяние возбуждалось в *eee*-геометрии в кристаллах $Mg:LiNbO_3$ длиной $L = 2.5$ см в первой конфигурации и $L = = 1$ см – во второй. В соответствии с условиями пространственного синхронизма, наиболее эффективно терагерцовое излучение генерируется в кристалле в черенковской геометрии рассеяния [25, 26] под углами к направлению накачки $\theta_{i0} \sim 60^\circ$ и выше. Вывод холостого излучения из кристалла осуществлялся через боковую грань кристалла, расположенную в непосредственной близости от луча накачки, и сопрягающий элемент – призму из материала высокоомного кремния с углом 45° в основании. Этот способ выведения позволяет снизить потери, связанные с поглощением терагерцовых волн в кристалле. Далее терагерцовое излучение после прохождения фильтра Zitex®G-106 фокусировалось кремниевой линзой на логарифмическую спиральную антенну, напыленную на сверхпроводящую пленку NbN толщиной 5 нм. Электрические импульсы с антенны после преобразования в широкополосном криогенном усилителе поступали на 50Ω вход осциллографа Tektronix, синхронизованного с импульсами с pin-диода (PD) в канале накачки. Регистрировалась амплитуда импульсов в режиме сбора с усреднением, число усреднений на осциллографе выбиралось максимальным и равным 128.

Одним из основных признаков перехода к спонтанному режиму ПР является установление линейной зависимости мощности холостого излучения от мощности накачки. Чтобы экспериментально исследовать характер данной зависимости мы варьировали ток лазерного диода в схеме накачки лазера в диапазоне от 5.5 до 8 А. При этом мощность излучения основной гармоники изменялась в диапазоне от 130 до 460 мВт, а мощность второй гармоники – от 6 до 73 мВт. Полученные экспериментальные данные представлены на рис. 2a и b. Видно, что в первом случае исследуемая зависимость носит ярко выраженный нелинейный характер. Она хорошо аппроксимируется известным соотношением [27]

$$P_i \propto \sinh^2(\beta), \tag{3}$$

справедливым в случае пренебрежимо малых вкладов от тепловых флуктуаций поля и малого поглощения. Эти условия выполнялись при низкой темпера-

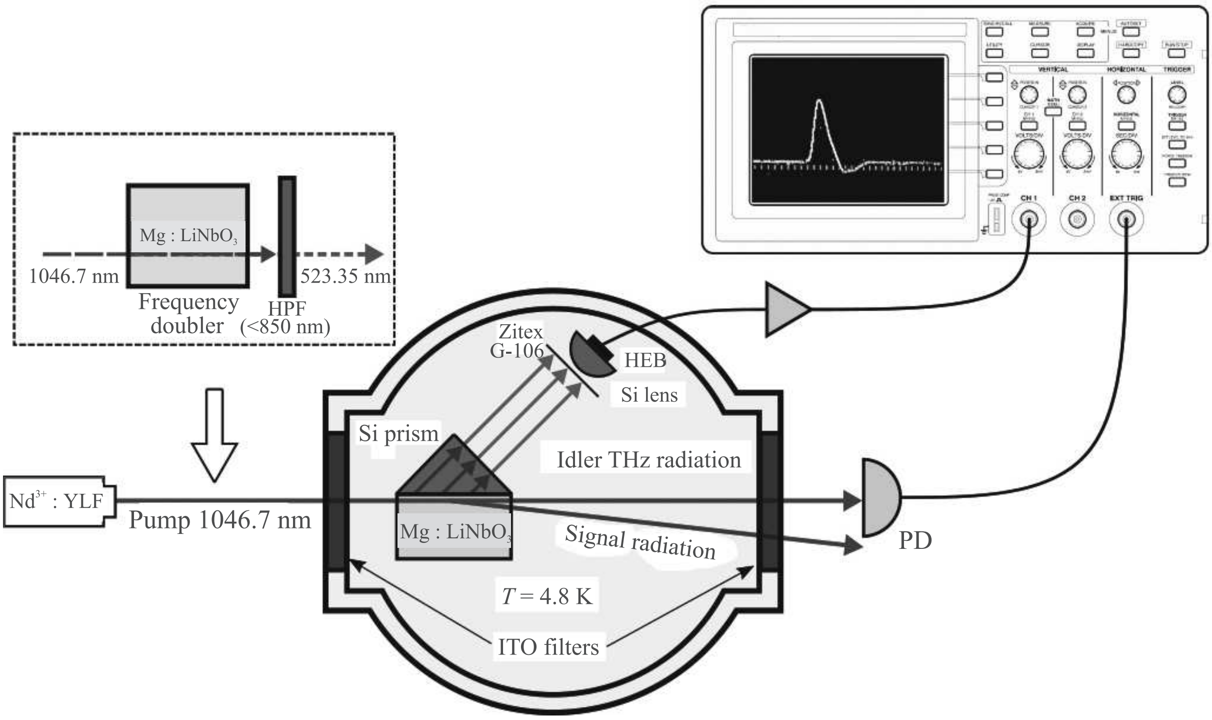

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки для генерации оптико-терагерцовых бифотонов и регистрации мощности холостого излучения терагерцовой частоты при ПР в двух режимах, на длинах волн накачки $\lambda_p = 1046.7$ нм и $\lambda_p = 523.35$ нм. Используемые во втором случае кристалл – удвоитель частоты лазера и фильтр, отрезающий излучение первой гармоники, показаны на пунктирной вставке

туре кристалла, поддерживаемой в нашем эксперименте. Из аппроксимации экспериментальных данных на рис. 2a с помощью соотношения (3) можно определить численную связь безразмерной величины β с мощностью накачки $P_{\rm pump}$, измеренной в милливаттах:

$$\beta = 0.14\sqrt{P_{\rm pump}[\rm mW]}. \tag{4}$$

Это означает, что диапазон варьирования мощности накачки в первом варианте установки соответствовал значениям коэффициента параметрического усиления $1.6 < \beta < 3.0$.

Во втором же случае, при переходе на удвоенную частоту накачки, наблюдалась почти линейная зависимость сигнала болометра от мощности накачки, что позволяет сделать вывод о начале перехода в режим спонтанного ПР. Однако при этом невозможно уверенно определить значения коэффициентов усиления непосредственно через аппроксимацию полученной слабо нелинейной зависимости. Поскольку сигнал HEB не был откалиброван в абсолютных единицах мощности, этого нельзя было сделать и напрямую. Однако учитывая, что только два из параметров, определяющих величину связи β с мощностью накачки, были изменены в экспериментальной установке – частота накачки и длина нелинейной среды, и используя выражение для коэффициента усиления (4), определенное экспериментально для первой установки, можно ожидать, что в этом случае

$$\beta = 0.1\sqrt{P_{\rm pump}[\rm mW]}. \tag{5}$$

Это означает, что коэффициент усиления во втором варианте установки варьировался в интервале существенно более низких значений $0.3 < \beta < 1$. Действительно, кривая, проведенная на рис. 2b, исходя из соотношений (3) и (5), хорошо аппроксимирует полученную экспериментально зависимость, близкую к линейной в диапазоне малых мощностей накачки. Таким образом, увеличение частоты накачки вдвое позволило провести измерения с кристаллом меньшей длины в режиме накачек меньшей мощности. Все это дало возможность в итоге существенно – в 5 раз – снизить минимальное значение коэффициента параметрического усиления β, при котором в установке возможна регистрация оптико-терагерцовых бифотонов.

Суммируя, в работе предложен подход, позволяющий с помощью одного и того же детектора с ограниченным динамическим диапазоном реги-

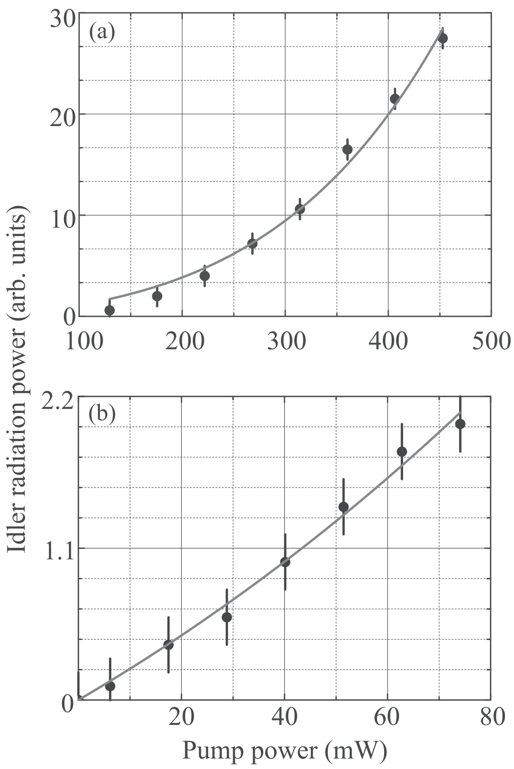

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости мощности холостого излучения от мощности оптической накачки. Точки – экспериментальные значения, измеренные при параметрах: (a) – $\lambda_p = 1046.7$ нм, $L = 25$ мм; (b) – $\lambda_p = 523.35$ нм, $L = 10$ мм. Линии – результат аппроксимации с помощью соотношения (3) и соотношений (4) (для рис. (a)) или (5) (для рис. (b))

стрировать терагерцовое излучение параметрического рассеяния света в различных интервалах изменения коэффициента параметрического усиления. Этот подход основан на изменении длины волны оптической накачки и может применяться для достижения режима спонтанного ПР с целью приготовления оптико-терагерцовых бифотонов с высокой степенью корреляции. За счет удвоения частоты лазерного источника импульсной накачки экспериментально продемонстрировано более чем пятикратное уменьшение минимального значения коэффициента усиления, при котором терагерцовое холостое излучение ПР может регистрироваться на фоне шумов детектора. Проведено детектирование терагерцового излучения, генерируемого при ПР в условиях рекордно низкого значения коэффициента параметрического усиления $\beta \sim 0.3$.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда # 17-12-01134.

1. A. N. Tuchak, G. N. Gol'tsman, G. Kh. Kitaeva, A. N. Penin, S. V. Seliverstov, M. I. Finkel, A. V. Shepelev, and P. V. Yakunin, JETP Lett. **96**, 94 (2012).
2. Ya. G. Ponomarev, H. H. Van, S. A. Kuzmichev, S. V. Kulbachinskii, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, and S. N. Tchesnokov, JETP Lett. **96**, 830 (2012).
3. A. A. Ushakov, M. Matoba, N. Nemoto, N. Kanda, K. Konishi, P. A. Chizhov, N. A. Panov, D. E. Shipilo, V. V. Bukin, M. Kuwata-Gonokami, J. Yumoto, O. G. Kosareva, S. V. Garnov, and A. B. Savel'ev, JETP Lett. **106**, 675 (2017).
4. M. Takeoka, R.-B. Jin, and M. Sasaki, New J. Phys. **17**, 043030 (2015).
5. Ch. F. Wildfeuer, A. J. Pearlman, J. Chen, J. Chen, J. Fan, A. Migdall, and J. P. Dowling, Phys. Rev. A **80**, 043822 (2009).
6. G. B. Lemos, V. Borish, G. D. Cole, S. Ramelow, R. Lapkieviwicz, and A. Zeilinger, Nature 512, 409 (2014)
7. D. A. Kalashnikov, A. V. Paterova, S. P. Kulik, and L. A. Krivitsky, Nature Photon. **10**, 98 (2016).
8. A. Paterova and L. A. Krivitsky, Light Sci. Appl. **9**, 82 (2020).
9. A. Schori, D. Borodin, K. Tamasaku, and S. Shwartz, Phys. Rev. A **97**, 063804 (2018).
10. M. Kutas, B. Haase, P. Bickert, F. Riexinger, D. Molter, and G. von Freymann, Sci. Adv. **6**, 8065 (2020).
11. K. A. Kuznetsov, S. P. Kovalev, G. K. Kitaeva, T. D. Wang, Y. Y. Lin, Y. C. Huang, I. I. Naumova, and A. N. Penin, Appl. Phys. B: Lasers Opt. **101**, 811 (2010).
12. K. A. Kuznetsov, G. Kh. Kitaeva, S. P. Kovalev, S. A. Germansky, A. M. Buryakov, A. N. Tuchak, and A. N. Penin, Appl. Phys. B: Lasers Opt. **122**, 223 (2016).
13. K. A. Kuznetsov, E. I. Malkova, R. V. Zakharov, O. V. Tikhonova, and G. Kh. Kitaeva, Phys. Rev. A **101**, 053843 (2020).
14. G. Kh. Kitaeva, S. P. Kovalev, A. N. Penin, A. N. Tuchak, and P. V. Yakunin, J. Infrared Millim. Terahertz Waves **32**, 1144 (2011).
15. G. Kh. Kitaeva, P. V. Yakunin, V. V. Kornienko, and A. N. Penin, Appl. Phys. B: Lasers Opt. **116**, 929 (2014).
16. V. V. Kornienko, G. Kh. Kitaeva, F. Sedlmeir, G. Leuchs, and H. G. L. Schwefel, APL Photonics **3**, 051704 (2018).
17. B. Haase, M. Kutas, F. Riexinger, P. Bickert, A. Keil, D. Molter, M. Bortz, and G. von Freymannet, Opt. Express **27**, 7458 (2019).
18. G. Kh. Kitaeva, V. V. Kornienko, K. A. Kuznetsov, I. V. Pentin, K. V. Smirnov, and Yu. B. Vakhtomin, Opt. Lett. **44**, 1198 (2019).
19. G. Kh. Kitaeva, A. A. Leontyev, and P. A. Prudkovskii, Phys. Rev. A **101**, 053810 (2020).
20. G. K. Kitaeva, V. V. Kornienko, A. A. Leontyev, and A. V. Shepelev, Phys. Rev. A **98**, 063844 (2018).

21. G. Kh. Kitaeva and V. V. Kornienko, Int. J. Quantum. Inf. **15**, 1740024 (2017).
22. S. Seliverstov, S. Maslennikov, S. Ryabchun, M. Finkel, T. Klapwijk, N. Kaurova, Y. Vakhtomin, K. Smirnov, B. Voronov, and G. Goltsman, IEEE Trans. Appl. Supercond. **25**, 2300304 (2015).
23. A. Shurakov, Y. Lobanov, and G. Goltsman, Supercond. Sci. Technol. **29**, 023001 (2015).
24. T. Wang, M. Zalkovskij, K. Iwaszczuk, A. V. Lavrinenko, G. V. Naik, J. Kim, A. Boltasseva, and P. U. Jepsenet, Opt. Mater. Express **5**, 566 (2015).
25. G. A. Askaryan, Sov. Phys. JETP **15**, 943 (1962).
26. D. H. Auston, K. P. Cheung, J. A. Valdmanis, and D. A. Kleinmann, Phys. Rev. Lett. **53**, 1555 (1984).
27. D. N. Klyshko, *Photons and Nonlinear Optics*, Gordon and Breach, N.Y. (1988).

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 5, pp. 303 – 304

Atom-field correlations in the weak-excitation limit of absorptive optical bistability

Th. K. Mavrogordatos[1)]

Department of Physics, Stockholm University, SE-106 91 Stockholm, Sweden

Submitted 27 July 2020
Resubmitted 10 August 2020
Accepted 10 August 2020

DOI: 10.31857/S1234567820170036

In this Letter, we calculate the steady-state and first-order time varying atom-field correlation functions in the weak-excitation limit of absorptive optical bistability from a linearized theory of quantum fluctuations. We formulate a Fokker–Planck equation in the positive P representation following the phase-space analysis of [1] which does not resort to adiabatic elimination. Special emphasis is placed on the limit of collective strong coupling as attained from a vanishing photon-loss rate. We compare to the cavity-transmission spectrum with reference to experimental results obtained for macroscopic dissipative systems, discussing the role of anomalous correlations arising as distinct nonclassical features. We follow the notation of Ch.15 in [2]. The steady-state averages

$$\langle \tilde{\bar{J}}_+ \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss} = \langle \tilde{\bar{J}}_+ \rangle_{\rm ss} \langle \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss} + \frac{1}{N} C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{z}}(0) \approx \approx -X^2 \left[1 - X^2 \frac{\xi 2C(2+\xi+2C)}{N(1+2C)^2(\xi+1)^2}\right] \qquad (1)$$

and

$$\langle \tilde{\bar{J}}_+ \tilde{\tilde{a}}^\dagger \rangle_{\rm ss} = \langle \tilde{\bar{J}}_+ \rangle_{\rm ss} \langle \tilde{\tilde{a}}^\dagger \rangle_{\rm ss} + \frac{1}{N} C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{z}_*}(0) \approx \approx -X^2 \left[1 + \frac{\xi 2C}{N(1+2C)(\xi+1)}\right], \qquad (2)$$

demonstrate explicit corrections of order $N^{-1} \ll 1$. In the above expressions, X is the scaled intracavity amplitude, N is the number of atoms inside the cavity, $2C$ is the cooperativity parameter and $\xi \equiv 2\kappa/\gamma$ is the ratio of the photon loss rate to the spontaneous emission rate. From Equation (15.103b) of [2] we read that in the weak-excitation limit,

$$\langle \Delta \tilde{\tilde{a}}^\dagger \Delta \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss} \approx N^{-1} X^4 \, 2C \frac{\xi 2C(2+\xi+2C)}{(1+2C)^2(\xi+1)^2}. \qquad (3)$$

Hence, $\langle \Delta \tilde{\tilde{a}}^\dagger \Delta \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss} / \langle \Delta \tilde{\bar{J}}_+ \Delta \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss} = 2C$, which reveals the role of atomic cooperativity along the lower branch of absorptive bistability. The largest deviation of the ratio $r(X,\xi) \equiv |\langle \tilde{\tilde{a}}^\dagger \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss} / \langle \tilde{\bar{J}}_+ \tilde{\tilde{a}} \rangle_{\rm ss}|$ from unity occurs for $\xi = 1$ as a consequence of impedance matching for the two decoherence channels (see also Sec. V of [1]). The two cross-correlation components of order X^4 are

$$C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{z};1}(\bar{\tau}) = \exp\left[-\frac{(\xi+1)}{2}\bar{\tau}\right] \left\{ C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{z}}(0)\cos(\bar{G}\bar{\tau}) + + \frac{\xi 2C\, C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{\nu}}(0)_{\rm ss} + [(1-\xi)/2] C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{z}}(0)}{\bar{G}} \sin(\bar{G}\bar{\tau}) \right\}, \qquad (4)$$

$$C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_* \tilde{z};2}(\bar{\tau}) = \frac{\xi 2C X^4}{(1+2C)(\xi+1)} \frac{1}{2\bar{G}} \exp\left[-\frac{(\xi+1)}{2}\bar{\tau}\right] \times \times \left\{ \frac{(\xi+1)(\xi-1-2C)}{2\bar{G}} \left[\frac{\sin(\bar{G}\bar{\tau})}{\bar{G}} - \bar{\tau}\cos(\bar{G}\bar{\tau})\right] + + (1+\xi+2C)\bar{\tau}\sin(\bar{G}\bar{\tau}) \right\}. \qquad (5)$$

In the above expressions,

$$\bar{G} \equiv \sqrt{\xi 2C - \frac{1}{4}(\xi-1)^2}$$

is the many-atom effective coupling strength in which dissipation also plays a role, and $\bar{\tau} \equiv \gamma\tau/2$. The transmitted-light spectrum is $\bar{\mathcal{C}}_{\rm ss}^{\tilde{z}_* \tilde{z}}(\bar{s}) = \bar{\mathcal{C}}_{\rm ss}^{\tilde{z}_* \tilde{z};1}(\bar{s}) + \bar{\mathcal{C}}_{\rm ss}^{\tilde{z}_* \tilde{z};2}(\bar{s})$ for $\bar{s} = -i2(\omega-\omega_0)/\gamma$, where

$$\frac{\bar{\mathcal{C}}_{\rm ss}^{\tilde{z}_* \tilde{z};1}(\bar{s})}{X^4} = \frac{4C^2(2+\xi+2C)}{(1+2C)^2(\xi+1)^2} \frac{1+\xi+\bar{s}}{(\xi+\bar{s})(1+\bar{s})+\xi 2C} \qquad (6)$$

and

$$\frac{\bar{\mathcal{C}}_{\rm ss}^{\tilde{z}_* \tilde{z};2}(\bar{s})}{X^4} = \frac{4C^2\xi}{(1+2C)(\xi+1)} \frac{\xi(\xi-2C+\bar{s})}{[(\xi+\bar{s})(1+\bar{s})+\xi 2C]^2}. \qquad (7)$$

The corresponding contribution to the correlation function for the cavity field is

1)e-mail: th.mavrogordatos@gmail.com

$$C_{\rm ss}^{\tilde{z}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau}) = X^4\frac{4C^2\xi}{(1+2C)(\xi+1)}\frac{1}{2\bar{G}}\exp\left[-\frac{(\xi+1)}{2}\bar{\tau}\right]\times$$
$$\times\left\{\frac{\xi(\xi-1-4C)}{2\bar{G}}\left[\frac{\sin(\bar{G}\bar{\tau})}{\bar{G}}-\bar{\tau}\cos(\bar{G}\bar{\tau})\right]+\right.$$
$$\left.+\,\xi\bar{\tau}\sin(\bar{G}\bar{\tau})\right\}. \tag{8}$$

The sum of two corresponding components of a light-matter correlation and the cavity-field autocorrelation, $[C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau})+C_{\rm ss}^{\tilde{z}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau})]/X^4$ obtained from Eqs. (4) and (8), is compared to the component $C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau})/X^4$ alone in Fig. 1 as we approach the many-atom strong-coupling

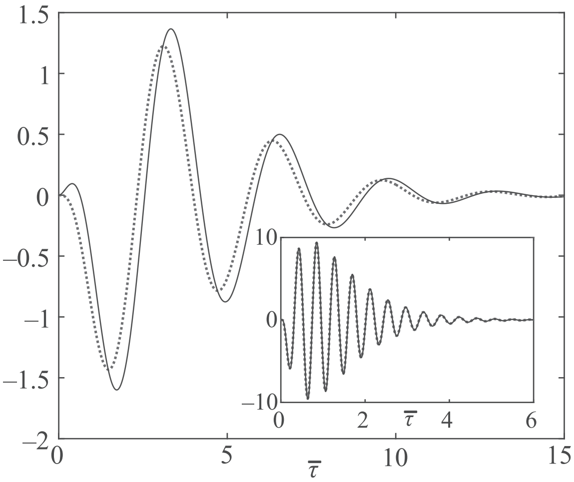

Fig. 1. (Color online) Correlations with a squared Lorentzian distribution. The sum of the two components: $C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau})/X^4$ and $C_{\rm ss}^{\tilde{z}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau})/X^4$ is plotted in a solid black line, superimposed on $C_{\rm ss}^{\tilde{z}_*\tilde{z};2}(\bar{\tau})/X^4$ alone plotted with a dashed green line. Parameters: $\xi=0.05$, $C=40$. The inset depicts the same quantities, but for $\xi\approx 1.9$, $C\approx 58$ (see Fig. 4 of [3])

limit of absorptive bistability $[\xi 2C \gg (\xi+1)^2/4]$. Upon a further increase of the parameter $\xi 2C$, the two curves coincide. On the other hand, the correlation

$$C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{z}_*}(\bar{\tau}) = -X^2\frac{\xi 2C}{(\xi+1)(1+2C)}\exp\left[-\frac{(\xi+1)}{2}\bar{\tau}\right]\times$$
$$\times\left[\cos(\bar{G}\bar{\tau})+\frac{4C+\xi+3}{2\bar{G}}\sin(\bar{G}\bar{\tau})\right], \tag{9}$$

dominates at weak-excitation. In the limit $\xi\to 0$, $C\to\infty$, with $\xi 2C\gg 1$ remaining constant, the sum

$$C_{\rm ss}^{\tilde{z}_*\tilde{\nu}_*}(\bar{\tau})+C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{z}_*}(\bar{\tau})\approx -2X^2\xi\exp\left(-\frac{\bar{\tau}}{2}\right)\cos(\sqrt{\xi 2C}\bar{\tau}), \tag{10}$$

tends to zero as $\xi\to 0$. Their difference, however, evaluating to

$$C_{\rm ss}^{\tilde{z}_*\tilde{\nu}_*}(\bar{\tau})-C_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{z}_*}(\bar{\tau})\approx$$
$$\approx 2X^2\sqrt{\xi 2C}\exp\left(-\frac{\bar{\tau}}{2}\right)\sin(\sqrt{\xi 2C}\bar{\tau}), \tag{11}$$

does not vanish as long as atomic coherence is maintained; this is a sign of the competition between a restricted bandwidth in the communication channel across individual atoms, and the collective strong coupling of the atomic ensemble to the intracavity field. Monitoring a second channel, provided by an additional low-Q cavity coupled to the same atomic ensemble, via homodyne detection reveals a negative source-field spectrum of squeezing $S(\omega)\propto{\rm Re}[\bar{\mathcal{C}}_{\rm ss}^{\tilde{\nu}_*\tilde{\nu}_*}(-2i\omega/\gamma)]$ when the local oscillator is in phase with the mean collective atomic polarization, while combining the fields transmitted from the two cavities yields the cross-correlations of light-matter interaction in absorptive optical bistability.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020170014

1. H. J. Carmichael, Phys. Rev. A **33**, 3262 (1986).
2. H. J. Carmichael, *Statistical Methods in Quantum Optics 2* (Non-Classical Fields), Springer, Berlin (2008).
3. S. L. Mielke, G. T. Foster, and L. A. Orozco, Phys. Rev. Lett. **80**, 3948 (1998).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 305 – 311

Изгибно-модуляционная динамика оптико-терагерцового солитона в градиентном волноводе

С. В. Сазонов[1)]

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

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

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

Поступила в редакцию 13 августа 2020 г.
После переработки 13 августа 2020 г.
Принята к публикации 13 августа 2020 г.

Представлено теоретическое исследование нелинейной стадии влияния изгибной и модуляционной неустойчивостей на динамику оптико-терагерцового солитона в квадратично-нелинейном градиентном волноводе. Показано, что обе неустойчивости имеют принципиальное значение и неотделимы одна от другой. Если несущая частота оптической компоненты лежит в области аномальной дисперсии групповой скорости, то данные неустойчивости развиваются в режиме с обострением, приводя к самофокусировке солитона. В случае же нормальной дисперсии групповой скорости взаимное влияние волновода и изгибно-модуляционной динамики приводят к формированию устойчивого пространственно-временного солитона.

DOI: 10.31857/S1234567820170048

Введение. Вопросы о способах повышения эффективности генерации терагерцового излучения поднимаются последнее время неоднократно в связи с актуальными приложениями данного излучения в системах безопасности, восстановления изображений, широкополосной связи, медицине и т.д. [1–3].

Особой популярностью в вопросах генерации терагерцового излучения пользуются методы, основанные на лазерных технологиях [4–6]. Один из наиболее эффективных методов генерации опирается на подход, связанный с явлением оптического выпрямления в квадратично-нелинейной среде [7–13]. Генерация происходит наиболее эффективно, если выполняется условие синхронизма [14]

$$v_g(\omega) = v_{\rm ph}, \tag{1}$$

где $v_g(\omega)$ – групповая скорость оптического импульса, соответствующая его несущей частоте ω, $v_{\rm ph}$ – фазовая скорость в области генерируемых терагерцовых частот.

В теории нелинейных волн равенство (1) называют условием синхронизма Захарова–Бенни [15–17]. Данное условие соответствует эффективному нелинейному взаимодействию длинных и коротких волн. В нашем случае роль коротковолновой компоненты играет оптический импульс. Роль длинноволновой составляющей отводится терагерцовому сигналу.

В условиях реального эксперимента добиться выполнения условия (1) весьма непросто. Ситуация здесь усугубляется еще и тем, что генерируемый терагерцовый сигнал является широкополосным. Поэтому для выполнения равенства (1) весьма желательно практическое отсутствие дисперсии в широком диапазоне частот генерируемого излучения. Таким образом, данный диапазон должен лежать вдали от линий поглощения.

При выполнении условия (1) происходит непрерывная подпитка оптическим импульсом генерируемого терагерцового сигнала. Как результат, в одномерном режиме генерации способен сформироваться оптико-терагерцовый солитон [14].

При нарушении условия (1) эффективность генерации резко снижается. В неколлинеарном режиме генерации происходит отрыв терагерцового излучения от оптического сигнала, что также снижает эффективность генерации.

Если возможность непосредственно удовлетворить условию (1) отсутствует, применяют технику наклонных фронтов оптического импульса [18–20].

Для повышения интенсивности генерируемого терагерцового сигнала в солитонном режиме желательна его концентрация в малой области пространства. Для этого можно использовать как нелиней-

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

ные свойства среды, вызывающие самофокусировку, так и линейную рефракцию, обусловленную неоднородностью среды. Речь может идти, например, о фокусирующем градиентном волноводе, в котором показатель преломления непрерывно уменьшается от центра к периферийным областям.

При фокусировке импульса испытывают искривления как фазовые, так и групповые фронты. В первом случае говорят о модуляционной неустойчивости [21–23], а во втором – об изгибной [23–26]. Условие синхронизма (1) приводит к предположению, что эти две неустойчивости должны быть тесно связаны друг с другом. В фокусирующем волноводе данная связь может проявляться наиболее рельефно из-за высокой плотности энергии генерируемого излучения. В связи с возрастающей актуальностью поиска эффективных способов генерации терагерцового излучения решение поставленной проблемы приобретает особую важность.

Аналитическому исследованию влияния изгибной и модуляционной неустойчивостей на солитонный режим генерации терагерцового излучения в нелинейном волноводе посвящена настоящая работа.

2. Исходная система и уравнения для солитонных параметров. Процесс генерации терагерцового излучения оптическим импульсом в градиентном нелинейном волноводе при использовании параксиального приближения описывается системой уравнений [27]

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} = -\frac{\beta}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\tau^2} + \alpha E\psi - \omega g_\omega(\mathbf{r})\psi + \frac{c}{2n_{\omega0}\omega}\Delta_\perp\psi, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial z} = -\sigma\frac{\partial}{\partial\tau}(|\psi|^2) + g_T(\mathbf{r})\frac{\partial E}{\partial\tau} + \frac{c}{2n_{T0}}\Delta_\perp\int\limits_{-\infty}^{\tau} E d\tau'. \quad (3)$$

Здесь ψ – комплексная огибающая электрического поля оптического импульса, E – электрическое поле терагерцового сигнала, $\tau = t - z/v_{g0}$, v_{g0} – линейная групповая скорость оптического импульса в центре поперечного сечения волновода, соответствующая его несущей частоте ω, z – ось волновода, совпадающая с направлением распространения обеих компонент импульса, t – время, $\beta = \partial v_{g0}^{-1}/\partial\omega$ – параметр дисперсии групповой скорости (ДГС) оптической компоненты, $\alpha = 4\pi\omega\chi^{(2)}(\omega,0)/cn_{\omega0}$, $\sigma = 4\pi\chi^{(2)}(\omega,-\omega)/cn_{T0}$, $\chi^{(2)}(\omega,0)$ и $\chi^{(2)}(\omega,-\omega)$ – нелинейные восприимчивости второго порядка, c – скорость света в вакууме, $n_{\omega0}$ и n_{T0} – оптический и терагерцовый показатели преломления соответственно в центре поперечного сечения волновода; вторые слагаемые в правых частях (3) и (4) описывают влияние волновода, при этом $g_\omega = (n_{\omega0}^2 - n_\omega^2(\mathbf{r}))/2cn_{\omega0}$, $g_T = (n_{T0}^2 - n_T^2(\mathbf{r}))/2cn_{T0}$, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор, проведенный от оси волновода к точке наблюдения, $n_\omega(\mathbf{r})$ и $n_T(\mathbf{r})$ – соответственно оптический и терагерцовый показатели преломления в этой точке, $\Delta_\perp$ – поперечный лапласиан, учитывающий изгибную и модуляционную неустойчивости оптико-терагерцового импульса.

При выводе уравнений (2) и (3) предполагалось, что условие (1) выполняется в центре поперечного сечения волновода: $v_{g0} = c/n_{T0}$.

Волновое уравнение (2) для оптической компоненты редуцировано от второго порядка к первому относительно производной по переменной z благодаря использованию приближения медленно меняющейся огибающей (ММО) для функции $\psi(\tau, z, \mathbf{r})$. В то же время уравнение (3) для терагерцовой компоненты является уравнением первого порядка относительно производной по переменной z благодаря приближению однонаправленного распространения [14, 28, 29]. Поэтому терагерцовый сигнал может состоять из сколь угодно малого числа колебаний.

В одномерном случае ($\Delta_\perp = 0$) и в отсутствие волновода ($g_\omega = g_T = 0$) уравнения (2), (3) имеют вид системы Ядзимы–Ойкавы [30]. Данная система интегрируема методом обратной задачи рассеяния. Двухкомпонентное солитонное решение этой системы имеет вид [14]

$$\psi = \frac{|\beta|}{\tau_p}\sqrt{\frac{\Omega}{\alpha\sigma}}e^{i(qz-\Omega(t-z/v))}\mathrm{sech}\left(\frac{t-z/v}{\tau_p}\right), \quad (4)$$

$$E = -\frac{\beta}{\alpha\tau_p^2}\mathrm{sech}^2\left(\frac{t-z/v}{\tau_p}\right), \quad (5)$$

где нелинейная групповая скорость v и параметр q определяются выражениями

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{v_{g0}} - \beta\Omega, \quad q = \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\tau_p^2} + \Omega^2\right), \quad (6)$$

а положительные постоянные Ω и τ_p являются свободными параметрами решения. При этом τ_p имеет смысл временной длительности солитона, а параметром Ω определяется сдвиг несущей частоты оптической компоненты в красную область: $\omega \to \omega - \Omega$. Данный сдвиг возникает благодаря параметрическому распаду оптических фотонов, в результате которого генерируются терагерцовые фотоны [19, 31]. При этом $\Omega \ll \omega$. Это же неравенство вытекает из приближения ММО. Из этого же приближения следует, что $1/\tau_p \ll \omega$.

Для исследования изгибной и модуляционной неустойчивостей воспользуемся методом усредненного лагранжиана (УЛ) [32].

Легко видеть, что системе (2), (3) соответствует плотность лагранжиана

$$L = L_\omega + \frac{\alpha}{2\sigma} L_T + L_{\text{int}}, \tag{7}$$

где

$$L_\omega = \frac{i}{2}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial z}\right) - \frac{\beta}{2}\left|\frac{\partial \psi}{\partial \tau}\right|^2 + \omega g_\omega |\psi|^2 + \frac{c}{2n_{\omega 0}\omega}|\nabla_\perp \psi|^2, \tag{8}$$

$$L_T = -\frac{\partial Q}{\partial z}\frac{\partial Q}{\partial \tau} + g_T\left(\frac{\partial Q}{\partial \tau}\right)^2 + \frac{c}{2n_{T0}}(\nabla_\perp Q)^2, \tag{9}$$

$$L_{\text{int}} = -\alpha \frac{\partial Q}{\partial \tau}|\psi|^2, \tag{10}$$

а динамическая переменная Q связана с электрическим полем E терагрецовой компоненты соотношением

$$E = \frac{\partial Q}{\partial \tau}. \tag{11}$$

Пробные решения для ψ и Q выберем, отталкиваясь от солитонного решения (4)–(6) при учете (11). Тогда, совершая замены $1/\tau_p \to \mu$, $\Omega \to \gamma$, $qz \to \omega\Phi_2$, $t - z/v = \tau + (1/v_{g0} - 1/v)z \to \tau + \Phi_1$, запишем

$$\psi = |\beta|\sqrt{\frac{\gamma}{\alpha\sigma}}\mu e^{i(\omega\Phi_2 - \gamma(\tau+\Phi_1))}\text{sech}[\mu(\tau+\Phi_1)], \tag{12}$$

$$Q = -\frac{\beta}{\alpha}\mu\tanh[\mu(\tau+\Phi_1)], \tag{13}$$

где μ, γ, Φ_2, Φ_1 – неизвестные функции координат; при этом $\mu/\omega \ll 1$ и $\gamma/\omega \ll 1$.

Переменные Φ_2 и Φ_1 имеют смысл солитонных фазового и группового эйконалов соответственно.

Так как в одномерном случае параметры μ и γ являются постоянными, а Φ_2 и Φ_1 пропорциональны z, то, следуя [32], будем считать μ и γ "медленными" функциями координат, а Φ_2 и Φ_1 – "быстрыми". По этой причине при подстановке (12) и (13) в (7)–(10) будем пренебрегать производными от μ и γ. Это соответствует приближению геометрической оптики для солитонов [32]. В работе [33] данное приближение названо квазиклассическим пределом.

Тогда после интегрирования лагранжиана по τ, пренебрегая слагаемыми μ/ω и γ/ω при одинаковых сомножителях, будем иметь

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} L d\tau = \frac{\beta^2}{\alpha\sigma}\Lambda,$$

где Λ – усредненный лагранжиан, определяемый выражением

$$\Lambda = -2\omega\gamma\mu\frac{\partial \Phi_2}{\partial z} + 2\left(\gamma^2\mu - \frac{\mu^3}{3}\right)\frac{\partial \Phi_1}{\partial z} + \beta(\gamma\mu^3 - \gamma^3\mu) + 2\omega g_\omega\gamma\mu + \frac{2}{3}g_T\mu^3 + \frac{c}{3n_{T0}}\mu^3(\nabla_\perp\Phi_1)^2 + \frac{c}{n_{\omega 0}}\omega\gamma\mu(\nabla_\perp\Phi_2)^2 - 2\frac{c}{n_{\omega 0}}\gamma^2\mu(\nabla_\perp\Phi_1)(\nabla_\perp\Phi_2). \tag{14}$$

Теперь, используя (14), запишем уравнения Эйлера–Лагранжа для солитонных эйконалов, а также для переменных μ и γ:

$$\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial \Lambda}{\partial(\partial\Phi_j/\partial z)} - \nabla_\perp\frac{\partial\Lambda}{\partial(\nabla_\perp\Phi_j)} = 0, \quad \frac{\partial\Lambda}{\partial\gamma} = \frac{\partial\Lambda}{\partial\mu} = 0.$$

Тогда получим

$$\frac{\partial}{\partial z}(\mu^3 - 3\gamma^2\mu) + \nabla_\perp(\mu^3\nabla_\perp\varphi_1 - 3\gamma^2\mu\nabla_\perp\varphi_2) = 0, \tag{15}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\gamma\mu) + \nabla_\perp(\gamma\mu\nabla_\perp\varphi_2) = 0, \tag{16}$$

$$\frac{\partial\varphi_1}{\partial z} + \frac{\mu^2}{\gamma^2+\mu^2}\frac{(\nabla_\perp\varphi_1)^2}{2} + \frac{\gamma^2}{\gamma^2+\mu^2}(\nabla_\perp\varphi_1)(\nabla_\perp\varphi_2) + \frac{c\beta}{n_{T0}}\gamma + \frac{c}{n_{T0}}g_T\frac{\mu^2}{\gamma^2+\mu^2} = 0, \tag{17}$$

$$\frac{\partial\varphi_2}{\partial z} + \frac{(\nabla_\perp\varphi_2)^2}{2} + \frac{c\beta}{2n_{\omega 0}\omega}(\gamma^2+\mu^2) + \frac{c}{n_{\omega 0}}g_\omega = 0, \tag{18}$$

где

$$\varphi_1 = -\frac{c}{n_{T0}}\Phi_1, \quad \varphi_2 = -\frac{c}{n_{\omega 0}}\Phi_2. \tag{19}$$

Система нелинейных уравнений (15)–(18) для солитонных динамических параметров, входящих в пробные решения (12), (13), достаточно сложна для анализа.

В одномерном случае ($\nabla_\perp = 0$) из (15) и (16) находим $\mu = \text{const}$, $\gamma = \text{const}$. Тогда, полагая $\mu = 1/\tau_p$, $\gamma = \Omega$, из (17) и (19) для однородной среды ($g_T = g_\omega = 0$) будем иметь $\varphi_1 = -c\beta\Omega z/n_{T0}$, $\varphi_2 = -c\beta(\Omega^2 + \tau_p^{-2})z/(2n_{\omega 0}\omega)$. Используя теперь (19), (12), (13) и (11), приходим к одномерному солитонному решению (4)–(6). Таким образом, в случае однородной одномерной среды система (15)–(18) имеет решения, в точности соответствующие временному солитону (4)–(6). Это обстоятельство является важным аргументом в пользу метода применяемого здесь метода УЛ.

3. Аналитические решения для стадии развитой генерации. В целях упрощения сделаем некоторые численные оценки. Из (11)–(13), а также из выражений для α и σ имеем следующее отношение интенсивностей терагерцовой $I_T = cE^2/(4\pi n_{T0})$ и оптической $I_\omega = c|\psi|^2/(2\pi n_{\omega 0})$ компонент:

$$\frac{I_T}{I_\omega} \sim 2\frac{\mu^2}{\omega\gamma}\left(\frac{n_{\omega 0}}{n_{T0}}\right)^2 \frac{\chi^{(2)}(\omega,-\omega)}{\chi^{(2)}(\omega,0)}.$$

Принимая во внимание, что

$$n_{\omega 0}/n_{T0} \sim \chi^{(2)}(\omega,-\omega)/\chi^{(2)}(\omega,0) \sim 1,$$

запишем

$$\frac{I_T}{I_\omega} \sim \frac{\mu}{\omega}\frac{\mu}{\gamma}.$$

Так как $\mu \sim 1/\tau_p$, $\gamma \sim \Omega$, то

$$\frac{I_T}{I_\omega} \sim \frac{1}{(\omega\tau_p)(\Omega\tau_p)}.$$

Сдвиг несущей частоты оптического импульса происходит в нелинейной среде по мере генерации терагерцового излучения и формирования оптико-терагерцового солитона. На входе же в среду данный сдвиг частоты отсутствует ($\Omega = \gamma = 0$). В то же время длительность импульса всегда имеет конечное значение ($\mu \sim 1/\tau_p \neq 0$). Поэтому ниже будем считать выполненным условие $\mu^2 \gg \gamma^2$. Пусть, например, $\omega \approx 10^{15}\,\text{с}^{-1}$, $\tau_p \sim 10^{-13}\,\text{с}$, $\Omega \sim 10^{12}\,\text{с}^{-1}$. Тогда $I_T/I_\omega \sim 10^{-1}$, что соответствует развитой стадии солитонного режима генерации терагерцового излучения. В этом случае система (15)–(18) примет вид

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \rho_1}{\partial z} + \nabla_\perp(\rho_1 \nabla_\perp \varphi_1) = 0, \\ &\frac{\partial \rho_2}{\partial z} + \nabla_\perp(\rho_2 \nabla_\perp \varphi_2) = 0, \end{aligned} \tag{20}$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial z} + \frac{(\nabla_\perp \varphi_1)^2}{2} + \frac{c\beta}{n_{T0}\omega}\frac{\rho_2}{\rho_1^{1/3}} + \frac{c}{n_{T0}} g_T = 0, \tag{21}$$

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial z} + \frac{(\nabla_\perp \varphi_2)^2}{2} + \frac{c\beta}{2n_{\omega 0}\omega}\rho_1^{2/3} + \frac{c}{n_{\omega 0}} g_\omega = 0, \tag{22}$$

где $\rho_1 = \mu^3$, $\rho_2 = \omega\gamma\mu$.

Отсюда имеем

$$\mu = \rho_1^{1/3}, \quad \gamma = \frac{\rho_2}{\omega \rho_1^{1/3}}. \tag{23}$$

Система (20)–(22) формально похожа на уравнения, описывающие двумерную динамику воображаемой двухкомпонентной идеальной жидкости во внешнем поле. Роль внешнего поля здесь играет градиентный волновод, а роль времени – координата z.

Легко видеть, что при условии $g_T/n_{T0} = g_\omega/n_{\omega 0}$ система (20)–(22) является совместной, если положить

$$\rho_1 = \rho, \quad \rho_2 = \frac{n_{T0}}{2n_{\omega 0}}\rho, \quad \varphi_{1,2}(z,\mathbf{r}) = \varphi(z,\mathbf{r}). \tag{24}$$

Отсюда и из (23) имеем

$$\mu^2 = \frac{2n_{\omega 0}}{n_{T0}}\omega\gamma. \tag{25}$$

Полагая здесь $\omega \sim 10^{15}\,\text{с}^{-1}$, $\gamma \sim 10^{11}\,\text{с}^{-1}$, будем иметь $\mu \sim 10^{13}\,\text{с}^{-1}$. Таким образом, условие $\mu^2 \gg \gamma^2$ выполняется с хорошим запасом.

Пусть поперечные профили оптической и терагерцовой линейных восприимчивостей χ_ω и χ_T градиентного волновода имеют параболический вид: $\chi_{\omega,T}(r) = \chi_{\omega 0,T0}(1 - r^2/a_{\omega,T}^2)$. При этом $r \le a \equiv \min\{a_\omega, a_T\}$, где параметр a имеет смысл поперечного радиуса волновода. В этом случае соответствующие показатели преломления обладают поперечными профилями вида

$$n_{T,\omega}(r) = \sqrt{n_{T0,\omega 0}^2 - (n_{T0,\omega 0}^2 - 1)\frac{r^2}{a_{T,\omega}^2}}.$$

Тогда вместо (20)–(22) имеем

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} + \nabla_\perp(\rho \nabla_\perp \varphi) = 0, \tag{26}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} + \frac{(\nabla_\perp \varphi)^2}{2} + \frac{c\beta}{2n_{\omega 0}\omega}\rho^{2/3} + \frac{\kappa^2}{2}r^2 = 0, \tag{27}$$

где

$$\kappa^2 = \frac{n_{T0}^2 - 1}{n_{T0}^2 a_T^2} = \frac{n_{\omega 0}^2 - 1}{n_{\omega 0}^2 a_\omega^2}. \tag{28}$$

Уравнение (26) имеет точное аксиально-симметричное автомодельное решение [34–36]

$$\rho = \frac{1}{\tau_0^3}\frac{R_0^2}{R^2} F\left(\frac{r}{R}\right), \quad \varphi = f(z) + \frac{r^2}{2}\frac{R'}{R}, \tag{29}$$

где $R = R(z)$ – функция координаты z, имеющая смысл апертуры пространственно- временного солитона, второе слагаемое во втором выражении (29) описывает кривизну фазовых волновых фронтов оптической компоненты, R_0 – некоторая постоянная, соответствующая апертуре солитона при плоском фазовом волновом фронте оптической компоненты ($R'(z) = 0$), τ_0 – временная длительность солитона на его центральной оси ($r = 0$) при $R = R_0$, функции $f(z)$ и $F(r/R)$ определяются после подстановки (29) в (27). Совершая данную подстановку, приравняем в правой части выражения при r^0 и r^2 к нулю. Тогда, полагая для локализованного решения

$$F = \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2} \tag{30}$$

при $r \le R$ и $F = 0$ при $r \ge R$, получим уравнения

$$f' = -\frac{R_0^2}{l_r^2}\frac{\mathrm{sgn}(\beta)}{q^{4/3}}, \tag{31}$$

$$q'' = -\frac{\partial U}{\partial q}. \tag{32}$$

Здесь

$$U = \frac{\kappa^2}{q}q^2 + \frac{3\mathrm{sgn}(\beta)}{2l_r^2 q^{4/3}}, \tag{33}$$

$q = R/R_0$, l_r – длина нелинейной рефракции оптической компоненты, определяемая выражением [37]

$$l_r = \sqrt{l_d l_D}, \tag{34}$$

l_d и l_D – дисперсионная и дифракционная длины соответственно:

$$l_d = \frac{2\tau_p^2}{|\beta|}, \quad l_D = \frac{n_{\omega 0}\omega}{c}R_0^2. \tag{35}$$

Уравнение (32) формально описывает динамику ньютоновской частицы единичной массы в поле с "потенциальной энергией" (33). Первое слагаемое в правой части (33) соответствует линейной рефракции градиентного волновода. Второе слагаемое в этом выражении описывает нелинейную рефракцию оптико-терагерцового солитона.

Решив уравнение (32), мы с помощью (31) сможем найти $f(z)$. Используя затем (30) и (29), получим выражения для ρ и φ. Из (24) и (23) определим параметры μ и γ. После подстановки данных параметров в (12), (13) и (11) найдем компоненты полей ψ и E оптико-терагерцового солитона для области $r \le R$. Вне этой области обе компоненты поля равны нулю.

Ниже рассмотрим две различные ситуации, соответствующие аномальной и нормальной ДГС оптической компоненты.

3.1. Самофокусировка при аномальной ДГС ($\beta < 0$). В этом случае "потенциальная энергия" $U(q)$ монотонно убывает до $-\infty$ при уменьшении динамического параметра q. Понятно, что по мере распространения импульса будем иметь $q \to 0$, что соответствует самофокусировке солитона. Исследуем поведение солитона вблизи фокуса, где $q = R/R_0 \ll 1$. При очень малых значениях q в (33) можно пренебречь первым слагаемым. Таким образом влияние волновода в этом случае несущественно. Тогда после интегрирования (32) получим

$$\frac{z_f - z}{l_r} = \frac{1}{\sqrt{3}}\int\limits_0^{R/R_0}\frac{q^{2/3}dq}{\sqrt{1 - q^{4/3}}}, \tag{36}$$

где дистанция самофокусировки

$$z_f = \frac{l_r}{\sqrt{3}}\int\limits_0^1\frac{q^{2/3}dq}{\sqrt{1 - q^{4/3}}} \approx 0.76 l_r. \tag{37}$$

Так как $R/R_0 \ll 1$, в подкоренном выражении (36) можно пренебречь $q^{4/3}$. Тогда имеем приближенно $\frac{z_f - z}{l_r} \approx \frac{1}{\sqrt{3}}\int\limits_0^{R/R_0} q^{2/3}dq = \frac{\sqrt{3}}{5}\left(\frac{R}{R_0}\right)^{5/3}$. Отсюда с учетом (37) найдем

$$R = 1.60 R_0 (1 - z/z_f)^{3/5}. \tag{38}$$

Из (29), (30), (24) и (23) получим

$$\mu = \frac{1}{\tau_p}\sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}}, \tag{39}$$

где временная длительность на оси солитона

$$\tau_p = \tau_0\left(\frac{R}{R_0}\right)^{2/3}. \tag{40}$$

Отсюда, а также из (39) и (25) будем иметь

$$\gamma = \Omega\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right), \tag{41}$$

где "красный" сдвиг несущей частоты на оси солитона

$$\Omega = \Omega_0\left(\frac{R_0}{R}\right)^{4/3}, \tag{42}$$

$\Omega_0 = \frac{n_{T0}}{2n_{\omega 0}\omega\tau_0^2}$.

Подставляя (38) в (31) с учетом (37), после интегрирования и использования (29), (24) и (19) получим

$$\frac{c}{n_T}\Phi_1 = \frac{c}{n_\omega}\Phi_2 = 2.02\frac{R_0^2}{l_r}\left(1 - \frac{z}{z_f}\right)^{1/5} + \frac{3}{10}\frac{r^2}{z_f - z}. \tag{43}$$

Подстановка (38)–(43) в (11)–(13) приводит нас к искомому приближенному решению для оптико-терагерцового солитона вблизи точки самофокусировки.

Из (11)–(13), а также из (38)–(42) видно, что пики интенсивностей обеих компонент солитона имеют следующее пространственное распределение в поперечных сечениях: $I_\omega/I_{\omega 0} = I_T/I_{T0} = (1 - r^2/R^2)^2$. При этом интенсивности $I_{\omega 0}$ и I_{T0} на оси солитона вблизи точки самофокусировки испытывают сингулярность: $I_{\omega 0} \sim I_{T0} \sim (1 - z/z_f)^{-8/5}$.

Из (38), (40) и (42) видно, что самофокусировка солитона сопровождается уменьшением его длительности и сингулярным ростом "красного" сдвига несущей частоты: $\tau_p \sim (1 - z/z_f)^{2/5}$, $\Omega \sim (1 - z/z_f)^{-4/5}$. При этом, как видно из (43), кривизны групповых и фазовых фронтов резко возрастают, что сопровождается значительным уменьшением групповой и фазовой скоростей на оси волновода. Обратная длительность оптико-терагерцового солитона и красный сдвиг несущей частоты оптической компоненты уменьшаются от центров поперечных сечений к периферийным участкам по законам (39) и (41) соответственно. Эти выводы качественно совпадают с численными экспериментами, проведенными в [38].

Взяв в (35) для одноосного кристалла ниобата лития $\beta \sim 10^{-26}\,\text{с}^2/\text{см}$ [39], $\tau_p \sim 10^{-13}\,\text{с}$, $\omega \sim 10^{15}\,\text{с}^{-1}$, $R_0 \sim 10^{-1}$–10^{-2} мм, найдем $l_d \sim l_D \sim 1$ см. Отсюда, а также из (34) и (37) находим $l_r \sim z_f \sim 1$ см.

3.2. Самоканалирование при нормальной ДГС ($\beta > 0$). В этом случае "потенциальная энергия" $U(q)$ имеет локальный минимум. Это соответствует возможности формирования устойчивой оптико-терагерцовой "пули". Так как в точке локального минимума $R' = 0$, то волновые фронты являются плоскими (см. второе выражение (29)). Следовательно, в этой точке $R = R_0$ (или $q = 1$). Таким образом, приходим к условию $(\partial U/\partial q)_{q=1} = 0$. Отсюда, а также из (33)–(35) имеем для поперечного радиуса оптико-терагерцовой пули

$$R_0 = 0.56 a_\omega \sqrt{\frac{n_{\omega 0}}{n_{\omega 0}^2 - 1}\frac{\lambda}{l_d}}, \tag{44}$$

где $\lambda = 2\pi c/\omega$ – длина волны, соответствующая несущей частоте ω.

Полагая здесь $\lambda \sim 10^{-4}$ см, $l_d \sim 1$ см, будем иметь $R_0 \sim 10^{-2} a_\omega$. Пусть $a_\omega \sim 1$ мм. Тогда $R_0 \sim 10^{-2}\,\text{мм} \sim \sim 10\lambda$.

Таким образом, в случае нормальной ДГС в градиентном волноводе возможно формирование устойчивого пространственно-временного солитона, состоящего из оптической и терагерцовой компонент. Принимая во внимание общепринятую терминологию [40], назовем данное связанное состояние оптико-терагерцовой пулей.

Поперечные распределения обратной длительности солитона и красного сдвига несущей частоты оптической компоненты определяются, как и в случае аномальной ДГС, соотношениями (39) и (41) соответственно. Только теперь в них следует совершить замены $\tau_p \to \tau_0$ и $\Omega \to \Omega_0$ (см. (40) и (42) при $R = R_0$).

При приведенных выше параметрах найдем для интенсивности оптической солитонной компоненты на центральной оси волновода: $I_{\omega 0} \sim \left(\frac{c}{4\pi}\right)^3 \frac{\beta^2 \Omega_0}{\chi^{(2)2}\omega \tau_0^2} \sim \sim 10^{10}\,\text{Вт/см}^2$. Для терагерцовой составляющей имеем $I_{T0} \sim 0.1 I_{\omega 0} \sim 10^9\,\text{Вт/см}^2$.

Заметим, что для теоретического описания оптико-терагерцовой пули в градиентном волноводе достаточно ограничиться приближением геометрической оптики, не вдаваясь в тонкости явлений дифракции.

Заключение. Проведенное в настоящей работе теоретической исследование показывает, что на динамику оптико-терагерцового солитона существенное влияние оказывают как изгибная, так и модуляционная неустойчивости. Обе неустойчивости развиваются в связанном нелинейном режиме, влияя друг на друга. Динамику фазовых волновых фронтов невозможно отделить от динамики групповых фронтов.

Градиентный волновод оказывает принципиальное влияние на динамику оптико-терагерцового солитона в области нормальной ДГС для оптической компоненты. Важно, что в этом случае волновод препятствует развитию изгибно-модуляционной неустойчивости, приводя к возможности формирования устойчивой оптико-терагерцовой пули. Если же несущая частота оптической компоненты лежит в области аномальной ДГС, то наличие волновода не имеет принципиального значения. В этом случае обе неустойчивости развиваются в режиме с обострением, приводя к самофокусировке солитона. Здесь, скорее, можно говорить о тенденции к самофокусировке, так как неизвестно, к чему может привести строгий учет дифракции за пределами приближения геометрической оптики. Пока на пути соответствующих аналитических расчетов встают трудности математического характера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 19-02-00234а).

1. P. Y. Han and X.-C. Zhang, Meas. Sci. Tech. **12**, 1747 (2001).
2. B. Fergusson and X.-C. Zhang, Natures Mater. **1**, 26 (2002).
3. А. Е. Щеголев, А. М. Попов, А. В. Богацкая, П. М. Никифорова, М. В. Терешонок, Н. В. Кленов, Письма в ЖЭТФ **111**, 443 (2020) [A. E. Schegolev, A. M. Popova, A. V. Bogatskaya, P. M. Nikiforova,

M. V. Tereshonok, and N. V. Klenov, JETP Lett. **111**, 371 (2020)].

4. Д. А. Шкитов, А. П. Потылицын, Г. А. Науменко, М. В. Шевелев, А. Арышев, Н. Терунума, Дж. Уракава, Письма в ЖЭТФ **111**, 443 (2019) [D. A. Shkitov, A. P. Potylitsyn, G. A. Naumenko, M. V. Shevelev, A. Aryshev, N. Terunuma, and J. Urakawa, JETP Lett. **109**, 771 (2019)].
5. В. А. Костин, И. Д. Ларюшин, Н. В. Введенский, Письма в ЖЭТФ **112**, 81 (2020).
6. S. Stremoukhov and A. Andreev, JOSA B **34**, 233 (2017).
7. У. А. Абдуллин, Г. А. Ляхов, О. В. Руденко, А. С. Чиркин, ЖЭТФ **66**, 1295 (1974) [U. A. Abdullin, G. A. Lyakhov, O. V. Rudenko, and A. S. Chirkin, Sov. Phys. JETP **39**, 633 (1974)].
8. Д. А. Багдасарян, А. О. Макарян, П. С. Погосян, Письма в ЖЭТФ **37**, 498 (1983) [D. A. Bagdasaryan, A. O. Makaryan, and P. S. Pogosyan, JETP Lett. **37**, 594 (1983)].
9. D. H. Auston, K. P. Cheung, J. A. Valdmanis, and D. A. Kleinman, Phys. Rev. Lett. **53**, 1555 (1984).
10. G. Kh. Kitaeva, Laser Phys. Lett. **5**, 559 (2008).
11. А. Н. Тучак, Г. Н. Гольцман, Г. Х. Китаева, А. Н. Пенин, С. В. Селиверстов, М. И. Финкель, А. В. Шепелев, П. В. Якунин, Письма в ЖЭТФ **96**, 97 (2012) [A. N. Tuchak, G. N. Gol'tsman, G. Kh. Kitaeva, A. N. Penin, S. V. Seliverstov, M. I. Finkel, A. V. Shepelev, and P. V. Yakunin, JETP Lett. **96**, 94 (2012)].
12. С. В. Сазонов, Письма в ЖЭТФ **96**, 281 (2012) [S. V. Sazonov, JETP Lett. **96**, 263 (2012)].
13. А. Н. Бугай, ЭЧАЯ **50**, 185 (2019) [A. N. Bugay, Physics of Particles and Nuclei **50**, 210 (2019)].
14. С. В. Сазонов, А. Ф. Соболевский, Письма в ЖЭТФ **75**, 746 (2002) [S. V. Sazonov and A. F. Sobolevskii, JETP Lett. **75**, 621 (2002)].
15. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Мир, М. (1988) [R. K. Dodd, J. C. Eilbeck, J. Gibbon, and H. C. Morris, *Solitons and Nonlinear Wave Equations*, Academic Press, N.Y. (1982)].
16. В. Е. Захаров, ЖЭТФ **62**, 1745 (1972) [V. E. Zakharov, Sov. Phys. JETP **35**, 908 (1972)].
17. D. J. Benney, Stud. Appl. Math. **56**, 81 (1977).
18. J. Hebling, G. Almasi, and I. Z. Cosma, Opt. Express **10**, 1161 (2002).
19. А. Г. Степанов, А. А. Мельников, В. О. Компанец, С. В. Чекалин, Письма в ЖЭТФ **85**, 279 (2007) [A. G. Stepanov, A. A. Mel'nikov, V. O. Kompanets, and S. V. Chekalin, JETP Lett. **85**, 227 (2007)].
20. А. Н. Бугай, С. В. Сазонов, А. Ю. Шашков, Квант. электрон. **42**, 1027 (2012) [A. N. Bugay, S. V. Sazonov, and A. Yu. Shashkov, Quantum Electronics **42**, 1027 (2012)].
21. E. A. Kuznetsov, A. M. Rubenchik, and V. E. Zakharov, Phys. Rep. **142**, 103 (1986).
22. Y. S. Kivshar and D. E. Pelinovsky, Phys. Rep. **331**, 117 (2000).
23. B. A. Malomed, D. Mihalache, F. Wise, and L. Torner, J. Opt. B: Quantum Semiclassical Opt. **7**, R53 (2005).
24. В. Е. Захаров, А. М. Рубенчик, ЖЭТФ **65**, 99 (1973) [V. E. Zakharov and A. M. Rubenchik, Sov. Phys. JETP **38**, 494 (1974)].
25. D. E. Pelinovsky, Math. Comput. Simul. **55**, 585 (2001).
26. G. Lombardi, W. Van Alphen, S. N. Klimin, and J. Tempere, Phys. Rev. A **96**, 033609 (2017).
27. А. Н. Бугай, С. В. Сазонов, Изв. РАН. Сер. Физическая **82**, 1610 (2018) [A. N. Bugay and S. V. Sazonov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **82**, 1468 (2018)].
28. P. J. Caudrey, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and R. K. Bullough, J. Phys. A: Math. Nucl. Gen. **6**, L53 (1973).
29. С. В. Сазонов, А. Ф. Соболевский, ЖЭТФ **123**, 1160 (2003) [S. V. Sazonov and A. F. Sobolevskii, JETP **96**, 1019 (2003)].
30. N. Yajima and M. Oikawa, Prog. Theor. Phys. **56**, 1719 (1976).
31. T. Hattori and K. Takeuchi, Opt. Express **15**, 8076 (2007).
32. С. К. Жданов, Б. А. Трубников, ЖЭТФ **92**, 1612 (1987) [S. K. Zhdanov and B. A. Trubnikov, Sov. Phys. JETP **65**, 904 (1987)].
33. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, С. Л. Мушер, Письма в ЖЭТФ **41**, 125 (1985) [V. E. Zakharov, E. A. Kuznetsov, and S. L. Musher, JETP Lett. **41**, 154 (1985)].
34. С. А. Ахманов, А. П. Сухоруков, Р. В. Хохлов, УФН **93**, 19 (1967) [S. A. Akhmanov, A. P. Sukhorukov, and R. V. Khokhlov, Sov. Phys. Usp. **10**, 609 (1968)].
35. Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко, *Колебания, волны, структуры*, Физматлит, М. (2001), 496 с. [N. V. Karlov and N. A. Kirichenko, *Oscillations, Waves, Structures*, Fizmatlit, Moscow (2001), 496 p. [in Russian]].
36. С. В. Сазонов, ЖЭТФ **130**, 145 (2006) [S. V. Sazonov, JETP **103**, 126 (2006)].
37. S. V. Sazonov, Phys. Wave Phenom. **24**, 31 (2016).
38. A. N. Bugay, S. V. Sazonov, and P. Yu. Shestakov, Proc. SPIE **10684**, 106841M (2018).
39. А. Ярив, *Квантовая электроника*, Сов. радио, М. (1980), 488 с. [A. Yariv, *Quantum Electronics*, John Wiley & Sons, N.Y. (1989), 676 p.].
40. Ю. С. Кившарь, Г. П. Агравал, *Оптические солитоны: от волоконных световодов к фотонным кристаллам*, Физматлит, М. (2005), 648 с. [Yu. S. Kivshar and G. P. Agrawal, *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals*, Academic Press, N.Y. (2003), 540 p.].

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 5, pp. 312 – 312

Insight into structural, electronic, magnetic and elastic properties of full-Heusler alloys Co_2YPb (Y = Ti, V, Fe and Mo): A first-principles study

A. Zitouni[+], *G. Remil*[+], *B. Bouadjemi*[+1)], *W. Benstaali*[+], *T. Lantri*[+], *M. Matougui*[+], *M. Houari*[+], *Z. Aziz*[+], *S. Bentata*[+*]

[+]*Laboratory of Technology and of Solids Properties, Abdelhamid Ibn Badis University, 27000 Mostaganem, Algeria*

[*]*Laboratory of Quantum Physics of Matter and Mathematical Modeling (LPQ3M), Mustapha Stambouli University of Mascara, 29000 Mascara, Algeria*

Submitted 18 July 2020
Resubmitted 27 July 2020
Accepted 29 July 2020

DOI: 10.31857/S123456782017005X

We have studied the electronic, magnetic and elastic properties of full-Heusler alloys Co_2YPb (Y = Ti, V, Fe and Mo) using FP-LAPW method which is based on DFT implemented in the wien2k code with GGA and modified Becke–Johnson (mBJ) approximations. Electronic and magnetic properties show that Co_2YPb (Y = Ti, V, Fe and Mo) are half-metallic and ferromagnetic. Elastic properties indicate that Co_2YPb are mechanically stable and ductile.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020170026

1)e-mail: bbouadjemi@yahoo.fr

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 313 – 318

Бозе конденсация и спиновая сверхтекучесть магнонов в перпендикулярно намагниченной пленке железо-иттриевого граната

П. М. Ветошко[+*], *Г. А. Князев*[+], *А. Н. Кузмичев*[+], *А. А. Холин*[*], *В. И. Белотелов*[+*×], *Ю. М. Буньков*[+*1)]

[+]*Российский квантовый центр, 143025 Сколково, Москва, Россия*

[*]*Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, 295007 Симферополь, Россия*

[×]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 22 июля 2020 г.
После переработки 31 июля 2020 г.
Принята к публикации 1 августа 2020 г.

Экспериментально исследовано образование Бозе конденсата магнонов (мБЭК) в перпендикулярно намагниченной пленке железо иттриевого граната при радиочастотной накачке в полосковой линии. Исследованы характеристики нелинейного магнитного резонанса и пространственное распределение Бозе конденсата магнонов в градиенте магнитного поля. В этих экспериментах Бозонная система магнонов ведет себя аналогично Бозе конденсату магнонов в антиферромагнитном сверхтекучем ^{3}He-B, детально исследованному ранее. Магнонный БЭК образует когерентно прецессирующее состояние, обладающее свойствами магнонной сверхтекучести. Его устойчивость определяется потенциалом отталкивания между возбужденными магнонами, который компенсирует неоднородность магнитного поля.

DOI: 10.31857/S1234567820170061

В настоящее время большой интерес вызывают макроскопические квантовые явления, которые могут быть использованы при создании платформ для квантовых вычислений. Недавний успех в создании фирмой Google квантового компьютера на основе сверхпроводящих кубитов [1] стимулировал поиск и других подобных систем. В частности, предполагается использовать явление магнонной сверхтекучести в качестве основы для магнонного квантового процессора [2]. В данной статье мы обращаем внимание на систему когерентных магнонов, возникающую при возбуждении нелинейного магнитного резонанса в пленке железо иттриевого граната (ЖИГ), намагниченной перпендикулярно плоскости. Динамические свойства этой системы во многом аналогичны свойствам магнонов в сверхтекучем ^{3}He-B, в котором и была обнаружена магнонная сверхтекучесть и когерентная прецессия намагниченности [3, 4]. В данной статье мы представляем вниманию читателей эксперимент по образованию состояния когерентно прецессирующих магнонов в ЖИГ в сильно неоднородном магнитном поле, результаты которого аналогичны пионерским наблюдениям этого эффекта в ^{3}He-B [5, 6].

Исследования пленок ЖИГ в условиях сильного возбуждения привели к наблюдению эффекта нелинейного резонанса, в котором частота прецессии зависит от амплитуды его возбуждения (*Foldover resonance*) [7]. Приблизительное аналитическое решение уравнений Ландау–Лифшица в условиях нелинейного резонанса удается получить только для простейшего случая одиночного осциллятора в пределе относительно небольшого сдвига частоты [8]. Реальные макроскопические образцы обладают пространственной неоднородностью и должны описываться набором связанных осцилляторов. Теоретический анализ осложняется тем, что возбуждение резонанса также пространственно неоднородно, в особенности при его возбуждении полосковой линией. Кроме того, в дополнение к локальному затуханию Гильберта следует учесть и процессы релаксации, связанные со спиновой диффузией при пространственной неоднородности резонанса, а также и взаимодействие с окружающей средой. Все эти факторы приводят к невозможности построения теории, реально описывающей сигналы нелинейного резонанса в пленках ЖИГ [9]. Использование программ микромоделирования также ограничено, так как необходимое время моделирования должно превышать время жизни магнона, которое для ЖИГа может достигать

1) e-mail: y.bunkov@rqc.ru

100000 периодов прецессии. Кроме того, это время катастрофически растет с увеличением размеров образца. Однако для описания резонанса в случае большого уровня возбуждения можно использовать квантовые свойства магнонов, а именно то, что магноны являются Бозе частицами и конденсируются в магнонный Бозе конденсат (мБЭК) при их достаточной концентрации. Именно этот подход, предлагаемый в данной статье, и позволяет описать основные свойства нелинейного резонанса в магнетиках.

В отличие от атомов, число которых сохраняется, плотность магнонов может изменяться вследствие их рождения и уничтожения из физического вакуума магнитоупорядоченного состояния, в соответствии с формализмом Хольштейна–Примакова [10]. При низкой концентрации газ магнона может рассматриваться как спиновые волны – объект классической физики, описываемый уравнениями Ландау–Лифшица. При конечной температуре число термо активированных магнонов определяется статистикой Бозе и всегда ниже критической плотности образования мБЕК. Однако плотность магнонов можно существенно повысить путем возбуждения дополнительных магнонов из магнитоупорядоченного состояния (физического вакуума) методами магнитного резонанса. При этом отклонение намагниченности от равновесного направления соответствует рождению магнонов, число которых определяется изменением продольной намагниченности системы, $N_r = (M_0 - M_z)_r/\hbar$, где N_r – плотность магнонов, $(M_0 - M_z)$ – разница между полной намагниченностью и ее проекцией на ось стационарного магнитного поля. Плотность магнонов, необходимую для образования Бозе конденсата, легко рассчитать для различных магнитоупорядоченных веществ, как продемонстрировано в [11]. В частности, критическая плотность магнонов в перпендикулярно намагниченной пленке ЖИГ соответствует отклонению намагниченности на 2.5°, что в условиях экспериментов соответствует сдвигу внешнего поля около 2 Э, т.е. все описываемые результаты, полученные при мощности накачки более 1 дБм, соответствуют условиям сформировавшегося мБЭК, согласно статистике.

Строго говоря, свойства мБЕК выходят за рамки классической физики и традиционно описываются формализмом Гросс–Питаевского, разработанным для описания атомарного бозе конденсата [12]. Магнонный БЕК является макроскопическим квантовым состоянием, описываемым волновой функцией:

$$|\Psi|_r = \mathcal{N}_r{}^{1/2} e^{i\mu t_r + i\alpha_r}, \tag{1}$$

где μ и α являются химическим потенциалом и фазой волновой функции, а N_r – плотность возбужденных магнонов. Химический потенциал магнонов определяется их частотой прецессии и может быть пространственно неоднородным. Градиент фазы волновой функции приводит к сверхтекучему потоку магнонов, направленному в область меньшего магнитного поля, т.е. меньшего химического потенциала:

$$\mathbf{J} = \mathcal{N}\boldsymbol{\nabla}\alpha. \tag{2}$$

В перпендикулярно намагниченной пленке ЖИГ частота прецессии зависит от плотности возбужденных магнонов [13]:

$$\omega_N = \omega_0 + \gamma 4\pi M_0(\cos\beta), \tag{3}$$

где $\omega_0 + \gamma 4\pi M_0$ – частота прецессии при малом возбуждении, которая определяется внешним полем и полем размагничивания. Мы здесь рассматриваем образец достаточно больших размеров, на котором величина обменного взаимодействия не может синхронизовать частоту прецессии на размерах образца. Сверхтекучий поток магнонов в область с меньшим эффективным магнитным полем приводит к увеличению их плотности и, соответственно, увеличению частоты прецессии. Этот процесс происходит до тех пор, пока не установится однородное состояние прецессии. То есть состояние с когерентной прецессией намагниченности, аналогичное тому, которое было открыто в ^{3}He-B [14, 15]. Если радиочастотное (РЧ) поле возбуждает магноны локально, как в случае с полосковой линией, то эти магноны сверхтекучим током переносятся в область с меньшим магнитным полем до тех пор, пока в ней не установится частота прецессии, равная частоте накачки, как и в экспериментах со сверхтекучем ^{3}He-B. Детально этот процесс описан в [16]. Образование состояния с когерентной прецессией намагниченности кардинально упрощает задачу теоретического описания нелинейного резонанса. В этом случае мы имеем дело с макроскопическим конденсатом магнонов, заполняющим все пространство образца, эффективное поле в котором меньше, чем поле, соответствующее частоте накачки. При этом намагниченность прецессирует когерентно на частоте накачки. Это состояние не зависит от мощности накачки, что является отличительной чертой формирования мБЭК. МБЭК автоматически адсорбирует энергию из возбуждающего поля, соответствующую его потерям [14], которые зависят от величины отклонения намагниченности. Сигнал нелинейного резонанса распадается, как только величина накачка не может компенсировать релаксацию. В данной статье мы впервый экспериментально

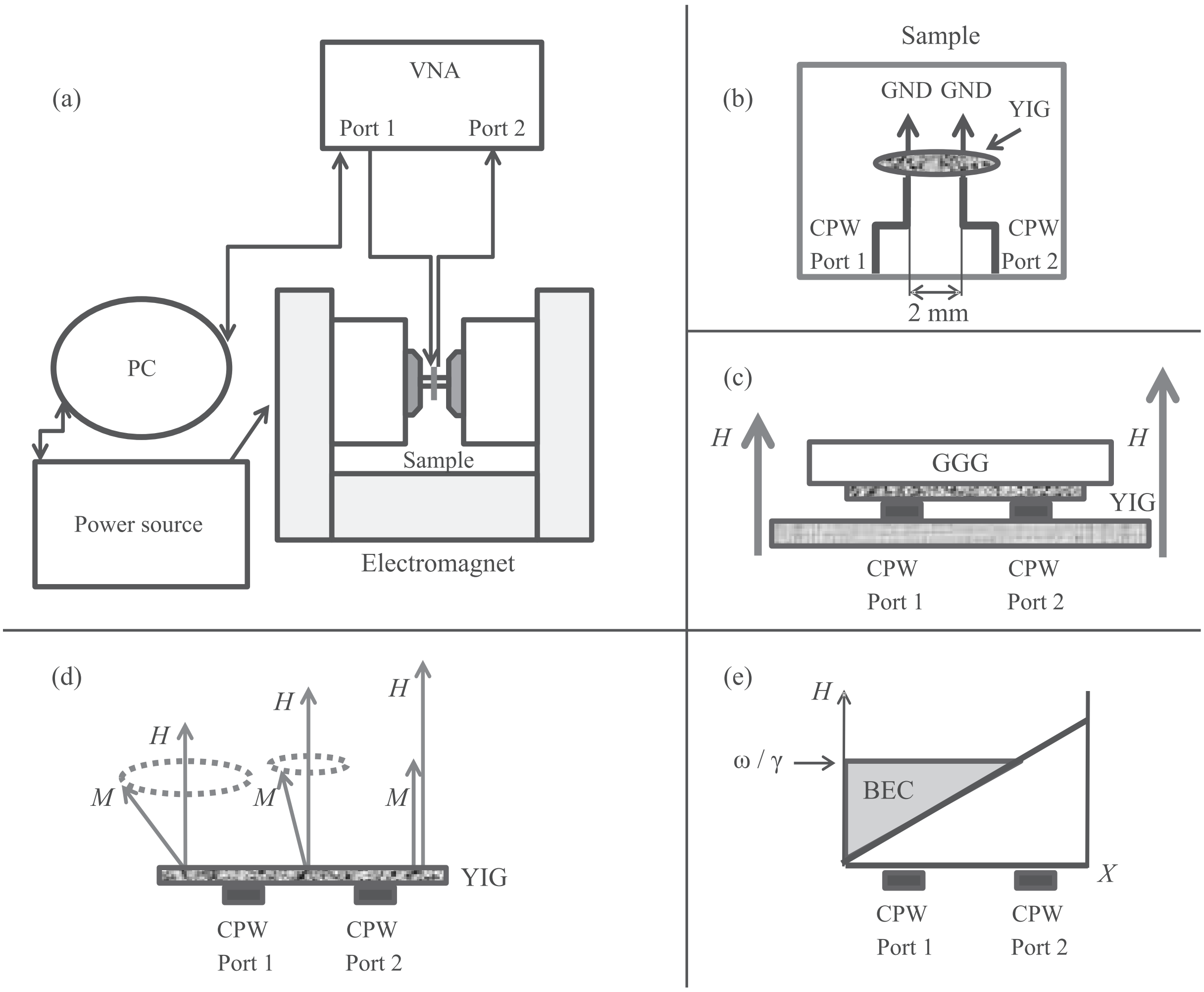

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема установки (a), плато с образцом, вид сверху (b) и с боку (c), распределение углов отклонения когерентно прецессирующей намагниченности в градиенте магнитного поля (d) и область заполнения образца магнонным БЭК (e)

показываем образование такого состояния в пленке ЖИГ и, в частности, в условиях, когда приложен достаточно большой градиент магнитного поля.

Общая схема установки показана на рис. 1a. Эксперименты проводились на двух образцах пленки ЖИГ толщиной 6 и 0.6 мкм. Первый образец имел форму круга диаметром 0.5 мм, а второй – форму эллипса с диаметрами 5 и 0.5 мм. Пленки выращены в Крымском федеральном университете. Первый образец располагался на одной полосковой линии, а второй – на двух полосковых линиях, расположенных симметрично от центра образца на растоянии 2 мм друг от друга, как показано на рис. 1b. Ширина полосковых линий составляла 0.2 мм. На образец подавалось магнитное поле, перпендикулярное плоскости пленки. Если в первом эксперименте поле было практически однородно, то во втором оно имело градиент, направленный вдоль пленки, как показано на Рис. 1c. В первом случае резонанс возбуждался на частоте 3.7 ГГц а во втором – 1.856 ГГц. В эксперименте использовался векторный анализатор цепей P5023A фирмы Кейсайт. РЧ накачка подавалась на первый полосок. При возбуждении резонанса амплитуда РЧ поле в полоске уменьшалось. На рисунке 2 показано уменьшение мощности РЧ при сканировании поля вниз при разных мощностях возбуждения. Важное наблюдение заключается в том, что мощность, поглощаемая образцом, не зависит от мощности, подаваемой на полосок. Это кардинально противоречит теории нелинейного резонанс [7, 8], однако полностью соответствует свойствам магнонного БЭК, исследованным ранее в ^{3}He-B. Действительно, состояние мБЭК полностью определяется его химическим потенциалом, который зависит от частоты

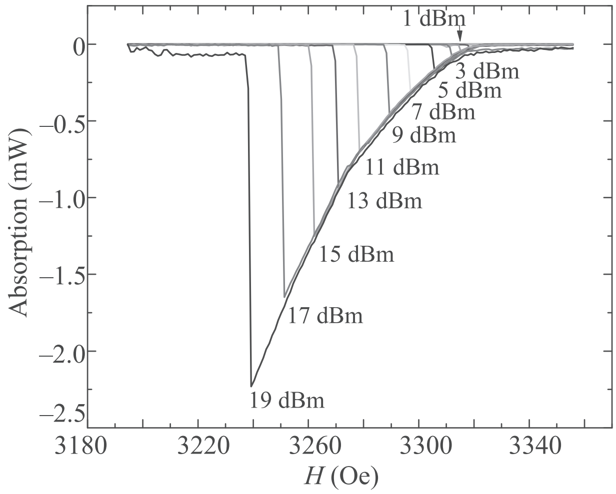

Рис. 2. (Цветной онлайн) Изменение поглощения РЧ накачки в первом эксперименте при уменьшении внешнего магнитного поля при разных мощностях накачки, указанных около соответствующих кривых

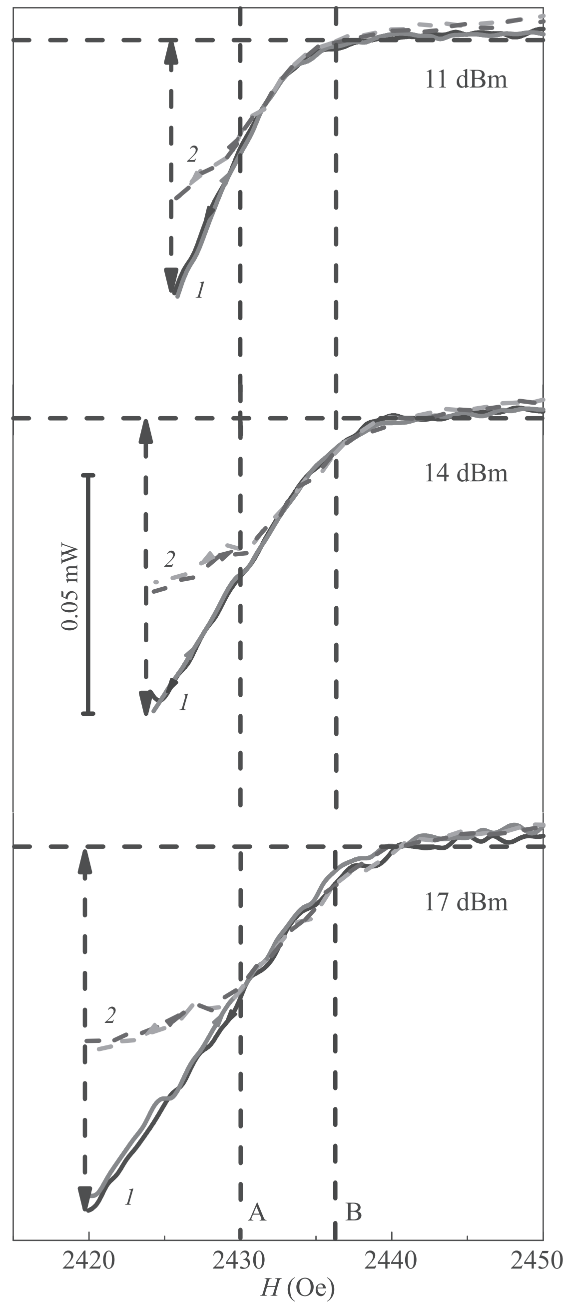

Рис. 3. (Цветной онлайн) Изменение поглощения мощности накачки во втором эксперименте при разных мощностях накачки. Линии *1* соответствуют сигналу с первого полоска, а *2* – со второго. Амплитуда сигнала со второго полоска увеличена в 5 раз для сравнения с сигналом с первого. Показаны также сигналы и при сканировании поля вверх. Обращает на себя внимание то, что они совпадают с сигналами при сканировании поля вниз. Таким образом, в случае с градиентом поля гистерезис не наблюдается

накачки, но не от ее амплитуды. Мощность накачки определяет ту величину отклонения прецессирующей намагниченности и сдвига поля, при которой ее амплитуды не хватит для компенсации релаксации магнонов в мБЭК.

Другим свойством мБЭК является то, что он должен заполнять все пространство, в котором эффективное магнитное поле меньше, чем соответствующая частота накачки. Для подтверждения этого свойства мБЭК мы использовали второй образец и две полосковые линии (рис. 1b, c). Образец был помещен в градиент магнитного поля порядка 3.5 Э на мм вдоль длинной оси образца (рис. 1d, e). МБЭК возбуждался первым полоском. В случае однородного поля второй полосок принимал сигнал с первого, который повторял форму сигнала на первом полоске, уменьшенную приблизительно в 5 раз. Отличить этот наведенный сигнал от сигнала излучения мБЭК не представлялось возможным. Однако при наложении градиента магнитного поля сигнал со второго полоска кардинально изменился как показано на рис. 3. При сканировании поля вниз, в точке B образовывается мБЭК в районе первого полоска. При дальнейшем сканировании поля граница мБЭК, которая соответствует условию $H = \omega/\gamma$ (см. рис. 1e), двигается ко второму полоску и в точке A достигает его. При этом второй полосок начинает принимать сигнал излучения от мБЭК. На рисунке 4 показана мощность сигнала излучения мБЭК, принимаемого вторым полоском. Область получения сигнала от мБЭК не зависит от мощности РЧ накачки, а только от разности полей в области первого и второго полосков. Этот эксперимент напрямую показывает пространственный перенос магнонов из области возбуждающего в

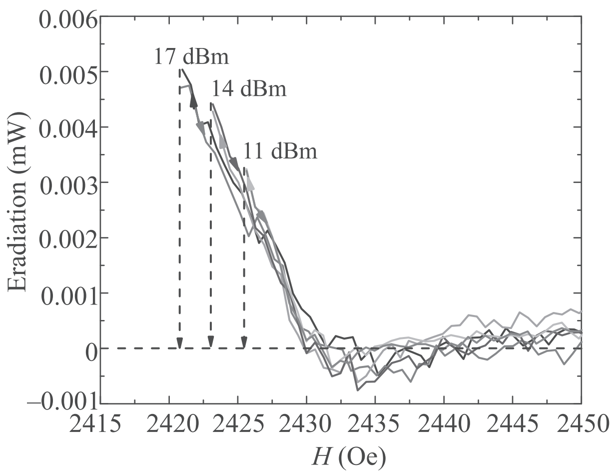

Рис. 4. (Цветной онлайн) Сигналы дополнительного излучения от мБЭК во втором полоске, как функция поля при мощности накачки 17, 14 и 11 дБм

область приемного полоска. Этот перенос невозможен в случае нормального газа магнонов, и объясняется сверхтекучем потоком магнонов, вызванным градиентом химического потенциала. Аналогичный эксперимент был проведен и в сверхтекучем ^{3}He-B, в котором были исследованы свойства сверхтекучего тока магнонов между двумя РЧ катушками [17]. Обращает на себя внимание также то, что при обратном ходе сканирования поля гистерезис не возникает, как показано на рис. 3. Этот эффект нерезонансного возбуждения был ранее отмечен в $MnCO_3$ [18]. РЧ поле возбуждает магноны в модах неоднородного резонанса в градиенте магнитного поля, которые затем конденсируются в однородный мБЭК.

Полученные результаты однозначно подтверждают формирование мБЭК в пленке ЖИГ, намагниченной перпендикулярно. Сигнал однородной прецессии на втором полоске мог возникнуть только, если все пространство с меньшим полем заполнено однородно прецессирующим мБЭК. Результаты по исследованию пленок ЖИГ в ЭПР-спектрометре также подтверждают формирование мБЭК [19]. Также недавно в ЖИГ было обнаружено формирование долгоживущего сигнала индукции [20], во многом аналогичного сигналам в ^{3}He-B [21, 22]. Наконец, в нескольких работах с антиферромагнитными образцами $MnCO_3$ и $CsMnF_3$ были также обнаружены эффекты, показывающие существование мБЭК и магнонной сверхтекучести [23–26]. Таким образом, можно сделать вывод о том, что магнонная сверхтекучесть в твердотельных магнетиках имеет ту же самую природу, что и в сверхтекучем ^{3}He-B, несмотря на принципиальную разницу их основного состояния [27, 28].

Следует обратить внимание на то, что полученное состояние является сверхтекучем в том смысле, что отклонение от него вызывает образование градиентов фазы прецессии, которые возбуждают сверхтекучий ток магнонов, протекающий до тех пор, пока не исчезнут градиенты и не восстановится когерентность. В большом цикле экспериментальных работ с различными фазами сверхтекучего ^{3}He были получены все магнонные аналоги известных сверхтекучих и сверхпроводящих эффектов, таких как сверхтекучий спиновый ток в канале и проскальзывание фазы при достижении его критического значения [17, 29], спин-токовый эффект Джозефсона [30, 31], образование квантовых вихрей при круговом токе намагниченности [32], Голдстоуновские моды колебаний [33–35] и т.д.

В настоящее время ведутся интенсивные исследования другого типа мБЭК, возникающего в продольно намагниченной пленке ЖИГ [36–39]. В этой конфигурации возбужденные магноны притягиваются. Поэтому однородная прецессия неустойчива и распадается на спиновые волны, как было показано экспериментально на примере сверхтекучего ^{3}He-A [40, 41]. Соответственно, о сверхтекучем состоянии говорить не приходится, так как критическая скорость Ландау равна нулю. В случае продольной намагниченности пленки ЖИГ минимум энергии соответствует бегущим магнонам, которые и образуют нетривиальный мБЭК. Если мБЕК, рассмотренный в первом случае, соответствует классическому атомарному БЭК покоящихся атомов, то для мБЭК второго типа нет аналогии в мире частиц. Однако он также остается весьма интересным объектом для исследований и применений.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, Мегагрант # 075-15-2019-1934.

1. F. Arute, K. Arya, R. Babbush et al. (Collaboration), Nature **574**, 505 (2019).
2. Yu. M. Bunkov, ЖЭТФ **158**, 24 (2020).
3. А. С. Боровик-Романов, Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, Письма в ЖЭТФ **40**, 256 (1984).
4. И. А. Фомин, Письма в ЖЭТФ **40**, 260 (1984).
5. А. С. Боровик-Романов, Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, К. Флахбарт, ЖЭТФ **88**, 2025 (1985).
6. G. E. Volovik, J. Low Temp. Phys. **153,** 266 (2008).

7. P. W. Anderson and H. Suhl, Phys. Rev. **100**, 1788 (1955).
8. Y. S. Gui, A. Wirthmann, and C. Hu, Phys. Rev. B **80**, 184422 (2009).
9. Yu. K. Fetisov, IEEE Trans. Magn. **35**, 4511 (1999).
10. T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
11. Yu. M. Bunkov and V. L. Safonov, J. Magn. Magn. Mater. **452,** 30 (2018).
12. J. Rogel-Salazar, Eur. J. Phys. **34**, 247 (2013).
13. Yu. V. Gulyaev, P. E. Zilberman, A. G. Temiryazev, and M. P. Tikhomirova, Phys. Solid State **42,** 1062 (2000).
14. 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).
15. 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 Univ. Press, Oxford (2013), ch. 4.
16. Yu. M. Bunkov, Appl. Magn. Reson., DOI: 10.1007/s00723-020-01223-z (2020).
17. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, Phys. Rev. Lett. **62**, 1631 (1989).
18. Yu. M. Bunkov, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safiullin, and M. S. Tagirov, JETP Lett. **109**, 43 (2019).
19. Yu. M. Bunkov, A. Farhutdinov, A. N. Kuzmichev, T. R. Safin, P. M. Vetoshko, V. I. Belotelov, and M. S. Tagirov, arxiv.1911.03708 (2019).
20. Ю. М. Буньков, П. М. Ветошко, А. Н. Кузмичев, Г. В. Мамин, С. Б. Орлинский, Т. Р. Сафин, В. И. Белотелов, М. С. Тагиров, Письма в ЖЭТФ **111**, 52 (2020).
21. Yu. M. Bunkov, S. N. Fisher, A. M. Guenault, and G. R. Pickett, Phys. Rev. Lett. **69**, 3092 (1992).
22. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, Phys. Rev. Lett. **98**, 265302 (2007).
23. Yu. M. Bunkov, E. M. Alakshin, R. R. Gazizulin, A. V. Klochkov, V. V. Kuzmin, T. R. Safin, and M. S. Tagirov, JETP Lett. **94**, 68 (2011).
24. Yu. M. Bunkov, E. M. Alakshin, R. R. Gazizulin, A. V. Klochkov, V. V. Kuzmin, V. S. L'vov, and M. S. Tagirov, Phys. Rev. Lett. **108**, 177002 (2012).
25. M. S. Tagirov, E. M. Alakshin, Yu. M. Bunkov, R. R. Gazizulin, S. A. Zhurkov, L. I. Isaenko, A. V. Klochkov, A. M. Sabitova, T. R. Safin, and K. R. Safiullin, J. Low Temp. Phys. **175**, 167 (2014).
26. Yu. M. Bunkov, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safiullin, and M. S. Tagirov, JETP Lett. **106**, 677 (2017).
27. Yu. M. Bunkov, J. Magn. Magn. Mater. **310**, 1476 (2007).
28. Yu. M. Bunkov and G. E. Volovik, J. Low Temp. Phys. **150**, 135, (2008).
29. А. С. Боровик-Романов, Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, Письма в ЖЭТФ **45**, 98 (1987).
30. А. С. Боровик-Романов, Ю. М. Буньков, А. де Ваард, В. В. Дмитриев, В. Макроциева, Ю. М. Мухарский, Д. А. Сергацков, Письма в ЖЭТФ **47**, 400 (1988).
31. Yu. M. Bunkov, SPIN **9**, 1940005 (2019).
32. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, Yu. M. Mukharskiy, and D. A. Sergatskov, Physica B **165**, 649 (1990).
33. Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, Письма в ЖЭТФ **43**, 131 (1986).
34. Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskiy, Physica B **178**, 196 (1992).
35. M. Kupka and P. Skyba, Phys. Rev. B **85**, 184529 (2012).
36. P. Nowik-Boltyk, O. Dzyapko, V. E. Demidov, N. G. Berloff, and S. O. Demokritov, Sci. Rep. **2,** 482 (2012).
37. D. A. Bozhko, A. J. E. Kreil, H. Yu. Musiienko-Shmarova, A. A. Serga, A. Pomyalov, V. S. L'vov, and B. Hillebrands, Nat. Commun. **10**, 2460 (2019).
38. D. A. Bozhko, A. J. E. Kreil, H. Yu. Musiienko-Shmarova, A. A. Serga, A. Pomyalov, V. S. L'vov, and B. Hillebrands, Nature Commun. **10**, 2460 (2019).
39. M. Schneider, T. Braacher, D. Breitbach et al. (Collaboration), Nature Nanotechn., DOI: 10.1038/s41565-020-0671-z (2020).
40. A. S. Borovik-Romanov, Yu. M. Bunkov, V. V. Dmitriev, and Yu. M. Mukharskiy, JETP Lett. **39**, 469 (1984).
41. Ю. М. Буньков, В. В. Дмитриев, Ю. М. Мухарский, ЖЭТФ **88**, 1218 (1985).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 319 – 324

Транспортные свойства перфорированных бислойных графеновых нанолент – исследование методом динамики волнового пакета

В. А. Демин[+], Д. Г. Квашнин[+], П. Ванчо[*], Г. Марк[*], Л. А. Чернозатонский[+×1)]

[+]*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, 119334 Москва, Россия*

[*]*Институт технической физики и материаловедения, H-1525 Будапешт, Венгрия*

[×]*Школа химии и технологии полимерных материалов, Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова, 117997 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 июня 2020 г.
После переработки 7 августа 2020 г.
Принята к публикации 7 августа 2020 г.

В работе проведено исследование проводящих свойств перфорированных двухслойных графеновых нанолент методом динамики волнового пакета. С помощью теоретической модели проведена оценка транспортных свойств примеров такой наноструктуры в зависимости от способа их присоединения к электроду. Определено влияние нанопоры на прохождение волнового пакета через двухслойные наноленты при их двух разных конфигурациях. Данные исследования могут стать первой предпосылкой для потенциального применения таких объектов в качестве элементов электронных и оптоэлектронных схем.

DOI: 10.31857/S1234567820170085

Введение. Графеновые наноленты (ГНЛ) – одномерные полосы из графена, оптические, электронные и магнитные свойства которых определяются их шириной и структурой краев. ГНЛ с краями типа “зиг-заг” являются металлами [1], а наноленты с краями типа “кресло” – полупроводники, величина запрещенной зоны которых зависит от их ширины [2]. Также возможно управление электронными свойствами графеновых нанолент путем деформации [3] или адсорбции атомов на их поверхность [4]. Зависимость запрещенной зоны ГНЛ от их структуры делает их идеальными для применения в качестве соединительных элементов. Благодаря этому устройства на основе ГНЛ способны стать эффективным заменителем кремниевых аналогов в наноустройствах нового поколения. В настоящее время активно исследуются возможности применения ГНЛ в качестве различных элементов электроники [5]. Современные технологии уже позволяют синтезировать ГНЛ шириной от нескольких десятых нанометра различными способами, такими как электронная литография, разрезание нанотрубок, самосборка молекул и др. [6].

Помимо монослойных структур, особый интерес представляют наносистемы на основе двухслойного графена, в котором закон дисперсии носителей зарядов имеет квадратичный вид, в отличие от однослойного графена [7]. Стоит отметить, что электронными свойствами двухслойного графена можно легко управлять, например, посредством приложения внешнего электрического поля [8, 9] или молекулярной адсорбции [10, 11].

Перспективным направлением для возможности управления электронными свойствами наноструктур на основе графена является создание пор нанометрового размера [12]. В отличие от пор в монослойном графене, нанопоры в двухслойном графене являются замкнутыми, что приводит к специфичности их электронных свойств, а также к их химической стабильности в присутствии только топологических дефектов на границе нанопоры [13–15]. Более того, ранее было предсказано, что соединение краев в нанопоре двухслойного графена является спонтанным процессом [14]. Образование структур такого рода было недавно подтверждено экспериментально [16, 17]. Также в работе [18] был показан переход полуметалл–полупроводник на примере трехслойных графеновых систем с порами. Все это делает пористые многослойные графеновые структуры чрезвычайно интересным объектом для изучения особенностей их свойств с перспективой применения в наноэлектронике будущего.

Подобно двухслойному графену с периодически расположенными нанопорами, двухслойные или бислойные ГНЛ с нанопорами также представляют особый интерес научного сообщества, как новый класс квазиодномерных углеродных материалов. Как и в

1)e-mail: chernol-43@mail.ru

случае однослойных ГНЛ, носители заряда в бислойных ГНЛ также ограничены в двух пространственных направлениях. Электронными свойствами таких структур также можно управлять посредством изменения их ширины [19, 20]. Кроме того, было показано, что электронные и транспортные свойства бислойных ГНЛ сильно зависят от приложенной разности потенциалов между слоями [19–21], что было также продемонстрировано экспериментально [22]. Таким образом, наличие нанопор в бислойных ГНЛ может значительно сказываться на их физико-химических свойствах, что требует тщательного фундаментального изучения.

В данной работе проведено исследование проводящих свойств бислойных графеновых нанолент с нанопорами путем моделирования процесса распространения электронного волнового пакета через нее.

Методы исследования. Метод динамики волнового пакета (ВП) представляет собой компьютерное моделирование распространения ВП через локализованный потенциал [23]. Распространение ВП в зависимости от времени рассчитывается путем решения нестационарного уравнения Шредингера. Результат вычисления динамики ВП дает детальную информацию о процессе распространения ВП с течением времени.

Модельная система состоит из электрода – источника ВП, локализованного потенциала, который задает рассматриваемую структуру, и абсорбирующего потенциала. Металлический электрод описывается как электронный газ с энергией Ферми $E_F = 5$ эВ и работой выхода $W = 4.81$ эВ. Начальная кинетическая энергия ВП равна $E_k = 5$ эВ. Псевдопотенциал связан с каждым sp^2-атомом углерода и имеет вид $V(r) = \sum A_i \exp(-a_i r^2)$, значения коэффициентов A_1, A_2 и A_3 равны 10.607, 29.711 и 98.911 эВ, параметров a_1, a_2 и a_3 – 0.12126, 1.9148 и 0.60078 r_{Bohr}^{-2} соответственно [24]. Данный псевдопотенциал был разработан для графена и графита, однако он может успешно применяться и для дефектных sp^2 гибридизованных структур [25–28]. После выхода из электрода ВП проходит через полученный локализованный потенциал и далее исчезает на абсорбирующем потенциале, не отражаясь. Решением нестационарного уравнения Шредингера является набор волновых функций $\psi(r,t)$. Далее проводится преобразование Фурье $\psi(r,t) \to \psi(r,E)$ для разделения энергий ВП. Полученная функция $\psi(r,E)$ не имеет зависимости от времени, таким образом мы можем увидеть картину распространения составляющей ВП с определенной энергией. Ранее данная методика применялась для изучения особенности электронного транспорта через углеродные нанотрубки [29], границы зерен графена [30], а также биграфеновые наносетки [14].

Атомная структура бислойной ГНЛ была рассчитана с помощью метода молекулярной динамики, реализованного в программном пакете LAMMPS [31] с использованием эмпирического потенциала AIREBO (Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order) [32]. Оптимизация геометрии проводилась до тех пор, пока силы, действующие на каждый атом, не становились менее 10^{-4} эВ/Å.

Результаты и их обсуждение. В качестве модельной системы была выбрана бислойная графеновая нанолента типа “кресло” 45AGNR шириной 55 Å с гексагональной нанопорой диаметром 15.5 Å, края которой соединены между собой ковалентно (рис. 1). Наличие нанопоры влияет на величину межслоевого

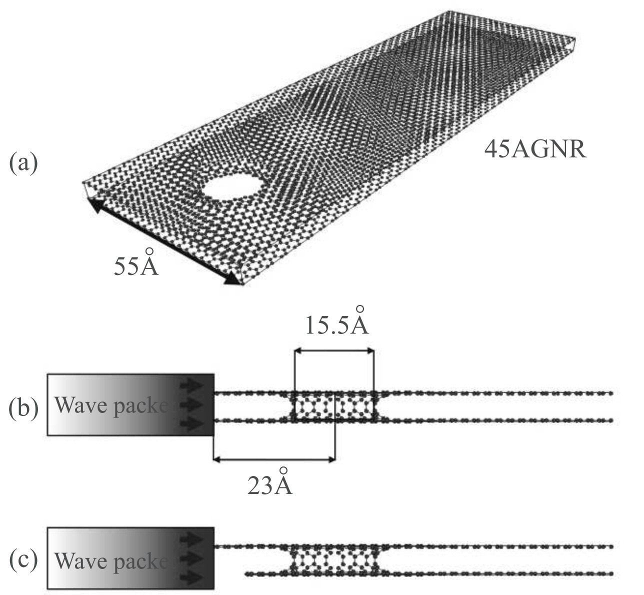

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Общий вид бислойной наноленты 45AGNR с отверстием диаметром 15.5 Å. (b), (c) – Схемы подключения к электроду, через который ВП попадает в наноленту

расстояния, которое после проведения оптимизации стало равным 5.2 Å. Для исследования влияния нанопоры на проводящие свойства бислойной ГНЛ мы рассмотрели два случая подключения электрода к ленте: (i) электрод присоединен сразу к двум слоям ленты (рис. 1b) и (ii) только к верхнему слою двухслойной ГНЛ (рис. 1c). Электрод расположен на расстоянии $L = 23$ Å от центра нанопоры. Транспортные характеристики измерялись до достижения ВП нанопоры и после ее прохождения. Сечения находились на расстояниях 4.35 Å до и после поры.

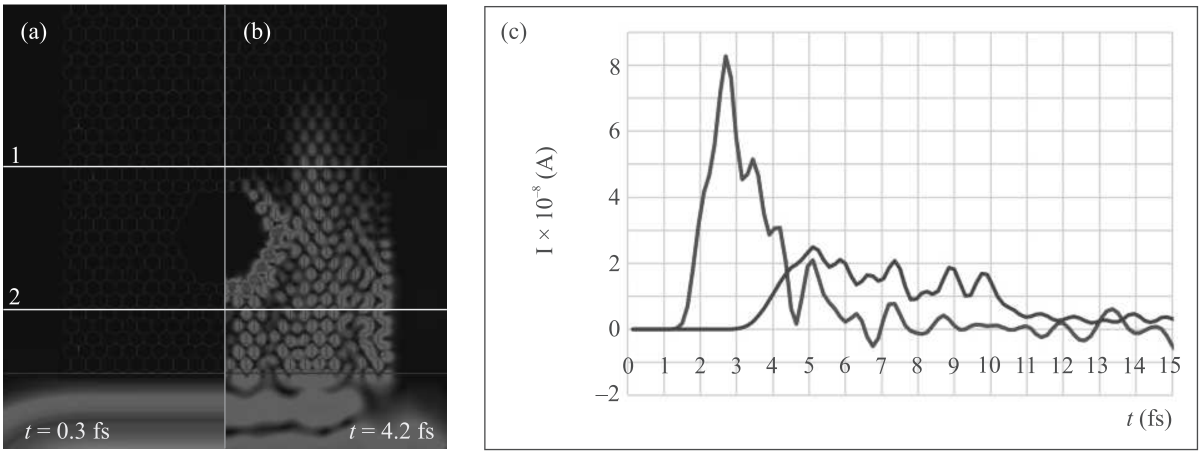

Рис. 2. (Цветной онлайн) Плотность вероятности ВП в моменты времени $t = 0.3$ (a) и $t = 4.2$ фс (b) и зависимости величины тока через секущие плоскости 1 ((c), красная линия) и 2 ((c), синяя линия) от времени

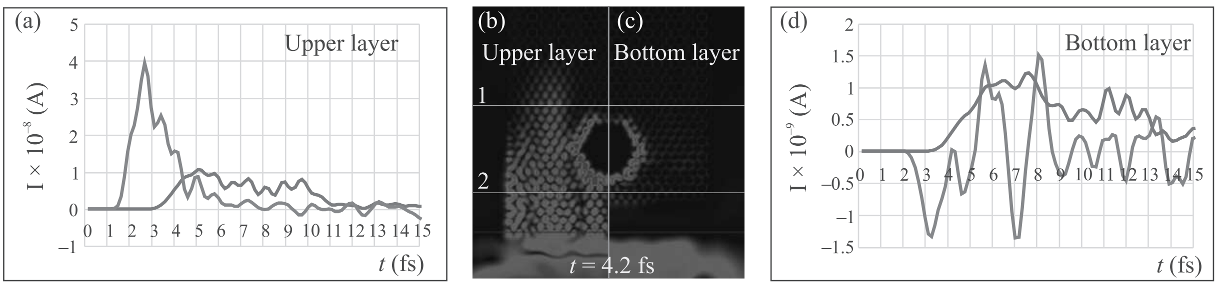

Рис. 3. (Цветной онлайн) Временные зависимости величины тока, проходящего по верхнему присоединенному к электроду слою бислойной наноленты (a) и по нижнему (d) через секущие плоскости 1 (красные линии) и 2 (синие линии). Плотности вероятности волнового пакета в момент времени $t = 4.2$ фс на верхнем слое, присоединенном к электроду (b) и на нижнем, свободном (c)

Сначала рассмотрим случай (i), когда электрод соединен с обоими слоями бислойной ГНЛ. Для получения картины распределения электронных волновых функций после прохождения ВП численно было получено решение нестационарного уравнения Шредингера, в результате чего были найдены наборы волновых функций $\psi(r,t)$, квадраты которых в моменты времени $t = 0.3$ и $t = 4.2$ фс показаны на рис. 2a и b соответственно. В момент времени $t = 0.3$ фс ВП находится в электроде (рис. 2a), далее пакет распространяется по ленте и через 1.5 фс достигает сечения 1, находящегося перед нанопорой, после происходит взаимодействие ВП с порой, в результате чего часть ВП локализуется на искривленных областях нанопоры (яркие красные области на рис. 2b). В момент времени $t = 3$ фс ВП достигает сечения 2. С каждого из указанных сечений были сняты зависимости тока, прошедшего через них, от времени (рис. 2c). Поскольку ГНЛ является двуслойной с упаковкой слоев АА и электрод соединен с обоими слоями, то ВП распространяется по слоям одинаково и дает одинаковый вклад в ток, проходящий через сечения. Из временных зависимостей (рис. 2c, d) видно, что амплитуда тока значительно падает после прохождения нанопоры в связи с тем, что ВП взаимодействует с отверстием, что приводит к существенному обратному току.

Далее рассмотрим второй случай, в котором электрод присоединен только к верхнему слою бислойной ГНЛ (рис. 1c). В этом случае наблюдается другая картина распространения ВП (рис. 3b, c). На рисунке 3 представлены плотности вероятности ВП на верхнем (b) и нижнем (c) слоях, а также временные зависимости тока, полученные с первого и второго сечений (a), (d). Получено, что ВП проходит по верхнему слою и разделяется при прохождении нанопоры: часть распространяется дальше по верхнему слою, другая часть проходит через межслоевые связи в поре и перетекает во второй слой. Из временных зависимостей тока следует, что поведение ВП в слое,

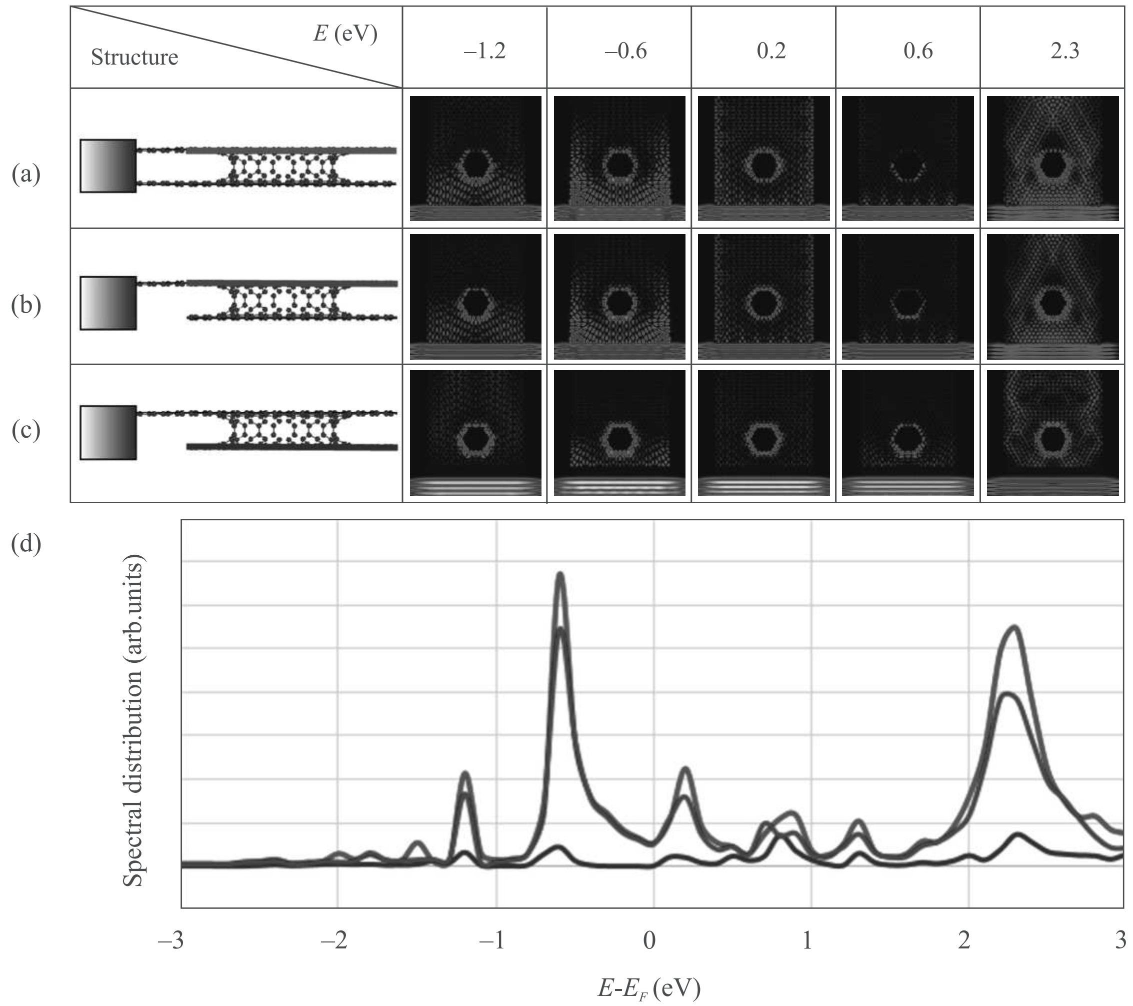

Рис. 4. (Цветной онлайн) (a)–(c) – Плотности вероятности ВП, соответствующие некоторым пикам и максимумам спектрального распределения (d). Плотности вероятности ВП показаны для одного слоя: (a) – в случае присоединения к электроду обоими слоями; (b) и (c) – в случае присоединения одним слоем для присоединенного и неприсоединенного слоев соответственно

присоединенном к электроду, аналогично поведению ВП на рис. 2c. Второй слой можно рассмотреть как отдельную систему, в которую ВП поступает через атомы на границе нанопоры. ВП распространяется во все стороны. Синяя кривая на рис. 3d показывает, что часть пакета распространяется вдоль наноленты от электрода. Также часть ВП проходит в сторону электрода, что показывают отрицательные значения тока через первое сечение (красная линия на рис. 3d). Зависимость тока через первое сечение осциллирует, что связано с процессами отражения от свободного конца ленты, неприсоединенного к электроду, а также от самой нанопоры. Осцилляции зависят от формы свободного конца ленты, а также от его удаленности от нанопоры. Отметим, что токи, идущие по второму слою, отличаются по амплитуде на порядок от токов, идущих через присоединенный слой (рис. 3d). Таким образом, после прохождения ВП через нанопору, одна его часть проходит далее по присоединенной ленте, другая – локализуется на границе поры и переходит на неприсоединенный к электроду слой. Значительная часть интенсивности при этом теряется.

Для более детального анализа процесса распространения ВП через двухслойную ГНЛ с нанопорой было проведено преобразование Фурье $\psi(r,t) \to \to \psi(r,E)$ для разделения ВП по энергиям, что позволяет построить независимое от времени спектральное распределение ВП. На рисунке 4 представлены такие спектральные распределения ВП для случаев присоединения электрода сразу к обоим слоям и только к верхнему слою. Спектральные распределения показывают, что двухслойная 45AGNR с нанопорой является металлической. Важно отметить, что наличие нанопоры не приводит к изменению характера проводимости, так как такая же двухслойная ГНЛ с идеальной структурой также проявляет металлические свойства. На рисунке 4 показаны распределения плотности вероятности для заданных значений энергий ВП, на основе которых можно определить энергии локализованных и делокализованных электронных состояний. ВП ведет себя примерно одинаково в слоях, присоединенных к электроду. Однако в неприсоединенный к электроду слой проходят составляющие пакета не со всеми энергиями. Анализ пиков спектрального распределения показывает, что при энергиях $E = -1.2$ и -0.6 эВ ВП не проходит дальше нанопоры и его большая часть локализуется на искаженных связях на границах нанопоры. При более высоких энергиях $E = 0.2$ и 2.3 эВ ВП проникает через края нанопоры во второй слой и распространяется далее по ленте. Таким образом показано, что изменением электрического потенциала на электродах можно регулировать прохождение, задержку или отражение ВП, а значит и подаваемого на устройства (рис. 1b, c) электрического импульса различной энергии. Это явление может быть использовано в наноэлектронных импульсных устройствах.

На основе полученных данных можно сделать вывод о том, что нанопоры в двухслойных структурах играют важнейшую роль в формировании металлической проводимости и дополнительных стационарных уровней, локализованных непосредственно в области соединения слоев в нанопоре, что сказывается на различном характере прохождения электрических импульсов через перфорированную бислойную ГНЛ.

Выводы. В данной работе были изучены проводящие свойства новых квазиодномерных материалов на основе двухслойных ГНЛ с нанопорами. С помощью метода динамики ВП показана металлическая проводимость бислойной ГНЛ с нанопорой. Наличие нанопоры приводит к образованию локализованных электронных состояний на ее границе. Кроме того, показано, что важным параметром является тип присоединения наноленты к электроду. Соединение только с одним слоем приводит к существенному изменению транспортных характеристик – нанопора в такой системе играет роль разделителя сигнала. Зависимости тока от времени, снимаемые после прохождения нанопоры, для каждого слоя существенно различны. На них влияет как размер и форма отверстия, так и геометрия неприсоединенного к электроду конца наноленты. Это приводит к возможности регулированного прохождения электрических импульсов через рассмотренные наноструктуры и является важным для их потенциального применения в наноэлектронике.

Исследование выполнено за счет гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 17-51-150006 НЦНИ_а), а также при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект # 01201253304). Расчеты выполнены с использованием ресурсов вычислительного кластера межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Nature **444**, 347 (2006).
2. Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **97**, 216803 (2006).
3. A. V. Zhukov, R. Bouffanais, N. N. Konobeeva, and M. B. Belonenko, JETP Lett. **97**, 400 (2013).
4. L. A. Chernozatonskii, A. A. Artyukh, and D. G. Kvashnin, JETP Lett. **95**, 266 (2012).
5. J. M. Marmolejo-Tejada and J. Velasco-Medina, Microelectronics Journal **48**, 18 (2016).
6. A. Celis, M. N. Nair, A. Taleb-Ibrahimi, E. H. Conrad, C. Berger, W. A. de Heer, and A. Tejeda, J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 143001 (2016).
7. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
8. Y. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, Nature **459**, 820 (2009).
9. Z. Z. Alisultanov, JETP Lett. **103**, 598 (2016).
10. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
11. W. Zhang, C.-T. Lin, K.-K. Liu, T. Tite, C.-Y. Su, C.-H. Chang, Y.-H. Lee, C.-W. Chu, K.-H. Wei, J.-L. Kuo, and L.-J. Li, ACS Nano **5**, 7517 (2011).
12. W. Oswald and Z. Wu, Phys. Rev. B **85**, 115431(5) (2012).
13. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and A. A. Artyukh, JETP Lett. **99**, 309 (2014).
14. D. G. Kvashnin, P. Vancsó, L. Y. Antipina, G. I. Márk, L. P. Biró, P. B. Sorokin, and L. A. Chernozatonskii, Nano Res. **8**, 1250 (2015).
15. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and Ph. Lambin, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 27432 (2016).
16. K. He, A. W. Robertson, C. Gong, C. S. Allen, Q. Xu, H. Zandbergen, J. C. Grossman, A. I. Kirkland, and J. H. Warner, Nanoscale **7**, 11602 (2015).
17. N. A. Nebogatikova, I. V. Antonova, S. V. Erohin, D. G. Kvashnin, A. Olejniczak, V. A. Volodin, A. V. Skuratov, A. V. Krasheninnikov, P. B. Sorokin, and L. A. Chernozatonskii, Nanoscale **10**, 14499 (2018).

18. L. A. Chernozatonskii, L. Yu. Antipina, and D. G. Kvashnin, JETP Lett. **111**, 235 (2020).
19. B. Sahu, H. Min, A. H. MacDonald, and S. K. Banerjee, Phys. Rev. B **78**, 045404 (2008).
20. T.-T. Vu, T.-K.-Q. Nguyen, A.-H. Huynh, T.-K.-L. Phan, and V.-T. Tran, Superlattices and Microstructures **102**, 451 (2017).
21. J. W. Gonzalez, H. Santos, E. Prada, L. Brey, and L. Chico, Phys. Rev. B **83**, 205402 (2011).
22. W. J. Yu and X. Duan, Sci. Rep. **3**, 1248 (2013).
23. G. I. Márk, ArXiv:2004.10046 [Physics, Physics:Quant-Ph] (2020).
24. A. Mayer, Carbon **42**, 2057 (2004).
25. G. I. Márk, P. Vancsó, L. P. Biró, D. G. Kvashnin, L. A. Chernozatonskii, A. Chaves, K. Yu. Rakhimov, and P. Lambin, in *Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics*, ed. by A. Maffucci and S. A. Maksimenko, Springer Netherlands, Dordrecht (2016), p. 89.
26. G. I. Márk, P. Vancsó, P. Lambin, C. Hwang, and L. P. Biro, J. Nanophoton. **6**, 061718 (2012).
27. P. Vancsó, G. I. Márk, P. Lambin, A. Mayer, Y.-S. Kim, C. Hwang, and L. P. Biró, Carbon **64**, 101 (2013).
28. P. Vancsó, G. I. Márk, P. Lambin, A. Mayer, C. Hwang, and L. P. Biró, Applied Surface Science **291**, 58 (2014).
29. G. I. Mark, L. P. Biro, and J. Gyulai, Phys. Rev. B **58**, 12645 (1998).
30. G. I. Márk, P. Vancsó, C. Hwang, P. Lambin, and L. P. Biró, Phys. Rev. B **85**, (2012).
31. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
32. S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison, J. Chem. Phys. **112**, 6472 (2000).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 325 – 331 © 2020 г. 10 сентября

Диффузия нанопузырей в ГЦК алюминии

А. С. Антропов[1)]

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Московский физико-технический институт (ГУ), 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 15 июля 2020 г.
После переработки 12 августа 2020 г.
Принята к публикации 12 августа 2020 г.

Существующие теории диффузии газонаполненных и пустых пузырей в твердых телах пока не обладают достаточной предсказательной силой и требуют уточнений, которые могут быть сделаны с использованием моделирования. В работе теоретически обосновывается метод ускоренного молекулярно-динамического моделирования дрейфа пузыря в градиенте давления. С помощью этого метода рассчитывается коэффициент диффузии пустых нанопузырей в алюминии. Теория диффузии путем образования критических террас на гранях дополнена таким образом, чтобы не возникало противоречия с континуальной моделью для макроскопических размеров. Результаты моделирования показывают ключевую роль механизма образования террас в нанопузырях и подтверждают дополненную теорию. Учет влияния газа позволяет сравнить результаты моделирования с экспериментальными данными. В результате сравнения также подтверждается механизм образования террас.

DOI: 10.31857/S1234567820170097

В данной работе речь пойдет о диффузии пузырей (полостей) в объеме зерна металла. Существует множество теоретических моделей процессов, определяющих скорость диффузии в таких условиях. Континуальная теория трех основных механизмов переноса атомов подробно описана в [1, 2]. При этом ключевой параметр одного из механизмов, коэффициент поверхностной самодиффузии, может зависеть от радиуса пузыря [3]. В фасеточных пузырях может играть роль частота образования критических террас на гранях [4, 5]. Газ, находящийся в пузыре, влияет на кинетику процессов на поверхности, причем есть разные подходы к учету этого влияния [6, 7]. Давление газа в этих теориях традиционно определяется как равновесное Лапласовское, однако учет кинетики переходов вакансий и газа между пузырем и объемом матрицы ведет к другому результату [8].

Наблюдение броуновского движения пузырей с помощью электронного микроскопа является наиболее прямым экспериментальным способом верификации описанных теорий. По зависимости коэффициента диффузии от радиуса пузыря предполагают ключевой механизм, однако это затруднено учетом влияния газа. Для нанопузырей в диоксиде урана предполагались как механизм поверхностной самодиффузии [9], так и механизм образования террас [10]; в золоте – аналогично [5, 11]; в меди [12] и алюминии [13] – механизм поверхностной самодиффузии; в ванадии [14] – механизм образования террас.

Таким образом, проверенной количественной теории, способной предсказывать механизм и коэффициент диффузии пузырей в широком диапазоне радиусов и температур пока нет. Атомистическое моделирование может помочь решить эту задачу, последовательно рассматривая все упомянутые факторы. Квантовыми и классическими методами моделируется диффузия точечных дефектов (например [15, 16]). Методами молекулярной динамики (МД) исследуется равновесное состояние пузырей [17–19], а также диффузия небольших кластеров вакансий [20, 21]. Диффузия пузырей моделировалась методами кинетического Монте-Карло [22, 23] и методами “phase-field” [24, 25], которые, однако, не могут в полной мере описывать поверхностные эффекты. Наконец популяции пузырей и выход газа из зерна моделируются континуальными методами [26].

Ранее нами было проведено МД моделирование диффузии полостей в модельной двумерной решетке [27], результаты которого согласовались с континуальной моделью диффузии. Однако в ОЦК уране [28] моделирование показало ключевую роль механизма образования террас. В данной работе впервые результаты моделирования диффузии пузырей сравниваются не только с теорией, но и с экспериментальными данными для типичного ГЦК металла – алюминия. Алюминий интересен и с прак-

1)e-mail: antropov@phystech.edu

тической точки зрения, как элемент матрицы ядерных топлив, так как диффузия пузырей влияет на транспорт газовых продуктов деления в них [29, 30]. В работе моделируется диффузия пустых пузырей (кластеров вакансий), однако впоследствии все предложенные методы могут быть распространены на пузыри, содержащие газ. Рассматриваются пузыри наноразмеров (радиус от 9 до 18 Å). Они представляют особый интерес по двум причинам. С одной стороны, именно в них проявляются отклонения от континуальной теории, которые являются главным предметом рассмотрения в данной статье. С другой, нанопузыри являются наиболее подвижными, и их диффузия вносит главный вклад в процессы коалесценции пузырей и выхода газа из зерна в радиационных материалах. Эксперименты по наблюдению броуновского движения пузырей в алюминии также проводились для наноразмеров – от 10 до 30 Å.

Существует три механизма переноса атомов с одной стороны пузыря на другую: объемная самодиффузия, поверхностная самодиффузия и перенос через сам пузырь (испарение-конденсация). Механизм переноса через пузырь в большинстве рассматриваемых материалов выражен очень слабо и им можно пренебречь. Легко показать [1], что в случае пузырей размером порядка 10^{-9}–10^{-7} м поверхностный механизм преобладает над объемным. Выражение для коэффициента диффузии пузыря радиусом R за счет поверхностной самодиффузии D_b^s было теоретически выведено в рамках континуального рассмотрения (атомные размеры пренебрежимо малы по сравнению с размерами пузыря) [1, 2]:

$$D_b^s = D_s \frac{3\Omega^{4/3}}{4\pi R^4}, \tag{1}$$

где D_s – коэффициент поверхностной самодиффузии. По теории свободных блужданий коэффициент поверхностной самодиффузии можно выразить так:

$$D_s = \frac{1}{4}\nu_0 a_0^2 \exp\left(-\frac{G_f + G_m}{kT}\right), \tag{2}$$

где G_f и G_m – свободные энергии формирования и миграции наиболее подвижных поверхностных дефектов, ν_0 – средняя частота тепловых колебаний атомов, a_0 – расстояние между ближайшими атомами поверхностного слоя.

Экспериментально было обнаружено, что в фасеточных пузырях (пузырях с явно выраженными устойчивыми гранями) скорость диффузии может определяться частотой образования критических террас [5]. Для того, чтобы грань переместилась на одну атомную плоскость, на ней должна сначала образоваться и вырасти терраса (кластер из поверхностных вакансий). Образование террасы повышает свободную энергию системы и из-за этого возникает дополнительный энергетический барьер.

Теория этого механизма была подробно разобрана Биром в статьях [4, 31, 32]. В статье [28] приводится выражение для коэффициента диффузии в случае такого механизма без дополнительных предположений о форме критической террасы и энергии переходного состояния:

$$D_b^t = \frac{3\Omega\nu_0 a_0 N_{cr} K_{cr}}{2\pi R^2} \exp\left(-\frac{G_f + G_m + G_{cr}}{kT}\right), \tag{3}$$

где $N_{cr}(R)$ – количество вакансий в террасе критического размера, $K_{cr}(R)$ – количество атомов, окружающих террасу (рис. 1, справа), Ω – атомный объем, $G_{cr}(R)$ – свободная энергия образования критической террасы.

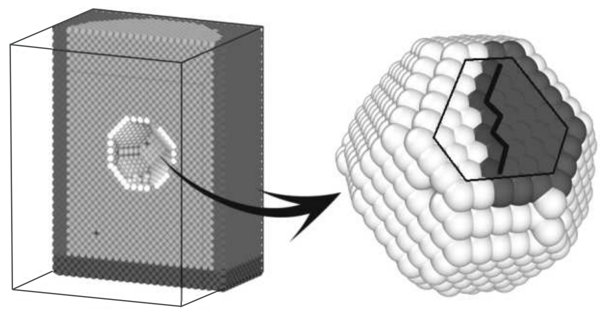

Рис. 1. (Цветной онлайн) Слева – расчетная ячейка для ускоренного метода, синие атомы заморожены, зеленые – термостат, белые – атомы поверхности пузыря. Справа – только атомы поверхности. Показано возможное расположение террасы. Внутри шестиугольника – атомы грани, красные – N_{cr} атомов террасы, серые – K_{cr} атомов окружения, жирная линия – ступень

Бир предполагает [32], что $G_{cr}(R) = \epsilon l_{cr}$, где ϵ – энергия на единицу длины ступени, l_{cr} – длина критической ступени. Проблема этой теории в том, что в таком случае D_b^t экспоненциально падает с ростом радиуса (так как $l_{cr} \sim R$) и не переходит в формулу (1) при $R \to \inf$ [6]. В этой статье предлагается способ исправления теории Бира. Выражение для свободной энергии, данное Биром, не учитывает конфигурационную энтропию состояния с террасой. Множество вариантов размещения террасы на грани увеличивает эту энтропию S_{cr}, уменьшая свободную энергию. Поэтому

$$G_{cr}(R) = E_{cr} - TS_{cr} = \epsilon l_{cr} - kT \ln W_{cr}, \tag{4}$$

где E_{cr} – потенциальная энергия ступени, W_{cr} – статистический вес состояния с критической террасой.

Учет энтропии террас устраняет вышеупомянутое противоречие: в больших пузырях эта энтропия настолько велика, что, в силу флуктуаций, на гранях всегда есть достаточно большие террасы, и переход атома из террасы на одной грани в террасу на другой не отражается на энергии. В таком случае время появления критической террасы становится меньше характерного времени диффузионного перемещения всех атомов грани на характерный размер пузыря. В итоге коэффициент диффузии определяется как $\min(D_b^t, D_b^s)$. Выражение (3) можно переписать в более удобной форме с учетом (4) и (2):

$$D_b^t = D_s \frac{6\Omega N_{cr} K_{cr} W_{cr}}{\pi a_0 R^2} \exp\left(-\frac{\epsilon l_{cr}}{kT}\right). \qquad (5)$$

Основной способ численного расчета коэффициента диффузии D некоторого объекта основан на моделировании его броуновского движения:

$$\overline{\Delta r^2} = 6Dt. \qquad (6)$$

В статьях [27, 28] для расчета коэффициента диффузии пузыря мы предложили метод вынуждающей силы. Дополним теоретическое обоснование этого метода. В общей формулировке он опирается на соотношение Эйнштейна: если на объект действует сила F по оси x, то:

$$\overline{\Delta x} = \frac{D}{kT} Ft. \qquad (7)$$

Соотношение Эйнштейна является следствием флуктуационно-диссипативной теоремы, в которой F обозначает силу в обобщенном смысле, т.е. наличие в Гамильтониане члена типа $-Fx$ [33]. Представим, что в некоторой области неподвижного кристалла, содержащей пузырь из N_b вакансий, на все атомы действует сила f. При изотермическом перемещении пузыря на Δx, сила совершит работу $N_b f \Delta x$. Тогда обобщенная сила $F = fN_b$. Легко показать, что в Гамильтониане можно пренебречь энергией создавшихся упругих напряжений, так как она много меньше работы силы по перемещению пузыря.

Для применения соотношения Эйнштейна в процессе моделирования необходимо подобрать достаточно малую силу, чтобы скорость зависела от нее линейно. С точки зрения элементарных кинетических процессов, наличие силы изменяет энергетические барьеры для атомных прыжков в зависимости от направления. Вероятность прыжка $\sim \exp(-G_m/kT)$. Поэтому для того чтобы использовать линейное приближение, необходимо $f\lambda \ll kT < G_m$, λ – межатомное расстояние.

Минимальное различимое перемещение пузыря в дискретной решетке – λ. Характерное время такого перемещения в процессе свободной диффузии, согласно (6), $\approx \lambda^2/6D$. Характерное время такого перемещения в процессе дрейфа, согласно (7), $\approx \lambda kT/N_b f D$. С учетом указанных выше ограничений на силу f видно, что этот метод дает выигрыш по времени в случае, когда $N_b \gg 1$.

Также в [28] выведен нелинейный аналог этого метода на случай, когда подвижность определяется механизмом образования террас, и энергия активации процесса велика. В таком случае зависимость скорости от силы дается следующей формулой, переходящей в (7) в линейном пределе:

$$V = \frac{4\pi R^2 D_b^t}{3\Omega N_{cr} \cos\phi} \,\mathrm{sh}\left(\frac{R\cos\phi N_{cr} f}{kT}\right), \qquad (8)$$

где ϕ – угол между нормалью к передним граням и направлением силы. В данном случае даже при условии малости изменения барьера для атомных прыжков ($f\lambda \ll kT$) может быть значительным изменение критической энергии террасы ($RN_{cr}f > kT$) и линейное разложение sh уже нельзя использовать. Таким образом, линейность зависимости $V(f)$ в этом диапазоне сил может служить признаком механизма поверхностной самодиффузии, а нелинейность – признаком механизма образования террас.

Расчеты проводились в пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS с ускорением на GPU [34, 35]. Для взаимодействия атомов алюминия использовался EAM (*Embedded atom model*) потенциал [36], который хорошо описывает fcc и жидкую фазы алюминия. Существует множество работ по описанию поверхностных эффектов в металлах с помощью модели EAM. Однако, так как свойства поверхности не входят в число оптимизируемых параметров при создании потенциала, необходимо проверить правильность их описания. В качестве проверяемых свойств были выбраны энергии образования дефектов на поверхности [111] при нулевой температуре, которые сравнивались с результатами квантово-механических расчетов [37]. Результаты сравнения приведены в табл. 1, выбранный EAM потенциал достаточно хорошо описывает поверхность. Все расчеты проводились для нулевой изобары с периодическими граничными условиями. Для создания пузыря из расчетной ячейки удалялись атомы в сфере заданного радиуса с последующей релаксацией формы пузыря. Линейные размеры ячейки не менее чем в 3 раза превосходили диаметр пузыря. Положение пузыря определялось как координаты центра масс группы вакансий, образующих его.

Таблица 1. Энергии формирования вакансии и адатома на поверхности [111] в алюминии

	E_f(vac), эВ	E_f(ad), эВ
EAM [36]	0.62	0.91
DFT [37]	0.67	1.05

Свободная диффузия пузыря моделировалась в равновесном ансамбле с сохранением числа частиц, объема и полной энергии. Для моделирования дрейфа под действием силы в расчетной ячейке с пузырем замораживался нижний слой атомов, а ко всем остальным прикладывалась сила f, перпендикулярная замороженному слою. Температура расчетной ячейки поддерживалась постоянной с помощью термостата Нозе–Гувера, применяемого к атомам, находящимся вне цилиндрической области (см. рис. 1). Моделирование направленной диффузии производилось в диапазоне сил $f \in [0.0005; 0.01]$ эВ/Å при температурах от 750 до 900 K ($kT/\lambda \approx 0.018$ эВ/Å).

На рисунке 2 показана зависимость скорости пузыря от действующей на него силы $F = N_b f$ в двойном логарифмическом масштабе для радиусов 12 и 18 Å ($N_b = 416$ и 1388 атомов соответственно). Точки

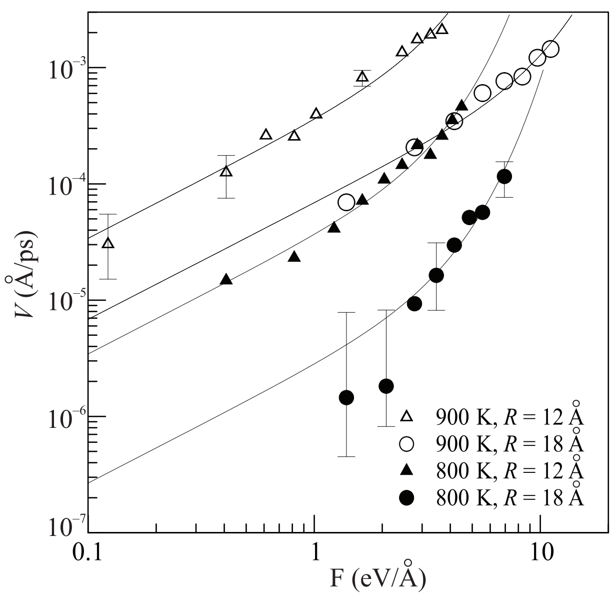

Рис. 2. Скорость пузыря в зависимости от суммарной действующей силы F. Аппроксимация по формуле (8)

аппроксимированы зависимостью (8). Прямая с единичным наклоном соответствует линейному пределу, а крутой нелинейный участок – экспоненциальному пределу. При 900 K точки хорошо ложатся на линейный участок. При понижении температуры начинает проявляться нелинейность, что является признаком механизма образования террас. По линейному пределу были определены подвижности и коэффициенты диффузии пузырей D_b^{MD}, показанные на рис. 3.

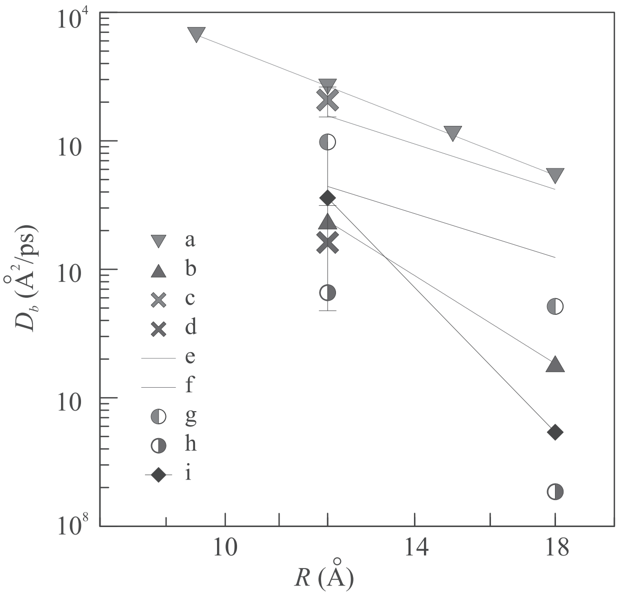

Рис. 3. (Цветной онлайн) Коэффициент диффузии пузыря в зависимости от радиуса. a/b – моделирование ускоренным методом D_b^{MD} для 900/800 K; c/d – моделирование свободной диффузии для 900/800 K; e/f – предсказание D_b^s (1) для 900/800 K; g/h – предсказание D_b^t (5) для 900/800 K, i – нормированные на нулевую концентрацию газа экспериментальные данные $D_b^{\exp}/e^{-n_g q}$ для 818 K [13] (см. текст)

На рисунке 3 также показаны коэффициенты, полученные из моделирования свободной диффузии пузырей радиусом 12 Å. Видно, что результаты ускоренного метода согласуются с результатами расчета свободной диффузии в пределах погрешности, при этом, как и было предсказано, они потребовали в 7–15 раз меньше времени. Например, для достаточного смещения при $T = 900$ K и $R = 12$ Å и минимальной силе $f = 0.001$ эВ/Å требуется около ста наносекунд, в то время как при свободной диффузии без силы – около двух микросекунд.

Коэффициент поверхностной самодиффузии был рассчитан в пузырях радиусом 12 и 18 Å аналогично работе [38]. Принадлежность атома к поверхностному слою определялась по объему его ячейки Вороного, был выбран порог 20 Å^3 при $\Omega \approx 17.5$ Å^3. Значения D_b^s, предсказанные формулой (1) на основе рассчитанных значений D_s, показаны на рис. 3.

Можно предположить, что для 900 K $D_b^t \approx D_b^s$ и потому зависимость от радиуса близка к предсказанию формулы (1), а для 800 K $D_b^t < D_b^s$ и зависимость определяется механизмом нуклеации террас. По температурной зависимости D_b^s и D_b^{MD} (рис. 4) можно

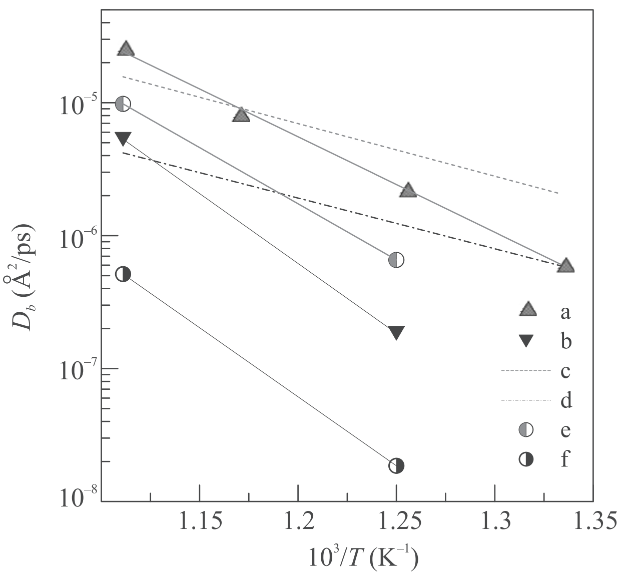

Рис. 4. (Цветной онлайн) Коэффициент диффузии пузыря в зависимости от температуры: a/b – моделирование ускоренным методом D_b^{MD} для 12/18 Å; c/d – предсказания D_b^s (1) для 12/18 Å; e/f – предсказания D_b^t (5) для 12/18 Å

определить энергию активации процессов поверхностной самодиффузии E_s^{act} (0.77 эВ) и диффузии пузыря E_b^{act} (1.4/2.0 эВ для 12/18 Å соответственно). Энергия активации диффузии пузыря больше энергии активации самодиффузии и зависит от радиуса, что соответствует механизму образования террас. Дополнительная энергия критической террасы $E_{cr}^{MD} = E_b^{\text{act}} - E_s^{\text{act}}$ приведена в табл. 2.

Таблица 2. Значение E_{cr} из моделирования и теоретическая оценка параметров в формуле (5)

R, Å	E_{cr}^{MD}, эВ	ϵl_{cr}, эВ	N_{cr}, Å	K_{cr}	W_{cr}
12	0.6	0.9	6	8	6
18	1.2	1.3	18	20	20

Для проверки формулы (5), описывающей механизм образования террас, оценим входящие в нее величины для $R = 12$ и 18 Å. Предположим (как и в статье [32]), что критическая терраса состоит из половины атомов грани. Потенциальную энергию, приходящуюся на единичную длину ступени ϵ, можно оценить из статического моделирования при нулевой температуре. Было получено значение $\epsilon = 0.07$ эВ/Å. Среднее количество атомов, окружающих террасу, K_{cr} и среднюю длину ступени l_{cr} можно оценить из геометрических соображений (рис. 1). Количество возможных расположений террасы на грани W_{cr} оценить сложнее всего, для этого приблизительно подсчитывалось количество возможных вариантов провести ступень, отсекающую половину грани. Результаты оценки приведены в табл. 1.

Рассчитанная теоретически энергия ϵl_{cr} совпадает с энергией критической террасы из моделирования E_{cr}^{MD} в пределах 8 % для $R = 18$ Å и 30 % для $R = 12$ Å. Таким образом, формула (5) объясняет температурную зависимость результата. Абсолютные значения D_b^t, рассчитанные по (5), приведены на рис. 3 и 4. По порядку они совпадают с результатами моделирования и лучше, чем континуальная теория (1), предсказывают зависимость от радиуса. Большая ошибка абсолютного значения связана, в первую очередь, с приблизительной оценкой W_{cr}.

Для сравнения с экспериментальными данными [13] необходимо учесть влияние газа (гелия) на коэффициент поверхностной самодиффузии D_s, которое было рассмотрено Михлиным [6], а также Вещуновым и Шестаком [7]. Оба подхода предсказывают экспоненциальное падение $D_s(n_g)$ с ростом концентрации газа n_g. Воспользуемся оценкой Михлина, в которой есть только один параметр q – свободный от газа объем вокруг атома на поверхности, необходимый для перескока:

$$D_s(n_g) = D_s(0)e^{-n_g q}. \tag{9}$$

Так как для обоих механизмов (1) и (5) $D_b \sim D_s$, то можно привести экспериментальный коэффициент диффузии $D_b^{\exp}$ к нулевой концентрации гелия, разделив его на $e^{-n_g q}$. Зависимость равновесной концентрации гелия от радиуса пузырей для алюминия приведена в работе [39] ($n_g = 0.05$ и 0.041 Å^{-3} для $R = 12$ и 18 Å соответственно). Наилучшее согласование результатов моделирования с экспериментом достигается при $q = 285$ Å^3. Экспериментальные данные для 818 K, приведенные к нулевой концентрации газа, нанесены на рис. 3. Зависимость от радиуса для нормированных результатов эксперимента больше соответствует механизму образования террас, чем механизму поверхностной самодиффузии. Таким образом, эксперимент подтверждает механизм образования террас, обнаруженный в расчетах. В дальнейшей работе планируется определить коэффициент q напрямую из моделирования.

В результате работы было проведено МД моделирование диффузии пустых нанопузырей в ГЦК алюминии для радиусов от 9 до 18 Å и температур от 750 до 900 K. Полученные коэффициенты диффузии сравнивались с предсказаниями двух разных теоретических моделей: континуальной, где скорость определяет только поверхностная самодиффузия, и механизма образования террас.

Энергия активации диффузии рассматриваемых пузырей больше энергии активации поверхностной самодиффузии, а разница соответствует теоретической оценке потенциальной энергии ступени, делящей грань [111] пополам. Это подтверждает ключевую роль механизма образования террас для нанопузырей. Уточнена теория Бира о свободной энергии образования террасы, в которую добавлена конфигурационная энтропия состояния с критической террасой. Оценка коэффициента диффузии по уточненной теории предсказывает полученную в моделировании зависимость от радиуса и температуры, а также абсолютные значения по порядку величины.

Для разных температур зависимость итогового коэффициента диффузии от радиуса соответствует разным механизмам. Так как энергия активации механизмов разная, то наиболее медленным может быть как один, так и другой в зависимости от температуры.

Учет влияния газа позволяет сравнить результаты моделирования с экспериментом. Нормированные для нулевой концентрации газа экспериментальные данные подтверждают зависимость от радиуса, соответствующую механизму образования террас. В настоящий момент ведется работа по моделированию пузырей с гелием для уточнения влияния газа и непосредственного сравнения с экспериментом.

Работа проведена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 18-08-01495).

---

1. Я. Е. Гегузин, *Движение микроскопических включений в твердых телах*, Металлургия, М. (1971).
2. P. Goodhew and S. Tyler, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **377**, 151 (1981).
3. E. Y. Mikhlin and V. Chkuaseli, Phys. Status Solidi (a) **29**, 331 (1975).
4. W. Beere and G. Reynolds, Acta Metallurgica **20**, 845 (1972).
5. L. Willertz and P. Shewmon, Metall. Mater. Trans. B **1**, 2217 (1970).
6. E. Y. Mikhlin, Phys. Status Solidi (a) **56**, 763 (1979).
7. M. Veshchunov and V. Shestak, J. Nucl. Mater. **376**, 174 (2008).
8. L. Noirot, J. Nucl. Mater. **447**, 166 (2014).
9. M. E. Gulden, J. Nucl. Mater. **23**, 30 (1967).
10. C. Baker, J. Nucl. Mater. **71**, 117 (1977).
11. J. Evans and A. van Veen, J. Nucl. Mater. **168**, 12 (1989).
12. R. Barnes and D. Mazey, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **275**, 47 (1963).
13. K. Ono, S. Furuno, K. Hojou, T. Kino, K. Izui, O. Takaoka, N. Kubo, K. Mizuno, and K. Ito, J. Nucl. Mater. **191**, 1269 (1992).
14. S. Tyler and P. Goodhew, J. Nucl. Mater. **92**, 201 (1980).
15. É. Bévillon, R. Ducher, M. Barrachin, and R. Dubourg, J. Nucl. Mater. **434**, 240 (2013).
16. G. Smirnov and V. Stegailov, J. Phys. Condens. Matter **31**, 235704 (2019).
17. A. Karavaev, V. Dremov, and G. Ionov, J. Nucl. Mater. **468**, 46 (2016).
18. X.-Y. Liu and D. Andersson, J. Nucl. Mater. **462**, 8 (2015).
19. B. Beeler, D. Andersson, M. W. Cooper, and Y. Zhang, J. Nucl. Mater. **523**, 413 (2019).
20. D. Perez, L. Sandoval, S. Blondel, B. D. Wirth, B. P. Uberuaga, and A. F. Voter, Sci. Rep. **7**, 2522 (2017).
21. N. Gao, L. Yang, F. Gao, R. J. Kurtz, D. West, and S. Zhang, J. Phys. Condens. Matter **29**, 145201 (2017).
22. K. Morishita and R. Sugano, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **255**, 52 (2007).
23. D. Schwen and R. Averback, J. Nucl. Mater. **402**, 116 (2010).
24. S. Hu, C. H. Henager Jr, H. L. Heinisch, M. Stan, M. I. Baskes, and S. M. Valone, J. Nucl. Mater. **392**, 292 (2009).
25. Y. Gao, Y. Zhang, D. Schwen, C. Jiang, C. Sun, and J. Gan, Materialia **1**, 78 (2018).
26. L. Verma, L. Noirot, and P. Maugis, J. Nucl. Mater. **528**, 151874 (2020).
27. А. Антропов, В. Озрин, В. Стегайлов, В. Тарасов, ЖЭТФ **156**, 125 (2019).
28. A. Antropov and V. Stegailov, J. Nucl. Mater. 152110 (2020).
29. M. Veshchunov, V. Ozrin, V. Shestak, V. Tarasov, R. Dubourg, and G. Nicaise, Nuclear Engineering and Design **236**, 179 (2006).
30. M. Tonks, D. Andersson, R. Devanathan, R. Dubourg, A. El-Azab, M. Freyss, F. Iglesias, K. Kulacsy, G. Pastore, S. R. Phillpot, and M. Welland, J. Nucl. Mater. **504**, 300 (2018).
31. W. Beere, Phil. Mag. **25**, 189 (1972).
32. W. Beere, J. Nucl. Mater. **45**, 91 (1972).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М. (1976), ч. 1 (т. 5).
34. W. M. Brown, P. Wang, J. S. Plimpton, and A. N. Tharrington, Comput. Phys. Commun. **182**, 898 (2011).

35. V. Stegailov, E. Dlinnova, T. Ismagilov, M. Khalilov, N. Kondratyuk, D. Makagon, A. Semenov, A. Simonov, G. Smirnov, and A. Timofeev, Int. J. High Perform. Comput. Appl. **33**, 507 (2019).
36. M. Mendelev, M. Kramer, C. A. Becker, and M. Asta, Phil. Mag. **88**, 1723 (2008).
37. R. Stumpf and M. Scheffler, Phys. Rev. B **53**, 4958 (1996).
38. A. Antropov, V. Ozrin, G. Smirnov, V. Stegailov, and V. Tarasov, J. Phys. Conf. Ser. **1133**, 012029 (2018).
39. W. Jäger, R. Manzke, H. Trinkaus, G. Crecelius, R. Zeller, J. Fink, and H. Bay, J. Nucl. Mater. **111**, 674 (1982).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 5, с. 332 – 339

Адиабатический рэтчет-эффект в системах с дискретным изменением переменных

В. М. Розенбаум[+1)], *И. В. Шапочкина*[*], *Л. И. Трахтенберг*[×○]

[+]*Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины, 03164 Киев, Украина*

[*]*Белорусский государственный университет, физический факультет, 220050 Минск, Беларусь*

[×]*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, 119991 Москва, Россия*

[○]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 мая 2020 г.
После переработки 8 августа 2020 г.
Принята к публикации 8 августа 2020 г.

Развита адиабатическая теория рэтчет-эффекта в различных системах, описываемых случайными переходами между дискретными состояниями. В основе теории лежит построение дискретного аналога леммы Паррондо – одного из фундаментальных соотношений теории рэтчет-систем, позволяющего рассчитывать интегральные потоки за промежутки времени от начальных к конечным (равновесным) распределениям. Предложено соответствие между вероятностями переходов и параметрами потенциального рельефа, прыжковое движение в котором описывается развитой теорией и является низкотемпературным пределом непрерывного движения. Скорость рэтчет-эффекта, рассчитанная с помощью предложенной теории, хорошо подтверждается результатами численного моделирования. Развитый подход позволяет исследовать закономерности функционирования броуновских моторов различной природы простыми методами.

DOI: 10.31857/S1234567820170103

Под броуновским рэтчетом обычно понимают находящуюся в контакте с термостатом наносистему, в которой направленное движение возникает в результате несмещенных (*unbiased*) неравновесных возмущений различной природы при нарушении пространственной и/или временной симметрии [1–5]. Сам феномен возникновения направленного движения при таких условиях называют рэтчет-эффектом. Глубокое понимание механизма последнего возникает из рассмотрения его элементарного акта, описываемого известной леммой Паррондо [6]. В периодическом потенциальном профиле при заданной начальной плотности вероятности распределения частиц возникает поток частиц, который приводит с течением времени к установлению в системе термодинамического равновесия, характеризуемого больцмановской функцией распределения. Лемма Паррондо определяет интегральные потоки через заданные поперечные сечения за промежутки времени от начальных к конечным (равновесным) распределениям, что позволяет аналитически представлять решения сложных моделей, сводящиеся при тех или иных предположениях, к последовательности элементарных актов, описываемых леммой [7–10]. Один из механизмов функционирования рэтчета использует дихотомный процесс переключения асимметричных пространственно периодических потенциальных профилей $V_{\mathrm{A}}(x)$ и $V_{\mathrm{B}}(x)$ $[V_{\mathrm{A(B)}}(x+L)=V_{\mathrm{A(B)}}(x),\ L$ – период$]$. Предполагая, что потенциалы переключаются мгновенно, а времена жизни профилей, τ_{A} и τ_{B}, много больше характерных времен релаксации (адиабатическое приближение), среднюю скорость рэтчета можно определить через сумму двух интегральных потоков с начальными и конечными распределениями, соответствующими распределениям Больцмана $\rho_-^{\mathrm{A(B)}}(x)$ в профиле $V_{\mathrm{A}}(x)$ или $V_{\mathrm{B}}(x)$

$$\langle\nu\rangle=\frac{L}{\tau_{\mathrm{A}}+\tau_{\mathrm{B}}}\int\limits_0^L dx[\rho_+^{\mathrm{A}}(x)-\rho_+^{\mathrm{B}}(x)]\int\limits_0^x dy[\rho_-^{\mathrm{A}}(y)-\rho_-^{\mathrm{B}}(y)], \tag{1}$$

$$\rho_\pm^{\mathrm{A(B)}}(x)=\exp[\pm\beta V_{\mathrm{A(B)}}(x)]\Big/\int\limits_0^L dy\exp[\pm\beta V_{\mathrm{A(B)}}(y)],$$

где $\beta=(k_BT)^{-1}$, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура (подробный вывод выражения (1), в том числе и при учете неадиабатических и инерционных поправок, дан в [7–10]).

[1)]e-mail: vik-roz@mail.ru

При низких температурах (k_BT много меньше барьеров потенциальных рельефов) движение частиц приобретает прыжковый характер. Такой характер движения присущ молекулярным (белковым) моторам [11–13], в которых связывание на поверхности броуновской частицы заряженного лиганда (АТФ – аденозинтрифосфата) приводит к сильному изменению потенциальной энергии этой частицы в асимметричном электростатическом поле полярной подложки. При определенных условиях, накладываемых теорией симметрии [14], прыжковый характер движения может быть инициирован и сильным перераспределением заряда наночастицы под действием внешнего электрического поля [15]. С более общей точки зрения, необходима сильная связь внешнего процесса, вызывающего флуктуации потенциального профиля и, как следствие, флуктуации констант скоростей преодоления потенциальных барьеров, с внутренним процессом возникновения направленного движения в рэтчет-сиситеме [16]. Электроконформационное сопряжение прикладываемого электрического поля и потока ионов через биологические мембраны служит ярким примером наличия такой связи внешнего и внутреннего процессов [17]. Для описания случайных переходов системы между дискретными состояниями может использоваться периодическая одномерная прыжковая модель диффузии частиц между узлами бесконечной цепочки с основной областью из N узлов, развитая Дерридой [18]. Задавая вероятности переходов, можно рассчитывать характеристики поведения различных систем: от потоков частиц через биологические мембраны [17, 19, 20] до изменения величины капитала в парадоксальных играх Паррондо [21–26]. При $N = 2$ количественные связи между результатами для, казалось бы, различных моделей – флуктуирующего потенциала [27], электроконформационного сопряжения [17] и “каталитического колеса” [20] – устанавливаются особенно просто [16].

Анализируя непрерывные и дискретные проявления рэтчет-эффекта, следует отметить, что хотя дискретное движение можно рассматривать как предельный случай непрерывного движения, рэтчет-эффект может носить и чисто дискретный характер, как, например, при кинетическом описании переходов между конечным набором состояний или в теории игр, когда эффект состоит в определенной смене стратегий игры, обеспечивающей средний выигрыш. Очевидно, что должен существовать дискретный аналог леммы Паррондо, описывающий элементарный акт, ответственный за рэтчет-эффект с дискретным изменением переменных, который, однако, до сих пор не был получен. В настоящей работе приводится простой вывод дискретного аналога леммы Паррондо, а также развитая с его помощью адиабатическая теория рэтчет-эффекта в системах с дискретным изменением переменных. Рассчитанные с использованием этой леммы величины средней скорости направленного движения хорошо подтверждаются результатами численного моделирования. Это позволяет эффективно использовать лемму для исследования закономерностей функционирования броуновских моторов простыми методами.

Рассмотрим бесконечную цепочку узлов, нумеруемых целочисленной переменной n. Пусть из каждого узла n частица может перейти в соседний узел $n+1$ направо с вероятностью p_n^r, в соседний узел $n-1$ налево с вероятностью p_n^l или остаться в узле n с вероятностью $p_n^u = 1 - p_n^r - p_n^l$. Обозначим через $P_n(t)$ вероятность того, что частица находится в узле n в момент времени t. Считая моменты времени целочисленными (происходящими через равные промежутки времени Δt), запишем уравнение, определяющее вероятность найти частицу в последующий момент времени $t+1$ в том же узле n:

$$P_n(t+1) = p_{n-1}^r P_{n-1}(t) + p_n^u P_n(t) + p_{n+1}^l P_{n+1}(t). \quad (2)$$

Если трактовать рэтчет-эффект в терминах теории парадоксальных игр Паррондо, то величина $P_n(t)$ приобретает смысл вероятности иметь капитал n после t бросков игральной кости, а уравнение (2) задает эволюцию $P_n(t)$, т.е. позволяет рассчитать результативность ведения игры.

Естественно ограничить число разнородных узлов n в общей прыжковой модели. Проще всего это сделать введением элементарной ячейки из N узлов, нумеруемых внутри нее целочисленной переменной $m = 1, 2, \ldots, N$, а все бесконечное множество узлов n определять трансляциями элементарной ячейки, т.е. полагать $n = m + Nk$, где $k = 0, \pm 1, \ldots$ – целочисленное число трансляций. Тогда вероятности p_n^i $(i = r, l, u)$ можно считать периодическими функциями с периодом N ($p_{n+N}^i = p_n^i$) и определять набором p_m^i с $m = 1, 2, \ldots, N$. Кроме того, введем редуцированную вероятность $R_m(t) = \sum\limits_{k=-\infty}^{\infty} P_{m+Nk}(t)$ заполнения состояния m в момент времени t с нормировкой на элементарную ячейку, $\sum\limits_{m=1}^{N} R_m(t) = 1$, которая является периодической функцией $R_n(t) = R_{n+N}(t)$ целочисленного аргумента n. В терминологии теории игр величина $R_m(t)$ задает вероятность иметь капитал n по модулю N (остаток от целочисленного деления n на N, $m = n \mod N$).

Замена индексов n в уравнении (2) на $m + Nk$ и суммирование по k с использованием периодичности $p_{n+N}^i = p_n^i$ $(i = r, l, u)$ приводит к уравнению на редуцированные вероятности $R_m(t)$, имеющему вид уравнения непрерывности:

$$R_m(t+1) - R_m(t) = -[J_m(t) - J_{m-1}(t)] \qquad (3)$$

с дискретными потоками

$$J_m(t) = p_m^r R_m(t) - p_{m+1}^l R_{m+1}(t). \qquad (4)$$

Стационарное решение уравнения (3) $R_m(t) = R_m^{(\mathrm{st})}$ предполагает независимость потока от номера узла, $J_m^{(\mathrm{st})} = J_{m-1}^{(\mathrm{st})} \equiv J$, что дает разностное уравнение рекуррентного типа $p_m^r R_m^{(\mathrm{st})} - p_{m+1}^l R_{m+1}^{(\mathrm{st})} = J$, которое для новой неизвестной величины $\tilde{\xi}_m \equiv p_m^r R_m^{(\mathrm{st})}$ и функции целочисленного аргумента $s_m \equiv p_m^l / p_m^r$ можно переписать как:

$$\tilde{\xi}_m = s_{m+1} \tilde{\xi}_{m+1} + J. \qquad (5)$$

Проведя последовательные итерации и используя равенство $\tilde{\xi}_{m+N} = \tilde{\xi}_m$, уравнение (5) легко преобразовать к виду:

$$\left(1 - \prod_{n=1}^{N} s_n\right) \tilde{\xi}_m = J \xi_m, \qquad (6)$$

где введено обозначение

$$\xi_m \equiv 1 + \sum_{n=1}^{N-1} \prod_{j=1}^{n} s_{m+j}. \qquad (7)$$

Дополним уравнение (6) с двумя неизвестными величинами $\tilde{\xi}_m$ и J условием нормировки $\sum_{m=1}^{N} R_m^{(\mathrm{st})} = \sum_{m=1}^{N} \tilde{\xi}_m / p_m^r = 1$. Тогда искомые величины определятся выражениями:

$$\begin{gathered} J = \left(\sum_{n=1}^{N} \frac{\xi_n}{p_n^r}\right)^{-1} \left(1 - \prod_{n=1}^{N} s_n\right), \\ R_m^{(\mathrm{st})} = \left(\sum_{n=1}^{N} \frac{\xi_n}{p_n^r}\right)^{-1} \frac{\xi_m}{p_m^r}, \end{gathered} \qquad (8)$$

впервые представленными в [18]. Из первого соотношения (8) следует, что термодинамическое равновесие может реализоваться только при определенном условии, накладываемом на вероятности переходов:

$$\prod_{n=1}^{N} s_n = 1, \quad p_1^r p_2^r \ldots p_N^r = p_1^l p_2^l \ldots p_N^l, \qquad (9)$$

известном как условие детального баланса.

Соотношения (8) являются дискретными аналогами известного результата Стратоновича, описывающего диффузию броуновской частицы в периодическом потенциале под действием стационарной однородной силы [28, 29]. Чтобы убедиться в этом, используем подход работы [30] и представим, что каждому узлу m соответствует потенциальная яма со значением минимума u_m, окруженная барьерами со значениями максимумов v_m справа и v_{m-1} слева. Введем такой наклон потенциального рельефа, что потенциальные барьеры слева и справа получают приращения f и $-f$ соответственно (рис. 1a). Если измерять введенные энергетические величины в единицах $k_B T$, то вероятности преодоления барьеров можно отождествить с аррениусовскими факторами:

$$p_m^l = e^{-v_{m-1} + u_m - f}, \quad p_m^r = e^{-v_m + u_m + f}. \qquad (10)$$

Подстановка (10) в (8) дает:

$$\begin{gathered} J = \frac{1 - e^{-2Nf}}{\sum\limits_{n=1}^{N} e^{-u_n + (2n-1)f} \sum\limits_{k=n}^{n+N-1} e^{v_k - 2kf}}, \\ R_m^{(\mathrm{st})} = \frac{e^{-u_m + (2m-1)f} \sum\limits_{k=m}^{m+N-1} e^{v_k - 2kf}}{\sum\limits_{n=1}^{N} e^{-u_n + (2n-1)f} \sum\limits_{k=n}^{n+N-1} e^{v_k - 2kf}}. \end{gathered} \qquad (11)$$

Полученные дискретные соотношения соответствуют интегральным представлениям результата Стратоновича (см. формулы (2.36)–(2.38) обзора [1]), если учесть, что внутренним интегралам соответствуют внутренние суммы, содержащие значения максимумов барьеров (барьерные факторы), а внешним интегралам – внешние суммы, содержащие факторы, которые зависят от значений минимумов потенциальных ям. В отсутствие наклона потенциального рельефа ($f = 0$) поток исчезает ($J = 0$), барьерные факторы в стационарном распределении $R_m^{(\mathrm{st})}$ сокращаются, и оно переходит в равновесное распределение Больцмана $R_m^{(\mathrm{eq})} = e^{-u_m} \Big/ \sum_{n=1}^{N} e^{-u_n}$, как и должно быть.

Соответствие между параметрами потенциального рельефа и вероятностями переходов между узлами цепочки, задаваемое соотношениями (10), обладает глубоким физическим смыслом, поскольку позволяет рассматривать прыжковое движение как низкотемпературный предел непрерывного [4, 16, 31, 32]. Этим оно отличается от формальных попыток определять дискретные точки рельефа по соответствию

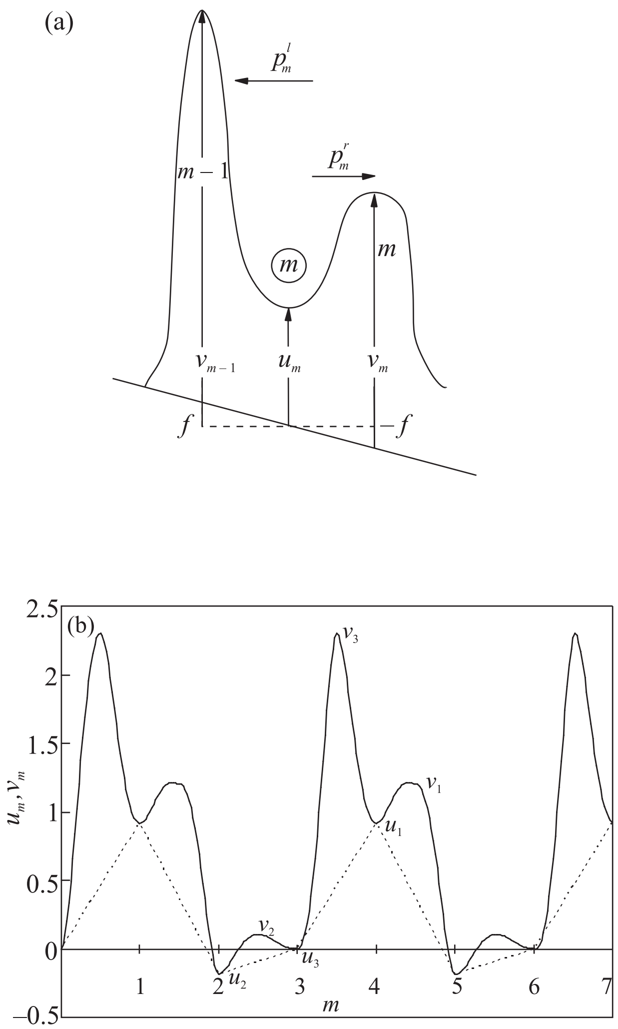

Рис. 1. (a) – Форма потенциального рельефа вблизи узла m, обеспечивающая переходы частицы в соседние узлы с вероятностями p_m^r и p_m^l, зависящими от параметров рельефа по закону Аррениуса. (b) – Потенциальный рельеф с экстремумами $u_1 = \ln(5/2)$, $u_2 = -\ln(6/5)$, $u_3 = 0$, $v_1 = \ln(10)$, $v_2 = \ln(10/3)$, $v_3 = \ln(10/9)$, рассчитанными по формулам (10) с параметрами $p_1^r = p_2^r = 3/4$, $p_1^l = p_2^l = 1/4$, $p_3^r = 1/10$, $p_3^l = 9/10$ парадоксальной игры Паррондо (сплошные кривые), и кусочно-линейный рельеф, представленный в [24] (пунктирные линии)

с коэффициентами уравнения Фоккера–Планка [24]. Следует иметь в виду, что система с N узлами в элементарной ячейке характеризуется набором из $2N$ параметров, которые могут задаваться вероятностями перескоков налево p_m^l и направо p_m^r или значениями минимумов u_m и максимумов v_m $(m = 1, 2, \ldots, N)$ потенциального рельефа. На рисунке 1b изображен потенциальный профиль с положениями экстремумов, рассчитанными по формулам (10) со значениями вероятностей, выбранных в парадоксальной игре Паррондо [21]. Подход работы [24], в котором наложено N дополнительных условий $p_m^u = 0$, не предполагает отображения барьерных участков, поэтому потенциальный профиль представляет собой ломаную линию, соединяющую минимумы потенциальных ям.

Перейдем к выводу дискретного аналога леммы Паррондо. Введем обозначения $\Phi_m(\tau)$ и $\varphi_m(\tau)$ для искомого интегрального потока и вспомогательной интегральной вероятности соответственно:

$$\Phi_m(\tau) \equiv \sum_{t=0}^{\tau-1} J_m(t) = p_m^r \varphi_m(\tau) - p_{m+1}^l \varphi_{m+1}(\tau), \qquad \varphi_m(\tau) = \sum_{t=0}^{\tau-1} R_m(t). \tag{12}$$

Лемма Паррондо позволяет выразить $\Phi_m(\tau)$ через $R_m(0)$ и $R_m(\tau)$, минуя непосредственное вычисление $\varphi_m(\tau)$. При произвольных τ использование леммы дает незначительное упрощение вычислений, поскольку нахождение редуцированной вероятности $R_m(\tau)$ все равно потребуется. Однако при больших τ упрощение вычислений существенно, вплоть до возможности аналитического получения решений для ряда ситуаций, поскольку $R_m(\tau)$ стремится к равновесному распределению Больцмана $R_m^{(\mathrm{eq})}$, вид которого известен. Покажем, как возникает такая оптимизация преобразований.

Суммирование уравнения непрерывности (4) по дискретной временной переменной t от 0 до $\tau - 1$ дает уравнение $R_m(\tau) - R_m(0) = -[\Phi_m(\tau) - \Phi_{m-1}(\tau)]$, которое при последующем суммировании по m от 2 до n приводит к формуле

$$\Phi_n(\tau) = \Phi_1(\tau) + \sum_{m=2}^{n} [R_m(0) - R_m(\tau)], \tag{13}$$

позволяющей выразить интегральный поток в произвольном узле $n > 1$ через интегральный поток в узле $n = 1$. Для вычисления $\Phi_n(\tau)$ используем явное выражение, задаваемое формулой (12), представив его в удобном для дальнейших преобразований виде:

$$\Phi_n(\tau) = \alpha_n [\beta_n \varphi_n(\tau) - \beta_{n+1} \varphi_{n+1}(\tau)], \tag{14}$$

где $\alpha_n = \alpha_{n+N}$ и $\beta_n = \beta_{n+N}$ – функции целочисленного аргумента, подлежащие определению. Фактор в квадратных скобках является аналогом полного дифференциала от периодической функции и обращается в нуль при суммировании по элементарной ячейке из N узлов в силу условия периодичности $\beta_1 \varphi_1(\tau) = \beta_{N+1} \varphi_{N+1}(\tau)$. Функции α_n и β_n удовлетворяют системе уравнений $\alpha_n \beta_n = p_n^r$, $\alpha_n \beta_{n+1} = p_{n+1}^l$, которая сводится к уравнению $\alpha_n = s_{n+1}\alpha_{n+1}$, совпадающему с уравнением (5) для $\tilde{\xi}_m$ при $J = 0$. Последнее означает, что в качестве решения α_n с точностью до произвольной постоянной C можно использовать функцию ξ_n, задаваемую соотношением (7) с дополнительным условием (9), $\alpha_n = C\xi_n$. Действительно, непосредственной подстановкой этого решения в выражение $\alpha_n - s_{n+1}\alpha_{n+1}$ можно убедиться, что оно равно $C(1 - s_1 s_2 \dots s_N)$, т.е. $\alpha_n = s_{n+1}\alpha_{n+1}$ при $s_1 s_2 \dots s_N = 1$.

Подстановка выражения для интегрального потока (14) в (13), домножение результата почленно на α_n^{-1} и последующее суммирование по всем узлам элементарной ячейки обращает в ноль левую часть полученного уравнения, которая содержит интегральные вероятности $\varphi_n(\tau)$ и $\varphi_{n+1}(\tau)$. Тогда в правой части получившегося уравнения коэффициент пропорциональности C между величинами α_n и ξ_n сокращается, что и приводит к окончательному выражению для $\Phi_1(\tau)$:

$$\Phi_1(\tau) = \sum_{n=2}^{N} Q_n \sum_{m=2}^{n} [R_m(\tau) - R_m(0)], \qquad Q_n = \xi_n^{-1} \Big/ \sum_{m=1}^{N} \xi_m^{-1}. \tag{15}$$

Использование выражений (15) в составе формулы (13) определяет $\Phi_n(\tau)$ при произвольном $n > 1$. Сопоставление выражения для Q_n в (15) с параметрами эквивалентного потенциального рельефа, задаваемыми соотношением (10), дает $Q_n = e^{v_n} \Big/ \sum_{m=1}^{N} e^{v_m}$, откуда следует, что величины Q_n определяются барьерными факторами, т.е. выступают эквивалентами функций $\rho_+^{\mathrm{A(B)}}(x)$ в непрерывном описании леммы Паррондо (1).

Соотношения (13), (15) являются точными и представляют основной результат данной статьи. Они позволяют рассчитывать интегральные потоки за произвольный промежуток дискретного времени τ, если известна редуцированная вероятность $R_m(\tau)$. При больших временах τ, когда устанавливается термодинамическое равновесие, $R_m(\tau)$ стремится к известному больцмановскому распределению $R_m^{(\mathrm{eq})}$, и соотношения (13), (15) становятся дискретным эквивалентом леммы Паррондо. Таким образом, на временной шкале результат (13), (15) имеет даже большую общность, нежели собственно лемма Паррондо. Значение полученного результата состоит в возможности изучать динамику средних значений заполнений узлов n и характеристики рэтчет-эффекта при наличии флуктуаций вероятностей переходов между узлами (флуктуаций потенциального профиля в рэтчет-системах). При соблюдении условий детального баланса (9) и в отсутствие флуктуаций приращение средних значений n определяется суммой интегральных потоков:

$$\langle n(\tau)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n P_n(\tau) = \langle n(0)\rangle + \sum_{m=1}^{N} (p_m^r - p_m^l)\varphi_m(\tau) = \langle n(0)\rangle + \sum_{m=1}^{N} \Phi_m(\tau). \tag{16}$$

При достаточно больших τ, когда устанавливается термодинамическое равновесие, величины $\Phi_m(\tau)$ перестают зависеть от τ и возникает постоянное приращение $\langle n(\infty)\rangle - \langle n(0)\rangle$.

Рассмотрим процесс чередования двух состояний A и B с длительностями τ_{A} и τ_{B}, характеризуемыми, соответственно, наборами вероятностей $p_{n,\mathrm{A}}^r$, $p_{n,\mathrm{A}}^l$ и $p_{n,\mathrm{B}}^r$, $p_{n,\mathrm{B}}^l$. Поскольку конечный момент времени одного состояния является начальным для другого ($\langle n_{\mathrm{A}}(0)\rangle = \langle n_{\mathrm{B}}(\tau_{\mathrm{B}})\rangle$), то, применяя (16) последовательно для $\langle n_{\mathrm{A}}(\tau_{\mathrm{A}})\rangle$ и для $\langle n_{\mathrm{B}}(\tau_{\mathrm{B}})\rangle$ и учитывая далее (13), получаем среднюю скорость изменения средних значений заполнений узлов n за один временной цикл $\tau_{\mathrm{A}} + \tau_{\mathrm{B}}$:

$$\langle v\rangle = \frac{\langle n_{\mathrm{A}}(\tau_{\mathrm{A}})\rangle - \langle n_{\mathrm{B}}(0)\rangle}{\tau_{\mathrm{A}} + \tau_{\mathrm{B}}} = (\tau_{\mathrm{A}} + \tau_{\mathrm{B}})^{-1} \sum_{m=1}^{N} [\Phi_{m,\mathrm{A}}(\tau_{\mathrm{A}}) + \Phi_{m,\mathrm{B}}(\tau_{\mathrm{B}})] = \frac{N}{\tau_{\mathrm{A}} + \tau_{\mathrm{B}}} [\Phi_{1,\mathrm{A}}(\tau_{\mathrm{A}}) + \Phi_{1,\mathrm{B}}(\tau_{\mathrm{B}})] \tag{17}$$

или, после подстановки выражения (15), эта скорость есть

$$\langle v\rangle = \frac{N}{\tau_{\mathrm{A}} + \tau_{\mathrm{B}}} \sum_{n=2}^{N} (Q_{n,\mathrm{A}} - Q_{n,\mathrm{B}}) \times \sum_{m=2}^{n} [R_{m,\mathrm{A}}(\tau_{\mathrm{A}}) - R_{m,\mathrm{B}}(\tau_{\mathrm{B}})], \qquad Q_{n,\mathrm{A(B)}} = \frac{\xi_{n,\mathrm{A(B)}}^{-1}}{\sum_{m=1}^{N} \xi_{m,\mathrm{A(B)}}^{-1}}. \tag{18}$$

Здесь величина ξ_n для состояний A(B) определена в (7). Отметим, что структура выражения (18) подобна (1), как и должно быть, поскольку (18) есть дискретный аналог выражения для скорости рэтчета в непрерывной модели.

Простейший пример, допускающий аналитическое представление редуцированной вероятности

$R_m(t)$ с произвольным t, соответствует случаю $N = 2$, при котором

$$R_1(t) = 1 - R_2(t) = \\ = \bar{R}_1^{(\mathrm{eq})} + [R_1(0) - \bar{R}_1^{(\mathrm{eq})}](1 - p_1 - p_2)^t, \\ \bar{R}_1^{(\mathrm{eq})} = \frac{p_2}{p_1 + p_2}, \quad p_m = p_m^r + p_m^l, \quad m = 1, 2. \tag{19}$$

Если вероятности оставаться в том же узле равны нулю, $p_m^u = 0$, $p_m = 1$ $(m = 1, 2)$, то четность номера узла пребывания частицы будет изменяться после каждого прыжка, приводя к осцилляциям $R_1(t) = \bar{R}_1^{(\mathrm{eq})} + [R_1(0) - \bar{R}_1^{(\mathrm{eq})}](-1)^t$, не убывающим с ростом t. Поскольку $\Phi_1(\tau) = (p_1^r/p_1)[R_1(0) - R_1(\tau)]$ и $\sum_{m=1}^{2} \Phi_m(\tau) = [(p_1^r - p_1^l)/p_1][R_1(0) - R_1(\tau)]$, то

$$\langle n(\tau)\rangle = \langle n(0)\rangle + \\ + [(p_1^r - p_1^l)/p_1][R_1(0) - \bar{R}_1^{(\mathrm{eq})}][1 - (1 - p_1 - p_2)^{\tau}]. \tag{20}$$

Тогда при чередовании двух состояний A и B скорость рэтчет-эффекта равна:

$$\langle v\rangle = \frac{2[(p_{1,\mathrm{A}}^r/p_{1,\mathrm{A}}) - (p_{1,\mathrm{B}}^r/p_{1,\mathrm{B}})]}{\tau_\mathrm{A} + \tau_\mathrm{B}}[\bar{R}_{1,\mathrm{B}}^{(\mathrm{eq})} - \bar{R}_{1,\mathrm{A}}^{(\mathrm{eq})}] \times \\ \times [1 - (1 - p_{1,\mathrm{A}} - p_{2,\mathrm{A}})^{\tau_\mathrm{A}}][1 - (1 - p_{1,\mathrm{B}} - p_{2,\mathrm{B}})^{\tau_\mathrm{B}}]. \tag{21}$$

На рисунке 2 теоретические зависимости (20), (21) сопоставлены с результатами моделирования, при котором случайные смещения частицы на каждом шаге дискретного изменения времени отрабатывались с помощью генератора случайных чисел в соответствии с исходным управляющим уравнением (2), а полученные траектории движения затем усреднялись. В качестве A выбрано симметричное состояние (аналог процесса свободной диффузии в отсутствие потенциального профиля), в котором $p_\mathrm{A}^r = p_\mathrm{A}^l = 1/2$ вне зависимости от номера узла. Состояние B задано набором параметров $p_{1,\mathrm{B}}^r = 0.2$, $p_{1,\mathrm{B}}^l = 0.3$, $p_{2,\mathrm{B}}^r = 0.54$, $p_{2,\mathrm{B}}^l = 0.36$, а состояние C определено как антисимметричное к B, что соответствует параметрам с инвертированными индексами 1 и 2. Начальное условие выбрано как $\langle n(0)\rangle = R_1(0) = 0$. Симметричное состояние A не дает смещения среднего значения заполнения узла n, т.е. $\langle n_\mathrm{A}(t)\rangle = \langle n_\mathrm{A}(0)\rangle = 0$, согласно (20) при $p_\mathrm{A}^r = p_\mathrm{A}^l = 1/2$. Смещения возможны для несимметричных состояний B и C. Формула (20) очень точно воспроизводит модельную зависимость $\langle n_{\mathrm{B(C)}}(t)\rangle$ (сравни положения маркеров относительно пунктирных линий на рис. 2a). Установившиеся значения $\langle n_\mathrm{B}(\infty)\rangle = 9/70$ и $\langle n_\mathrm{C}(\infty)\rangle = -5/70$ реализуются достаточно быстро: при $\tau > 5$. Рэтчет-эффект возникнет при чередовании состояний; исключение – реализация состояния A с четным значением его длительности τ_A (рис. 2b). Значения скоростей рэтчет-эффекта, рассчитываемые по формуле (21) (пунктирные линии на рис. 2b), правильно описывают наклон модельных зависимостей.

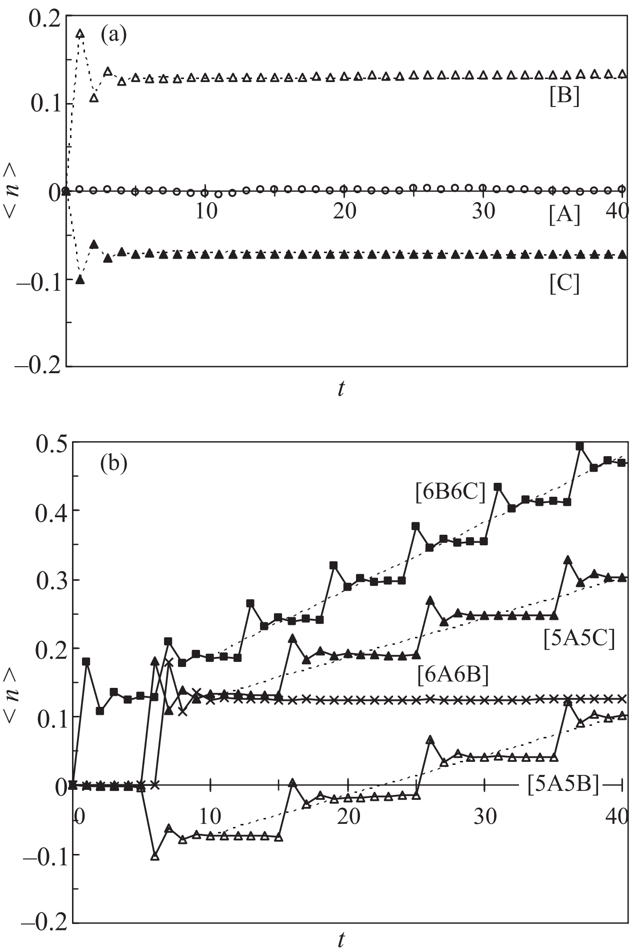

Рис. 2. Зависимости средних значений заполнений узлов n от дискретного времени t, рассчитанные при $N = 2$ путем численного моделирования с усреднением по 3 млн. траекторий (маркеры) и по формулам (20), (21) (пунктирные линии). Результаты для состояний A, B и C (описаны в тексте) представлены на рисунке (a), а при чередовании этих состояний – на рисунке (b) (символы в [...] описывают последовательность чередования, например, [6B6C] соответствует чередованию состояний B и C с длительностями $\tau_\mathrm{B} = 6$ и $\tau_\mathrm{C} = 6$)

Соотношения (13), (15), (16), (18) можно применить и к парадоксальной игре Паррондо (обозначаемой здесь как D с параметрами, представленными в подписи к рис. 1), соответствующей $N = 3$ [21–25].

Средний капитал при достаточно больших $\tau > 20$ выходит на значение $\langle n_{\mathrm{D}}(\infty)\rangle = -88/169$, также хорошо согласующееся с результатом моделирования (рис. 3). Чередование игры D с симметричной игрой A приводит к рэтчет-эффекту, характеризующемуся скоростью изменения среднего капитала $\langle v\rangle = (16/169)/(\tau_{\mathrm{A}}+\tau_{\mathrm{D}})$, которую демонстрирует и моделирование при достаточно больших τ_{D} (сравни пунктирные линии и маркеры на рис. 3).

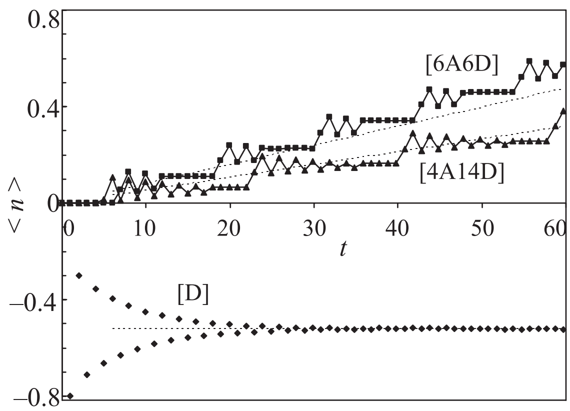

Рис. 3. Зависимости среднего капитала $\langle n\rangle$ от числа бросков игральной кости t в случае $N = 3$ для игры D и ее чередования с игрой A (парадоксальная игра Паррондо), при различных длительностях игр τ_{A} и τ_{D}. Результаты моделирования с усреднением по 3 млн. траекторий и расчетами по формулам (16) и (18) представлены маркерами и пунктирными линиями

Таким образом, представленный в данной статье дискретный аналог леммы Паррондо, одного из фундаментальных соотношений теории рэтчетов, позволил развить теоретический аппарат рэтчет-эффекта в системах с дискретным изменением переменных, а также установить количественные связи между различными моделями. Полученное представление для дискретных систем является даже более общим, чем интегральная лемма Паррондо, поскольку применимо не только к адиабатическим системам. Основными параметрами предложенного описания являются вероятности переходов между узлами одномерной решетки, которые ставятся в соответствие величинам экстремумов потенциального рельефа, прыжковое движение в котором описывается предлагаемой теорией и является низкотемпературным пределом непрерывного движения. Соотношения для скорости дискретного рэтчет-эффекта в случаях двух и трех неэквивалентных узлов элементарной ячейки одномерной решетки приводят к результатам, находящимся в хорошем согласии с результатами численного моделирования. Представленные количественные связи параметров дискретных и непрерывных моделей позволяют учитывать влияние внешних процессов (например, конформационных переходов и перераспределений заряда под действием гидролиза АТФ или внешних электромагнитных полей) в терминах флуктуаций потенциального рельефа, вдоль которого движется броуновская частица, а значит исследовать закономерности функционирования броуновских моторов относительно простыми модельными методами.

Работа выполнена в рамках Государственного задания 0082-2018-0003 (регистрационный номер АААА-А18-118012390045-2) и поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 20-57-00007 и 18-29-02012-мк), Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект Ф20Р-032).

1. P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).
2. P. Hänggi and F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys. **81**, 387 (2009).
3. D. Cubero and F. Renzoni, *Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nanomotors*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (2016).
4. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Л. И. Трахтенберг, Успехи физических наук **189**, 529 (2019) [V. M. Rozenbaum, I. V. Shapochkina, and L. I. Trakhtenberg, Physics-Uspekhi **62**, 496 (2019)].
5. Ю. В. Гуляев, А. С. Бугаев, В. М. Розенбаум, Л. И. Трахтенберг, Успехи физических наук **190**, 337 (2020) [Yu. V. Gulyaev, A. S. Bugaev, V. M. Rozenbaum, and L. I. Trakhtenberg, Physics-Uspekhi **63**(4), 311 (2020)].
6. J. M. R. Parrondo, Phys. Rev. E **57**, 7297 (1998).
7. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Письма в ЖЭТФ **92**, 124 (2010) [JETP Lett. **92**, 120 (2010)].
8. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Т. Е. Корочкова, Письма в ЖЭТФ **98**, 637 (2013) [V. M. Rozenbaum and I. V. Shapochkina, JETP Lett. **98**, 568 (2013)].
9. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Письма в ЖЭТФ **102**, 275 (2015) [V. M. Rozenbaum and I. V. Shapochkina, JETP Lett. **102**, 248 (2015)].
10. V. M. Rozenbaum, Yu. A. Makhnovskii, I. V. Shapochkina, S.-Y. Sheu, D.-Y. Yang, and S. H. Lin, Phys. Rev. E **92**, 062132 (2015).
11. R. D. Astumian and M. Bier, Phys. Rev. Lett. **72**, 1766 (1994).
12. F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost, Rev. Mod. Phys. **69**, 1269 (1997).
13. Y. Okada and N. Hirokawa, Science **283**, 1152 (1999).
14. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Ё. Тераниши, Л. И. Трахтенберг, Письма в ЖЭТФ **107**, 525 (2018).
15. М. А. Кожушнер, Б. В. Лидский, В. С. Посвянский, Л. И. Трахтенберг, Письма в ЖЭТФ **108**, 670 (2018).
16. V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S. H. Lin, and T. Y. Tsong, J. Phys. Chem. B **108**, 15880 (2004).

17. T. Y. Tsong and R. D. Astumian, Bioelectrochemistry and Bioenergetics **15**, 457 (1986).
18. B. Derrida, J. Stat. Phys. **31**, 433 (1983).
19. J. C. Skou, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **37**, 2321 (1998).
20. T. Y. Tsong and C.-H. Chang, AAPPS Bulletin **13**, 12 (2003).
21. G. P. Harmer and D. Abbott, Nature **402**, 864 (1999).
22. G. P. Harmer and D. Abbott, Stat. Sci. **14**, 206 (1999).
23. J. M. R. Parrondo, G. P. Harmer, and D. Abbott, Phys. Rev. Lett. **85**, 5226 (2000).
24. R. Toral, P. Amengual, and S. Mangioni, Physica A **327**, 105 (2003).
25. J. M. R. Parrondo and L. Dinis, Contemp. Phys. **45**, 147 (2004).
26. В. М. Розенбаум, Химия, физика и технология поверхности **11**, 100 (2020).
27. R. D. Astumian, J. Phys. Chem. **100**, 19075 (1996).
28. Р. Л. Стратонович, Радиотехника и электроника **3**, 497 (1958) [*Non-linear Transformations of Stochastic Processes*, ed. by P. I. Kuznetsov, R. L. Stratonovich, and V. I. Tikhonov, Pergamon Press, Oxford (1965)].
29. R. L. Stratonovich, *Theory of Random Noise*, Gordon and Breach, London (1969).
30. L. Schimansky-Geier, M. Kschischo, and T. Fricke, Phys. Rev. Lett. **79**, 3335 (1997).
31. V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S. H. Lin, and T. Y. Tsong, Physica A **363**, 211 (2006).
32. V. M. Rozenbaum and I. V. Shapochkina, Phys. Rev. E **84**, 051101 (2011).

Р О С С И Й С К А Я А К А Д Е М И Я Н А У К

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

том 112

Выпуск 6

25 сентября 2020

Журнал издается под руководством Отделения физических наук РАН

Адрес редакции	119334 Москва, ул. Косыгина 2
тел./факс	(499)-137-75-89
e-mail	letters@kapitza.ras.ru
Web-страница	http://www.jetpletters.ac.ru

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

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 343 – 351

Измерение угловых распределений осколков деления ^{240}Pu нейтронами с энергиями 1–200 МэВ и их модельный анализ

А. С. Воробьев[+1)], *А. М. Гагарский*[+], *О. А. Щербаков*[+], *Л. А. Вайшнене*[+], *А. Л. Барабанов*[*]

[+]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, 188300 Гатчина, Россия*

[*]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 августа 2020 г.
После переработки 13 августа 2020 г.
Принята к публикации 13 августа 2020 г.

В данной работе представлены результаты измерений угловых распределений осколков деления ^{240}Pu и теоретического анализа полученных экспериментальных данных. Измерения в области выше 10 МэВ выполнены впервые. Предложено модельное описание энергетической зависимости угловой анизотропии осколков во всём исследованном диапазоне энергий нейтронов.

DOI: 10.31857/S1234567820180019

Нейтронный комплекс ГНЕЙС на основе синхроциклотрона СЦ-1000 с энергией протонов 1 ГэВ, действующий в НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ, включает в себя интенсивный импульсный источник нейтронов с длительностью вспышки 10 нс и спектрометр по времени пролета с базами длиной до 50 м [1, 2]. К настоящему времени на этом нейтронном комплексе в рамках программы исследований процесса деления нами получен большой объем новых уникальных экспериментальных данных по угловым распределениям осколков при делении ядер нейтронами промежуточных энергий 1–200 МэВ [3–8]. Измерения выполнены для широкого набора ядер мишеней: $^{\rm nat}$Pb, ^{209}Bi, ^{232}Th, ^{233}U, ^{235}U, ^{238}U, ^{237}Np и ^{239}Pu; экспериментальные результаты размещены в базе данных EXFOR [9]. В аналогичных исследованиях, которые ведутся за рубежом коллаборациями n_TOF [10, 11] и NIFFTE [12, 13], были изучены угловые распределения осколков при делении ядер ^{232}Th, ^{235}U и ^{238}U нейтронами примерно в том же диапазоне энергий нейтронов. Результаты, полученные разными группами, в целом согласуются между собой; выявленные отличия, безусловно, станут предметом внимательного анализа.

Интерес к угловым распределениям осколков деления ядер нейтронами, протонами и другими падающими частицами обусловлен тем, что анизотропия угловых распределений чувствительна к характеристикам переходных состояний на барьерах деления – см., например, [14]. Эта информация важна, поскольку в механизме деления остается еще много неясного в силу его сложности. Отметим также, что исследования угловых распределений осколков в реакциях с нейтронами с энергиями выше 20–30 МэВ начались сравнительно недавно. Результаты первых измерений на нейтронах с энергиями до 100 МэВ для ядер ^{232}Th и ^{238}U были представлены в [15].

Теоретическое описание угловой анизотропии осколков основывается на учете двух факторов (для определенности рассмотрим деление, инициируемое нейтронами). Во-первых, спины J первичных компаунд-ядерных состояний, формирующихся при захвате ядрами-мишенями нейтронов с отличными от нуля орбитальными моментами (они перпендикулярны импульсу нейтронов), выстраиваются преимущественно поперек оси столкновения (оси z) нейтрона и ядра-мишени. Другими словами, если взять уровень компаунд-ядра со спином J, то сечения заселения выше для подуровней с малыми $|M|$, где M – проекция J на ось z. Во-вторых, компаунд-ядро при делении проходит через переходные состояния на барьере (или на барьерах, если их несколько), которые характеризуются определенными проекциями K спина J на ось деформации ядра или представляют собой определенные суперпозиции состояний с проекциями K на основную ось деформации, если ядро не обладает аксиальной симметрией. Поэтому формируется некоторое, в общем случае неравномерное, распределение $\rho^J(K)$ вероятности деления через состояния с квантовыми числами K (при этом $\rho^J(K) = \rho^J(-K)$ при сохранении пространственной четности). Важно,

1) e-mail: vorobyev_as@pnpi.nrcki.ru

что аналогичные распределения сечений заселения по M и вероятностей деления по K имеют место не только для уровней первичных компаунд-ядер, но и для всех уровней со спином J и четностью π, нумеруемых индексом i, всех делящихся нуклидов (остаточных ядер) с Z протонами и N нейтронами; пусть $\sigma_{ZN}(J\pi iM)$ – сечение заселения соответствующего подуровня.

Отметим, что при высоких энергиях столкновения остаточные ядра формируются не только потому, что первичное компаунд-ядро равновесным образом испускает одну частицу или несколько; пусть $\sigma^{C}_{ZN}(J\pi iM)$ – сечение заселения подуровня остаточного ядра в таком процессе. Ведь при столкновении нейтрона с ядром-мишенью не всегда образуется компаунд-ядро. Остаточное ядро, вообще говоря, возбужденное, может возникнуть вследствие некоторого прямого процесса или стать следствием захвата нейтрона ядром-мишенью и последующего предравновесного испускания некоторой частицы. За образованием этого возбужденного остаточного ядра может, в свою очередь, последовать каскадное испускание одной или нескольких частиц с образованием других остаточных ядер. Пусть $\sigma^{DPE}_{ZN}(J\pi iM)$ – это сечение заселения подуровня остаточного ядра, если процесс начинается с прямого (Direct) или предравновесного (Pre-Equilibrium) процесса, так что

$$\sigma_{ZN}(J\pi iM) = \sigma^{DPE}_{ZN}(J\pi iM) + \sigma^{C}_{ZN}(J\pi iM). \quad (1)$$

Суммируя по M левую и правую части этого соотношения, получим аналогичную формулу для сечений заселения уровней,

$$\sigma_{ZN}(J\pi i) = \sigma^{DPE}_{ZN}(J\pi i) + \sigma^{C}_{ZN}(J\pi i). \quad (2)$$

Поэтому полное сечение деления

$$\sigma_f = \sum_{ZNJ\pi i} \sigma_{ZN}(J\pi i) P^{ZN}_f(J\pi i) = \sigma^{DPE}_f + \sigma^{C}_f, \quad (3)$$

где $P^{ZN}_f(J\pi i)$ – вероятность деления (делимость) уровня, распадается на составляющие σ^{DPE}_f и σ^{C}_f (суммирование по i превращается в интегрирование, если уровни лежат в непрерывном спектре).

Итак, любой делящийся $(J\pi i)$-уровень любого образующегося (ZN)-нуклида характеризуется распределением $\rho^{J\pi i}_{ZN}(K)$ вероятности деления по числу K, связанным со свойствами переходных состояний. Заметим, что это распределение не зависит от M в силу изотропии пространства. При этом сечения заселения уровня и его подуровней определяются формулами (2) и (1) соответственно. Удобно ввести распределение вероятности заселения подуровней по проекции M: $\eta^{J\pi i}_{ZN}(M) = \sigma_{ZN}(J\pi iM)/\sigma_{ZN}(J\pi i)$. Тогда угловое распределение осколков деления в системе центра масс (с.ц.м.), нормированное на единицу, может быть представлено в виде ряда по полиномам Лежандра,

$$\frac{dw^{J\pi i}_{ZN}(\theta)}{d\Omega} = \sum_{Q=0,2,\ldots} \frac{2Q+1}{4\pi}\, \tau^{ZN}_{Q0}(J\pi i)\beta^{ZN}_{Q}(J\pi i) P_Q(\cos\theta), \quad (4)$$

где θ – угол между направлением импульса осколка и осью столкновения, спин-тензоры ориентации

$$\tau^{ZN}_{Q0}(J\pi i) = \sum_{M} C^{JM}_{JMQ0}\, \eta^{J\pi i}_{ZN}(M), \quad \tau^{ZN}_{00}(J\pi i) = 1, \quad (5)$$

четного ранга Q характеризуют выстроенность спинов делящихся состояний, а величины

$$\beta^{ZN}_{Q}(J\pi i) = \sum_{M} C^{JK}_{JKQ0}\, \rho^{J\pi i}_{ZN}(K), \quad \beta^{ZN}_{0}(J\pi i) = 1, \quad (6)$$

называют параметрами анизотропии, C^{Aa}_{BbDd} – коэффициенты Клебша–Гордана, см. [8, 16].

При низких энергиях падающих нейтронов полное и дифференциальное сечения деления практически полностью (с точностью до вкладов от реакции $(n,\gamma f)$) определяются вкладами состояний первичного компаунд-ядра (делениями 1-го шанса), но с ростом энергии нейтронов появляется вклад от делений 2-го шанса, т.е. от деления состояний остаточного ядра, возникающего после испускания первичным компаунд-ядром одного нейтрона. При дальнейшем увеличении энергии нейтронов картина все более усложняется не только за счет открывающихся 3-го, 4-го и т.д. шансов, но и вследствие появления вкладов от остаточных делящихся ядер, формирующихся в прямых и предравновесных процессах. Понятно, что угловые распределения осколков могут быть найдены, лишь если вычисляются как спин-тензоры, определяющие выстроенности всех делящихся состояний всех остаточных ядер, так и соответствующие параметры анизотропии.

Существующие в настоящее время программные комплексы, такие как, например, TALYS [17], моделирующие ядерные реакции при низких и промежуточных энергиях, вычисляют только сечения образования и делимости уровней остаточных ядер, что достаточно для получения как полного, так и парциальных (связанных с отдельными нуклидами) сечений деления – см. (2) и (3). Но ни один из таких комплексов не содержит в себе опции вычисления угловых распределений осколков деления. До недавнего времени работа [15] оставалась единственной, в которой был выполнен расчет углового распределения осколков деления ядер ^{232}Th и ^{238}U нейтронами с энергиями до 100 МэВ. К сожалению, не все детали вычислений представлены в указанной статье. Кроме того, публикаций, посвященных развитию методики или расчетам для других ядер, не последовало. Следующее вычисление углового распределения осколков деления ядер нейтронами промежуточных энергий до 200 МэВ было выполнено нами [8, 16]. Предметом изучения стала реакция $^{237}\mathrm{Np}(n, f)$, для которой нами же были получены соответствующие экспериментальные данные. Мы поставили себе задачу дополнить упомянутую выше программу TALYS, код которой является открытым, возможностью расчета угловых распределений осколков путем включения в программу блоков, в которых вычисляются спин-тензоры ориентации и параметры анизотропии.

В этой статье представлены результаты измерений угловых распределений осколков, выполненных для деления ядер ^{240}Pu нейтронами промежуточных энергий, а также расчетов этих угловых распределений в рамках разработанного нами подхода. Важность измерений заключается в том, что для ^{240}Pu в области энергии нейтронов ниже 10 МэВ имелись только два набора данных [18, 19], а выше 10 МэВ экспериментальные данные отсутствовали. Что же касается расчетов, то цель состояла не только в проверке нашего метода, но и в его усовершенствовании.

Измерения были произведены на пролетной базе 36.5 м нейтронного пучка # 5 времяпролетного спектрометра ГНЕЙС. Мишень ^{240}Pu обогащением 99.13 %, толщиной 153 мкг/см^2 и диаметром 80 мм, в виде слоя двуокиси плутония PuO_2 на подложке из алюминия толщиной 100 мкм и диаметром 100 мм, была изготовлена стандартным методом "намазывания".

Регистрация осколков деления производилась двумя позиционно-чувствительными многопроволочными пропорциональными счетчиками (МППС) размером 140 × 140 мм^2. Эффективность регистрации осколков деления полностью определяется геометрией МППС и проницаемостью проволочных электродов. Система накопления данных была организована на основе 8-ми битового 500 МГц оцифровщика (Acqiris DC-270). Временной и амплитудный анализ волновых форм сигналов со счетчиков позволяет определить координаты регистрируемых осколков и энергию нейтрона, вызывающего деление, по методу времени пролета. Существенным моментом является то, что совместное использование МППС и методов цифровой обработки сигналов позволило провести измерения с практически нулевым порогом регистрации

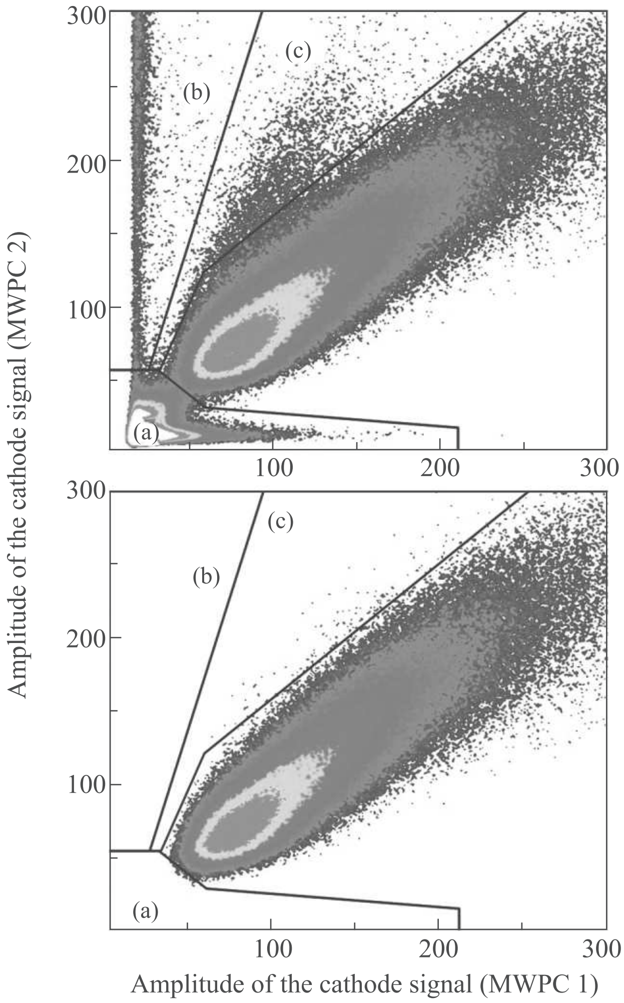

Рис. 1. (Цветной онлайн) Двумерное представление зависимости между амплитудами катодных сигналов с двух МППС в эксперименте с мишенью ^{240}Pu: (a) – область не связанных с делением продуктов реакций, индуцированных нейтронам; (b) и (c) – события деления, соответствующие случаю, когда осколки деления зарегистрированы только одним из МППС из-за ограниченной прозрачности другого. На нижней части рисунка показаны "полезные" события деления

осколков при отсутствии вклада сопутствующих реакций. Наиболее наглядно это демонстрируют двумерные распределения амплитуд катодных сигналов с обоих МППС, представленные на рис. 1, до и после выделения событий деления. Подробное описание экспериментальной установки и процедуры обработки данных представлено в наших работах [4, 6].

Полученные в данной работе угловые распределения осколков деления ядер ^{240}Pu (в с.ц.м. нейтрона и ядра-мишени), т.е. выходы осколков $W(\theta)$ под углом

θ между направлением импульса осколка и осью нейтронного пучка, описывались при помощи функции, являющейся суммой четных полиномов Лежандра до 4-й степени (вклад 6-й и более высоких степеней пренебрежимо мал) включительно в диапазоне углов $0.24 < \cos\theta < 1.0$ с шагом по $\cos\theta$, равным 0.01. На рисунке 2 представлена анизотропия $W(0°)/W(90°)$

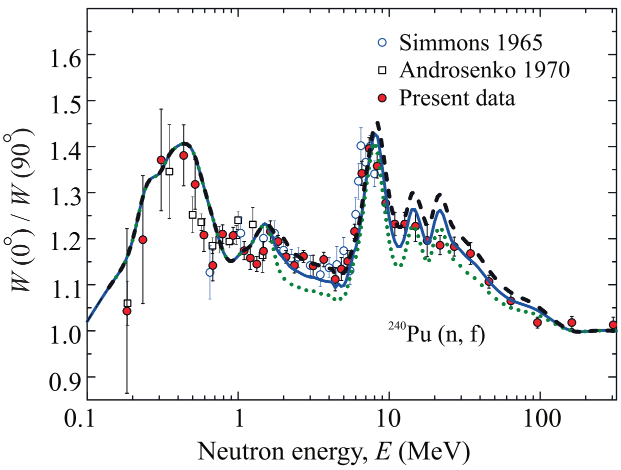

Рис. 2. (Цветной онлайн) Угловая анизотропия осколков деления ^{240}Pu в зависимости от энергии E падающих нейтронов. Экспериментальные данные представлены точками; помимо наших данных приведены результаты авторов [18, 19]. Указанные ошибки являются статистическими. Штриховая, сплошная и точечная кривые – результаты наших расчетов (см. текст статьи), отличающиеся только значением параметра $\hbar^2/I_{\text{eff}}$, равным 9, 7 и 5 кэВ, соответственно

осколков деления ядер ^{240}Pu, полученная для интервала энергий нейтронов 1–200 МэВ. Анизотропия определялась через коэффициенты A_2 и A_4 при соответствующих полиномах Лежандра посредством следующего выражения:

$$\frac{W(0°)}{W(90°)} = \frac{1 + A_2 + A_4}{1 - A_2/2 + 3A_4/8}. \tag{7}$$

Полная информация об угловом распределении заключена в A_2 и A_4. На практике, однако, коэффициент A_4 заметно отличается от нуля лишь в небольшом диапазоне низких энергий, и почти всегда мал по сравнению с A_2. В случаях, когда величиной A_4 можно пренебречь, анизотропия $W(0°)/W(90°)$ и коэффициент A_2 однозначно связаны друг с другом.

В области энергий нейтронов ниже ~ 10 МэВ результаты нашей работы в пределах экспериментальных погрешностей согласуются с данными Симмонса и др. [18], а также Андросенко и Смиренкина [19]. Для энергий нейтронов выше 10 МэВ данные об энергетической зависимости анизотропии угловых распределений осколков получены впервые. Средняя величина погрешности наших измерений во всем исследованном диапазоне энергии нейтронов 1—200 МэВ составляет 2–3 %, за исключением области энергий вблизи порога реакции (n, f) ниже 1 МэВ.

Угловую анизотропию естественно описывать вместе с сечением деления. Ведь вид углового распределения осколков, как выше было сказано, связан со свойствами переходных состояний на барьерах, но величина сечения деления определяется этими же барьерами и плотностью этих же переходных состояний. Ранее было отмечено, что в программе TALYS вычисляются полные и парциальные сечения деления в реакциях с нейтронами при низких и промежуточных энергиях столкновения до 200 МэВ (и даже формально до 1000 МэВ, но с нарастающими погрешностями, обусловленными, в частности, тем, что механизмы взаимодействия, специфичные для высоких энергий, не учитываются). Эти вычисления осуществляются в рамках схемы, описанной, к примеру, в [20]. Более того, в TALYS по умолчанию используются численные значения параметров, определяющих конфигурацию барьера деления, как правило, двугорбого, а также переходные состояния на барьерах, взятые из этой же публикации [20], которая посвящена описанию 3-й версии библиотеки входных параметров RIPL-3 (*Reference Input Parameter Library*), рекомендованных для использования в расчетах наблюдаемых величин в ядерных реакциях и при оценке ядерных данных.

В действительности, эти параметры из RIPL-3 вместе с используемой в TALYS по умолчанию моделью Гилберта–Камерона [21] для плотности уровней, в том числе на барьерах, весьма приближенно описывают многие сечения деления. Это, в частности, касается и реакции ^{237}Np(n, f), обсуждавшейся нами в [8, 16], и реакции ^{240}Pu(n, f), которую мы рассматриваем здесь; сравнение экспериментальных данных [22, 23] по сечению деления ядер ^{240}Pu нейтронами с энергиями от 0.1 до 200 МэВ и результатов расчета в TALYS с параметрами по умолчанию представлено на рис. 3. Для удобства представления, на рис. 3 нанесены каждая 2-я точка данных работы [22] и каждая десятая точка данных работы [23].

Невысокая точность описания многих сечений деления является, по-видимому, следствием как недостаточной изученности механизма деления, так и несовершенства используемых моделей. О первом свидетельствует тот факт, что согласно RIPL-3 ротационные полосы переходных состояний всех четно-

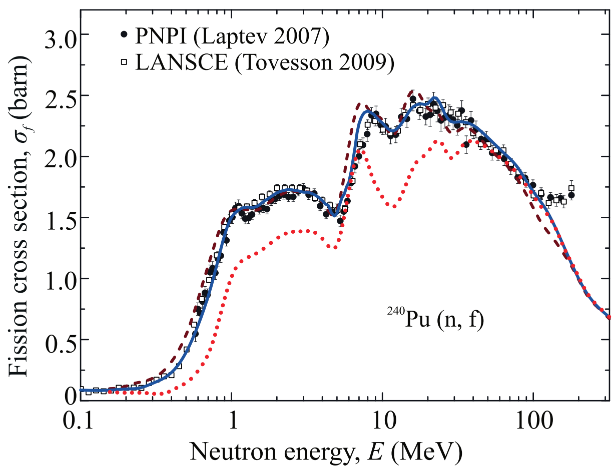

Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечение деления ^{240}Pu в зависимости от энергии E падающих нейтронов: экспериментальные данные взяты из работ [22, 23], точечная линия – расчет с параметрами, заданными в TALYS по умолчанию, штриховая линия – расчет с параметрами "best", сплошная линия – расчет с параметрами из табл. 1, см. также текст статьи

четных делящихся ядер следует строить на одних и те же рекомендованных уровнях с энергиями $E_{K\pi}$ в одних и тех же интервалах от нуля до некоторой энергии E_{cj}, за которой начинается непрерывный спектр переходных состояний, j – номер барьера (и то же верно для всех четно-нечетных, нечетно-четных и нечетно-нечетных ядер). Ясно, что это упрощение. Таким образом, прежде чем технически усложнять модели деления, естественно попытаться согласовать расчет с экспериментом в рамках имеющихся моделей путем подбора более приемлемых параметров, относящихся к делению (но не меняя другие параметры и тем самым сохраняя качество описания сечений в упругом канале и всех других каналах реакции).

В качестве первого шага мы воспользовались опцией "best" в TALYS, означающей, что вместо параметров по умолчанию используются параметры из специального набора, улучшающие описание наблюдаемых величин в заданной реакции, в нашем случае – ^{240}Pu(n, f). Сечение деления, вычисленное с параметрами "best", представлено на рис. 3, и оно действительно лучше согласуется с экспериментальными данными, нежели вариант по умолчанию. Это достигается тем, что 1) немного изменяются некоторые из высот и ширин барьеров ^{241}Pu, ^{240}Pu и ^{239}Pu, 2) для каждого из ядер ^{240}Pu и ^{239}Pu понижается параметр плотности уровней при энергии возбуждения, равной энергии связи нейтрона, и повышаются плотности переходных состояний над 1-м и 2-м барьерами, 3) подавляется влияние состояний во 2-й яме ядра ^{241}Pu на сечение деления (это важно лишь при очень низких энергиях, соответствующих глубоко подбарьерной области). Отметим сразу, что в наш набор параметров, описанный ниже, из перечисленного не измененным вошел лишь пункт 3).

Мы, однако, отказались от варианта "best", поскольку в нем необходимое повышение плотности уровней над барьерами ядер ^{240}Pu и ^{239}Pu обеспечивается неудовлетворительным способом. А именно, в модели Гилберта–Камерона отдельно задаются функции, описывающие плотность уровней при низких и высоких энергиях, но при некоторой энергии E_M, разделяющей указанные области, приравниваются и сами функции, и их первые производные. Между тем, в варианте "best" (для рассматриваемой реакции) плотности уровней при низких и высоких энергиях задаются совершенно независимо, так что при энергии E_M плотность уровней претерпевает разрыв.

Таблица 1. Высоты B (МэВ), параметры ширин $\hbar\omega$ (МэВ), факторы R_{tm} и K_{rc} для 1-го и 2-го барьеров деления нуклидов $^{241-238}$Pu в зависимости от массового числа A, использованные нами для описания сечения деления и угловой анизотропии осколков в реакции ^{240}Pu(n, f)

	1				2			
A	B	$\hbar\omega$	R_{tm}	K_{rc}	B	$\hbar\omega$	R_{tm}	K_{rc}
241	6.05	0.78	0.7	1.5	5.4	0.5	1.0	1.5
240	6.07	0.9	8.0	2.0	5.05	0.6	8.0	4.0
239	6.1	0.8	0.7	1.5	5.6	0.5	1.0	1.5
238	5.6	0.9	4.0	1.0	5.0	0.6	4.0	2.0

В результате мы, во-первых, отказались от вмешательства в параметр плотности уровней для ^{240}Pu и ^{239}Pu, подбираемый в TALYS для каждого ядра таким образом, чтобы он согласовывался с известным средним расстоянием между s-волновыми компаунд-резонансами, и, во-вторых, добились необходимого повышения плотности переходных состояний для указанных ядер, сохраняя непрерывность и гладкость плотности уровней. Для этого мы воспользовались подгоночными параметрами, имеющимися в TALYS, R_{tm} и K_{rc}. Первый из них определяет момент инерции ядра на барьере $I_\perp = R_{tm} I_\perp^{rb}$ относительно оси, перпендикулярной оси деформации, где $I_\perp^{rb}$ – соответствующий "твердотельный" момент инерции. По умолчанию в TALYS принято, что параметр R_{tm} равен 0.6 на 1-м барьере и 1.0 на 2-м барьере. Второй параметр, K_{rc}, входит как множитель в фактор коллективного усиления плотности уровней на барьерах при энергиях возбуждения выше

E_M и по умолчанию принимается равным единице. С помощью параметра R_{tm} можно увеличить моменты инерции ядер на барьерах, что дает рост числа уровней в ротационных полосах в области дискретных уровней от нуля до энергии $E_{cj} < E_M$ (подобная коррекция числа ротационных уровней была выполнена также для ^{241}Pu и ^{238}Pu). Кроме того, мы немного изменили некоторые из высот и ширин барьеров нуклидов $^{241-238}$Pu по сравнению со значениями из RIPL-3. Все использованные параметры для $^{241-238}$Pu (в том числе все, отличающиеся от значений по умолчанию) приведены в табл. 1. Результат расчета сечения деления представлен на рис. 3. На наш взгляд, это описание не уступает по качеству варианту “best”, а в некоторых интервалах, в частности, 5–8 МэВ, выглядит лучше.

На рисунке 4 представлено полное сечения деления σ_f вместе с составляющими, обусловленными делениями 1-го, 2-го и 3-го шансов. Отметим, что пик в сечении вблизи энергии 8 МэВ, хотя и связан с ростом вклада от деления 2-го шанса, но своей характерной формой обязан скорее тому, что выше 8 МэВ сечение деления 1-го шанса падает быстрее, нежели растет вклад от 2-го. Кроме того, на этом же рисунке представлена “компаунд-составляющая” полного сечения деления, определенная формулами (2) и (3).

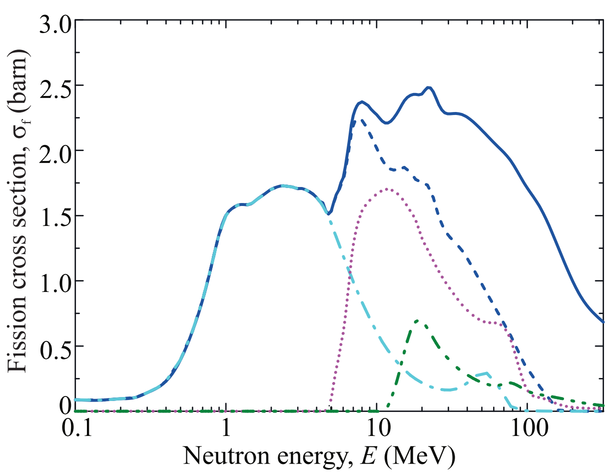

Рис. 4. (Цветной онлайн) Рассчитанные нами полное и парциальные сечения деления ^{240}Pu в зависимости от энергии E падающих нейтронов. Сплошная линия – сечение деления σ_f, штриховая линия – компаунд-составляющая сечения деления σ_f^C, штрих-пунктирная линия – вклад деления 1-го шанса, точечная линия – вклад деления 2-го шанса, штрих-пунктирная линия с двумя точками – вклад деления 3-го шанса

Изложим теперь вкратце суть нашего подхода к вычислению углового распределения осколков, ранее использованного для описания результатов, полученных в реакции ^{237}Np(n,f) [8, 16]. Поскольку делимость $P_f^{ZN}(J\pi i)$ — это сумма по делимостям $P_f^{ZN}(J\pi iK)$ через состояния с определенными K, то распределение по K, входящее в выражение (6), вычисляется как отношение: $\rho_{ZN}^{J\pi i}(K) = P_f^{ZN}(J\pi iK)/P_f^{ZN}(J\pi i)$. При этом дифференциальное сечение деления записывается в виде

$$\frac{d\sigma_f(\theta)}{d\Omega} = \sum_{ZNJ\pi i} \sigma_{ZN}(J\pi i)P_f^{ZN}(J\pi i)\,\frac{dw_{ZN}^{J\pi i}(\theta)}{d\Omega}. \quad (8)$$

При интегрировании по всем телесным углам это дифференциальное сечение переходит в сечение деления (3).

Далее, поскольку сечения $\sigma_{ZN}(J\pi iM)$ (1), определяющие распределения $\eta_{ZN}^{J\pi i}(M)$, состоят из DPE- и C-составляющих, то возникают две существенно разные задачи по вычислению спин-тензоров ориентации (5) уровней делящихся ядер. Одна связана с прямыми и предравновесными процессами, тогда как другая — с формированием исходного выстроенного компаунд-ядра и его последующего статистического распада. Эта последняя задача решается с той же точностью, с какой в рамках метода Хаузера–Фешбаха, заложенного в TALYS, находятся сечения заселения всех уровней компаунд-ядра и всех остаточных ядер. Что же касается первой задачи, то в [8] мы привели следующий аргумент в пользу слабой выстроенности состояний, заселяющихся через прямые и предравновесные процессы. В этих процессах входной и выходной каналы характеризуются сравнимыми энергиями относительного движения и, следовательно, сравнимыми относительными орбитальными моментами. Но направление оси разлета частиц, относительно которой выстроены орбитальные моменты в выходном канале, меняется в пространстве от столкновения к столкновению, поэтому в среднем направление углового момента остаточного ядра должно быть слабо связано с осью столкновения, т.е. выстроенность остаточных ядер относительно оси z должна быть незначительной. Иначе обстоит дело в компаунд-ядерных процессах, где выходные каналы характеризуются относительно малыми энергиями относительного движения, масштаба температуры ядра, и, следовательно, малыми орбитальными моментами. Поэтому большая выстроенность первичного компаунд-ядра должна эффективно передаваться остаточным ядрам (что и было подтверждено расчетами).

Таким образом, мы пренебрегаем выстроенностями остаточных ядер, образующихся после прямых и предравновесных процессов. Соответственно, если в дифференциальном сечении деления выделить изотропное DPE-слагаемое и добавить к нему изотропную часть C-слагаемого, то получим:

$$\frac{d\sigma_f(\theta)}{d\Omega} = \frac{\sigma_f}{4\pi} + \sum_{Q=2,4,\ldots} \sigma^C_{fQ} P_Q(\cos\theta), \tag{9}$$

$$\sigma^C_{fQ} = (2Q+1) \sum_{ZNJ\pi i} \sigma^C_{ZN}(J\pi i) P^{ZN}_f(J\pi i) \times \\ \times \tau^{CZN}_{Q0}(J\pi i) \beta^{ZN}_Q(J\pi i), \tag{10}$$

где величины $\sigma^C_{ZN}(J\pi i)$, $P^{ZN}_f(J\pi i)$ исходно рассчитываются в TALYS, тогда как вычисление $\tau^{CZN}_{Q0}(J\pi i)$ добавлено нами в TALYS. Наблюдаемое угловое распределение осколков легко приводится к форме, из которой было получено выражение (7),

$$W(\theta) = \frac{d\sigma_f(\theta)/d\Omega}{\sigma_f} = \frac{1}{4\pi}\left(1 + \sum_{Q=2,4,\ldots} A_Q P_Q(\cos\theta)\right). \tag{11}$$

Есть и еще один аргумент в пользу изотропности DPE-составляющей сечения деления. Сравним энергетическую зависимость наблюдаемой угловой анизотропии $W(0°)/W(90°)$ на рис. 2 и рассчитанной компаунд-составляющей сечения деления σ^C_f на рис. 4. Мы видим, что выше 20 МэВ эти величины, разные по своей природе, уменьшаются с ростом энергии схожим образом. Но так и должно быть, если угловая анизотропия осколков обусловлена главным образом выстроенностью компаунд-ядра, передающейся на остаточные ядра в процессе его статистического распада. Величина σ^C_f обращается в нуль вблизи энергии 160 МэВ; при этой энергии и выше отличие наблюдаемой угловой анизотропии от нуля сравнимо со статистической погрешностью.

Что же касается параметров анизотропии, входящих в (10), то при достаточно высоких энергиях возбуждения для распределения по K, входящего в (6), используется статистическая гипотеза (см., например, [14]), $\rho^{J\pi i}_{ZN}(K) \sim e^{-K^2/2K_0^2}$, параметр $K_0^2 = I_{\rm eff}T/\hbar^2$ выражается через температуру ядра T и эффективный момент инерции

$$I_{\rm eff} = \frac{I_\perp I_\parallel}{I_\perp - I_\parallel}, \tag{12}$$

где $I_\parallel$ и $I_\perp$ (выше уже встречавшийся) – моменты инерции относительно оси деформации ядра и оси, поперечной к ней. В то же время при энергиях, незначительно превышающих барьер деления (или наивысший из барьеров, если их несколько) и при подбарьерных энергиях мы ожидаем, что деление будет идти в основном через одно-два дискретных переходных состояний, лежащих в интервале от нуля до E_{cj} над наивысшим j-м барьером. В [8] мы предложили следующее распределение,

$$\rho^{J\pi i}_{ZN}(K) \sim e^{-\alpha(|K|-K_1)}, \tag{13}$$

достаточно быстро убывающее при отклонении от одного-двух выделенных значений K.

Следуя логике нашей предыдущей работы по реакции ^{237}Np(n,f), мы ограничились введением минимального числа дополнительных параметров, не претендуя на высокую точность описания угловой анизотропии, а скорее проверяя, воспроизводит ли наш подход общий ход ее энергетической зависимости. Более того, в этой работе мы воспользовались ранее установленными численными значениями всех "универсальных" параметров; например, приняли $\alpha = 1.5$ для коэффициента в экспоненте в формуле (13). Заметим, далее, что в TALYS различаются энергия возбуждения ядра E^* и эффективная энергия возбуждения $U = E^* - \delta$, где δ – поправка на спаривание нуклонов, зависящая от Z и N. Например, для первичного компаунд-ядра ^{241}Pu энергия E^* равна сумме энергии связи нейтрона $B_n = 5.242$ МэВ в этом ядре и энергии столкновении нейтрона с ядром в с.ц.м. $E_{\rm cm}$, тогда как $\delta = 0.773$ МэВ. На барьере энергия возбуждения ядра уменьшается на величину, равную высоте барьера. В этих терминах нами было принято, что при $U > U_{\rm up} = 0.4$ МэВ справедливо статистическое распределение по K, тогда как при $U < U_{\rm down} = -0.1$ МэВ – распределение (13); в промежуточной области используется плавный переход от распределения одного типа к другому. Эффективный момент инерции, как и ранее, мы считали одинаковым для всех делящихся нуклидов и рассматривали его как подгоночный параметр. Температура вычисляется по стандартной формуле

$$T = \sqrt{\frac{U}{a_j(U)}}, \tag{14}$$

где $a_j(U)$ — параметр плотности уровней на j-м, наиболее высоком барьере, зависящий от энергии так, как это задано в TALYS. И, наконец, если в предыдущей работе мы особым образом выбирали значения K_1 для компаунд-ядра и ядра- мишени, а для всех прочих ядер полагали $K_1 = 1.5$, то в этой работе мы поступили также. Для ядра-мишени ^{240}Pu, в частности, приняли $K_1 = 1.9$.

Но в двух пунктах мы отклонились от процедуры, использованной ранее. Во-первых, раз плотности уровней над барьерами вычисляются с множителями, описывающими усиление за счет коллективных эффектов, то в формулу (14), по-видимому, правильно подставлять эффективный параметр плотности уровней, при котором при заданной энергии U плотность уровней ферми-газа сравнивается с той плотностью уровней, которая получается в результате усиления. Во-вторых, параметр K_1 может зависеть от J и π, и в этой работе мы ввели такую зависимость для состояний компаунд-ядра ^{241}Pu, что, как и следовало ожидать, значительно повысило гибкость нашего подхода при описании угловой анизотропии при энергиях падающих нейтронов ниже 1.5 МэВ.

В этой области существенные вклады в сечение деления дают парциальные волны с орбитальными моментами $l \leq 3$, при этом анизотропия угловых распределений осколков возникает при делении выстроенных состояний $3/2^-$, заселяемых p-волнами, состояний $3/2^+$ и $5/2^+$, заселяемых d-волнами, а также состояний $5/2^-$ и $7/2^-$, заселяемых f-волнами. Над 1-м, более высоким барьером ядра ^{241}Pu, в интервале от 0 до $E_{c1} = 80$ кэВ располагаются ротационные переходные состояния, построенные на состояниях с энергиями $E_{K=1/2\,+} = 0$, $E_{K=3/2\,-} = 10$ кэВ, $E_{K=1/2\,-} = 50$ кэВ, $E_{K=5/2\,+} = 80$ кэВ. Предполагая, что состояния, заселяемые f-волнами, скорее делятся через переходные состояния с $K = 3/2$, нежели $K = 1/2$, мы приняли $K_1 = 1.4$ для $5/2^-$ и $7/2^-$. Далее, состояние $3/2^+$ может делиться только через $K = 1/2$, так что $K_1 = 0.5$, тогда как для $5/2^+$ мы приняли $K_1 = 1.0$, поскольку здесь к вкладу от $K = 1/2$ может добавляться вклад от $K = 5/2$. Наконец, для состояния $3/2^-$ была использована подобранная апроксимация $K_1 = 1.2 - 0.35 \cdot e^{-9.5(E_{cm}-0.36)^2}$, имитирующая изменение вкладов переходных состояний с $K = 1/2$ и $K = 3/2$. Результат представлен на рис. 2; в подбарьерной области ниже 0.7–0.8 МэВ получено разумное описание угловой анизотропии.

Что же касается области выше 2 МэВ, где мы используем статистическое распределение по K, то на рис. 2 представлены три варианта расчета, различающиеся только величиной $\hbar^2/I_{\rm eff}$, фактически, единственным подгоночным параметром. Общему ходу энергетической зависимости угловой анизотропии, как представляется, лучше всего соответствует значение $\hbar^2/I_{\rm eff} = 7$ кэВ. В рамках данного подхода, в котором принимается во внимание лишь спиновая выстроенность компаунд-ядра, угловая анизотропия обращается в нуль вблизи энергии 160 МэВ вместе с сечением σ_f^C. Если анизотропия при этой и более высоких энергиях в самом деле отлична от нуля, то ее значение может рассматриваться как погрешность нашего подхода, не учитывающего спиновое выстраивание в прямых и предравновесных процессах.

Переход к использованию эффективного параметра плотности уровней в формуле (14) позволил снизить параметр $\hbar^2/I_{\rm eff}$ с 17 кэВ в наших работах [8, 16] по реакции ^{237}Np(n, f) до 7 кэВ в данной работе. Это важно, потому что это ближе к тому, что следует ожидать. В самом деле, при достаточно высоких энергиях возбуждения, где справедлив статистический подход, моменты инерции ядер должны быть близки к твердотельным значениям. Пользуясь выражениями

$$I_\perp = I_0\left(1 + \frac{\beta_2}{3}\right), \quad I_\parallel = I_0\left(1 - \frac{2\beta_2}{3}\right), \qquad (15)$$

используемыми в TALYS, где $I_0 = (2/5)mr_0^2A^{5/3}$, m – масса нейтрона, $r_0 = 1.2$ фм, A – массовое число, β_2 – параметр деформации, получим

$$\frac{\hbar^2}{I_{\rm eff}} = \frac{\hbar^2}{I_0}\,\frac{\beta_2}{(1 - 2\beta_2/3)(1 + \beta_2/3)}. \qquad (16)$$

Заметим, что в такой модели эффективный момент инерции в самом деле (как мы принимаем в нашем подходе) слабо меняется от ядра к ядру, так как массы и деформации (например, на 1-м барьере) делящихся ядер близки. Если принять, как в TALYS, что $\beta_2 = 0.6$ на 1-м барьере, то $\hbar^2/I_{\rm eff} = 6.5$ кэВ при $A = 240$. И это очень близко к тому, что получилось в данной работе.

Подытоживая, в данной работе мы представили новые экспериментальные данные по угловой анизотропии осколков деления ядер ^{240}Pu нейтронами с энергиями от 1 до 200 МэВ, а также численную оценку этой анизотропии на основе ранее разработанного подхода с использованием модифицированной программы TALYS. Как при низких, так и высоких энергиях воспроизводится общий ход энергетической зависимости угловой анизотропии с использованием небольшого числа параметров с разумными численными значениями. В ходе работы был также найден способ описать с хорошей точностью энергетическую зависимость сечения деления ^{240}Pu нейтронами с энергиями до 100 МэВ (расхождения при более высоких энергиях могут быть связаны как с неправильным учетом предравновесных процессов, так и с некоторыми другими факторами).

Для получения по-настоящему надежной информации о барьерах, переходных состояниях на барьерах, т.е., в сущности, о механизме деления, а также о роли предравновесных процессов при достаточно больших энергиях, нужно, во-первых, включать в анализ как можно больше разнородных данных и, во-вторых, совершенствовать модели, описывающие ядерные процессы. Мы рассматриваем данную работу как подготовительный шаг в данном направлении.

Авторы выражают искреннюю благодарность Е. М. Иванову и всему персоналу Ускорительного отдела ПИЯФ за постоянную дружескую поддержку и стабильную работу синхроциклотрона во время проведения эксперимента. Мы высоко ценим сотрудничество с Т. Е. Кузьминой (Радиевый институт им. В. Г. Хлопина) при решении задачи изготовления высококачественных актинидных мишеней.

Работа частично поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 18-02-00571.

1. N. K. Abrosimov, G. Z. Borukhovich, A. B. Laptev, V. V. Marchenkov, G. A. Petrov, O. A. Shcherbakov, Yu. V. Tuboltsev, and V. I. Yurchenko, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **242**, 121 (1985).
2. O. A. Shcherbakov, A. S. Vorobyev, and E. M. Ivanov, Phys. Part. Nucl. **49**, 81 (2018).
3. A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, L. A. Vaishnene, and A. L. Barabanov, JETP Lett. **102**, 203 (2015).
4. A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, L. A. Vaishnene, and A. L. Barabanov, JETP Lett. **104**, 365 (2016).
5. A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, L. A. Vaishnene, and A. L. Barabanov, EPJ Web Conf. **146**, 04011 (2017).
6. A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, L. A. Vaishnene, and A. L. Barabanov, JETP Lett. **107**, 521 (2018).
7. A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, L. A. Vaishnene, and A. L. Barabanov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **82**, 1240 (2018).
8. A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, L. A. Vaishnene, and A. L. Barabanov, JETP Lett. **110**, 242 (2019).
9. A. S. Vorobyev, EXFOR Data Base, Entries # 41608, 41616, 41658.
10. D. Tarrio, L. S. Leong, L. Audouin et al. (The n_TOF Collaboration), Nucl. Data Sheets **119**, 35 (2014).
11. E. Leal-Cidoncha, I. Duran, C. Paradela et al. (The n_TOF Collaboration), EPJ Web Conf. **111**, 10002 (2016).
12. V. Geppert-Kleinrath, F. Tovesson, J. S. Barrett et al. (NIFFTE Collaboration), Phys. Rev. C **99**, 064619 (2019).
13. D. Hensle, J. T. Barker, J. S. Barrett et al. (NIFFTE Collaboration), Phys. Rev. C **102**, 014605 (2020).
14. R. Vandenbosch and J. R. Huizenga, *Nuclear Fission*, Academic Press, N.Y. (1973).
15. I. V. Ryzhov, M. S. Onegin, G. A. Tutin, J. Blomgren, N. Olsson, A. V. Prokofiev, and P.-U. Renberg, Nucl. Phys. A **760**, 19 (2005).
16. A. L. Barabanov, A. S. Vorobyev, A. M. Gagarski, O. A. Shcherbakov, and L. A. Vaishnene, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **84**, 397 (2020).
17. A. J. Koning, S. Hilaire, and M. C. Duijvestijn, *"TALYS-1.0", Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology (Nice, France, 2007)*, ed. by O. Bersillon, F. Gunsing, E. Bauge, R. Jacqmin, and S. Leray, EDP Sciences, Les Ulis, France (2008), p. 211.
18. J. E. Simmons, R. B. Perkins, and R. L. Henkel, Phys. Rev. B **137**, 809 (1965).
19. Kh. D. Androsenko and G. N. Smirenkin, Sov. J. Nucl. Phys. **12**, 142 (1971); [Х. Д. Андросенко, Г. Н. Смиренкин, ЯФ **12**, 260 (1970)].
20. R. Capote, M. Herman, P. Obložinský, P. G. Young et al. (Collaboration), Nucl. Data Sheets **110**, 3107 (2009).
21. A. Gilbert and A. G. W. Cameron, Can. J. Phys. **43**, 1446 (1965).
22. A. B. Laptev, O. A. Shcherbakov, A. S. Vorobyev, R. C. Haight, and A. D. Carlson, *Proc. 4th Int. Conf. on Fission and Properties of Neutron-Rich Nuclei (Sanibel Island, USA, 2007)*, ed. by J. H. Hamilton, A. V. Ramayya, and H. K. Carter, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Singapore (2008), p. 462.
23. F. Tovesson, T. S. Hill, M. Mocko, J. D. Baker, and C. A. McGrath, Phys. Rev. C **79**, 014613 (2009).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 352 – 356 © 2020 г. 25 сентября

Несохранение четности в протон-дейтронном рассеянии

А. И. Мильштейн[+*], *Н. Н. Николаев*[×1)], *С. Г. Сальников*[+*]

[+]*Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

[*]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

[×]*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

Поступила в редакцию 13 августа 2020 г.
После переработки 13 августа 2020 г.
Принята к публикации 13 августа 2020 г.

Обсуждаются эффекты несохранения четности при взаимодействии релятивистских поляризованных протонов и дейтронов. В рамках подхода Глаубера получены оценки P-нечетных асимметрий в полном и упругом сечениях рассеяния, сечении диссоциации и в неупругом сечении рассеяния с рождением мезонов. Показано, что с точки зрения величины P-нечетного эффекта, взаимодействие поляризованных дейтронов с неполяризованными протонами имеет преимущество по сравнению со взаимодействием поляризованных протонов с неполяризованными дейтронами. При этом найдена значительная P-нечетная асимметрия в канале диссоциации поляризованного дейтрона.

DOI: 10.31857/S1234567820180020

Введение. Интерференция амплитуд сильного и слабого взаимодействий приводит к несохранению четности в ядерных и адронных процессах [1, 2]. Наблюдаемые эффекты в ядерных процессах и в процессах рассеяния протонов и нейтронов низких энергий принято описывать феноменологическими мезон-барионными взаимодействиями (см. обзор [3]). Несмотря на обширную теоретическую [4–15] и экспериментальную [19–22] литературу, вопрос о несохранении четности в адронных процессах при высокой энергии остается открытым. Существенного прогресса в понимании этого эффекта можно ожидать от поляризационных экспериментов на коллайдере NICA [23, 24]. Возможные постановки экспериментов на NICA по поиску нарушения четности при взаимодействии продольно поляризованных протонов или дейтронов с неполяризованной мишенью обсуждались в работе [25].

Оценки P-нечетной асимметрии в нуклон-нуклонном рассеянии в области энергий NICA даны в нашей недавней работе [26]. Структура слабых токов такова, что главный вклад в P-нечетную асимметрию в *pp* рассеянии дают радиационные поправки за счет зарядово-обменного сильного взаимодействия. Было показано также, что с точки зрения величины наблюдаемого эффекта, выгодно измерять P-нечетную асимметрию в упругом рассеянии, так как в неупругих сечениях асимметрия сильно подавлена.

В предлагаемой работе мы обобщили результаты [26] на P-нечетные асимметрии в протон-дейтронном рассеянии при энергиях коллайдера NICA. В отличие от нуклон-нуклонного рассеяния, здесь возникает канал квазиупругого рассеяния с диссоциацией дейтрона в протон-нейтронный континуум. Аналогично результату [26] об усилении асимметрии в упругом рассеянии, подобное усиление найдено и для диссоциации продольно поляризованного дейтрона на неполяризованном протоне. P-нечетная асимметрия при взаимодействии поляризованного дейтрона с неполяризованным протоном оказывается выше, чем при взаимодействии поляризованного протона с неполяризованным дейтроном. Это важно с точки зрения экспериментальных возможностей, так как в области энергий коллайдера NICA ускорение поляризованных дейтронов свободно от спиновых резонансов, многочисленных в случае поляризованных протонов. Что касается выделения P-нечетной асимметрии в процессах упругого рассеяния и диссоциации ускоренных дейтронов, выгодных с точки зрения ожидаемой величины эффекта, мы обращаем внимание на возможности работы с внутренней струйной водородной мишенью с детектированием протонов отдачи [27].

Нуклон-нуклонное рассеяние. Полная амплитуда высокоэнергетического упругого протон-нуклонного рассеяния $T(\mathbf{q}_\perp)$, где $\mathbf{q}_\perp$ – поперечный

[1)] e-mail: nikolaev@itp.ac.ru

импульс рассеянного протона, может быть представлена в виде [26]

$$T(\mathbf{q}_\perp) = T_s(\mathbf{q}_\perp) + T_W(\mathbf{q}_\perp) + T_{\text{int}}(\mathbf{q}_\perp),$$
$$T_{\text{int}}(\mathbf{q}_\perp) = -\frac{i}{2}\int \frac{d^2q'_\perp}{(2\pi)^2}\, T_s(\mathbf{q}'_\perp) T_W(\mathbf{q}_\perp - \mathbf{q}'_\perp). \quad (1)$$

Здесь $T_s(\mathbf{q}_\perp)$ – амплитуда сильного взаимодействия, $T_W(\mathbf{q}_\perp)$ – амплитуда слабого взаимодействия с учетом радиационных поправок к P-нечетному гамильтониану за счет сильного взаимодействия, $T_{\text{int}}(\mathbf{q}_\perp)$ – так называемая абсорбционная поправка к слабой амплитуде, ее нетрудно вывести в эйкональном подходе. С учетом сохранения s-канальной спиральности для амплитуд pN рассеяния (здесь и далее $N = p, n$) можно использовать стандартную параметризацию [28] (отличие от альтернативных параметризаций [29, 30] несущественно и не обсуждается):

$$T_s^{pN}(\mathbf{q}_\perp) = \delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4} t_s^{pN}(\mathbf{q}_\perp),$$
$$t_s^{pN}(\mathbf{q}_\perp) = -(\epsilon_{pN} + i)\,\sigma^{pN}_{s,\,\text{tot}} \exp(-B_{pN}q_\perp^2/2), \quad (2)$$

где λ_1 и λ_2 – спиральности начальных частиц, λ_3 и λ_4 – соответствующие спиральности конечных частиц ($\lambda_i = \pm 1$). При переданных импульсах внутри дифракционного конуса отношение вещественной и мнимой частей амплитуды ϵ_{pN} и наклон конуса B_{pN} можно считать константами. С удовлетворяющей нас точностью, в области энергий NICA, можно положить $t_s^{pp}(\mathbf{q}_\perp) = t_s^{pn}(\mathbf{q}_\perp) \equiv t_s(\mathbf{q}_\perp)$ [28]. В численных оценках мы используем

$$\epsilon_{pN} = \epsilon = -0.5, \quad \sigma^{pN}_{s,\,\text{tot}} = \sigma_{s,\,\text{tot}} = 50\,\text{мб},$$
$$B_{pN} = B = 9\,\text{ГэВ}^{-2}. \quad (3)$$

При этом сечение упругого рассеяния равно

$$\sigma^{pN}_{s,\,el} = \int |T_s^{pN}(\mathbf{q}_\perp)|^2 \frac{d^2q_\perp}{16\pi^2} = \frac{(1+\epsilon^2)\sigma^2_{s,\text{tot}}}{16\pi B} = 17.8\,\text{мб}. \quad (4)$$

Согласно [26], амплитуды за счет слабого взаимодействия, $T_W^{pN}(\mathbf{q}_\perp)$, имеют разные зависимости от переданного импульса и спиральностей:

$$T_W^{pp}(\mathbf{q}_\perp) = \lambda_1\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_1\lambda_4} t_W^{pp}(\mathbf{q}_\perp),$$
$$T_W^{pn}(\mathbf{q}_\perp) = \lambda_1\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4} t_W^{pn}(\mathbf{q}_\perp),$$
$$t_W^{pp}(\mathbf{q}_\perp) = c_{pp}\, R(\mathbf{q}_\perp), \quad t_W^{pn}(\mathbf{q}_\perp) = c_{pn}\, F^2(\mathbf{q}_\perp),$$
$$F(\mathbf{q}_\perp) = \frac{\Lambda^4}{(\Lambda^2 + q_\perp^2)^2},$$
$$R(\mathbf{q}_\perp) = \frac{4}{\pi}\int \frac{F^2(\mathbf{k}_\perp) d^2k_\perp}{(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{q}_\perp)^2 + m_\rho^2},$$
$$c_{pp} = 5\,\text{нб}, \quad c_{pn} = -7.8\,\text{нб},$$
$$\Lambda = 1\,\text{ГэВ}, \quad m_\rho = 770\,\text{МэВ}. \quad (5)$$

Обратим внимание на то, что c_{pp} и c_{pn} имеют противоположный знак.

Используя оптическую теорему, $\sigma_{\text{tot}} = -\text{Im}T(0)$, находим поправки $\sigma^{pp}_{W,\text{tot}}$ и $\sigma^{pn}_{W,\,\text{tot}}$ к полному сечению pp и pn рассеяния за счет слабого взаимодействия:

$$\sigma^{pp}_{W,\,\text{tot}} = \lambda_1\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_1\lambda_4} S_W^{pp},$$
$$\sigma^{pn}_{W,\,\text{tot}} = \lambda_1\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4} S_W^{pn},$$
$$S_W^{pp} = 3.7\,\text{нб}, \quad S_W^{pn} = -2.47\,\text{нб}. \quad (6)$$

Соотношение между S_W^{pp} и S_W^{pn} определяется не только соотношением между c_{pp} и c_{pn}, но и разной зависимостью амплитуд t_W^{pp} и t_W^{pn} от $q_\perp$. При упрощенной параметризации (2) P-нечетные поправки $\sigma^{pN}_{W,\,el}$ к упругим сечениям pN рассеяния совпадают с P-нечетными поправками к соответствующим полным сечениям. Подавление P-нечетных поправок к неупругим сечениям есть, по-существу, общее следствие условия унитарности в линейном по слабому взаимодействию приближении.

Эффекты слабого взаимодействия в протон-дейтронном рассеянии. Здесь рабочим аппаратом является подход Глаубера [31–33]. Отдельного рассмотрения требует новый канал дифракционной диссоциации (квазиупругого рассеяния) в протон-нейтронный континуум без рождения мезонов, $pd \to (pn)p$, в котором, как мы покажем, также возможна большая P-нечетная асимметрия.

Амплитуда T_s^{pd} упругого рассеяния за счет сильного взаимодействия равна

$$T_s^{pd}(\mathbf{q}_\perp) = \delta_{\lambda_p\lambda'_p}\delta_{\lambda_d\lambda'_d}\, t_s^{pd}(\mathbf{q}_\perp),$$
$$t_s^{pd}(\mathbf{q}_\perp) = \left[t_s^{pp}(\mathbf{q}_\perp) + t_s^{pn}(\mathbf{q}_\perp)\right] F_D\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}\right) -$$
$$-\frac{i}{2}\int \frac{d^2q'_\perp}{(2\pi)^2}\, t_s^{pp}\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2} - \mathbf{q}'_\perp\right) t_s^{pn}\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2} + \mathbf{q}'_\perp\right) F_D\left(\mathbf{q}'_\perp\right). \quad (7)$$

Здесь λ_p и λ'_p – спиральности начального и конечного протонов, λ_d и λ'_d – спиральности начального и конечного дейтронов. Амплитуда однократного рассеяния содержит формфактор дейтрона $F_D(\mathbf{q}_\perp/2)$, а малая в области дифракционного конуса упругого pd рассеяния амплитуда двухкратного рассеяния дает глауберовское экранирование. Формфактор дейтрона можно оценить с достаточной точностью, используя чисто S-волновую функцию $\phi(\mathbf{r})$:

$$F_D(\mathbf{q}) = \int d^3r\, |\phi(\mathbf{r})|^2 \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}).$$

Полученная в модели прямоугольной ямы формула

$$F_D(q) = \frac{2b}{(b-1)\,x}\Big[\arctan\left(\frac{x}{2}\right) - \frac{1}{2}\mathrm{Si}\left(\frac{x}{b}\right) - \\ - \frac{1}{4}\mathrm{Si}\left(\pi+\frac{x}{b}\right) + \frac{1}{4}\mathrm{Si}\left(\pi-\frac{x}{b}\right)\Big], \\ \mathrm{Si}(x) = \int_0^x dy\,\frac{\sin y}{y}, \quad b = 2.5, \\ x = q/\kappa, \quad \kappa = 45.7\,\text{МэВ} \tag{8}$$

численно хорошо согласуется с полученными в других моделях.

Выражение для полного сечения pd рассеяния следует из оптической теоремы:

$$\sigma^{pd}_{s,\,\mathrm{tot}} = 2\sigma_{s,\,\mathrm{tot}} - \Delta\sigma_G = 96\,\text{мб}, \\ \Delta\sigma_G = \frac{1}{2}(1-\epsilon^2)\sigma^2_{s,\,\mathrm{tot}} \times \\ \times \int \frac{d^2q_\perp}{(2\pi)^2}\,\exp(-B\,q_\perp^2)\,F_D\,(\mathbf{q}_\perp) = 4\,\text{мб}. \tag{9}$$

Поправка $\Delta\sigma_G$, соответствующая глауберовской экранировке, мала в силу большого размера дейтрона, $\Delta\sigma_G \ll \sigma^{pd}_{s,\,\mathrm{tot}}$. Ввиду очевидной доминантности амплитуды однократного рассеяния, P-нечетная асимметрия в pd рассеянии будет подобна асимметрии в упругом pN рассеянии. Интегральное сечение упругого pd рассеяния будет заметно подавлено формфактором дейтрона. В том же приближении рыхлого дейтрона дифференциальное сечение квазиупругого pd рассеяния будет близко к сумме дифференциальных сечений упругого pp и pn рассеяния. Таким образом, мы ожидаем, что указанное в [26] усиление P-нечетной асимметрии в упругом pN рассеянии будет присутствовать и в упругом, и в квазиупругом pd рассеянии. Мы опускаем обсуждение имеющего ничтожно малое сечение процесса перезарядки дейтрона ($d \to pp$).

Полный вклад слабого взаимодействия в амплитуду упругого рассеяния поляризованного протона на поляризованном дейтроне, $T^{pd}_W(\mathbf{q}_\perp)$, включающий все абсорбционные поправки, имеет вид

$$T^{pd}_W(\mathbf{q}_\perp) = \delta_{\lambda_p\lambda'_p}\delta_{\lambda_d\lambda'_d}\,t^{pd}_W(\mathbf{q}_\perp), \\ t^{pd}_W(\mathbf{q}_\perp) = \mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp)F_D\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}\right) - \\ - \frac{i}{2}\int\frac{d^2q'_\perp}{(2\pi)^2}\,t_s\,(\mathbf{q}'_\perp)\,\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp-\mathbf{q}'_\perp)F_D\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}\right) - \\ - \frac{i}{2}\int\frac{d^2q'_\perp}{(2\pi)^2}t_s\Big(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}-\mathbf{q}'_\perp\Big)\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}\Big(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}+\mathbf{q}'_\perp\Big)F_D(\mathbf{q}'_\perp) - \\ - \frac{1}{4}\iint\frac{d^2q'_\perp}{(2\pi)^2}\frac{d^2q''_\perp}{(2\pi)^2}t_s\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}-\mathbf{q}'_\perp\right)t_s\left(\frac{\mathbf{q}_\perp}{2}-\mathbf{q}''_\perp\right)\times \\ \times\,\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}\left(\mathbf{q}'_\perp+\mathbf{q}''_\perp\right)F_D\left(\mathbf{q}'_\perp\right), \\ \mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp) = \frac{1}{2}(\lambda_p+\lambda_d)t^{pp}_W(\mathbf{q}_\perp) + \lambda_p\,t^{pn}_W(\mathbf{q}_\perp). \tag{10}$$

Главный P-нечетный вклад $\sigma^{pd}_{W,\,el}$ в сечение упругого рассеяния равен

$$\sigma^{pd}_{W,\,el} = \int\frac{d^2q_\perp}{8\pi^2}\,\mathrm{Re}\Big[t^{pd\,*}_s(\mathbf{q}_\perp)t^{pd}_W(\mathbf{q}_\perp)\Big] \simeq -\frac{\epsilon\sigma_{s,\,\mathrm{tot}}}{4\pi^2}\times \\ \times\int d^2q_\perp\,\exp(-B\,q_\perp^2/2)\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp)F_D^2\,(\mathbf{q}_\perp/2)\,. \tag{11}$$

В случае рассеяния поляризованного протона на неполяризованном дейтроне следует использовать $\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp)$ из (10) с $\lambda_d = 0$, а для рассеяния поляризованного дейтрона на неполяризованном протоне необходимо использовать $\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp)$ с $\lambda_p = 0$.

Следуя технике Франко—Глаубера [32, 33], нетрудно получить P-нечетную поправку к сечению квазиупругого pd рассеяния. Опуская детали вычислений, мы ограничимся утверждением, что суммарное P-нечетное сечение упругого ($\sigma^{pd}_{W,\,el}$) и квазиупругого ($\sigma^{pd}_{W,\,qel}$) рассеяния совпадает с поправкой $\sigma^{pd}_{W,\,\mathrm{tot}}$ к полному сечению pd рассеяния, которое может быть определено по оптической теореме из амплитуды (10):

$$\sigma^{pd}_{W,\,\mathrm{tot}} = -\frac{\epsilon\sigma_{s,\,\mathrm{tot}}}{8\pi^2}\times \\ \times\int d^2q_\perp\,\exp(-B\,q_\perp^2/2)\,\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(\mathbf{q}_\perp)\,[1+F_D\,(\mathbf{q}_\perp)]. \tag{12}$$

Как и в случае неупругого pN рассеяния, P-нечетная асимметрия в истинно неупругом сечении pd рассеяния, в котором рождаются мезоны, является подавленной.

Перейдем от качественного обсуждения к численным оценкам сечений и соответствующих асимметрий $\mathcal{A} = \sigma_W/\sigma_s$ при рассеянии поляризованного дейтрона с $\lambda_d = 1$ на неполяризованном протоне. Используя приведенные формулы, находим:

$$\sigma^{pd}_{s,\,\mathrm{tot}} = 96\,\text{мб}, \quad \sigma^{pd}_{W,\,\mathrm{tot}} = 2.1\,\text{нб}, \quad \mathcal{A}^{pd}_{\mathrm{tot}} = 2\cdot10^{-8}, \\ \sigma^{pd}_{s,\,el} = 20\,\text{мб}, \quad \sigma^{pd}_{W,\,el} = 0.7\,\text{нб}, \quad \mathcal{A}^{pd}_{el} = 3.5\cdot10^{-8}, \\ \sigma^{pd}_{s,\,qel} = 22.4\,\text{мб}, \quad \sigma^{pd}_{W,\,qel} = 1.4\,\text{нб}, \quad \mathcal{A}^{pd}_{qel} = 6\cdot10^{-8}. \tag{13}$$

Для взаимодействия поляризованного протона с $\lambda_p = 1$ с неполяризованным дейтроном имеем

$$\sigma^{pd}_{W,\,\mathrm{tot}} = -0.8\,\text{нб}, \quad \mathcal{A}^{pd}_{\mathrm{tot}} = -0.9\cdot10^{-8}, \\ \sigma^{pd}_{W,\,el} = -0.6\,\text{нб}, \quad \mathcal{A}^{pd}_{el} = -3\cdot10^{-8}, \\ \sigma^{pd}_{W,\,qel} = -0.2\,\text{нб}, \quad \mathcal{A}^{pd}_{qel} = -10^{-8}. \tag{14}$$

Разница в знаках и величине асимметрий связана с существенным отличием зависимости $\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(q_\perp)$ от $q_\perp$

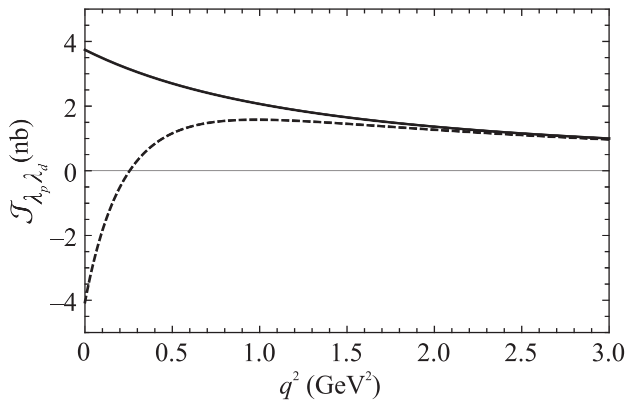

Рис. 1. Зависимость $\mathcal{T}_{0\,1}$ (сплошная линия) и $\mathcal{T}_{1\,0}$ (пунктирная линия) от $q^2 \equiv \mathbf{q}_\perp^2$, (10)

для поляризованных протонов и для поляризованных дейтронов, см. рис. 1.

Так как P-нечетный гамильтониан слабого pp взаимодействия определяется радиационной поправкой за счет сильного взаимодействия, точность расчета которой невелика, то указанное на рис. 1 поведение $\mathcal{T}_{\lambda_p\lambda_d}(q_\perp)$ носит скорее качественный характер. Из приведенных оценок следуют два важных вывода. Во-первых, величина ожидаемой P-нечетной асимметрии делает выгодным эксперимент по взаимодействию именно поляризованных дейтронов с неполяризованными протонами. Это выгодно и с точки зрения управления поляризацией накопленных в ускорителе частиц, так как в области энергий NICA у дейтронов нет спиновых резонансов, в то время как у протонов есть многочисленные спиновые резонансы. Во-вторых, опять же ориентируясь на величину ожидаемой асимметрии, выгодно выделять упругое и квазиупругое pd рассеяние. Здесь мы вкратце прокомментируем проводимый участниками гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 18-02-40092 МЕГА, которые являются авторами [25], анализ привлекательных возможностей работы с внутренней струйной водородной мишенью.

При работе со струйной мишенью (см., например, [27]) для выделения упругого рассеяния достаточно измерить передачу импульса на протон отдачи, который однозначно связан с углом вылета протона, $\theta = q_z/q_\perp = q_\perp/(2m_p)$. Диссоциация релятивистского дейтрона с $\gamma \gg 1$ в np пару с энергией возбуждения ϵ^* дает дополнительный вклад в продольный импульс протонов отдачи, $\Delta q_z = \epsilon^*/\gamma$, что увеличивает угол вылета θ. При этом уширяется, по сравнению с чисто упругим рассеянием, и распределение по поперечному импульсу протонов отдачи. Это дает возможность регистрации квазиупругих событий с одновременной дискриминацией событий рождения пионов, когда $\epsilon^* > m_\pi$.

Заключение. Мы проанализировали эффекты несохранения четности в процессе рассеяния протонов на дейтронах при энергиях коллайдера NICA. Используя подход Глаубера, мы получили оценки для поправок за счет слабого взаимодействия к полному, упругому, неупругому сечениям и сечению диссоциации в pd рассеянии, а также соответствующие спиновые асимметрии, см. (13) и (14). Согласно нашим результатам, предпочтительными являются эксперименты по рассеянию поляризованных дейтронов на неполяризованных протонах. Это обстоятельство является особенно важным, поскольку ускорение релятивистских поляризованных дейтронов проще, чем ускорение поляризованных протонов. Полученные результаты должны учитываться при планировании экспериментов на коллайдере NICA.

Мы выражаем благодарность И. А. Коопу и Ю. М. Шатунову за полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 18-02-40092 МЕГА.

---

1. Y. G. Abov, P. A. Krupchitsky, and Y. A. Oratovsky, Phys. Lett. **12**, 25 (1964).
2. V. M. Lobashov, D. M. Kaminker, G. I. Kharkevich, V. A. Kniazkov, N. A. Lozovoy, V. A. Nazarenko, L. F. Sayenko, L. M. Smotritsky, and A. I. Yegorov, Nucl. Phys. A **197**, 241 (1972).
3. S. Gardner, W. C. Haxton, and B. R. Holstein, Annual Review of Nuclear and Particle Science **67**, 69 (2017).
4. V. Brown, E. Henley, and F. Krejs, Phys. Rev. C **9**, 935 (1974).
5. E. M. Henley and F. R. Krejs, Phys. Rev. D **11**, 605 (1975).
6. V. B. Kopeliovich and L. L. Frankfurt, Письма в ЖЭТФ **22**, 601 (1975) [JETP Lett. **22**, 295 (1975)].
7. L. L. Frankfurt and V. B. Kopeliovich, Nucl. Phys. B **103**, 360 (1976).
8. B. Desplanques, J. Donoghue, and B. Holstein, Ann. Phys. (N.Y.) **124**, 449 (1980).
9. L. L. Frankfurt and M. I. Strikman, Phys. Lett. B **107**, 99 (1981).
10. A. Barroso and D. Tadić, Nucl. Phys. A **364**, 194 (1981).
11. T. Oka, Progress of Theoretical Physics **66**, 977 (1981).
12. G. Nardulli and G. Preparata, Phys. Lett. B **117**, 445 (1982).
13. Б. Г. Захаров, ЯФ **39**, 1260 (1984) [B. G. Zakharov, Sov. J. Nucl. Phys. **39**, 793 (1984)].
14. Б. Г. Захаров, ЯФ **42**, 756 (1985) [B. G. Zakharov, Sov. J. Nucl. Phys. **42**, 479 (1985)].

15. T. Goldman and D. Preston, Nucl. Phys. B **217**, 61 (1983).
16. J. M. Potter, J. D. Bowman, C. F. Hwang, J. L. McKibben, R. E. Mischke, D. E. Nagle, P. G. Debrunner, H. Frauenfelder, and L. B. Sorensen, Phys. Rev. Lett. **33**, 1307 (1974).
17. D. E. Nagle, J. D. Bowman, C. Hoffman, J. McKibben, R. Mischke, J. M. Potter, H. Frauenfelder, and L. Sorensen, AIP Conf. Proc. **51**, 224 (1979).
18. R. Balzer, R. Henneck, C. Jacquemart, J. Lang, M. Simonius, W. Haeberli, C. Weddigen, W. Reichart, and S. Jaccard, Phys. Rev. Lett. **44**, 699 (1980).
19. N. Lockyer, T. A. Romanowski, J. D. Bowman, C. M. Hoffman, R. E. Mischke, D. E. Nagle, J. M. Potter, R. L. Talaga, E. C. Swallow, D. M. Alde, D. R. Moffett, and J. Zyskind, Phys. Rev. D **30**, 860 (1984).
20. V. Yuan, H. Frauenfelder, R. W. Harper, J. D. Bowman, R. Carlini, D. W. Macarthur, R. E. Mischke, D. E. Nagle, R. L. Talaga, and A. B. Mcdonald, Phys. Rev. Lett. **57**, 1680 (1986).
21. P. D. Eversheim, W. Schmitt, S. Kuhn, F. Hinterberger, P. von Rossen, J. Chlebek, R. Gebel, U. Lahr, B. von Przeworski, M. Wiemer, and V. Zell, Phys. Lett. B **256**, 11 (1991).
22. A. R. Berdoz, J. Birchall, J. B. Bland et. al. (Collaboration), Phys. Rev. C **68**, 034004 (2003).
23. V. D. Kekelidze, R. Lednicky, V. A. Matveev, I. N. Meshkov, A. S. Sorin, and G. V. Trubnikov, *Proc. of 3rd Large Hadron Collider Physics Conf.* (LHCP 2015), 565 (2016).
24. I. A. Savin, A. Efremov, D. Peshekhonov, A. Kovalenko, O. Teryaeva, O. Shevchenko, A. Nagajcev, A. Guskov, V. Kukhtin, and N. Toplilin, EPJ Web Conf. **85**, 02039 (2015).
25. И. А. Кооп, А. И. Мильштейн, Н. Н. Николаев, А. С. Попов, С. Г. Сальников, П. Ю. Шатунов, and Ю. М. Шатунов, Письма в ЭЧАЯ **17**, 122 (2020) [I. A. Koop, A. I. Milstein, N. N. ikolaev, A. S. Popov, S. G. Salnikov, P. Yu. Shatunov, and Yu. M. Shatunov, Phys. Part. Nucl. Lett. **17**(2), 154 (2020)].
26. А. И. Мильштейн, Н. Н. Николаев, С. Г. Сальников, Письма в ЖЭТФ **111**, 215 (2020) [A. I. Milstein, N. N. Nikolaev, and S. G. Salnikov, JETP Lett. **111**, 197 (2020)].
27. A. Bujak, P. Devensky, A. Kuznetsov, B. Morozov, V. Nikitin, P. Nomokonov, Yu. Pilipenko, V. Smirnov, E. Jenkins, E. Malamud, M. Miyajima, and R. Yamada, Phys. Rev. D **23**, 1895 (1981).
28. J. Ryckebusch, D. Debruyne, P. Lava, S. Janssen, B. van Overmeire, and T. van Cautere, Nucl. Phys. A **728**, 226 (2003).
29. A. Sibirtsev, J. Haidenbauer, H.-W. Hammer, S. Krewald, and U.-G. Meissner, Eur. Phys. J. A **45**, 357 (2010).
30. W. Ford and J. W. van Orden, Phys. Rev. C **87**, 014004 (2013).
31. R. J. Glauber, Phys. Rev. **100**, 242 (1955).
32. V. Franco and R. J. Glauber, Phys. Rev. **142**, 1195 (1966).
33. R. J. Glauber and V. Franco, Phys. Rev. **156**, 1685 (1967).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 357 – 360 © 2020 г. 25 сентября

О лоренц-инвариантных 2D уравнениях, допускающих долгоживущие локализованные решения с нетривиальной структурой

Р. К. Салимов[+1)], *Т. Р. Салимов*[*], *Е. Г. Екомасов*[+∘×]

[+] *Башкирский государственный университет, 450076 Уфа, Россия*

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

[∘] *Тюменский государственный университет, 625003 Тюмень, Россия*

[×] *Южно-Уральский государственный университет, 454080 Челябинск, Россия*

Поступила в редакцию 14 августа 2020 г.
После переработки 24 августа 2020 г.
Принята к публикации 29 августа 2020 г.

В данной работе представлены Лоренц-инвариантные 2D уравнения, имеющие в случае двух скалярных полей долгоживущие ($t \backsim 1000$) локализованные решения без потерь энергии на излучение. В случае 3 скалярных полей показано существование долгоживущих локализованных решений с нетривиальной внутренней структурой. Эта структура представляет собой два пространственно разделенных и связанных между собой максимума квадратов амплитуды этих полей. Подобные решения могут быть интересны как солитонные модели структуры адронов.

DOI: 10.31857/S1234567820180032

Солитонные решения нелинейных уравнений часто рассматриваются как протяженные модели частиц [1–9]. Например, модель Скирма [10–12], описывающая внутреннюю структуру барионов и легких ядер. Одним из недостатков солитонного подхода является достаточно малое количество математических моделей, имеющих 2D и 3D устойчивые локализованные решения. В некоторых случаях подобные решения невозможны. Например, существование стационарных локализованных решений лоренц-инвариантных полевых уравнений для пространственной размерности более 1 запрещено теоремой Деррикса [13]. Однако это не исключает таких локализованных, зависящих от времени осциллирующих решений. Ранее в [14] было рассмотрено уравнение (1), имеющее локализованные, не расплывающиеся сферически симметричные численные решения в 3D случае. Также уравнение (2) имеет локализованные, не расплывающиеся цилиндрически симметричные численные решения в 2D случае.

$$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} - u_{tt} = u^{\frac{1}{2k+1}}, \tag{1}$$

$$u_{xx} + u_{yy} - u_{tt} = u^{\frac{1}{2k+1}}. \tag{2}$$

Следующим естественным шагом исследования решений уравнений (1)–(2) было моделирование их локализованных решений при отсутствии цилиндрической и сферической симметрии. Численное моделирование в двумерном случае показывает, что без условия цилиндрической симметрии локализованные решения из одного поля u неустойчивы и достаточно быстро ($t \backsim 30$) распадаются. Распад локализованных решений (2) происходил при переходе амплитуды решения через нулевые значения. Поэтому для получения устойчивых локализованных решений были рассмотрены уравнения вида (3)–(4) для двух скалярных полей. Основным доводом в пользу возможного существования устойчивых локализованных решений в этом случае была возможность получения решения, при котором оба осциллирующих поля не равны одновременно нулю.

$$u_{xx} + u_{yy} - u_{tt} = \alpha \frac{u}{(u^2+v^2)^{\frac{n}{2n+1}}} + \beta u + \gamma u(u^2+v^2), \tag{3}$$

$$v_{xx} + v_{yy} - v_{tt} = \alpha \frac{v}{(u^2+v^2)^{\frac{n}{2n+1}}} + \beta v + \gamma v(u^2+v^2). \tag{4}$$

Действительно, при ненулевых полях u, v слагаемое при коэффициенте α представляет собой потенциальный барьер вида

$$\alpha \frac{1}{(u^2+v^2)^{\frac{n}{2n+1}}}, \tag{5}$$

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

который тем выше, чем меньше значение u^2+v^2. Слагаемые при при коэффициентах β и γ ограничивают решения большой амплитуды. Гамильтониан системы (3)–(4) имеет один минимум при $u = 0, v = 0$. Численное моделирование показывает, что для существования локализованных решений, также как в случае уравнений (1)–(2), нужна выпуклость вверх выражения $V((u^2+v^2)^{1/2})/((u^2+v^2)^{1/2})$ как функции от $((u^2+v^2)^{1/2})$ вблизи нуля, где V – потенциальная энергия.

При численном исследовании использовался модифицированный разностный метод Кристиансена Ломдала [13] 4 порядка точности. Ограничение по конечному времени счета проводилось из соображений контроля сохранения энергии. Численное моделирование производилось в квадрате 20×20.

Уравнения (3)–(4) интересны тем, что имеют долгоживущие не расплывающиеся численные решения. Локализованные решения в них сохраняются без заметных потерь энергии в течение всего времени численного моделирования, например, для времени $t = 1294$, $E = 13.51$, а при $t = 403$, $E = 13.79$. Интересной особенностью решений при некоторых параметрах является их нетривиальная структура. В частности, при параметрах $n = 8$; $\alpha = 1$; $\beta = 12$; $\gamma = 12$ и начальных условиях вида

$$u(x,y,0) = 0.85e^{(-2((x-10)^2+(y-10)^2/1.44))}$$
$$u_t(x,y,0) = 0, \qquad (6)$$

$$v_t(x,y,0) = 4.24e^{(-2((x-10)^2+(y-10)^2/1.44))}$$
$$v(x,y,0) = 0 \qquad (7)$$

область перехода к нулевым значениям установившегося решения представляет собой овал, периодически изменяющий свою ориентацию на плоскости Oxy (рис. 1, 2).

В промежуточных состояниях решение приближается к “круглому” состоянию. Максимум амплитуды квадрата величины u^2+v^2 при этом значительно не изменяется. Такое поведение решений говорит о существовании некоего поверхностного натяжения.

В случае других начальных условий, при достаточно малых начальных энергиях $E \leq 14$ сценарий развития решения соответствует сценарию, представленному на рис. 1 и 2. Таким образом, локализованное установившееся решение не излучает энергию. При больших значениях энергии, например, при $E = 21.05$, решение, изначально локализованное аналогично (6)–(7), распадается на несколько локализованных объектов (см. рис. 3). Такое поведение вызвано наличием слагаемых при коэффициентах β и γ. Решения с начальными условиями между этими значениями энергий в дальнейшем предполагается исследовать более подробно.

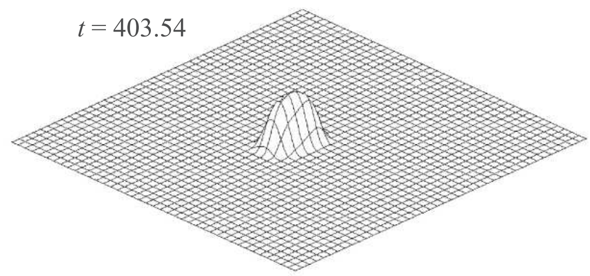

Рис. 1. Пространственное распределение величины $(u^2+v^2)^{1/2}$, $E = 13.79$

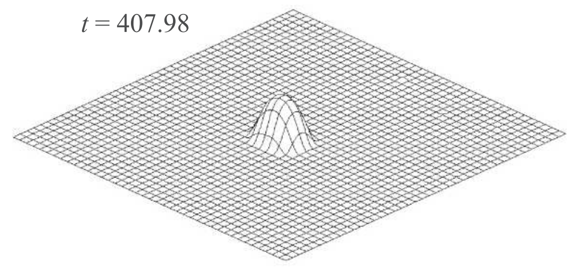

Рис. 2. Пространственное распределение величины $(u^2+v^2)^{1/2}$

Далее в уравнения были добавлены слагаемые вида uv^2, vu^2 для получения двух максимумов величины u^2+v^2. Ожидалось, что поверхностное натяжение будет компенсировать отталкивание полей. Но та-

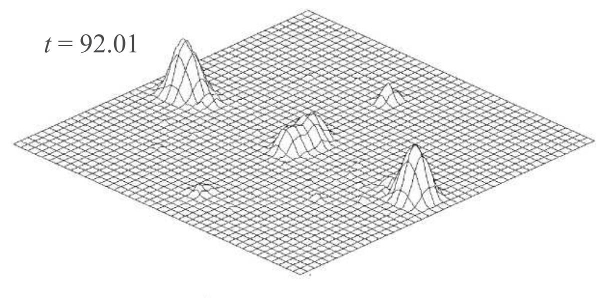

Рис. 3. Пространственное распределение величины $(u^2+v^2)^{1/2}$, $E = 21.05$

кие решения оказались не стабильными. Для стабилизации решений было добавлено 3 скалярное поле. Наличие нескольких полей, одновременно не равных нулю, приводит к более устойчивой локализации решений. Пример существования решений уравнений (3)–(4) это подтверждает.

Были численно исследованы решения уравнений (8)–(10) для трех скалярных полей:

$$u_{xx}+u_{yy}-u_{tt}=\alpha\frac{u}{(u^2+v^2+w^2)^{\frac{n}{2n+1}}}+\beta u+ \\ +\gamma u(u^2+v^2+w^2)+\lambda uv^2+\xi w, \qquad (8)$$

$$v_{xx}+v_{yy}-v_{tt}=\alpha\frac{v}{(u^2+v^2+w^2)^{\frac{n}{2n+1}}}\beta v+ \\ +\gamma v(u^2+v^2+w^2)+\lambda vu^2-\xi w, \qquad (9)$$

$$w_{xx}+w_{yy}-w_{tt}=\alpha\frac{w}{(u^2+v^2+w^2)^{\frac{n}{2n+1}}}+\eta w+ \\ +\gamma u(u^2+v^2+w^2)+\xi(u-v)+\mu\frac{w}{(w^2)^{\frac{n}{2n+1}}}. \qquad (10)$$

Гамильтониан системы (8)–(10) имеет один минимум при $u=0, v=0, w=0$. Здесь для локализации решений, также как в случае уравнений (3)–(4), нужна выпуклость вверх выражения $V((u^2+v^2+w^2)^{1/2})/((u^2+v^2+w^2)^{1/2})$ как функции от $(u^2+v^2+w^2)^{1/2}$ вблизи нуля, где V – потенциальная энергия. Уравнения построены таким образом, что два скалярных поля u, v отталкиваются из-за слагаемых uv^2, vu^2. Слагаемые при коэффициентах ξ приводят к тому, что при не нулевых значениях полей $u-v$ обязательно появляются не нулевые значения поля w и при не нулевых значениях поля w обязательно появляются не нулевые значения полей u и v. Или другими словами, эти слагаемые обеспечивают некий “конфайенмент” для комбинации полей $u-v$, w и w, u, v. Слагаемое при коэффициенте μ должно обеспечивать локализацию поля w.

Численные решения уравнений (8)–(10) обладают более интересной внутренней структурой. При некоторых начальных условиях и параметрах ($n=8$; $\alpha=1$; $\beta=12$; $\gamma=18$; $\lambda=360$; $\xi=1.2$; $\eta=8\pi$; $\mu=1$),

$$u(x,y,0)=0.15e^{(-2((x-11)^2+(y-10)^2))} \\ u_t(x,y,0)=0, \qquad (11)$$

$$v(x,y,0)=-0.15e^{(-2((x-9)^2+(y-10)^2))} \\ v_t(x,y,0)=0, \qquad (12)$$

$$w_t(x,y,0)=2.83e^{(-2((x-10)^2+(y-10)^2/1.44))} \\ w(x,y,0)=0 \qquad (13)$$

решение представляет собой структуру из двух периодически появляющихся максимумов значения функции $(u^2+v^2+w^2)^{(1/2)}$, см. рис. 4. Максимальное

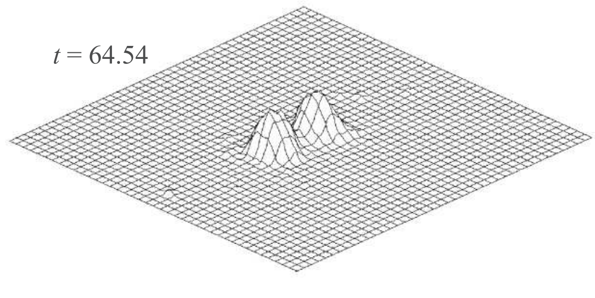

Рис. 4. Энергия системы $E=14.10$

по амплитуде решение сменяется решением минимальной амплитуды величины $(u^2+v^2+w^2)^{(1/2)}$, см. рис. 5.

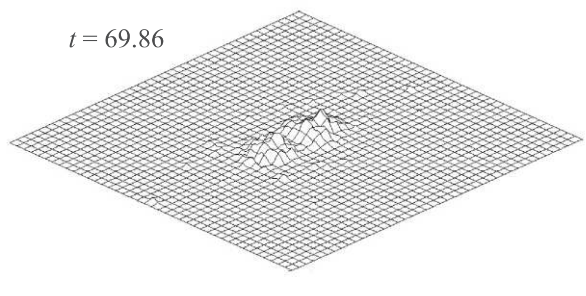

Рис. 5. Состояние малого значения амплитуды

Такое поведение решений сохраняется достаточно длительное время ($t \backsim 400$) без заметного искажения формы решения, см. рис. 6. Здесь нужно отметить,

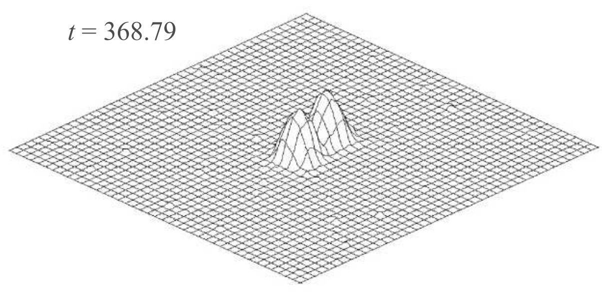

Рис. 6. Энергия системы $E=10.37$

что решение представляет собой связанное состояние из максимумов полей, в каждом из которых одно из полей u, v больше другого. Это состояние является связанным, в противном случае из-за отталкивания полей u, v и начальных условий эти максимумы бы удалились друг от друга. Решения уравнений (8)–(10) исследовались в диапазоне значений начальной энергии, при которой существенны коэффициенты отталкивания и решение представляет собой связанное состояние. Решения с другими начальными условиями предполагается исследовать более подробно в дальнейшем.

Как видно из численного решения уравнений (3)–(4), уравнения скалярных полей с дробной степенной нелинейностью интересны как уравнения, имеющие не расплывающиеся локализованные решения. Существование колебаний пространственной ориентации решений (3)–(4) позволяет говорить о некое м аналоге поверхностного натяжения для локализованных решений. При отталкивании для разных полей поверхностное натяжение может его компенсировать. Это дает возможность получить долгоживущие решения, имеющие несколько пространственных максимумов. Это подтверждают численные решения уравнений (8)–(10). Подобные решения могут быть интересны как солитонные модели структуры адронов. Кроме того, модель (8)–(10) интересна тем, что в гамильтониане данной модели есть слагаемые, обеспечивающие некий "конфайенмент" для комбинаций полей. Подобные модели, по мнению авторов, достойны изучения и имеют перспективы получения стабильных решений с 3-мя пространственно разделенными максимумами полей и обобщения на 3D случай.

1. D. J. Kaup and A. C. Newell, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences A **361**, 413 (1978).
2. A. M. Kosevich, Physica D **41**, 253 (1990).
3. E. Jenkins, A. V. Manohar, and M. B. Wise, Nucl. Phys. B 396(1), 27 (1993); doi:10.1016/0550-3213(93)90256-O.
4. Yu. P. Rybakov and B. Saha, Phys. Lett. A **122**, 5 (1996).
5. N. S. Manton, Nonlinearity **21**(11), T221 (2008).
6. A. Maccari, EJTP **3**(10), 39 (2006).
7. E. J. Weinberg, *Classical Solutions in Quantum Field Theory*, Cambridge University Press, N.Y. (2012).
8. M. J. Ablowitz, *Nonlinear Dispersive Waves: Asymptotic Analysis and Solitons*, Cambridge University Press, N.Y. (2011).
9. Y. Iwata, Front. Phys. **8**, 154 (2020).
10. C. Adam, C. Naya, J. Sanchez-Guillen, and A. Wereszczynski, Phys. Rev. Lett. **111**(23), 232501 (2013).
11. C. Naya and P. Sutcliffe, Phys. Rev. Lett. **121**(23), 232002 (2018).
12. R. A. Battye, N. S. Manton, and P. M. Sutcliffe, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **463**(2077), 261 (2007).
13. Р. Додд, Д. Эйлбек, Д. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Мир, М. (1988).
14. Е. Г. Екомасов, Р. К. Салимов, Письма в ЖЭТФ **100**, 477 (2014).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 361 – 366

Мнимое изображение в прозрачной диэлектрической сфере

А. Р. Бекиров[1]*, Б. С. Лукьянчук, А. А. Федянин*

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

Поступила в редакцию 22 августа 2020 г.
После переработки 27 августа 2020 г.
Принята к публикации 28 августа 2020 г.

С позиций волновой теории рассмотрена задача формирования оптического изображения, создаваемого виртуально сходящейся электромагнитной волной от источника света. Решена задача дифракции точечного источника на диэлектрической сфере. Получены формулы, описывающие мнимое изображение точечного источника в диэлектрической сфере, в области параметров, где неприменимо приближение геометрической оптики. Для щелей в непрозрачном экране мнимое изображение в диэлектрической сфере позволяет разрешать щели, отстоящие друг от друга на расстояниях, значительно меньших дифракционного предела $\lambda/2$. Это объясняет ранее полученные экспериментальные результаты по эффекту супер разрешения в мнимом изображении (Nat. Commun. **2**, 1 (2011)).

DOI: 10.31857/S1234567820180044

В 1609 году Галилей изобрел зрительную трубу из двух линз, в котором вогнутая рассеивающая линза образовывала мнимое, увеличенное изображение объекта. В 1611 году Кеплер сформулировал правила построения оптического изображения в линзе на базе закона преломления света и его прямолинейного распространения. Применяя эти правила к прозрачной сфере, легко получить положение плоскости мнимого изображения $z_{vi} = nR/(2-n)$ и соответствующее увеличение $M = n/(2-n)$. В этих формулах n – показатель преломления, а R – радиус сферы. Об эффекте увеличения изображения такой сферой еще две тысячи лет назад сообщал Сенека [1]. Написанные выше формулы имеют ограниченную область применимости: они неприменимы при $n \to 2$, поскольку при этом $M \to \infty$, а также при размере частицы порядка нескольких длин волн света λ; формулы геометрической оптики работают, когда $R \gg \lambda$.

Современные технологии позволяют изготавливать сферические частицы с размерами от десятков нанометров до десятков микрометров, что широко используется в исследованиях по нанофотонике [2]. Уже первые эксперименты [3] показали, что увеличение мнимого изображения с помощью малых сферических микролинз с размером порядка нескольких микрометров позволяет преодолевать дифракционный предел и рассматривать в обычный микроскоп структуры с размером в десятки нанометров. Это явление изучалось в десятках работ, см. литературу, цитированную в [4], и получило хорошее экспериментальное подтверждение. Однако теоретическое описание этого явления требует описание мнимого изображения в рамках волновой теории. Нам не известны работы, посвященные исследованию данной проблемы.

В теории Ми [5, 6] рассматривается точное решение уравнений Максвелла для случая рассеяния сферической частицей плоской электромагнитной волны, приходящей из бесконечности. Эту теорию можно обобщить, рассматривая рассеяние сферической частицей расходящейся сферической волны от точечного источника, находящегося внутри сферы или на некотором расстоянии от нее [7, 8]. В этих работах принимается другая модель точечного источника, в которой не учитывается важный вклад продольных мод. Кроме того, в [7, 8] не рассматривается построение мнимого изображения, которое должно находиться как построение виртуальной сходящейся электромагнитной волны от рассеянного света.

Пусть $\mathbf{E}_s$ – поле некоторого источника, а Γ – поверхность апертуры оптического прибора. Введем поле $\mathbf{E}_i$, используя теорему Кирхгофа–Гельмгольца [5]

$$\mathbf{E}_i = \frac{1}{4\pi} \iint\limits_{\Gamma} (G(\mathbf{n}, \nabla)\mathbf{E}_s^* - \mathbf{E}_s^*(\mathbf{n}, \nabla)G)k^2 dS, \qquad (1)$$

где $G = \exp[ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|]/k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$ – функция Грина волнового уравнения, оператор $\nabla = \frac{1}{k}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$ и $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, Γ – некоторая поверхность. Интеграл (1), как известно [5, 6], не зависит от формы поверхности, и (в случае бесконечной или замкнутой поверхности), также и от расстояния

[1])e-mail: arlen.bekirov@mail.ru

от поверхности до источника. Пусть, например, источник представляет собой излучение, исходящее из щели непрозрачного экрана. Поле такого источника можно определить как

$$\mathbf{E}_s = \frac{(-2)}{4\pi} \iint_\Sigma (\mathbf{E}^0(\mathbf{n}, \nabla)G) k^2 dS. \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{E}^0$ – поле в плоскости отверстия. В случае граничных условий Кирхгофа [5], можно принять простейшую модель: $\mathbf{E}^0 = \text{const}$. Поле $\mathbf{E}_s$ представляет собой суперпозицию точечных источников вида $(\mathbf{n}, \nabla)G$. Пусть Γ является бесконечной плоскостью, представляя собой, по сути, апертуру оптического прибора, если поле $\mathbf{E}_s = G\mathbf{e}_x$, то в плоскости источника, параллельной плоскости Γ, поле изображения, $\mathbf{E}_i$, можно аналитически представить в виде

$$\mathbf{E}_i = -i\frac{\sin(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)}{k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}\mathbf{e}_x. \tag{3}$$

Это поле изображения от точечного дельта источника определяется функцией $\sin(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$, имеющей полуширину $\lambda/2$. Отсюда следует критерий Рэлея: предел разрешения двух некогерентных точечных источников равен $\lambda/2$. Данный критерий относится к поперечному разрешению, продольное разрешение при этом существенно меньше $\lambda/2$. Если в качестве Γ выбрать замкнутую поверхность, окружающую источники, то дифракционный предел $\lambda/2$ сохраняется в любом направлении. В случае $\mathbf{E}_s = (\mathbf{n}, \nabla)G$ аналитическое решение типа (3) найти не удается, но уравнение (1) можно численно проинтегрировать. Численное интегрирование приводит к результатам, качественно сходным с (3), но первый нуль распределения $\mathbf{E}_i$ находится в точке $|x| = 1.22 \cdot \lambda/2$, см. рис. 1.

Теперь мы можем усложнить задачу, поставив между точечным источником и апертурой оптического прибора диэлектрическую сферу радиуса R. В этом случае по-прежнему можно использовать уравнение (1), в которое, однако, следует подставить выражение для поля $\mathbf{E}_s$, обусловленное дифракцией излучения на сфере. Не ограничивая общности рассмотрения, представим источник в виде:

$$\mathbf{E}^i = pkr_0 \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)}{k\partial z_0}\mathbf{e}_x. \tag{4}$$

Для перехода к исходной нормировке достаточно положить $p = 1/kr_0$, для простоты рассматривается случай источника на оси z, т.е. $\mathbf{r}_0 = (0, 0, -r_0)$. Поля, относящиеся к пространству вне сферы, будем

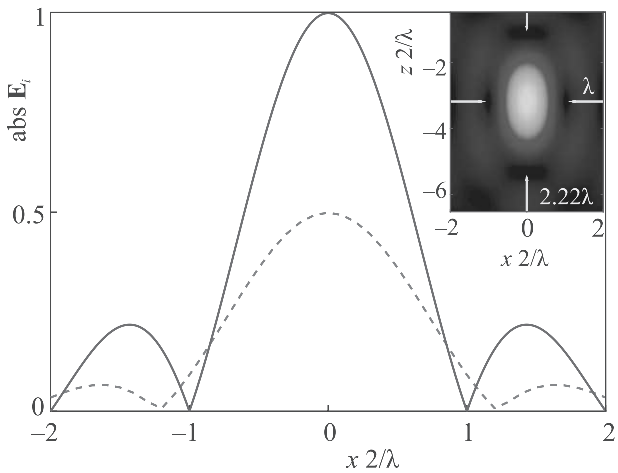

Рис. 1. (Цветной онлайн) Сравнение функции abs $\mathbf{E}_i$ из (3) (синяя линия) с численным расчетом для источника вида $(\mathbf{n}\nabla)G$ (красный пунктир). Точечный источник расположен на оси z в точке $z = -5\lambda/\pi$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$. Размытое мнимое изображение этого источника показано на вставке

обозначать индексом "1", а поля внутри сферы – индексом "2". Оба поля удовлетворяют волновым уравнениям с показателями преломления n_1 и n_2, и магнитными проницаемостями μ_1 и μ_2. Для нахождения этих полей мы используем стандартное разложение по собственным функциям $\mathbf{M}$, $\mathbf{N}$ и $\mathbf{L}$ в сферической системе координат $\{r, \theta, \varphi\}$, аналогично тому, как это делается в теории Ми [9]:

$$\mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{E}^i + \sum_{\ell=1}^{\infty}(a_\ell\mathbf{N}_\ell + b_\ell\mathbf{M}_\ell + f_\ell\mathbf{L}_\ell), \quad r > R, \tag{5}$$

$$\mathbf{E}^{(2)} = \sum_{\ell=1}^{\infty}(d_\ell\mathbf{N}_\ell + c_\ell\mathbf{M}_\ell + t_\ell\mathbf{L}_\ell), \quad r < R. \tag{6}$$

Функции $\mathbf{M}_\ell$, $\mathbf{N}_\ell$ и $\mathbf{L}_\ell$ даются формулами [9]:

$$\mathbf{M}_\ell = z_\ell(\rho)[\pi_\ell(\theta)\cos\varphi\mathbf{e}_\theta - \tau_\ell(\theta)\sin\varphi\mathbf{e}_\varphi], \tag{7}$$

$$\mathbf{N}_\ell = \ell(\ell+1)\frac{z_\ell(\rho)}{\rho}P_\ell^{(1)}(\cos\theta)\cos\varphi\mathbf{e}_r + \\ + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}[\rho z_\ell(\rho)][\tau_\ell(\theta)\cos\varphi\mathbf{e}_\theta - \pi_\ell(\theta)\sin\varphi\mathbf{e}_\vartheta], \tag{8}$$

$$\mathbf{L}_\ell = \frac{dz_\ell(\rho)}{d\rho}P_\ell^{(1)}(\cos\theta)\cos\varphi\mathbf{e}_r + \\ + \frac{z_\ell(\rho)}{\rho}[\tau_\ell(\theta)\cos\varphi\mathbf{e}_\theta - \pi_\ell(\theta)\sin\varphi\mathbf{e}_\varphi]. \tag{9}$$

Здесь $z_\ell(\rho) = j_\ell(k_2 r)$ при $r < R$, $z_\ell(\rho) = h_\ell(k_1 r)$ при $r > R$, $k_{1,2} = kn_{1,2}$, j_ℓ – сферическая функция Бесселя, h_ℓ – сферическая функция Ганкеля первого рода,

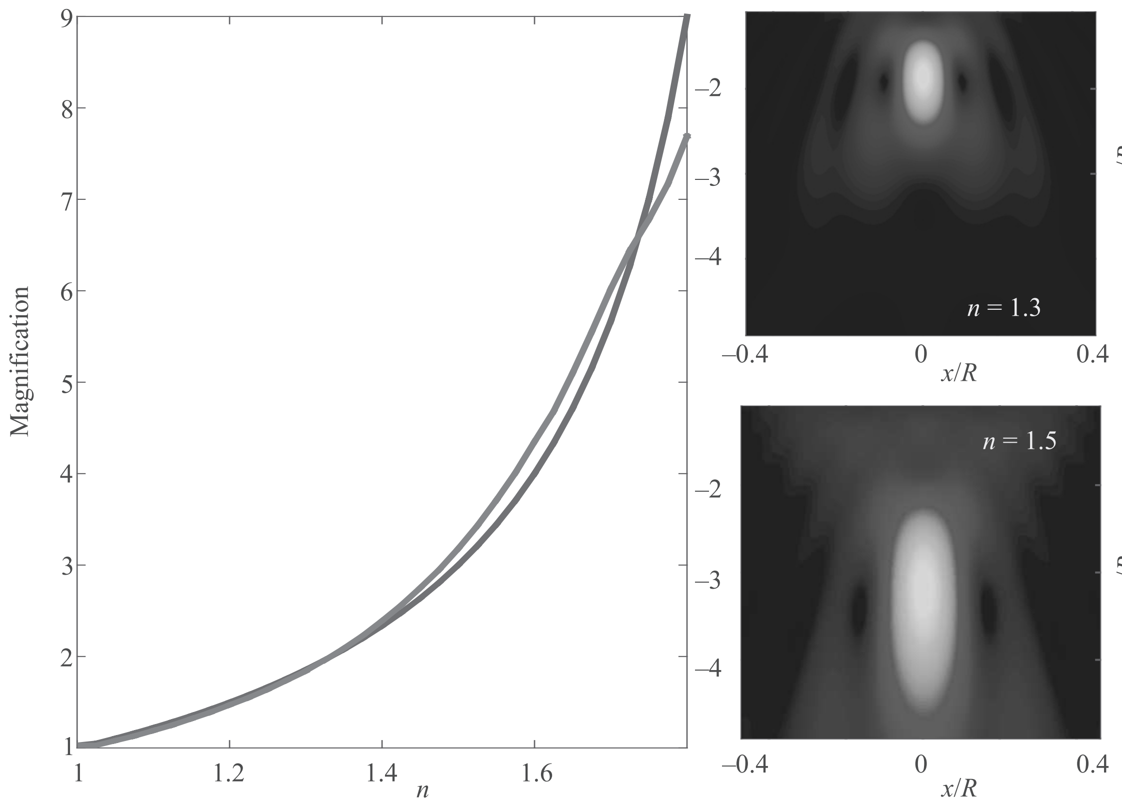

Рис. 2. (Цветной онлайн) Сравнение результатов геометрической (синяя линия) и волновой (красная линия) оптики для параметров $q = q_1 = p^{-1} = 100$. В интеграле (1) область Г представляла квадрат со стороной $2R$ и центром по оси z, в точке $z = 1.05R$. По мере увеличения показателя преломления размеры области локализации мнимого изображения также возрастают. Размытые мнимые изображения точечного источника, видимые с помощью сфер с показателями преломления $n = 1.3$ и $n = 1.5$, показаны в правой части рисунка

$\pi_\ell = P_\ell^{(1)}(\cos\theta)/\sin\theta$, $\tau_\ell = dP_\ell^{(1)}(\cos\theta)/d\theta$. Величины магнитных полей определяются из (5) и (6) по уравнениям Максвелла. Коэффициенты рассеяния a, b, c, d, f и t находятся из шести граничных условий на поверхности сферы:

$$E_\theta^{(1)} = E_\theta^{(2)},\ \ E_\varphi^{(1)} = E_\varphi^{(2)},\ \ H_\theta^{(1)} = H_\theta^{(2)},\ \ H_\varphi^{(1)} = H_\varphi^{(2)},$$

$$\frac{n_1^2}{\mu_1}E_r^{(1)} = \frac{n_2^2}{\mu_2}E_r^{(2)},\ \ Q_\varphi^{(1)} = Q_\varphi^{(2)}. \tag{10}$$

Здесь первые четыре условия отвечают обычным условиям непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей на поверхности сферы, пятое – описывает непрерывность нормального вектора индукции εE_r (вместо диэлектрической проницаемости ε нам удобнее использовать показатель преломления $n = \sqrt{\varepsilon\mu}$). Наконец, шестое уравнение описывает непрерывность продольных мод поля (здесь $\mathbf{Q}$ – соленоидальная часть поля $\mathbf{E}$). Наличие продольных мод, пропорциональных $\mathbf{L}$ в разложениях (5) и (6), ведет к тому, что все шесть уравнений (10) линейно независимы. В этом состоит отличие от стандартной процедуры в теории Ми [5, 9], где продольные моды не играют никакой роли. Однако именно эти моды важны для построения мнимого изображения. Опуская громоздкие вычисления коэффициентов рассеяния из решения уравнений (10), приведем конечные формулы:

$$c_\ell = iq_1 p(-1)^{\ell+1}\frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)}h'_\ell(q_1)\times$$
$$\times\frac{\mu\left(j_\ell(q)[qh_\ell(q)]' - h_\ell(q)[qj_\ell(q)]'\right)}{\mu j_\ell(nq)[qh_\ell(q)]' - h_\ell(q)[nqj_\ell(nq)]'} \tag{11}$$

$$b_\ell = iq_1 p(-1)^{\ell+1}\frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)}h'_\ell(q_1)\times$$
$$\times\frac{j_\ell(q)[nqj_\ell(nq)]' - \mu j_\ell(nq)[qj_\ell(q)]'}{\mu j_\ell(nq)[qh_\ell(q)]' - h_\ell(q)[nqj_\ell(nq)]'}, \tag{12}$$

$$d_\ell = iq_1 p(-1)^{\ell}\frac{2\ell+1}{\ell(l+1)}\left[\left[\frac{h_\ell(q_1)}{q_1}\right]'(\ell+1) - h'_{\ell+1}(q_1)\right]\times$$
$$\times\frac{\mu n\left(j_\ell(q)[qh_\ell(q)]' - h_\ell(q)[qj_\ell(q)]'\right)}{n^2 j_\ell(nq)[qh_\ell(q)]' - \mu h_\ell(q)[nqj_\ell(nq)]'}, \tag{13}$$

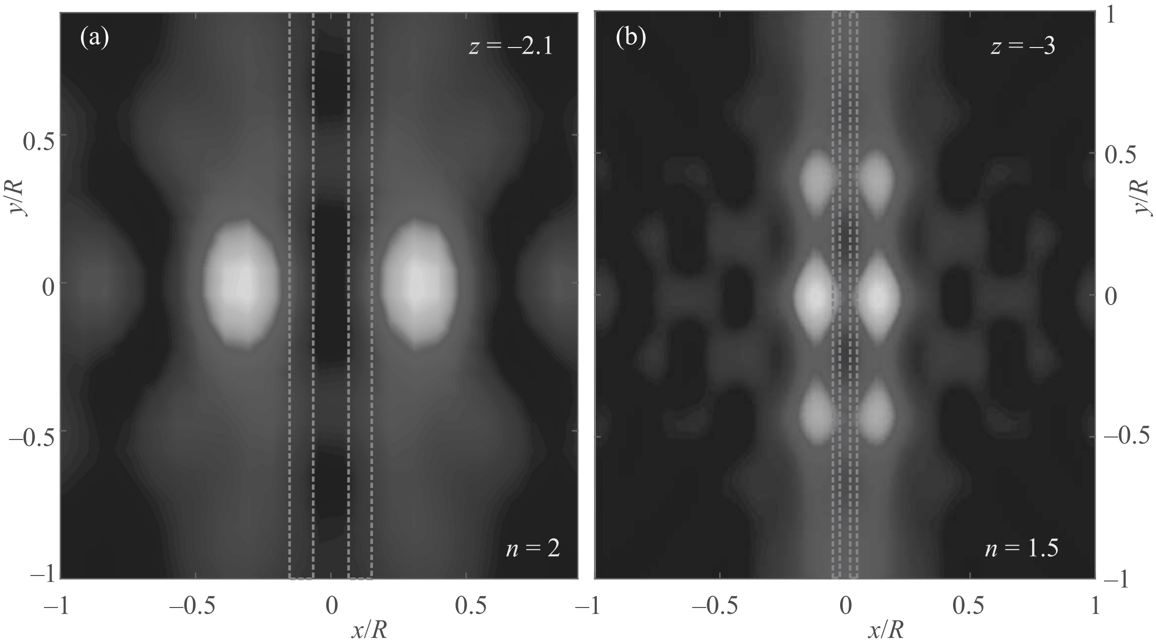

Рис. 3. (Цветной онлайн) Мнимое изображение двух щелей с шириной $\lambda/6$ и расстоянием между ними $\lambda/4$ (a) и $\lambda/6$ (b). Положение щелей показано пунктирными линиями. Значения параметров: (a) – $n = 2$, $q = 12$ и (b) – $n = 1.5$, $q = 38$. Мнимые изображения находятся на расстояниях: (a) $z = -2.1\,R$ и (b) – $z = -3\,R$. Поля щелей складываются некогерентным образом. Изучение в щелях (a) поляризовано вдоль оси x. В щелях (b) $\mathbf{E}^0(-1,\,0,\,0.5)$ для правой и $E^0(1,\,0,\,0.5)$ для левой щелей, соответственно. При построении учитывалась только x поляризация поля $\mathbf{E}_i$

$$a_\ell = iq_1p(-1)^\ell\frac{2\ell+1}{\ell(l+1)}\left[\left[\frac{h_\ell(q_1)}{q_1}\right]'(\ell+1) - h'_{\ell+1}(q_1)\right]\times$$

$$\times\frac{\mu j_\ell(q)[nqj_\ell(nq)]' - n^2j_\ell(nq)[qj_\ell(q)]'}{n^2j_\ell(nq)[qh_\ell(q)]' - \mu h_\ell(q)[nqj_\ell(nq)]'}, \qquad (14)$$

$$t_\ell = iq_1p(-1)^\ell(2l+1)\times$$

$$\times\left[\frac{h_\ell(q_1)}{q_1}\right]'\frac{\mu n(j_\ell(q)h'_\ell(q) - h_\ell(q)j'_\ell(q))}{\mu j_\ell(nq)h'_\ell(q) - n^3h_\ell(q)j'_\ell(nq)}, \qquad (15)$$

$$f_\ell = iq_1p(-1)^\ell(2l+1)\times$$

$$\times\left[\frac{h_\ell(q_1)}{q_1}\right]'\frac{n^3j_\ell(q)j'_\ell(nq) - \mu j_\ell(nq)j'_\ell(q)}{\mu j_\ell(nq)h'_\ell(q) - n^3h_\ell(q)j'_\ell(nq)}. \qquad (16)$$

Здесь $q = kR$, $q_1 = kr_0$, $n = n_2/n_1$, $\mu = \mu_2/\mu_1$, штрих означает дифференцирование по аргументу. В пределе, когда точечный источник удаляется на бесконечность, функции t и f стремятся к нулю, а коэффициенты a, b, c, d стремятся к своим выражениям в теории Ми, при этом следует положить $p = \exp(-iq_1)$. Множитель $-i$ в этих предельных формулах возникает из-за производной от дельта-функции выбранного точечного источника (4). Положение мнимого изображения определялось по формуле (1), как точка локального максимума поля $\mathbf{E}_i$. Зависимость коэффициента увеличения мнимого изображения M от величины относительного показателя преломления показана на рис. 2. На графике также показано увеличение в пределе геометрической оптики. Несмотря на то, что в приведенном примере выполнены формальные требования геометрической оптики: $q \gg 1$, $q_1 \gg 1$, различие между двумя зависимостями, как и ожидалось, возрастает по мере приближения показателя преломления к двойке.

Теперь перейдем к вопросу о преодолении дифракционного предела для мнимого изображения. Возможность такого явления в волновой теории прежде не исследовалась. Из экспериментов [3, 4, 10, 11] следует, что дифракционный предел преодолевается при определенных параметрах сферы. Поскольку в экспериментах наиболее часто встречаются данные по разрешению периодической системы темных и светлых полос (обычно это полоски нанодециметрового размера, записанные на *Blueray* диске), мы рассмотрим, для начала, разрешение поля от щели согласно формуле (2). Для построения решения мы используем вспомогательные решения ζ_i^j для полей вида $\frac{\partial G(\mathbf{r},\mathbf{r}_0)}{k\partial x^j}\mathbf{e}_i$, где $\mathbf{r}_0$ описывает произвольное положение источника в пространстве. Решение (2) в этом случае в силу линейности имеет вид:

$$X = \frac{(-2)}{4\pi}\iint\limits_{\Sigma} E_i^0 n^j \zeta_i^j k^2 dS, \qquad (17)$$

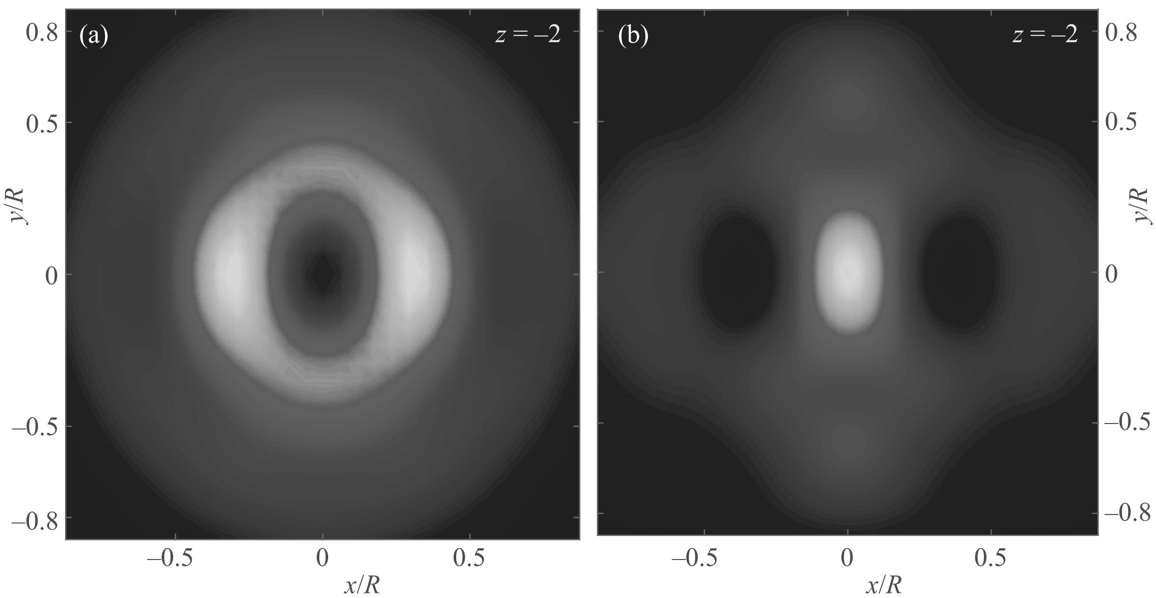

Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Мнимое изображение источника, расположенного на оси z ($z = -R$), в виде темной точки на светлом фоне. (b) – Мнимое изображение двух источников, расположенных симметрично по оси x на расстоянии λ друг от друга, $z = -R$. Параметры задачи: $q = 18$, $n = 2$, положение мнимого изображения в плоскости $z = -2R$

где X – один из компонентов рассеянного поля (в программе на MATLAB вначале вычисляются коэффициенты (11)–(16), а потом строятся сами поля).

Расчеты по приведенным выше формулам показывают, что дифракционный предел действительно преодолевается в определенной области параметров сферы. На рисунке 3 показаны два примера, когда в мнимом изображении разрешаются две соседние яркие полосы, расположенные на расстояниях $\lambda/4$ и $\lambda/6$ друг от друга. В приведенных примерах щели считаются некогерентными по отношению друг к другу, но источники внутри каждой из щелей когерентны. В приведенной теории не учитывается возможное изменение поля $\mathbf{E}^0$ внутри самой щели, а также самосогласованный расчет поля $\mathbf{E}^0$, обусловленный эффектом обратного рассеяния сферы. Эффекты такого рода играют важную роль в задаче "частица на подложке" [12, 13]. Однако даже в рассмотренном приближении волновая теория утвердительно отвечает на вопрос о возможности преодоления дифракционного предела в мнимом изображении.

Теоретический предел разрешения на базе приведенных формул возможен, но требует больших численных расчетов, связанных с нахождением максимума разрешения в пятимерном пространстве параметров: размера сферы, показателя преломления и $\{x_0, y_0, z_0\}$ координат, описывающих положение источника (в общем случае следует также учитывать поляризацию и форму щели). Экспериментально подтвержденное разрешение мнимого изображения в видимой области составляет $\lambda/8$ [3, 4]. Данная теория также объясняет экспериментально наблюдавшийся эффект, когда в некоторой области параметров светлые щели в мнимом изображении выглядят темными, а темные области между щелями – светлыми. По существу, это реинкарнация известного явления в теории дифракции – когда в центре изображения непрозрачного диска наблюдается светлое пятно, соответствующее половине действия первой открытой зоны Френеля [5]. Соответствующие картины мнимого изображения показаны на рис. 4.

Заключение. Предложенный метод формирования оптического изображения с помощью построения виртуальной сходящейся волны позволяет находить параметры мнимого изображения в области параметров, где неприменима геометрическая оптика. Метод позволяет определять параметры разрешения изображения за дифракционным пределом.

Эта работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант # 14.W03.31.0008). Эта работа также частично поддержана Российским научным фондом (проект # 20-12-00389) и Российским фондом фундаментальных исследований (проект # 20-02-00715).

1. B. S. Luk'yanchuk, R. Paniagua-Dominguez, I. Minin, O. Minin, and Z. B. Wang, Opt. Mater. Express **7**, 1820 (2017).

2. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, M. L. Brongersma, Y. S. Kivshar, and B. Luk'yanchuk, Science **354**, aag2472 (2016).
3. Z. B. Wang, W. Guo, L. Li, B. Luk'yanchuk, A. Khan, Z. Liu, Z. Chen, and M. H. Hong, Nature Commun. **2**, 1 (2011).
4. *Label-Free Super-resolution Microscopy*, ed. by V. Astratov, Springer, Cham, Switzerland (2019), p. 371.
5. M. Born and E. Wolf, *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference, and diffraction of light*, Elsevier, Amsterdam, Netherlands (2013).
6. S. Solimeno, B. Crosignani, and P. DiPorto, *Guiding, Diffraction, and Confinement of Optical Radiation*, Academic Press, N.Y. (1986).
7. H. Chew, P. J. McNulty, and M. Kerker, Phys. Rev. A **13**, 396 (1976).
8. H. Chew, M. Kerker, and D. D. Cooke, Phys. Rev. A **16**, 320 (1977).
9. C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley, Hoboken, New Jersey (1998).
10. L. A. Krivitsky, J. J. Wang, Z. B. Wang, and B. Luk'yanchuk, Sci. Rep. **3**, 3501 (2013).
11. K. W. Allen, N. Farahi, Y. Li, N. I. Limberopoulos, D. E. Walker Jr., A. M. Urbas, V. Liberman, and V. N. Astratov, Annalen der Physik **527**, 513 (2015).
12. B. S. Luk'yanchuk, Y. W. Zheng, and Y. F. Lu, Proc. SPIE **4065**, 576 (2000).
13. D. Bedeaux and J. Vlieger, *Optical properties of surfaces*, Imperial College Press, London (2004).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 367 – 373

Вынужденная диффузия скоррелированных примесей в пайерлсовском проводнике o-TaS_3

В. Е. Минакова[1)], *А. М. Никитина, С. В. Зайцев-Зотов*

Институт радиотехники и электроники РАН, 125009 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 июля 2010 г.
После переработки 31 июля 2010 г.
Принята к публикации 1 августа 2020 г.

Показано, что в ромбическом TaS_3 с дефектами закалки при изменении температуры в области ниже температуры пайерлсовского перехода $T < T_P$ возникает вынужденная диффузия дефектов, обусловленная их сильным взаимодействием с волной зарядовой плотности (ВЗП). Определены взаимосвязи между концентрацией дефектов закалки n и пороговым полем начала скольжения ВЗП E_T, а также сдвигом T_P, вызванным внесением дефектов: $E_T \propto n$ и $\Delta T_P \propto n$. Такой набор законов соответствует скоррелированному с ВЗП расположению дефектов по объему образца. Обнаружена обычная (без термоциклирования) диффузия дефектов закалки при $T \approx 300$ К, оценены ее коэффициент диффузии и высота энергетического барьера, что позволило прояснить наиболее вероятную природу дефектов. Это – примеси серы, внедренные во время закалки в ван-дер-ваальсовскую щель между цепочками и при $T < T_P$ частично упорядоченные благодаря взаимодействию с ВЗП. Это упорядочение существенно понижает высоту энергетического барьера вынужденной диффузии по сравнению с обычной диффузией при изменении пространственной конфигурации ВЗП в ходе термоциклирования, что приводит к появлению аномально высокой низкотемпературной вынужденной мобильности скоррелированных примесей.

DOI: 10.31857/S1234567820180056

Введение. Существует целый ряд физических систем, в которых при определенных условиях образуются упорядоченные в пространстве электронные сверхструктуры. Это – волны зарядовой и спиновой плотности (ВЗП и ВСП), вигнеровские кристаллы и решетки вихрей в сверхпроводниках II рода в магнитном поле. Взаимодействие таких сверхструктур с несовершенствами решетки (различными дефектами, примесями и т.д.) лежит в основе целого ряда эффектов. Среди них – пиннинг сверхструктуры, приводящий к появлению порогового значения усилия, необходимого для начала ее скольжения, а также разрушение дальнего порядка, вызывающее размытие и подавление перехода образования сверхструктуры по мере роста числа центров пиннинга.

Такой пиннинг в случае пайерлсовского проводника приводит к тому, что его вольт-амперные характеристики (ВАХ) линейны в малых электрических полях $E < E_T$, где E_T – пороговое значение, соответствующее началу скольжения ВЗП [1–4]. E_T зависит от концентрации центров пиннинга n и увеличивается с ее ростом. Температура пайерлсовского перехода T_P, наоборот, уменьшается с ростом n. В случае больших n пайерлсовский переход размывается из-за потери когерентности ВЗП [5].

Это поведение хорошо изучено экспериментально для таких центров пиннинга, как примеси замещения [6], ростовые [7] и радиационные [5, 8, 9] дефекты. В теории такой пиннинг также хорошо изучен. Он делится на коллективный (слабый) и индивидуальный (сильный) [2–4, 10, 11], а в более сложном случае содержит элементы обоих видов пиннинга [12–15]. При слабом пиннинге вызванный наличием центров пиннинга сдвиг температуры перехода $\Delta T_P \propto n$ и $E_T \propto n^2$. При сильном пиннинге $\Delta T_P \propto \sqrt{n}$ и $E_T \propto n$. Значит, в обоих случаях верен закон $\Delta T_P \propto \sqrt{E_T}$. Во всех описанных случаях центры пиннинга не взаимодействуют и разупорядочены. Ниже такой пиннинг, осуществляемый нескоррелированными локальными несовершенствами решетки, мы будем называть обычным пиннингом.

Структура квазиодномерных (q-1D) проводников с ВЗП (o-TaS_3, $NbSe_3$ и др.) состоит из металлических цепочек, соединенных взаимодействием ван дер Ваальса. В o-TaS_3 пайерлсовская щель, затрагивающая всю поверхность Ферми, открывается при

[1)] e-mail: mina_cplire@mail.ru

$T_P \approx 220$ К, и вплоть до $T \approx 80$ К омическая проводимость ($E < E_T$) следует активационному закону с энергией активации $\Delta \approx 850$ К [1].

Способ термической интеркаляции примесей In из контактов в межцепочечные промежутки кристалла $NbSe_3$ предложил Гилл (Gill) [16]. Он обнаружил способность таких примесей передвигаться на межатомные расстояния при взаимодействии с движущейся ВЗП. Он же первым обратил внимание на проблемы описания взаимодействия ВЗП с примесями внедрения. Гилл считал созданный ими пиннинг ВЗП обычным слабым пиннингом. Но для объяснения полученных результатов ему пришлось предположить, что взаимодействие осуществляется между In и дислокациями ВЗП, а для снятия возникших при этом противоречий с моделью упругой ВЗП, описывающей слабый пиннинг [10, 11], внести в нее поправки.

В недавней работе [17] было экспериментально показано, что в кристаллах o-TaS_3, подвергшихся быстрому охлаждению (закалке) во время синтеза, наблюдается новый, ранее неизвестный тип пиннинга. Оказалось, что свойства этого пиннинга принципиально отличаются от свойств обычного пиннинга в пайерлсовских проводниках. Во-первых, нарушается соотношение $\Delta T_P \propto \sqrt{E_T}$. Во-вторых, обнаруженный пиннинг нестабилен – он может быть существенно ослаблен и даже полностью устранен в процессе термоциклирований образца в области температур $T < T_P$, в то время как выдержка при комнатной температуре на него не оказывает практически никакого действия. В-третьих, пайерлсовский переход почти не размыт, несмотря на чрезвычайно низкие начальные значения T_P (и, соответственно, большие E_T). Поэтому резкость перехода почти не изменяется при существенном росте T_P (и значительном ослаблении пиннинга) при термоциклированиях. Была высказана гипотеза о том, что обнаруженный пиннинг может осуществляться протяженными макроскопическими объектами, которые устроенны таким образом, чтобы не разрушать дальний порядок. Также было предположено, что такими объектами могли бы быть дислокации кристаллической решетки, поскольку они часто возникают при закалке и способны сравнительно легко перемещаться по кристаллу [18, 19].

Цель данной работы – прояснить природу дефектов закалки, особенности их взаимодействия с ВЗП, а также механизм их вывода из кристалла при термоциклировании. Мы показываем, что стимулированное термоциклированиями уменьшение концентрации дефектов вызвано их вынужденной диффузией. В свою очередь, причиной вынужденной диффузии дефектов закалки является их сильное взаимодействие с ВЗП, заставляющее их частично упорядочиваться в пространстве и коррелированно отслеживать изменения пространственной конфигурации ВЗП при изменении T. И, наконец, сравнивая данные по диффузии In в пайерлсовских проводниках [16, 20] с результатами нашего исследования, мы делаем вывод, что дефектами закалки, вероятнее всего, являются атомы серы, внедренные при закалке в межцепочечное пространство кристалла и пространственно скоррелированные благодаря взаимодействию с ВЗП. А значит, пиннинг, осуществляемый примесями внедрения, является слабым пиннингом скоррелированных примесей и описывается законами $E_T \propto n$ и $\Delta T_P \propto n$.

Эксперимент. Для синтеза кристаллов o-TaS_3 (8 ростовых партий) использовался стандартный метод газофазного транспорта. Детали описаны в [17]. Избыток S (≈ 10 %) играл роль транспортного агента. Дефекты создавались с помощью закалки – по окончании синтеза ампула быстро вынималась из зоны роста и опускалась горячим концом в воду. При этом избыток S устранялся с поверхности кристаллов.

Для исключения влияния размерных эффектов на T_P и E_T [21] выбирались кристаллы, соответствующие случаю трехмерного пиннинга: поперечные размеры составляли, как правило, 1–10 мкм, а длины $L \approx 1.8-3$ мм. Контакты с сопротивлением $\lesssim 10$ Ом изготавливались холодной пайкой индием.

Основные характеристики качества кристалла, величины T_P и E_T, извлекались из температурной зависимости омической проводимости $G(T)$ и ВАХ соответственно. Зависимости $G(T)$ измерялись в режиме заданного напряжения при условии $E \ll E_T$. В большей части экспериментов измерения $G(T)$ проводились по стандартной схеме термоциклирования – при охлаждении от 300 до 77 К со скоростью 2 К/мин. Иногда использовались нестандартные режимы термоциклирования, в частности, охлаждения до 8 К. Величина T_P определялась по максимуму температурной зависимости $-d\ln G/d(1/T)$. ВАХ измерялись после приложения электрического поля больше порогового для удаления метастабильности ВЗП [1]. Значение E_T определялось по началу слабой (~ 1 %) нелинейности зависимости $G \equiv I/V$ от E. Все измерения проводились в двухконтактной конфигурации. Точность измерения и стабилизации температуры была лучше 0.1 К.

Вынужденная диффузия дефектов закалки и основные законы нового пиннинга. Очень низкая начальная величина $T_P \approx 189-200$ К была критерием при отборе кристаллов с большим количеством дефектов закалки из свежесинтезированных партий. В таких кристаллах ($\approx 10\,\%$ от общего количества) с каждым новым измерением $G(T)$ наблюдался необычный и очень существенный рост T_P, сопровождающийся уменьшением E_T. Остальные кристаллы содержали малое количество дефектов и имели стабильные свойства. T_P и E_T изменялись значительно, пока число термоциклирований N было мало. С ростом N кривые $T_P(N)$ и $E_T(N)$ выходили на насыщение, а T_P приближались к значениям, характерным для лучших образцов со стабильными свойствами 212–214 K. Такое поведение означает ослабление пиннинга из-за исчезновения дефектов в процессе термоциклирований. Часть термоциклирований (особенно при больших N) проводилась без измерений, поскольку наличие малых полей на образце $E \ll E_T$ не влияло на величину изменений T_P и E_T.

Наибольшему числу термоциклирований $N = 178$ подвергся образец # 1. Его зависимости $G(T)$ и $G(E)$ при первом и последнем термоциклировании, а также сильно нелинейные зависимости $T_P(N)$ и $E_T(N)$ приведены в [17]. В данной работе зависимости T_P и E_T представлены как функции от $\sqrt{N}$ на рис. 1c и d соответственно (красные кружки). Обе зависимости линейны при $N \lesssim 50$, а затем согласованно выходят на насыщение.

Покажем, что механизмом, выводящим дефекты из кристалла, является вынужденная диффузия, в которой роль времени играет число термоциклирований. В анизотропных материалах процесс диффузии идет преимущественно в направлении главной оси кристалла [18]. Предположим, что в момент времени $t = 0$ концентрация дефектов закалки n_0 постоянна на всей длине образца L, а на концах резко падает до нуля. С течением времени t на длине L_D от концов образца возникнет неоднородное распределение дефектов (подтверждено экспериментально в [17]), вызванное их выходом из кристалла. Такое распределение схематически показано на рис. 1b, для простоты будем считать, что n вблизи концов образца падает по линейному закону. Тогда средняя по длине образца концентрация оставшихся дефектов

$$\langle n \rangle = \frac{L - L_D}{L} n_0.$$

Процесс диффузии должен завершаться значительно быстрее в коротких образцах, поскольку длина диффузии $L_D \propto \sqrt{t}$. Оказалось, что не очень длительное хранение образцов с дефектами закалки при постоянной температуре (как комнатной, так

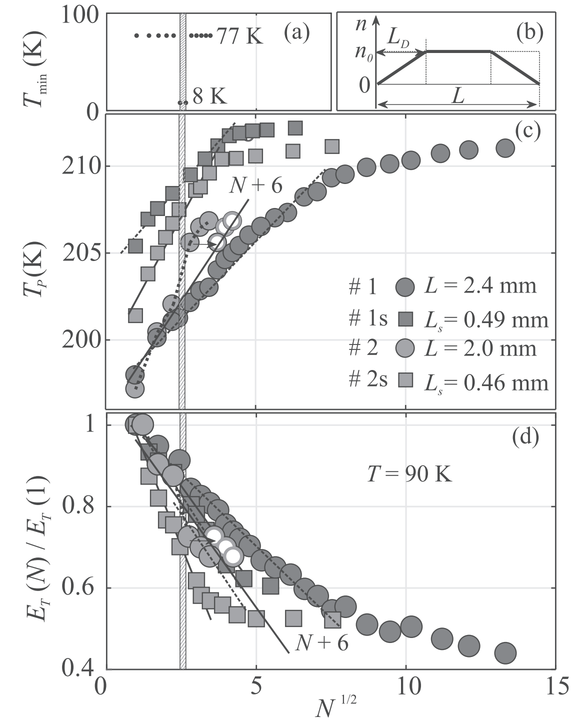

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Минимальная температура в каждом термоцикле для длинного образца # 2, 6-й и 7-й термоциклы – нестандартные. (b) – Схема изменения концентрации дефектов вдоль образца. (c) – Зависимости $T_P(\sqrt{N})$ для образцов разной длины. (d) – Зависимости $E_T(\sqrt{N})$, нормированные на $E_T(1)$, для тех же образцов. Стрелки на рис. (c) и (d) соединяют реально измеренные точки с зависимостями, ожидаемыми при стандартных измерениях. На рисунках (a), (c) и (d) – единая шкала абсцисс

и более низкой) слабо изменяет их характеристики (см. ниже). Поэтому в большинстве случаев этим зависящим от времени процессом можно пренебречь. Основные изменения T_P и E_T происходят во время термоциклирований. Поскольку все термоциклирования проводятся в одинаковых условиях, можно грубо считать, что $t \propto N$. То есть в случае диффузии должен наблюдаться закон $L_D \propto \sqrt{N}$. Тогда получим $\langle n \rangle - n_0 \propto -\sqrt{N}$.

Мы обнаружили, что экспериментально наблюдаемые изменения основных характеристик действительно следуют корневым зависимостям:

$$T_P(N) - T_P(1) \propto \sqrt{N}, \quad E_T(N) - E_T(1) \propto -\sqrt{N}.$$

Это позволило установить совокупность основных законов, описывающих новый пиннинг в o-TaS$_3$:

$$\Delta T_P \propto \langle n \rangle, \quad E_T \propto \langle n \rangle.$$

Следовательно, экспериментально установленная связь между обеими величинами описывается законом $\Delta T_P \propto E_T$, отличным от закона $\Delta T_P \propto \sqrt{E_T}$, характерного для обычного пиннинга (как сильного, так и слабого). Именно линейный закон $\Delta T_P \propto E_T$ наблюдали для образцов с дефектами закалки при разных температурах измерения $E_T(T)$ в [17].

Закон $E_T \propto n$ для пиннинга дефектами закалки схож с законом для обычного сильного пиннинга, что позволяет оценить изменение концентрации дефектов Δn в образце $\#\,1$. Используя экспериментально полученную в работе [5] взаимосвязь $\Delta n \approx \Delta E_T \times \times 10^{-5}$ ат. %/(В $\cdot$ см$^{-1}$) для пиннинга сильными примесями в o-TaS$_3$, получим $\Delta n = 3 \cdot 10^{-5}$ ат. %.

Рисунки 1 c и d позволяют сравнить зависимости $T_P(\sqrt{N})$ и $E_T(\sqrt{N})$ в случае длинных образцов $\#\,1$ и 2 и их укороченных вариантов $\#\,1$s и 2s (оставлена центральная часть длиной $L_s \lesssim 0.25L$). Линейность зависимостей $T_P(\sqrt{N})$ и $E_T(\sqrt{N})$, а также их больший наклон и более ранний и резкий выход на насыщение доказывают диффузионную природу наблюдаемого эффекта.

Зависимости $T_P(\sqrt{N})$ и $E_T(\sqrt{N})$ линейны только в том случае, когда все термоциклирования проводятся в одинаковых условиях. Масштаб изменений T_P и E_T в каждом термоцикле зависит от его параметров, в частности, от минимальной температуры $T_{\min}$, и увеличивается при охлаждении до более низких T. Так, для длинного образца $\#\,2$ термоциклы с номерами $N = 6$ и 7 (заштрихованная область на рис. 1) проводились по нестандартной схеме с $T_{\min} = 8$ К. Кривые $T_P(\sqrt{N})$ и $E_T(\sqrt{N})$ в этой области имеют резкий изгиб. Скорость диффузии в этих термоциклах больше, так как их эффект эквивалентен восьми термоциклированиям до $T_{\min} = 77$ К. Учет этой поправки дает линейные зависимости, которые были бы в случае стандартных измерений.

О необычном характере диффузии дефектов закалки при термоциклировании свидетельствуют следующие ее свойства. Эта диффузия практически отсутствует при $T > T_P$. Область ее наблюдения – при $T < T_P$, когда уже сформирована трехмерно упорядоченная ВЗП, причем состояние ВЗП должно сильно изменяться, что и происходит при термоциклировании за счет изменения волнового вектора ВЗП $q(T)$ [22, 23]. Так, наибольшая скорость диффузии наблюдается в той области низких T, где $q(T)$ изменяется наиболее сильно. Процессы, в которых q не изменяется, например, хранение образца при постоянной низкой температуре (даже при наличии электрического поля $E > E_T$), практически не оказывают влияния на диффузию. Полученные результаты позволяют сделать вывод: диффузия дефектов при низкотемпературном термоциклировании возникает вследствие их сильного взаимодействия с ВЗП, т.е. является вынужденной.

Диффузия дефектов закалки при комнатной температуре. Наблюдать обычную диффузию дефектов при $T \approx 300$ К можно на начальной стадии эволюции свойств образца, пока N мало. На рисунке 2a для образца $\#\,4$ приведены значения $T_{\min}$ во

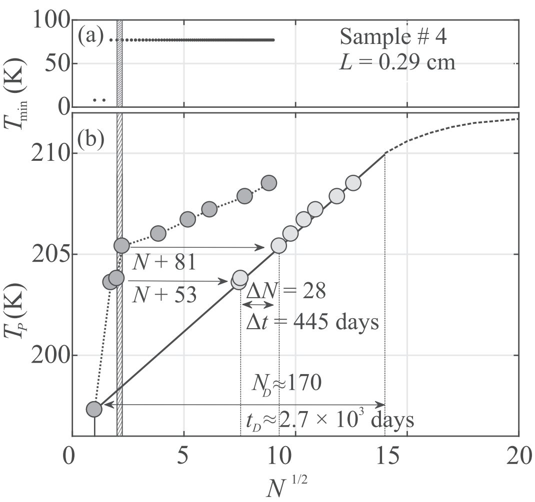

Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – $T_{\min}$ в каждом термоцикле для образца $\#\,4$, 1-й и 2-й термоциклы – нестандартные. Между 4-м и 5-м термоциклами (заштрихованная область) образец хранился 445 дней при $T \approx 300$ К. (b) – Зависимость $T_P(\sqrt{N})$. Синие кружки – реально измеренные точки, желтые кружки – ожидаемая зависимость в случае стандартных измерений и без временно́й выдержки. Шкала абсцисс единая

всех проведенных термоциклах, из них 1-й и 2-й – нестандартные, в каждом было несколько добавочных охлаждений в области $8 < T_{\min} < 77$ К. Остальные термоциклы были стандартными, но между 4-м и 5-м (заштрихованная область) образец хранился $\Delta t = 445$ дней при $T \approx 300$ К. Измеренная зависимость $T_P(\sqrt{N})$ имеет огромное (более 6 К) изменение T_P после двух нестандартных термоциклов и более слабый скачок (≈ 2 К) после временно́й выдержки (рис. 2b). Соответствующее этому скачку изменение T_P связано с обычной диффузией, вызванной градиентом n. Оценка эффективности обоих процессов показала, что многократные охлаждения в первых двух термоциклах дали поправку $\Delta N = 53$, а для почти полуторагодовалой выдержки $\Delta N = 28$. Значит, эффект от хранения при $T \approx 300$ К (обычная диффузия) слаб по сравнению с эффектом от термоциклирований (вынужденная диффузия), и при обычных измерениях им можно пренебречь.

Оценим коэффициент обычной диффузии дефектов закалки D_{S300} при $T \approx 300$ К. Считаем (по аналогии с другими образцами), что зависимость $T_P(\sqrt{N})$ при $N \to \infty$ будет стремится к $T \approx 212$ К, а выход на насыщение начнется при $T \approx 210$ К. Тогда получим, что процесс диффузии, стартующий при $N = 1$, будет следовать корневому закону до $N_D \approx 170$, т.е. будет продолжаться в течение $t_D \approx 2.7 \cdot 10^3$ дней (более 7 лет!) или $\sim 2.3 \cdot 10^8$ с. Выход кривой $T_P(\sqrt{N})$ на насыщение происходит при $L_D \approx L/2$. Отсюда получаем, что $D_{S300} \sim 10^{-10}$ см^2/с. Оцененная величина D_{S300} близка к типичным значениям коэффициента диффузии примесей в металлах при $T \approx 300$ К и существенно больше, чем в кристаллических полупроводниках, таких как Si, Ge, GaAs и др.

Предположив, что дефекты закалки в o-TaS$_3$ являются обычными примесями, оценим высоту энергетического барьера их диффузии θ_S. Используем отношение законов диффузии для нашего случая и предельного случая, когда $T \to \infty$:

$$\left(\frac{L_D}{l_0}\right)^2 \approx \frac{t_D}{\tau_0} e^{-\theta_S/T},$$

где $\tau_0 \sim 10^{-12}$ с – характерное время элементарного акта диффузии на межатомное расстояние $l_0 \approx \approx 3 \cdot 10^{-8}$ см при $T \to \infty$. Получим $\theta_S \approx 4830$ К.

Проанализируем данные по диффузии In в o-TaS$_3$ [20]. Для внедрения In образец o-TaS$_3$ с контактами нагревался при $T \approx 400$ К в течение 23 ч. С помощью энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии наличие In наблюдалось на расстояниях $\leqslant 30$ мкм от контактов. Отсюда получаем параметры диффузии In в o-TaS$_3$: высота энергетического барьера диффузии $\theta_{\mathrm{In}} \approx 6370$ К, а коэффициенты диффузии при $T \approx 400$ К и $T \approx 300$ К, соответственно, $D_{\mathrm{In}400} \sim \sim 10^{-10}$ см^2/с, $D_{\mathrm{In}300} \sim 10^{-12}$ см^2/с.

Полученные величины энергетических барьеров обычной диффузии в o-TaS$_3$ как для дефектов закалки, так и для примесей индия ($\theta_S \approx 4830$ К и $\theta_{In} \approx 6370$ К) несколько больше, чем $\theta = 3200$ К для In в NbSe$_3$ [16]. При этом диффузию в случае NbSe$_3$ следует считать вынужденной, поскольку она возникала в результате взаимодействия примесей In с ВЗП. Оцененная на основе экспериментальных данных энергия взаимодействия ВЗП с примесями в o-TaS$_3$ составляет $W_i \approx 3000$ К [21]. На близкую величину отличаются высоты барьеров обычной диффузии в o-TaS$_3$ и вынужденной диффузии в NbSe$_3$. В пайерлсовском состоянии такое существенное понижение барьера диффузии происходит при изменении конфигурации ВЗП в ходе термоциклирования и приводит к появлению вынужденной диффузии в o-TaS$_3$.

Возможная природа дефектов закалки. Обнаруженная близость параметров диффузии In и дефектов закалки в o-TaS$_3$ приводит нас к заключению, что дефекты закалки являются обычными примесями, а не дислокациями кристаллической решетки. Наиболее вероятно, что в качестве таких примесей выступает S. Избыток S используется для обеспечения газового транспорта. В процессе синтеза какое-то количество атомов свободной S может проникать в ван-дер-ваальсовскую щель между цепочками и оставаться там, если плавное охлаждение заменяется закалкой. Поскольку из-за взаимодействия с ВЗП атомы S будут стремиться скоррелировать свои положения, то их частично упорядоченная структура будет стремиться быть соизмеримой с ВЗП, обеспечивая тем самым гораздо более эффективный пиннинг по сравнению с их случайным распределением. Таким образом, в этом случае слабого, но соизмеримого с ВЗП пиннинга, как и в случае обычного сильного пиннинга, $E_T \propto n$. С другой стороны, соизмеримое с ВЗП расположение примесей приведет лишь к понижению T_P без существенного изменения резкости пайерлсовского перехода, поскольку при соизмеримости не разрушается когерентность ВЗП. В этом случае зависимость $\Delta T_P(n)$ будет ближе к случаю слабого, а не сильного пиннинга, т.е. $\Delta T_P \propto n$. В результате ожидаемая зависимость будет иметь вид $\Delta T_P \propto E_T$ в соответствии с нашими наблюдениями [17]. Таким образом, скоррелированное с ВЗП расположение примесей должно создавать пиннинг, все проявления которого совпадают с экспериментально наблюдаемыми.

Предположение о таком скоррелированном с ВЗП расположении атомов S достаточно реалистично. Подобное упорядочение различных примесей внедрения (ванадия, хрома и т.д.) наблюдается в NbSe$_3$ [24, 25]. Оно приводит к появлению периодической модуляции кристаллической структуры NbSe$_3$, связанной с упорядочением примесей и наблюдающейся при комнатной температуре с помощью атомно-силовой микроскопии. Теоретическая модель [26] удовлетворительно объясняет эту модуляцию и ее изменение при изменении n. Наблюдаемый эффект упорядочения примесей является следствием особенности взаимодействия электронной системы q-1D металлов с примесями. А именно, каждая примесь генерирует фриделевские осцилляции в плотности заряда с волновым вектором $2k_F$. В q-1D случае эти колебания затухают значительно медленнее, чем в материалах с большей размерностью, обеспечивая тем самым взаимодействие примесей на сравнительно больших расстояниях.

В пайерлсовском состоянии взаимодействие дальнего порядка усиливается благодаря образованию ВЗП, имеющей тот же волновой вектор. В присутствии ВЗП упорядочение происходит даже при низких n, поскольку дальнодействующее взаимодействие распространяется на расстояния порядка длины когерентности фазы ВЗП (десятки микрон). При изменении конфигурации ВЗП происходит согласованное с ВЗП перераспределение примесей в объеме образца. Волновой вектор ВЗП q зависит от T [22, 23], в результате чего период ВЗП увеличивается при охлаждении. Это и приводит к вынужденному перемещению и выводу примесей из кристалла при понижении T.

Поиск избыточной серы. С помощью энергодисперсионного анализа мы попытались найти различие в концентрации серы в свежесинтезированных кристаллах с дефектами закалки и без них, но это различие оказалось ниже погрешности измерений[2)]. Других “чужеродных“ примесей не обнаружено.

Есть косвенное указание на диффузию S. Исследованные образцы с индиевыми контактами и медными монтажными проводами герметично хранились вместе с основной массой выращенных в той же партии кристаллов. Через год медные провода ”обрастали” кристаллами сульфида меди в результате реакции с избыточной S, выходящей из кристаллов благодаря обычной диффузии.

Резюме. В образцах o-TaS_3 с дефектами закалки наблюдается диффузия двух типов – обычная и вынужденная. При $T > T_P$ вынужденная диффузия практически отсутствует, поскольку ВЗП при $T > T_P$ представляет собой не коррелирующие друг с другом флуктуации на отдельных цепочках. Поэтому при $T \approx 300$ К имеет место только обычная диффузия, вклад которой с понижением T активационно исчезает. Наоборот, роль вынужденной диффузии с понижением температуры до $T < T_P$ усиливается, так как при этом возникает трехмерно упорядоченная ВЗП. С дальнейшим понижением T ВЗП становится более жесткой из-за изменений условий экранировки [27]. Поскольку эффект взаимодействия является обоюдным, дефекты закалки, не встроенные в кристаллическую решетку, вынуждены отслеживать изменение зависящей от T пространственной конфигурации ВЗП. Это и приводит к их перемещению и выводу из кристалла при изменении температуры, т.е. к вынужденной диффузии.

Оцененная величина высоты барьера обычной диффузии дефектов закалки $\theta_{S300} \approx 0.5$ эВ приблизительно на порядок меньше, чем в кристаллических полупроводниках. Этот факт отражает специфику q-1D проводников. Их цепочечная структура имеет естественные каналы диффузии в ван-дер-ваальсовской щели для примесей внедрения. Это и позволяет дефектам закалки сравнительно легко упорядочиваться, минимизируя энергию взаимодействия с ВЗП при $T < T_P$, а также легко передвигаться на расстояния, сравнимые с длиной образца, и покидать его. Такая особенность строения q-1D проводников делает возможным наблюдение эволюции свойств кристалла, вызванной обычной диффузией, при $T \approx 300$ К. Существование вынужденной диффузии (высота барьера которой значительно уменьшается из-за большой величины энергии взаимодействия ВЗП с примесями $W_i \approx 0.3$ эВ) позволяет наблюдать изменение характеристик образца при гораздо более низких T.

Заключение. Пиннинг ВЗП в кристаллах o-TaS_3, подвергшихся закалке, описывается набором законов $\Delta T_P \propto n$ и $E_T \propto n$ и, вероятнее всего, обусловлен не встроенными в решетку избыточными атомами S. Они скоррелированы и частично упорядочены в пространстве благодаря сильному взаимодействию с ВЗП, которое при низких T приводит к их вынужденной диффузии. Большая эффективность вынужденной диффузии обусловлена цепочечной структурой q-1D проводников и огромной энергией взаимодействия ВЗП с примесями, существенно снижающей высоту ее энергетического барьера по сравнению с барьером для обычной диффузии в условиях, когда при изменении температуры изменяется пространственная конфигурация ВЗП.

Обнаруженные эффекты могут быть присущи широкому классу слоистых или цепочечных металлических или полуметаллических соединений, в которых взаимодействие между электронной сверхструктурой и примесями является сильным.

Авторы благодарны Е. Б. Якимову за проведение энергодисперсионного анализа образцов.

[2)] По приведенным выше оценкам $\Delta n \sim 10^{-5}$ ат. %.

1. P. Monceau, Adv. Phys. **61**, 325 (2012).
2. А. И. Ларкин, ЖЭТФ **58**, 1466 (1970).
3. К. Б. Ефетов, А. И. Ларкин, ЖЭТФ **72**, 2350 (1977).
4. H. A. Lee, T. M. Rice, and P. W. Anderson, Solid State Commun. **14**, 703 (1974).
5. H. Mutka, S. Bouffard, G. Mihály, and L. Mihály, J. Physique – Lett. **45**, L1-13 (1984).

6. P.-L. Hsieh, F. de Czitto, A. Janossy, and J. W. Savage, J. Physique **44**, C3-1753 (1983).
7. Yu. I. Latyshev, V. V. Petristchev, Ya. S. Savitskaya, and V. V. Frolov, Synth. Metals **19**, 849 (1997).
8. G. Mihály, L. Mihály, and H. Mutka, Solid State Commun. **49**, 1009 (1984).
9. G. Mihály, N. Housseau, H. Mutka, L. Zuppiroli, J. Pelissier, P. Gressier, A. Meerschaut, and J. Rouxel, J. Physique – Lett. **42**, L-263 (1981).
10. H. Fukuyama and P. A. Lee, Phys. Rev. B **17**, 476 (1978).
11. H. A. Lee and T. M. Rice, Phys. Rev. B **19**, 3970 (1979).
12. S. Abe, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 3494 (1985).
13. S. Abe, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1987 (1986).
14. J. R. Tucker, W. G. Lyons, and G. Gammie, Phys. Rev. B **38**, 1148 (1999).
15. S. V. Zaitsev-Zotov, V. Ya. Pokrovskii, and J. C. Gill, J. Phys. I France **2**, 111 (1992).
16. J. C. Gill, Phys. Rev. B **53**, 15586 (1996).
17. В. Е. Минакова, А. М. Никитина, С. В. Зайцев-Зотов, Письма в ЖЭТФ **110**, 56 (2019).
18. K.-Th. von Wilke, *Kristallzüchtung*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1973).
19. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, М. (1978).
20. V. F. Nasretdinova, E. B. Yakimov, and S. V. Zaitsev-Zotov, Physica B: Condensed Matter **460**, 180 (2015).
21. S. V. Zaitsev-Zotov, Physics – Uspekhi **47**, 533 (2004).
22. Z. Z. Wang, H. Salva, P. Monceau, and M. Renard, J. Physique – Lett. **44**, L-311 (1983).
23. K. Inagaki, M. Tsubota, K. Higashiyama K. Ichimua, S. Tanda, K. Yamamoto, N. Hanasaki, N. Ikeda, Y. Nogami, T. Ito, and H. Toyokawa, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 093708 (2008).
24. Y. Gong, Q. Xue, Z. Dai, C. G. Slough, R. V. Coleman, and L. M. Falicov, Phys. Rev. Lett. **71**, 3303 (1993).
25. Y. Gong, Q. Xue, D. L. Drake, J. Qian, and R. V. Coleman, Phys. Rev. B **51**, 12975 (1995).
26. S. Turgut and L. M. Falicov, Phys. Rev. B **49**, 14043 (1994).
27. С. Н. Артеменко, В. Я. Покровский, С. В. Зайцев-Зотов, ЖЭТФ **110**, 1069 (1996).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 374 – 378

Образование новых кристаллических фаз при высокотемпературном отжиге бората железа $FeBO_3$ в различных газовых средах

Н. И. Снегирев[+1)], *И. С. Любутин*[+], *С. В. Ягупов*[*], *А. Г. Куликов*[+], *В. В. Артемов*[+], *Ю. А. Могиленец*[*], *М. Б. Стругацкий*[*]

[+] *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" РАН, 119333 Москва, Россия*

[*] *Физико-технический институт, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского", 295007 Симферополь, Россия*

Поступила в редакцию 11 августа 2020 г.
После переработки 14 августа 2020 г.
Принята к публикации 14 августа 2020 г.

На специально созданной установке выполнен отжиг кристаллов бората железа $FeBO_3$ в нейтральной, окислительной и восстановительной газовых средах. Установлено влияние химической среды и режимов отжига на морфологию поверхности и фазовый состав образцов. Показано, что отжиг в нейтральной или окислительной среде ведет к перекристаллизации $FeBO_3$ в фазу гематита α-Fe_2O_3, а отжиг в восстановительной среде приводит к образованию фазы пиробората $Fe_2B_2O_5$ и металлического железа α-Fe. Различие в характере структурных трансформаций связано с изменением валентного состояния ионов железа при отжиге в восстановительной атмосфере. Полученный результат представляет интерес как способ трансформации кристаллических фаз.

DOI: 10.31857/S1234567820180068

1. Введение. Борат железа $FeBO_3$ изоструктурен минералу кальциту $CaCO_3$ и принадлежит к пространственной группе симметрии $R\bar{3}c$ [1]. Несмотря на то, что это соединение было впервые синтезировано еще в 1963 г., интерес исследователей к нему возрастает из-за возможности применений кристаллов $FeBO_3$ в различных областях, включая оптоэлектронику и синхротронные технологии [1–16]. Только в последнее время на кристаллах $FeBO_3$ были изучены электронный переход типа диэлектрик-полупроводник при спиновом кроссовере [2–6], магнитное двупреломление звука [7], а также магнитоакустические явления, индуцированные фемтосекундными лазерными импульсами [8]. В ряде теоретических работ показано, что наноразмерные частицы $FeBO_3$ могут быть использованы в качестве эффективных оптических преобразователей [9, 10], а введение бората железа в состав электролита литий-ионных аккумуляторов приводит к существенному улучшению их характеристик [11]. Кроме того, обогащенные по изотопу ^{57}Fe монокристаллы бората железа применяются при проведении спектроскопических исследований для выделения резонансного диапазона из "белого" синхротронного излучения [12–14, 17, 18].

Известно, что без контакта с атмосферой соединение $FeBO_3$ инконгруэнтно плавится при температуре выше 900 °C [19, 20]. В случае выхода за пределы стабильности, в структуре бората железа наступают необратимые изменения, связанные с образованием новых кристаллических фаз. Авторами настоящей статьи [21, 22], а также другими научными группами [19, 20] ранее было исследовано влияние высоких температур на фазовый состав моно- и поликристаллов бората железа. Установлено, что при отжиге $FeBO_3$ трансформируется в гематит α-Fe_2O_3, а при определенных температурных режимах в отожженных образцах также обнаруживается фаза Fe_3BO_6 [19, 21]. Кроме того, ранее нами было изучено влияние изоморфной примеси галлия на структурную стабильность кристаллов $FeBO_3$. Обнаружено, что воздействие высоких температур на кристаллы железо-галлиевого бората $Fe_{0.27}Ga_{0.73}BO_3$ приводит к структурным изменениям, связанным с образованием фаз β-Ga_2O_3 и $(Fe,Ga)_2O_3$ [22]. При этом кристаллы смешанного состава демонстрируют большую устойчивость к воздействию высоких температур по сравнению с "чистыми" фазами боратов галлия ($GaBO_3$) и железа ($FeBO_3$) [22].

Следует отметить, что во всех ранее выполненных работах $FeBO_3$ отжигался лишь в воздушной среде [19–22]. Целью настоящей работы было прове-

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

сти серию экспериментов по отжигу кристаллов бората железа в различных химических средах, а также изучить морфологию и фазовый состав отожженных образцов.

2. Методика эксперимента. Для проведения экспериментов по отжигу была разработана установка (см. рис. 1), основой которой служила трубчатая

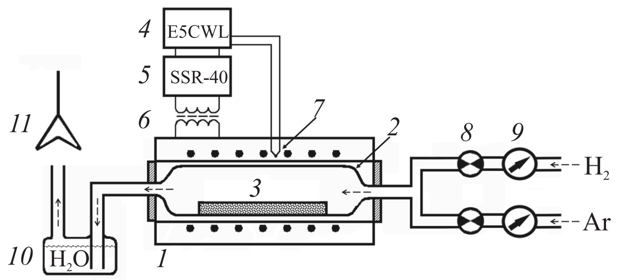

Рис. 1. Схема разработанной экспериментальной установки: *1* – печь сопротивления; *2* – кварцевая трубка; *3* – фарфоровая лодочка с образцом; *4* – терморегулятор Omron EC5WL; *5* – твердотельное реле SSR-40LA; *6* – понижающий трансформатор; *7* – S-термопара; *8* – кран; *9* – манометр; *10* – склянка Дрекселя; *11* – лабораторная вытяжка

печь сопротивления (*1*). На всю длину шахты печи была введена кварцевая трубка (*2*) диаметром $d = 20$ мм. Трубка была герметично соединена с одного края с газовым затвором (склянкой Дрекселя *10*), а с другого края – со стеклянным соединительным тройником. Два других конца тройника через краны (*8*) и манометры (*9*) были подключены, соответственно, к баллону с аргоном (ОСЧ, ГОСТ 10157-62) и к генератору водорода Хроматек 10-400. Газ подавался от начала нагрева и до полного остывания печи с постоянной скоростью ~ 0.2 л/мин. Перед отжигом в протоке водорода система продувалась аргоном в течение 15 мин. Отработанный газ удалялся из помещения за счет принудительного приточно-вытяжного вентилирования (*11*).

Использованные в работе кристаллы $FeBO_3$ были синтезированы методом из раствора в расплаве по методике, развитой в работе [13]. С целью достижения наилучшего контакта со средой отжига кристаллы перетирались в агатовой ступке до получения мелкодисперсного (50–100 мкм) состояния. Около 20 мг кристаллов распределялось слоем толщиной 1.0–1.5 мм в сапфировой кювете, которая помещалась в фарфоровую лодочку (*3*) и затем в печь.

Температура контролировалась с помощью цифрового регулятора Omron EC5WL, который обеспечивал управление печью посредством твердотельного реле SSR-40LA (*5*) и понижающего трансформатора (*6*). Спай управляющей термопары типа S (*7*) находился вблизи нагревательного элемента. При программировании режимов отжига учитывался температурный градиент в шахте печи, вносимый кварцевой трубкой. Скорость нагрева составляла 25 °C/мин, время изотермического выдерживания – 4 ч.

Морфология поверхности образцов и их химический состав исследовались путем сканирования растровым электронным микроскопом (РЭМ) FEI Quanta 200 3D с приставкой для энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС) EDAX Genesis (ускоряющее напряжение 20 кВ). Для отведения заряда образцы фиксировались на предметном столике микроскопа с помощью проводящей клейкой ленты на основе графита.

Рентгеновский фазовый анализ (РФА) выполнен с помощью дифрактометра Rigaku MiniFlex 600. Количественное соотношение фаз вычислено методом Ритвельда.

3. Результаты экспериментов и их обсуждения. В результате отжига бората железа при 800 и 1000 °C на воздухе, в протоке аргона, а также водорода (окислительная, нейтральная и восстановительная атмосфера соответственно [23]) получена серия экспериментальных образцов. Как отмечалось выше, эксперименты по отжигу кристаллов $FeBO_3$ в воздушной среде уже выполнялись в предыдущих работах [21, 22]. Однако для корректной оценки соотношения фаз в образцах требовалось соблюсти идентичные экспериментальные условия.

После отжига при 800 °C мелкодисперсные образцы $FeBO_3$ приобрели в атмосфере воздуха и аргона бурый цвет, в атмосфере водорода – черный. Образцы $FeBO_3$, отожженные при 1000 °C, плотно "спекались" между собой и имели "металлический" темный цвет, независимо от среды отжига.

На рисунке 2 приведены результаты РЭМ-сканирования поверхности образцов. Изначально образцы $FeBO_3$ содержали зерна со сравнительно гладкой поверхностью (рис. 2a). После отжига на воздухе и в протоке аргона при 800 °C зерна сохраняли видимую целостность, однако их поверхность была покрыта множественными кристаллитами произвольной формы (рис. 2b, c). Зерна образцов, отожженных при 800 °C в протоке водорода, представляли собой оплавленную пористую структуру (рис. 2d), которая состояла из отдельных включений с характерным размером порядка 5 мкм. Можно сделать вывод, что структурные изменения наиболее выражены при от-

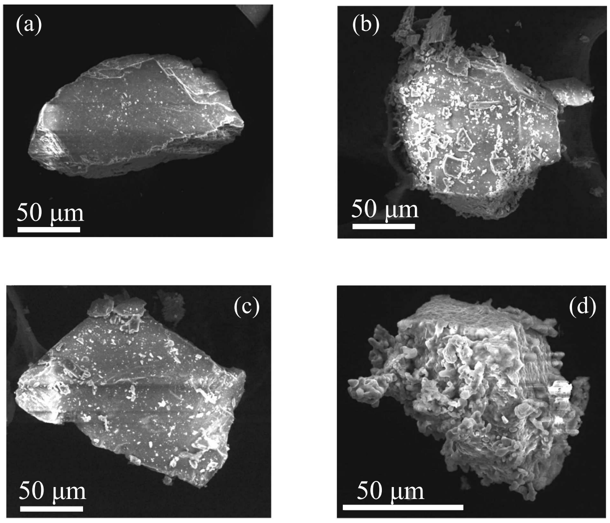

Рис. 2. Изображения растровой электронной микроскопии. Поверхность кристаллов $FeBO_3$ до отжига (a), а также отожженных при 800 °C в атмосфере воздуха (b), аргона (c) и водорода (d)

жиге кристаллов в протоке водорода, значительно менее выражены при отжиге на воздухе, и совсем незначительны при отжиге в протоке аргона.

Рентгено-дифракционными исследованиями подтверждается, что исходные кристаллы бората железа не содержали побочных кристаллических фаз (см. рис. 3a). Методом РФА установлено, что в образце $FeBO_3$, отожженном на воздухе при температуре 800 °C, помимо фазы $FeBO_3$, содержится также фаза гематита α-Fe_2O_3 (пр. гр. $R\bar{3}c$ [24, 25]), ее концентрация составляет 13.5(6) масс. % (см. рис. 3b). Отжиг в воздушной среде при 1000 °C ведет к полной перекристаллизации $FeBO_3$ в гематит (см. рис. 3c). Также появляются рефлексы с $2\theta = 14.57°$ и $27.84°$, которые, как мы полагаем, связаны с кубической модификацией оксида бора B_2O_3 [26]. Этот результат в полной мере подтверждает ранее полученные данные по отжигу на воздухе [19–22].

На рисунке 3d показана дифрактограмма образцов $FeBO_3$, отожженных в протоке аргона при 800 °C. Появление новых рефлексов свидетельствует о присутствии фазы гематита α-Fe_2O_3, как это наблюдалось при отжиге на воздухе. Однако объем фазы гематита в этом случае составляет 9.9(7) масс. %, что заметно меньше, чем в образце, отожженном на воздухе при аналогичной температуре. Это позволяет заключить, что в случае отжига в протоке аргона структурные трансформации в кристаллах $FeBO_3$ менее выражены, чем при отжиге на воздухе. Это хорошо согласуется с данными РЭМ (см. рис. 2b, c).

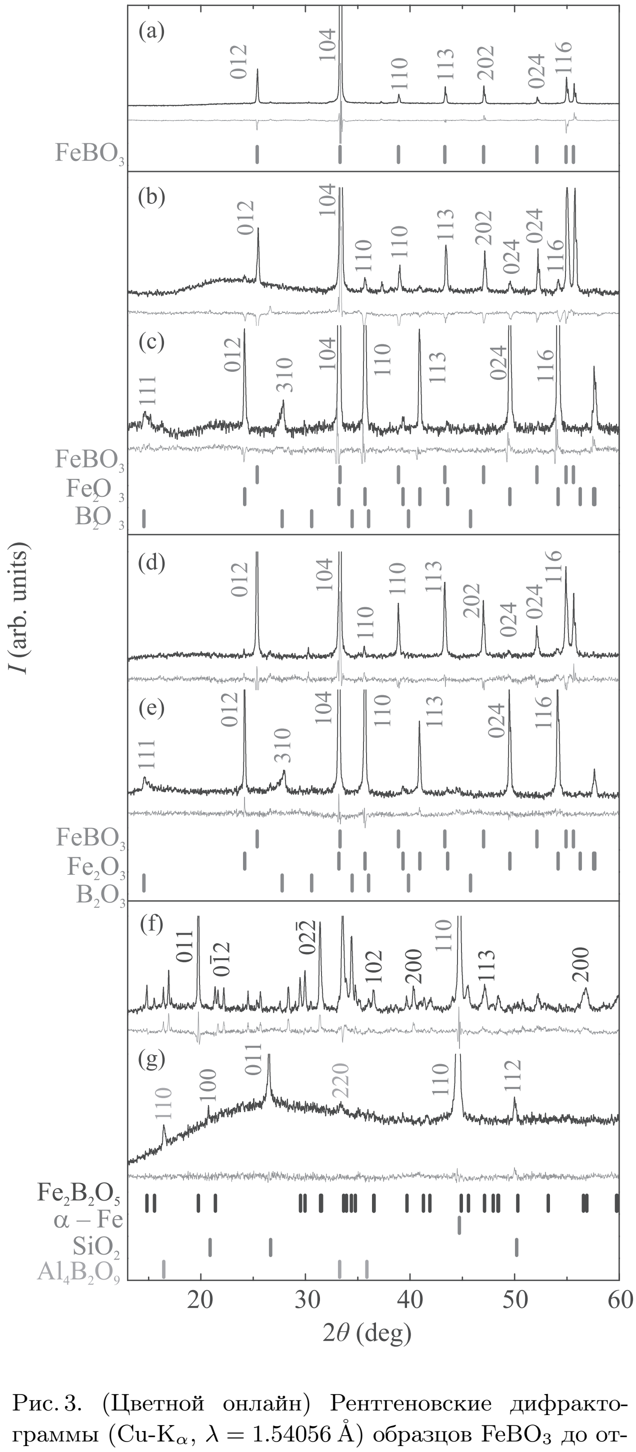

Рис. 3. (Цветной онлайн) Рентгеновские дифрактограммы (Cu-K$_\alpha$, $\lambda = 1.54056$ Å) образцов $FeBO_3$ до отжига (a), а также отожженных при 800 и 1000 °C в атмосфере воздуха (b), (c), аргона (d), (e) и водорода (f), (g). Темные линии – экспериментальные кривые, их интенсивности ограничены 30 % от наиболее яркого отражения на конкретной дифрактограмме. Светлыми линиями показана разность между экспериментальными кривыми и профилем, рассчитанным по методу Ритвельда

В образцах бората железа, отожженных в протоке аргона при 1000 °C преобладает фаза α-Fe_2O_3, а также содержатся следовые концентрации фазы B_2O_3 (см. рис. 3e).

После отжига при 800 °C в протоке водорода исходной фазы $FeBO_3$ в исследованных образцах не обнаружено (см. рис. 3f). Преобладающей является фаза $Fe_2B_2O_5$ (80.4(9) масс. %) [27, 28]. Пироборат $Fe_2B_2O_5$ является изоструктурным минералу суаниту ($Mg_2B_2O_5$, пр. гр. $P\bar{1}$), в котором ионы железа находятся в двухвалентном состоянии [27, 28] в отличие от $FeBO_3$, где железо трехвалентно. Кроме того, в этом образце обнаружена фаза металлического железа α-Fe (пр. гр. $Im3m$ [29]), концентрация которой составляет 19.6(4) масс. %.

На рентгеновской дифрактограмме образцов $FeBO_3$, отожженных в протоке водорода при 1000 °C (см. рис. 3g), наиболее интенсивные отражения связаны с фазой α-Fe. Кроме того, расчет индекса кристалличности показал наличие в этом образце неидентифицируемой РФА аморфной составляющей в количестве около 42 масс. %. Отметим, что по результатам ЭДС-исследования установлено наличие примесей Al и Si (см. рис. 4) (появление в ЭДС-спектре линии углерода (E = 0.28 кэВ) связано с методикой крепления образца при исследовании). В этой связи, рефлексы с $2\Theta = 20.88°$, $26.66°$, $50.15°$ и $2\Theta = 16.61°$, $33.53°$ на рентгеновской дифрактограмме (см. рис. 3g) мы интерпретируем как связанные с фазами SiO_2 [30] и $Al_4B_2O_9$ [31]. По-видимому, эти фазы возникли в результате транспортных процессов между исходными кристаллами $FeBO_3$, сапфировой кюветой и оснасткой печи, при высокой температуре в восстановительной атмосфере.

Отметим, что пироборат $Fe_2B_2O_5$ является слабо изученным материалом, который, в то же время, весьма перспективен с точки зрения его практического применения [27, 28]. Синтез этого кристалла до сих пор связан с определенными технологическими трудностями [27, 28]. В настоящей работе показано, что фаза $Fe_2B_2O_5$ в значительном количестве появляется после отжига бората железа при описанных выше условиях. В дальнейшем мы планируем оптимизировать режимы отжига кристаллов $FeBO_3$ для получения наиболее фазово-чистого образца $Fe_2B_2O_5$ и исследовать электронные и магнитные свойства пирobората методами на основе ядерных резонансов.

4. Заключение и выводы. Разработана и изготовлена установка для отжига кристаллических образцов в различных газовых средах. Установлено, что наиболее выраженные изменения морфологии поверхности и фазового состава образцов $FeBO_3$ происходят при отжиге в атмосфере водорода, а наименее выраженные – в атмосфере аргона.

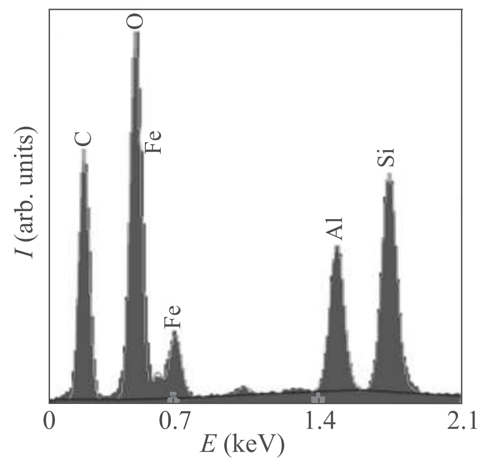

Рис. 4. (Цветной онлайн) Рентгеновский ЭДС-спектр экспериментальных образцов $FeBO_3$, отожженных при 1000 °C в протоке водорода

Отжиг на воздухе или в протоке аргона при 800 °C ведет к частичной, а при 1000 °C – к полной перекристаллизации бората железа в фазу α-Fe_2O_3. Отжиг в протоке водорода ведет к полной трансформации $FeBO_3$ при 800 °C – в фазы $Fe_2B_2O_5$ и α-Fe, а при 1000 °C – в фазу α-Fe и аморфную составляющую.

Полученные результаты будут использованы для отработки технологических режимов отжига кристаллов бората железа.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект # 19-29-12016-мк, в части разработки экспериментальной установки и получения кристаллических образцов.

РФА- и РЭМ-измерения проведены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию Федерального научно-исследовательского центра “Кристаллография и фотоника” с использованием оборудования центра коллективного пользования (проект RFMEFI62119X0035).

1. R. Diehl, W. Jantz, B. I. Nolang, and W. Wettling, Current Topics in Material Science **11**, 241 (1984).
2. I. A. Troyan, A. G. Gavrilyuk, V. A. Sarkisyan, I. S. Lyubutin, R. Rüffer, O. Leupold, A. Barla, B. Doyle, and A. I. Chumakov, JETP Lett. **1**, 24 (2001).

3. A. G. Gavriliuk, I. A. Trojan, R. Boehler, M. Eremets, A. Zerr, I. S. Lyubutin, and V. A. Sarkisyan, JETP Lett. **75**, 23 (2002).
4. V. A. Sarkissyan, I. A. Trojan, I. S. Lyubutin, A. G. Gavriliuk, and A. F. Kashuba, JETP Lett. **76**, 664 (2002).
5. I. A. Trojan, M. I. Eremets, A. G. Gavriliuk, I. S. Lyubutin, and V. A. Sarkissyan, JETP Lett. **78**, 13 (2003).
6. A. G. Gavriliuk, S. A. Kharlamova, I. S. Lyubutin, S. G. Ovchinnikov, A. M. Potseluyko, I. A. Trojan, and V. N. Zabluda, J. Phys.: Condens. Matter **48**, 7599 (2005).
7. M. B. Strugatsky, K. M. Skibinsky, V. V. Tarakanov, and V. I. Khizhny, Funct. Mater. **9**, 6 (2002).
8. E. A. Mashkovich, K. A. Grishunin, R. V. Mikhaylovskiy, A. K. Zvezdin, R. V. Pisarev, M. B. Strugatsky, P. C. M. Christianen, Th. Rasing, and A. V. Kimel, Phys. Rev. Lett. **123**, 157202 (2019).
9. R. Wolfe, A. J. Kurtzig, and R. C. LeCraw, J. Appl. Phys. **41**, 1218 (1970).
10. S. Shang, Y. Wang, Z. K. Liu, C. E. Yang, and S. Yin, Appl. Phys. Lett. **91**, 253115 (2007).
11. J. L. C. Rowsell, J. Gaubicher, and L. F. Nazar, J. Power Sources **97**, 254 (2001).
12. V. Potapkin, A. I. Chumakov, G. V. Smirnov, J. P. Celse, R. Rüffer, C. McCammon, and L. Dubrovinsky, J. Synchrotron Radiat. **19**, 559 (2012).
13. S. Yagupov, M. Strugatsky, K. Seleznyova, Yu. Mogilenec, N. Snegirev, N. Marchenkov, A. Kulikov, Ya. Eliovich, K. Frolov, Yu. Ogarkova, and I. Lyubutin, Cryst. Growth Des. **18**, 7435 (2018).
14. N. Snegirev, Yu. Mogilenec, K. Seleznyova, I. Nauhatsky, M. Strugatsky, S. Yagupov, A. Kulikov, D. Zolotov, N. Marchenkov, K. Frolov, and I. Lyubutin, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering **525**, 012048 (2019).
15. V. R. Galakhov, S. N. Shamin, and V. V. Mesilov, JETP Lett. **107**, 583 (2018).
16. E. N. Ovchinnikova, V. E. Dmitrienko, K. A. Kozlovskaya, and A. Rogalev, JETP Lett. **110**, 568 (2019).
17. A. O. Baskakov, Yu. L. Ogarkova, I. S. Lyubutin, S. S. Starchikov, V. Ksenofontov, S. I. Shylin, D. Kroitor, V. Tsurkan, S. A. Medvedev, and P. G. Naumov, JETP Lett. **109**, 536 (2019).
18. Yu. V. Knyazev, A. I. Chumakov, A. A. Dubrovskia, S. V. Semenov, S. S. Yakushkin, V. L. Kirillov, O. N. Martyanov, and D. A. Balaev, JETP Lett. **110**, 613 (2019).
19. J. C. Joubert, T. Shirk, W. B. White, and R. Roy, Materials Research Bulletin **3**, 671 (1968).
20. Р. И. Зверева, Е. Л. Духовская, Ю. Л. Сапожников, Известия АН СССР **11**, 282 (1975).
21. S. V. Yagupov, N. I. Snegirev, K. A. Seleznyova, E. T. Milyukova, Yu. A. Mogilenec, Yu. V. Ermolaev, and M. B. Strugatsky, Technical Physics **64**, 1161 (2019).
22. N. I. Snegirev, I. S. Lyubutin, A. G. Kulikov, S. V. Yagupov, K. A. Seleznyova, Yu. A. Mogilenec, and M. B. Strugatsky, Crystallography Reports **65**, 596 (2020).
23. S. I. Pechenyuk, D. P. Domonov, A. N. Gosteva, Yu. P. Semushina, and A. A. Shimkin, Izv. Vys. Uchebnykh Zaved. **61**, 49 (2018).
24. E. N. Maslen, V. A. Streltsov, N. R. Streltsova, and N. Ishizawa, Acta. Cryst. B **50**, 435 (1994).
25. A. G. Gavriliuk, V. V. Struzhkin, A. A. Mironovich, I. S. Lyubutin, I. A. Troyana, P. Chowe, and Y. Xiao, JETP Lett. **107**, 247 (2018).
26. H. F. Rizzo, Boron Synthesis, Structure, and Properties **1**, 175 (1960).
27. T. Kawano, H. Morito, T. Yamada, T. Onuma, S. F. Chichibu, and H. Yamane, J. Solid State Chem. **182**, 2004 (2009).
28. S. C. Neumair and H. Huppertz, Z. Naturforsch. B **64**, 491 (2009).
29. H. E. Swanson, *Standard X-ray diffraction powder patterns*, National Bureau of Standards, Washington, D.C., USA (1953).
30. A. Kern and W. Eysel, *Mineralogisch-Petrograph. Inst.*, Univ. Heidelberg, Heidelberg, Germanny (1993).
31. D. Mazza, M. Vallino, and G. Busca, J. Am. Ceram. Soc. **75**, 1929 (1992).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 379 – 386 © 2020 г. 25 сентября

Наномасштабные тепловые эффекты второго порядка в мемристивных структурах на основе поли-n-ксилилена

А. Н. Мацукатова[+*1)], А. В. Емельянов[+×], А. А. Миннеханов[+], В. А. Демин[+], В. В. Рыльков[+∘], П. А. Форш[+×], П. К. Кашкаров[+*×∇]

[+]Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123098 Москва, Россия

[*]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

[×]Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

[∘]Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 141190 Фрязино, Россия

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

Поступила в редакцию 18 августа 2020 г.
После переработки 18 августа 2020 г.
Принята к публикации 27 августа 2020 г.

Впервые обнаружены эффекты резистивного переключения второго порядка в мемристорах на основе поли-n-ксилилена. Показано, что данные мемристивные структуры представляют собой динамическую систему, поведение которой существенно зависит от кратковременных эффектов второго порядка. А именно, при подаче парных импульсов (необязательно одной полярности) с определенной задержкой наблюдается уменьшение времени переключения мемристивных структур. Эффекты второго порядка объяснены увеличением локальной температуры металлического проводящего мостика вследствие джоулева нагрева. Разработана численная трехмерная динамическая модель, основанная на учете дрейфа-диффузии ионов металла в полимерной матрице, экспериментально наблюдаемые эффекты подтверждены в рамках данной модели. Полученные результаты демонстрируют возможность использования обнаруженных эффектов при построении нейроморфных вычислительных систем.

DOI: 10.31857/S123456782018007X

В последнее время проявляется повышенный интерес к исследованию взаимосвязанных сильно неравновесных процессов теплового, электронного и ионного транспорта на нанометровых масштабах, которые наблюдаются при резистивном переключении (РП) так называемых мемристивных структур, изменяющих под действием электрических импульсов свое сопротивление в некотором окне между высокоомным ($R_{\rm OFF}$) и низкоомным ($R_{\rm ON}$) состояниями [1]. Эти структуры (мемристоры) обладают чрезвычайно низким энергопотреблением и весьма привлекательны для использования при построении нейроморфных вычислительных систем (НВС) с целью решения различного рода когнитивных задач (распознавание изображений, текста и речи, принятие решений и т.д.), в которых мемристоры способны эффективно эмулировать синапсы, т.е. весовые коэффициенты связей между нейронами [2–5].

Мемристор представляет собой слоистую структуру типа "металл–диэлектрик–металл" (МДМ), в которой РП происходит в объеме диэлектрика или на его контакте с металлом [3]. РП в большинстве оксидных МДМ устройств происходит вследствие электромиграции вакансий кислорода в оксидах с последующим образованием (разрывом) проводящих филаментов (механизм изменения валентности, или VCM – *valence change mechanism*) или вследствие роста (разрушения) металлических мостиков, обусловленного миграцией катионов металла в диэлектрической матрице (механизм электрохимической металлизации, или ECM – *electrochemical metallization*) [2, 6]. При этом РП по ECM механизму можно описать в рамках модели, основанной на изменении одной переменной состояния w – размера (длины или диаметра) проводящего металлического мостика [6]. Эта переменная называется переменной состояния 1-го порядка, а мемристоры, функционирующие в рамках описанной модели, – мемристорами 1-го порядка. Однако недавно были описаны и более сложные устройства – так называемые мемристоры 2-го по-

1)e-mail: an.matcukatova@physics.msu.ru

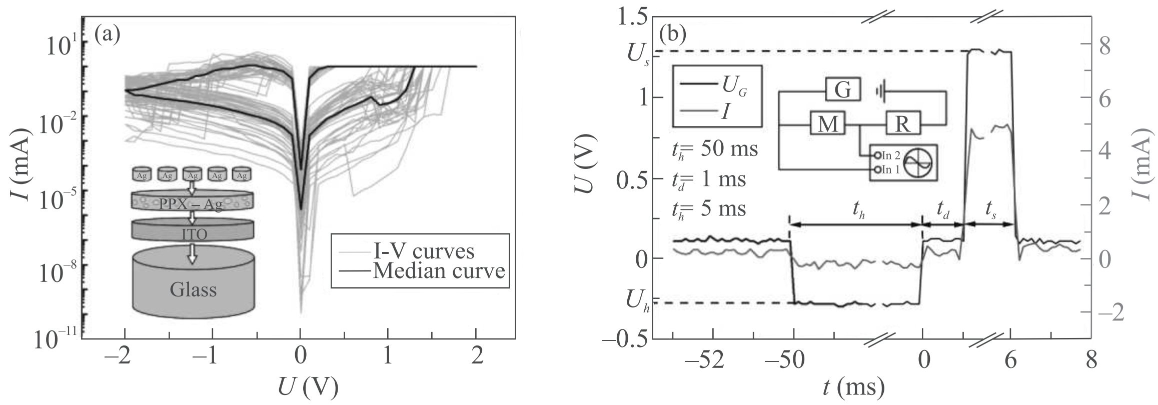

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – ВАХ мемристивной структуры Ag/PPX-Ag/ITO. На вставке: схематичное изображение данной структуры. (b) – Пример зависимости напряжения (левая шкала) на первом входе осциллографа и силы тока (правая шкала) через нагрузочное сопротивление от времени в эксперименте по изучению эффектов 2-го порядка при РП из состояния $R_{\rm OFF}$ в $R_{\rm ON}$. На мемристор последовательно подаются разогревающий импульс длительностью t_h и амплитудой U_h и переключающий импульс длительностью t_s и амплитудой U_s, с задержкой между ними длительностью t_d. На вставке: схема эксперимента для изучения эффектов РП 2-го порядка, где G – генератор, M – мемристор, R – нагрузочное сопротивление, In1 и In2 – входы осциллографа

рядка [7], в которых дополнительная переменная состояния (2-го порядка), не определяя сопротивление напрямую, влияет на динамику изменения w в процессе электрической стимуляции и некоторое время после нее. Так, для механизма ECM за переменную 2-го порядка можно принять температуру проводящего мостика [8]. Тогда изменение резистивного состояния мемристора при приложении некоторого импульса напряжения может зависеть от степени разогрева мостика предыдущими импульсами, причем не только от амплитуды и длительности поступающих на систему импульсов, но и от их частоты. Такая модель лучше описывает свойства биологических синапсов, так как проницаемость межнейронных контактов (синаптическая эффективность) контролируется переменной 2-го порядка, а именно – постсинаптической концентрацией ионов кальция [7]. Поэтому переменная 2-го порядка является важным фактором в описании динамических процессов биоподобных нейронных сетей.

Одним из наиболее перспективных органических материалов для создания мемристоров является поли-*п*-ксилилен (парилен, или PPX – *poly-p-xylylene*) – доступный и легкий в производстве полимер, полностью безопасный для человека и животных [9]. Мемристоры на основе PPX демонстрируют эффекты квантования проводимости при РП по механизму ECM, т.е. диаметр образующегося филамента находится на нанометровых масштабах [10]. Кроме этого, они обладают характеристиками, приемлемыми для создания НВС (многоуровневое РП (≥ 16 состояний) при отношении $R_{\rm OFF}/R_{\rm ON} > 10^3$, время хранения резистивных состояний более 10^4 с) [11]; способны изменять свое состояние по механизму пластичности, зависящей от времени прихода импульсов (*spike-timing-dependent plasticity*, или STDP) [11, 12]. При этом вариабельность РП мемристоров на основе PPX может быть снижена путем внедрения в слой PPX металлических наночастиц, например, серебра (PPX-Ag) [13]. Однако в подобных структурах до сих пор не были изучены мемристивные эффекты 2-го порядка, исследование которых могло бы пролить свет на особенности физико-химических процессов при РП PPX-мемристоров, что необходимо для построения динамической модели РП.

В работе изучались два типа мемристивных МДМ структур – на основе слоев PPX-Ag (структуры Ag/PPX-Ag/ITO) и чистого PPX (Cu/PPX/ITO) толщиной 100 нм, которые осаждались на стеклянную подложку, покрытую проводящим слоем оксида индия-олова (ITO), выступающего в роли нижнего электрода (вставка к рис. 1a). Верхние металлические электроды (500 нм) были получены осаждением Ag или Cu через теневую маску с размером отверстий 0.2×0.5 мм^2 (см. детали в [10, 13]).

Мемристивные характеристики структур исследовались с использованием аналитической зондовой станции Cascade Microtech PM5. Импульсы напряжения подавались на верхний электрод структуры (при заземленном нижнем электроде) от источника-

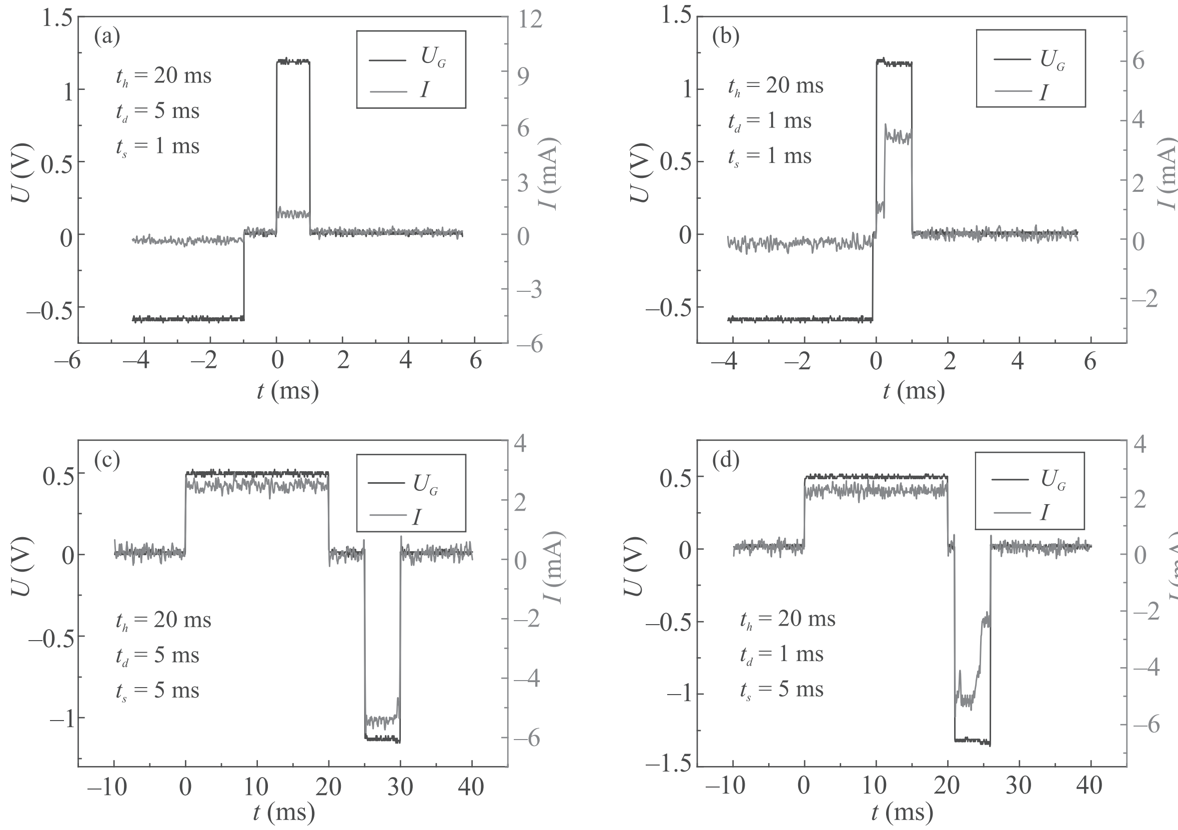

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости напряжения на верхнем электроде мемристивной структуры Cu/PPX/ITO (левая шкала) и тока через нее (правая шкала) от времени в эксперименте по изучению эффектов 2-го порядка. (a), (b) – РП из состояния $R_{\rm OFF}$ в $R_{\rm ON}$, $U_h = -0.6$ В, $U_s = 1.2$ В; (c), (d) – РП из состояния $R_{\rm ON}$ в $R_{\rm OFF}$, $U_h = 0.5$ В, $U_s = -1.3$ В; длительности импульсов указаны на графиках

измерителя National Instruments PXIe-4140. При измерениях вольт-амперных характеристик (ВАХ) устанавливалось ограничение по току на уровне +1 мА и −50 мА для предотвращения теплового разрушения мемристоров. Для изучения эффектов РП 2-го порядка на верхний электрод мемристоров подавались импульсы напряжения от генератора Keysight 81150A (вставка к рис. 1b). Контроль изменения сопротивления структуры осуществлялся по падению напряжения на последовательно подключенном к ней нагрузочном сопротивлении $R = 50$ Ом. Сигналы от генератора и нагрузочного сопротивления регистрировались 2-х канальным осциллографом Agilent Technologies DSO8104A с входным сопротивлением 50 Ом. Эксперименты проводились при комнатной температуре с использованием программной среды LabView.

На рисунке 1a в полулогарифмическом масштабе представлены ВАХ четырех образцов Ag/PPX-Ag/ITO (10 последовательных переключений для каждого) и их медианная кривая. Данная зависимость характерна для мемристоров с биполярным РП: мемристор, первоначально находящийся в состоянии $R_{\rm OFF}$, переходит в состояние $R_{\rm ON}$ при приложении напряжения $U_{\rm set}$, а затем обратно в состояние $R_{\rm OFF}$ при приложении отрицательного напряжения $U_{\rm reset}$. Стоит отметить, что в силу стохастической природы РП напряжения переключения $U_{\rm set}$ и $U_{\rm reset}$ варьируются от цикла к циклу и от образца к образцу. Ранее нами было установлено, что РП обеих структур, Ag/PPX-Ag/ITO и Cu/PPX/ITO, происходит по механизму ECM [10, 13]. При приложении положительного напряжения к верхнему электроду катионы металлов из него мигрируют через слой PPX к нижнему электроду, что приводит к образованию проводящего мостика между двумя электродами и к переключению структуры в состояние $R_{\rm ON}$. При приложении отрицательного напряжения $U \leq U_{\rm reset}$ к верхнему электроду мостик разрушается из-за эффектов термоэлектромиграции [14], и структура переключается в состояние $R_{\rm OFF}$. Отличительная особенность механизма переключения структу-

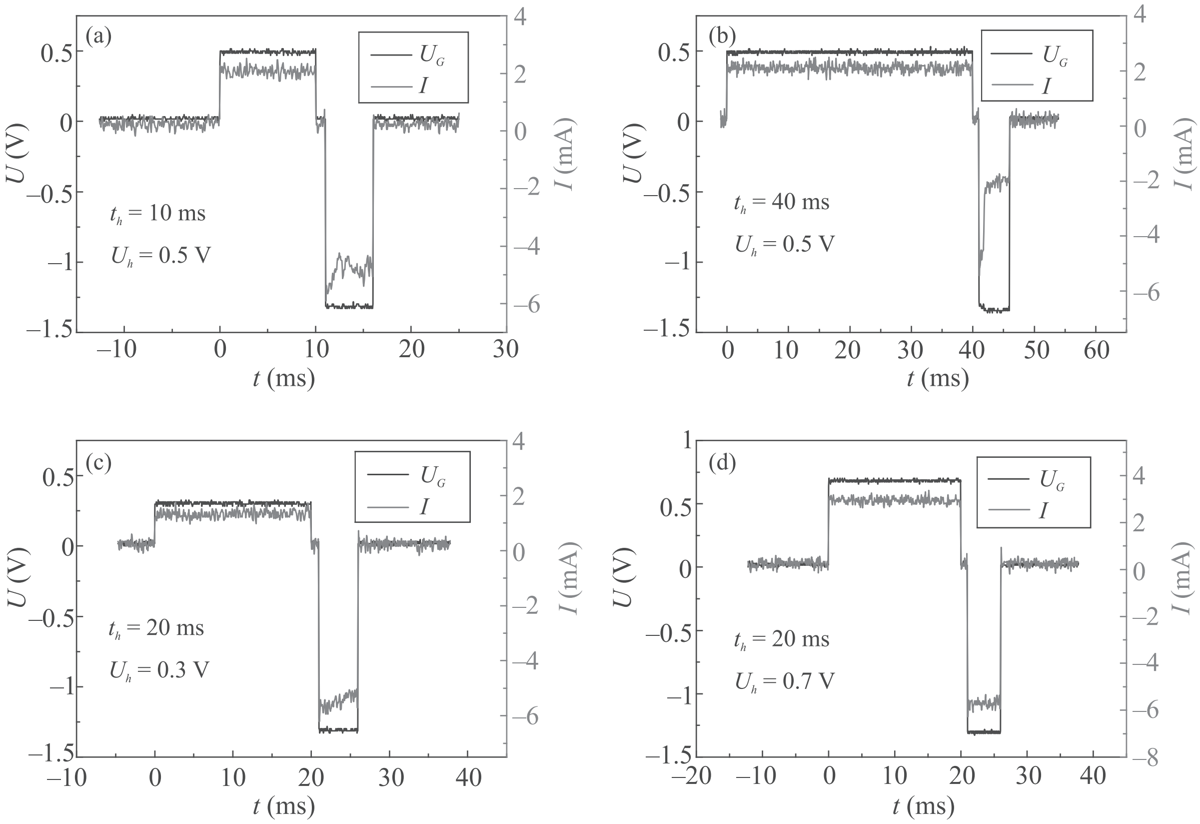

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости напряжения на верхнем электроде мемристивной структуры Cu/PPX/ITO (левая шкала) и тока через нее (правая шкала) от времени в эксперименте по изучению эффектов 2-го порядка РП из состояния $R_{\rm OFF}$ в $R_{\rm ON}$. Используемые параметры: $t_d = 1$ мс, $t_s = 5$ мс, $U_s = -1.3$ В; остальные параметры импульсов указаны на графиках

ры Ag/PPX-Ag/ITO заключается в том, что перколяционные цепочки, формируемые металлическими наночастицами Ag в слое PPX, концентрируют электрическое поле и задают направление образования проводящего мостика. Поэтому данные структуры демонстрируют большую стабильность РП и меньшие значения $U_{\rm set}$ ($U_{\rm reset}$) в сравнении со структурами Ag/PPX/ITO и Cu/PPX/ITO [11]. Для исследования эффектов второго порядка критически важной становится стабильность мемристивных структур и малый разброс значений $U_{\rm set}$ и $U_{\rm reset}$, поэтому для данной работы были выбраны мемристоры на основе PPX с медными верхними электродами [11].

Для изучения эффектов 2-го порядка при РП мемристоров на них подавались парные импульсы: разогревающий импульс большой длительности t_h амплитудой U_h и переключающий импульс малой длительности t_s, но с большей по величине амплитудой U_s, задержка между импульсами t_d варьировалась. Полярности разогревающего и переключающего импульсов были противоположными для исключения возможных эффектов 1-го порядка при воздействии разогревающих импульсов. Амплитуда U_s и длительность t_s переключающего импульса были подобраны таким образом, чтобы сам по себе переключающий импульс не переводил мемристор из одного состояния в другое. На рисунке 1b представлены парные импульсы, использованные для переключения мемристора из состояния $R_{\rm OFF}$ в состояние $R_{\rm ON}$, для обратного переключения использовались подобные импульсы обратных полярностей.

Эффекты РП 2-го порядка были обнаружены как в структуре Cu/PPX/ITO (рис. 2), так и в Ag/PPX-Ag/ITO (пример полученной зависимости представлен на рис. 1b). Схема эксперимента была следующей: изначально мемристивная структура переводилась в определенное состояние ($R_{\rm OFF}$ или $R_{\rm ON}$), и измерялось ее сопротивление при напряжении чтения (0.1 В), далее следовали разогревающий и переключающий импульсы с определенной задержкой t_d, после чего измерялось конечное сопротивление структуры. При достаточно больших временах задержки

$t_d \geq 5$ мс мемристор остается в состоянии $R_{\rm OFF}$ после переключающего импульса (рис. 2a), однако при $t_d \leq 1$ мс переключающий импульс переводит мемристор в состояние $R_{\rm ON}$ (рис. 2b). Полученные результаты можно объяснить достаточно быстрым спадом локальной температуры проводящего мостика T_l после приложения к структуре разогревающего импульса: при $t_d \geq 5$ мс температура успевает вернуться практически к первоначальному значению и второй импульс не переключает мемристор. С другой стороны, при $t_d \leq 1$ мс температура T_l не успевает опуститься до первоначального состояния, что способствует диффузии атомов металла и образованию проводящего мостика переключающим импульсом. Аналогичное поведение наблюдается при переключении мемристора из состояния $R_{\rm ON}$ в $R_{\rm OFF}$ парными импульсами обратных полярностей (рис. 2c, d). Таким образом, можно сделать вывод о влиянии разогрева током на последующее РП изучаемых структур при достаточно малых t_d вне зависимости от полярности разогревающего импульса.

Кроме того, для более детального изучения эффектов 2-го порядка было проведено исследование влияния параметров разогревающего импульса на последующее РП структуры Cu/PPX/ITO из состояния $R_{\rm ON}$ в $R_{\rm OFF}$ при постоянной задержке $t_d = 1$ мс (рис. 3). При длительности разогревающего импульса $t_h < 20$ мс парные импульсы не изменяют состояние мемристора (рис. 3a). Однако при $t_h \geq 20$ мс переключающий импульс переводит мемристор в состояние $R_{\rm OFF}$ (рис. 2d и 3b), т.е. разогревающий импульс должен быть достаточной длительности для влияния на последующее РП. Далее исследовалось влияние амплитуды разогревающего импульса U_h при его постоянной длительности $t_h = 20$ мс. При $U_h = 0.4{-}0.6$ В (рис. 2d) переключающий импульс изменял состояние мемристора, в то время как при $U_h < 0.4$ В и $U_h > 0.6$ В РП не наблюдались (рис. 3c, d). Это может быть связано с тем, что для фиксированной длительности t_h и при $U_h < 0.4$ В разогрев мемристивной структуры оказывается недостаточным, а импульс амплитудой $U_h > 0.6$ В закрепляет мемристор в проводящем состоянии. Таким образом, для проявления эффектов 2-го порядка необходимо тщательно подбирать параметры разогревающего импульса.

Также были проведены эксперименты по обнаружению эффектов 2-го порядка при подаче пакета переключающих импульсов на структуру Cu/PPX/ITO: после одного длительного разогревающего импульса подавалась последовательность из 10 коротких переключающих импульсов с постоянной задержкой между ними (схематичное изображение подаваемых импульсов представлено на вставке к рис. 4, параметры подаваемых импуль-

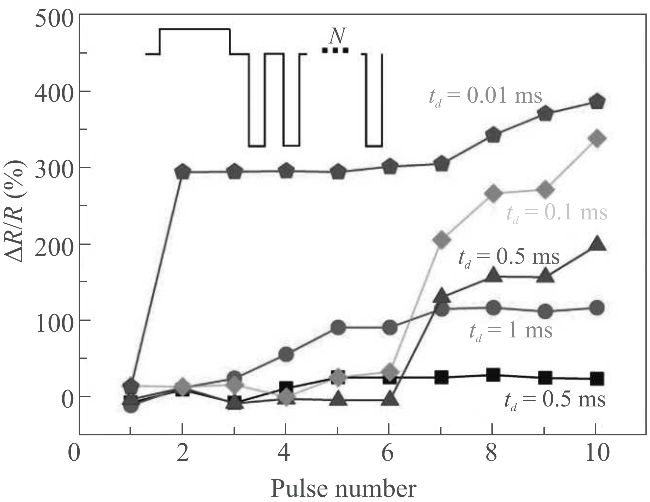

Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость отношения изменения сопротивления мемристора Cu/PPX/ITO к его первоначальному сопротивлению от номера переключающего импульса при переключении из состояния $R_{\rm ON}$ в $R_{\rm OFF}$ для различных t_d, их значения указаны на графиках. На вставке: схематичное изображение подаваемых на структуру импульсов. После разогревающего импульса длительностью $t_h = 20$ мс и амплитудой $U_h = 0.4$ В с задержкой t_d на структуру подавалось $N = 10$ переключающих импульсов длительностью $t_s = 1$ мс и амплитудой $U_s = -1.2$ В с задержкой между ними длительностью t_d

сов приведены в описании к рисунку). Изменение сопротивления мемристивной структуры при подаче такой последовательности импульсов зависит от задержки между импульсами t_d (рис. 4): для $t_d \geq 1$ мс переключение происходит постепенно, а для $t_d \leq 0.5$ мс РП происходит тем резче и быстрее, чем меньше t_d, что также является проявлением эффектов 2-го порядка.

Описанное выше увеличение скорости РП при уменьшении задержек между импульсами в экспериментах с парными импульсами и с пакетом импульсов можно объяснить временным увеличением температуры T_l при достаточно малых длительностях задержек между импульсами, что приводит к экспоненциально сильному росту коэффициента диффузии ионов Ag и Cu (по закону Аррениуса) и ускоряет образование или разрыв проводящего мостика в мемристивных структурах [15].

Для описания подобного поведения была построена численная электротермическая модель, основан-

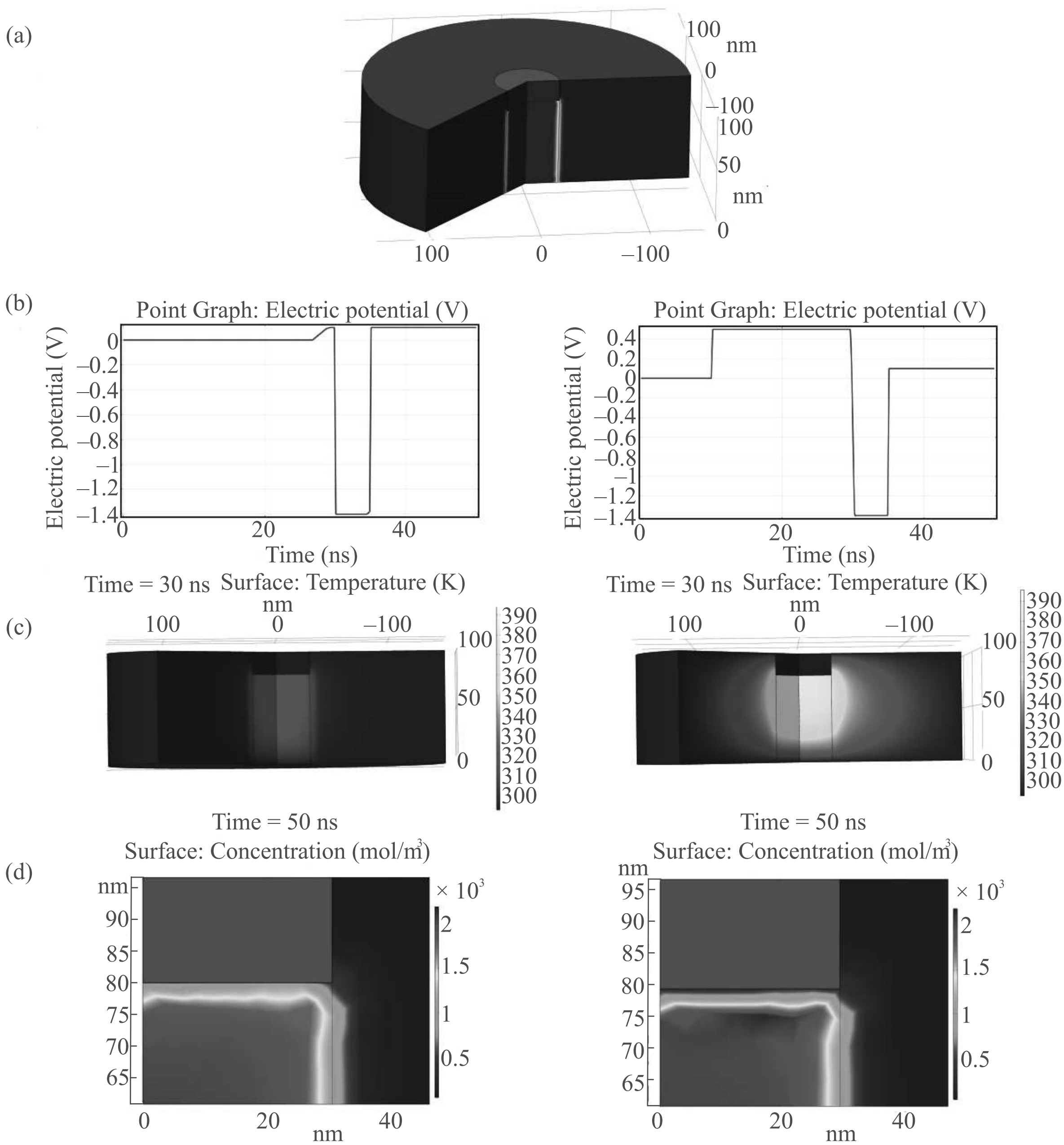

Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Смоделированный образец. Синим цветом обозначен слой PPX, красным – проводящий мостик с ионами меди. (b) – Подаваемые на образец импульсы напряжения. (c) – Температура образца в начале действия переключающего импульса. (d) – Концентрация ионов меди через некоторое время после окончания действия переключающего импульса

ная на учете дрейфа-диффузии ионов меди в матрице PPX. На рисунке 5a представлена смоделированная мемристивная структура в аксиально симметричной геометрии. Образец состоял из 100 нм слоя PPX и двух бесконечно тонких идеальных электродов по обе его стороны. Кроме того, изначально в центре образца помещался тонкий мостик радиуса 30 нм, обогащенный ионами Cu, который соединял два электрода, т.е. образец находился в состоянии R_{ON}. В части мостика, ближайшей к верхнему электроду, толщиной 20 нм концентрация меди задавалась постоянной [16]. На данную структуру подавались импульсы напряжения (рис. 5b): одиночный импульс (-1.4 В) и парные импульсы (разогревающий

0.5 В и переключающий −1.4 В). Состояние мемристора рассчитывалось решением уравнения непрерывности для расчета электронной проводимости образца, уравнения Фурье для расчета джоулева нагрева и уравнения дрейфа-диффузии ионов меди для расчета распределения их концентрации и соответствующего распределения потенциала. Подробнее модель описана в работе [16]. В связи с малой теплоемкостью исследуемого образца в связи с выбранными малыми размерами в рамках данной модели установление теплового равновесия происходило намного быстрее дрейфа-диффузии ионов, поэтому для решения нестационарного уравнения теплопроводности потребовались меньшие характерные времена импульсов в сравнении с экспериментальными данными [17]. Все длительности импульсов были уменьшены без нарушения соотношения между ними. Таким образом, удалось пронаблюдать изменение тока, температуры и концентрации ионов в процессе переключения мемристора из состояния R_{ON} в состояние R_{OFF}. На рисунке 5 видно, что предварительный нагрев образца приводит к увеличению температуры в начале действия переключающего импульса (рис. 5c) и разрыву проводящего мостика (рис. 5d). При этом изменение сопротивления в результате подачи двух импульсов оказалось на порядок больше, чем в случае отсутствия предварительного нагрева структуры.

В заключение, в данной работе изучены эффекты РП 2-го порядка мемристивных структур Cu/PPX/ITO и Ag/PPX-Ag/ITO, причем как при их переключении парными импульсами, так и пакетом импульсов. Выявлено увеличение скорости РП мемристоров при достаточно малом времени задержки между импульсами (∼ 1 мс) в обоих типах экспериментов. Для эксперимента с парными импульсами показано, что для проявления эффектов 2-го порядка существуют оптимальные амплитуда и длительность разогревающего импульса. Эффекты 2-го порядка объясняются увеличением локальной температуры вследствие джоулева нагрева, что качественно подтверждено численным моделированием, основанным на учете дрейфа-диффузии ионов меди в матрице PPX.

Из приведенных данных пока трудно сделать однозначный вывод о том, какие мемристоры с наночастицами или без наночастиц Ag более предпочтительны для наблюдения эффектов 2-го порядка (ср. данные рис. 1b и рис. 2a, b). Для этого необходимы дополнительные эксперименты по исследованию данных эффектов в зависимости от содержания Ag, которые планируется сделать в дальнейшем.

Наконец отметим, что мемристоры 2-го порядка демонстрируют более биоподобный тип РП и, следовательно, более предпочтительны при построении НВС, чем мемристоры 1-го порядка, поскольку для изменения их синаптического веса (проводимости) важна не только амплитуда, но и частота импульсов. Продемонстрированный диапазон задержек между импульсами, оказывающий влияние на сопротивление PPX-мемристоров (порядка нескольких миллисекунд), гораздо лучше подходит для обучения НВС в реальном времени динамическим корреляциям в практически значимых сценах с макроскопическими объектами, которые тоже лежат в этом временном интервале (в противовес ранее продемонстрированным мемристорам 2-го порядка с наносекундными задержками между импульсами [7]).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (# 20-79-10185) на оборудовании ресурсного центра электрофизических методов (НИЦ “Курчатовский институт”).

А. Н. Мацукатова благодарит за финансовую поддержку Фонд развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант # 19-2-6-57-1).

Авторы выражают благодарность А. А. Несмелову и А. Ю. Вдовиченко за помощь в синтезе мемристивных структур.

1. Z. Shen, C. Zhao, Y. Qi, W. Xu, Y. Liu, I. Z. Mitrovic, L. Yang, and C. Zhao, Nanomaterials **10**, 1437 (2020).
2. F. Merrikh-Bayat, M. Prezioso, B. Chakrabarti, H. Nili, I. Kataeva, and D. B. Strukov, Nat. Commun. **9**, 2331 (2018).
3. D. Ielmini, Semicond. Sci. and Technol. **31**, 063002 (2016).
4. A. V. Emelyanov, K. E. Nikiruy, A. V. Serenko, A. V. Sitnikov, M. Y. Presnyakov, R. B. Rybka, A. G. Sboev, V. V. Rylkov, P. K. Kashkarov, M. V. Kovalchuk, and V. A. Demin, Nanotechnology **31**, 045201 (2020).
5. Y. van De Burgt, A. Melianas, S. T. Keene, G. Malliaras, and A. Salleo, Nature Electronics **1**, 386 (2018).
6. W. Wang, M. Wang, E. Ambrosi, A. Bricalli, M. Laudato, Z. Sun, X. Chen, and D. Ielmini, Nat. Commun. **10**, 81 (2019).
7. S. Kim, C. Du, P. Sheridan, W. Ma, S. Choi, and W. D. Lu, Nano Lett. **15**, 2203 (2015).
8. S. Kim, H. D. Kim, and S. J. Choi, Small **12**, 3320 (2016).
9. Q. Chen, M. Lin, Z. Wang, X. Zhao, Y. Cai, Q. Liu, Y. Fang, Y. Yang, M. He, and R. Huang, Advanced Electronic Materials **5**, 1 (2019).
10. A. A. Minnekhanov, B. S. Shvetsov, M. M. Martyshov, K. E. Nikiruy, E. V. Kukueva, M. Y. Presnyakov,

P. A. Forsh, V. V. Rylkov, V. V. Erokhin, V. A. Demin, and A. V. Emelyanov, Organic Electronics **74**, 89 (2019).

11. A. A. Minnekhanov, A. V. Emelyanov, D. A. Lapkin, K. E. Nikiruy, B. S. Shvetsov, A. A. Nesmelov, V. V. Rylkov, V. A. Demin, and V. V. Erokhin, Sci. Rep. **9**, 10800 (2019).
12. Б. С. Швецов, А. В. Емельянов, А. А. Миннеханов, К. Э. Никируй, А. А. Несмелов, М. Н. Мартышов, В. В. Рыльков, В. А. Демин, РН **14**, 85 (2019).
13. А. Н. Мацукатова, А. В. Емельянов, А. А. Миннеханов, Д. А. Сахарутов, А. Ю. Вдовиченко, Р. А. Камышинский, В. А. Демин, В. В. Рыльков, П. А. Форш, С. Н. Чвалун, П. К. Кашкаров, Письма в ЖТФ **46**, 25 (2020).
14. А. С. Веденеев, В. В. Рыльков, К. С. Напольский, А. П. Леонтьев, А. А. Клименко, А. М. Козлов, Письма в ЖЭТФ **106**, 387 (2017).
15. D. Michel, Physica A **510**, 188 (2018).
16. S. Larentis, F. Nardi, S. Balatti, D. Ielmini, and D. C. Gilmer, *4th IEEE International Memory Workshop* (2012), p. 53.
17. A. Marchewka, B. Roesgen, K. Skaja, H. Du, C. L. Jia, J. Mayer, V. Rana, R. Waser, and S. Menzel, Advanced Electronic Materials **2**, 1500233 (2016).

Pis'ma v ZhETF, vol. 112, iss. 6, pp. 387 – 387

Lead-free semiconductors with high absorption: insight into the optical properties of $K_2GeSnBr_6$ and K_2GeSnI_6 halide double perovskites

M. Houari[+1)], *B. Bouadjemi*[+], *A. Abbad*[+], *T. Lantri*[+], *S. Haid*[+], *W. Benstaali*[+], *M. Matougui*[+], *S. Bentata*[+*]

[+]*Laboratory of Technology and of Solids Properties, Abdel Hamid IbnBadis University, 27000 Mostaganem, Algeria*

[*]*Laboratory of Quantum Physics of Matter and Mathematical Modeling (LPQ3M), Mustapha Stambouli University of Mascara, 29000 Mascara, Algeria*

Submitted 21 August 2020
Resubmitted 26 August 2020
Accepted 26 August 2020

DOI: 10.31857/S1234567820180081

In this study, using the first-principles calculations, we have applied the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method based on density functional theory (DFT) implemented in the code wien2k to study structural, electronic and optical properties of two halide double perovskites: $K_2GeSnBr_6$ and K_2GeSnI_6. The approximations used are generalized gradient approximation (GGA) and for exchange and correlation potential, we have applied a modified version of the potential proposed by Becke–Johnson (mBJ) to our compounds in order to improve the bandgaps and approach them to the experimental results.

Structural properties show that these two compounds are cubic and that they crystallize in the space group (Fm-3m, # 225), they also present a NM phase (non magnetic phase) which has the lowest energy compared to ferromagnetic and antiferromagnetic phases. The study of electronic properties is divided in two parts: the first one is for the band structure. The results show that these two compounds present a semiconductor behavior with direct band gap. The second one is for total and partial density of States. Results presented here confirm the semiconductor behavior observed in the band structure with a high impact of *s*-orbital of Sn and *p*-orbital of Br for valence band, while for conduction band there is a predominance of hybridization between *p*-orbital of Sn and *p*-orbital of metalloids used.

The most important parameter for optical properties is the dielectric function which has real and imaginary parts. The results obtained show that these compounds are suitable for storing sun light due to high values of absorption coefficient and that they are also reflective in optical devices.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364020180010

[1)]e-mail: mohammed_houari73@yahoo.com

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 388 – 393 © 2020 г. 25 сентября

Зеркальные пары орбифолдов квинтики

А. Белавин[+×○1)], *Б. Еремин*[+*×○]

[+]*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, 142432 Черноголовка, Россия*

[*]*Сколковский институт науки и технологий, 143026 Москва, Россия*

[×]*Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия*

[○]*Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича, 127994 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 3 сентября 2020 г.
После переработки 3 сентября 2020 г.
Принята к публикации 3 сентября 2020 г.

В этой работе мы сравниваем две конструкции построения зеркальных пар многообразий Калаби–Яу на примере орбифолдов Квинтики $\mathcal{Q}$. Первая – конструкция Берглунда–Хубша–Кравитца (БХК) состоит в следующем. Мы рассматриваем фактор X гиперповерхности $\mathcal{Q}$ по некоторой подгруппе H' максимально допустимой группы SL. Тогда зеркальное многообразие Y определяется как фактор по дополнительной подгруппе ${H'}^T$. Вторая – конструкция Батырева определяет по данным полинома W_X, задающего Калаби–Яу X, торическое многообразие T, содержащее зеркало Y как гиперповерхность, задаваемую нулями полинома W_Y. Сам полином W_Y мы находим в явном виде. По виду W_Y мы находим его группу симметрии и проверяем, что она совпадает с предсказанной конструкцией БХК.

DOI: 10.31857/S1234567820180111

Многообразия Калаби–Яу возникают при компактификации 6 из 10 измерений в теории суперструн [1], которая является способом объединить Стандартную модель и Квантовую гравитацию. Эффективная теория определяется в терминах так называемой Специальной геометрии, которая возникает на пространстве модулей [2] многообразий Калаби–Яу и их зеркал. Мы проводим изучение зеркальных пар на примере трех случаев орбифолдов квинтики. Мы рассматриваем многообразия Калаби–Яу, определяемые как гиперповерхности во взвешенном проективном пространстве

$$\mathbb{P}^4_{(k_1,k_2,k_3,k_4,k_5)} = \left\{(x_1,\ldots,x_5)\in\mathbb{C}^5\backslash\{0\} \,\middle|\, x_i\sim\lambda^{k_i}x_i\right\}. \tag{1}$$

Пусть M – матрица степеней квазиоднородного полинома $W_M(x) := \sum_{i=1}^5\prod_{j=1}^5 x_j^{M_{ij}}$, т.е.

$$W_M(\lambda^{k_i}x) = \lambda^d W_M(x), \tag{2}$$

который задает гиперповерхность уравнением $W_M(x) = 0$. Матрица M – обратима и имеет тип Ферма, цепь, или петля [3], что вместе с равенством

$$d = \sum_i^5 k_i \tag{3}$$

является условием того, что гиперповерхность является многообразием Калаби–Яу.

Полное семейство Калаби–Яу X_M получается при деформации исходного полинома W_M допустимыми мономами

$$W(x,\varphi) = W_M(x) + \sum_{l=1}^h \varphi_l \prod_{i=1}^5 x_i^{S_{li}}. \tag{4}$$

Параметры φ_l являются модулями комплексной структуры многообразия X_M.

Заметим, что из (1) и (3) следует, что если взять

$$\lambda = \omega, \quad \omega^d = 1, \tag{5}$$

то полином $W_M(x)$ инвариантен относительно группы преобразований Q_M, которая действует как

$$x_i \mapsto \omega^{k_i}x_i. \tag{6}$$

Группа Q_M называется группой квантовой симметрии. У полинома W_M может быть большая группа симетрии, назовем ее $\mathrm{Aut}(M)$, $Q_M\subset\mathrm{Aut}(M)$, а ее порядок равен [3]

$$|\mathrm{Aut}(M)| = \det M. \tag{7}$$

Группа $\mathrm{Aut}(M)$ порождена генераторами $q(M)_i$, $i = 1,\ldots,5$, которые действуют на каждой координате x_j как

$$q_i(M): x_j \mapsto e^{2\pi i B_{ji}}x_j, \tag{8}$$

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

где матрица B является обратной к M.

Генератором квантовой группы Q_M является произведение $\prod_{i=1}^5 q_i(M)$, которое действует на x_i как в (6). В группе $\mathrm{Aut}(M)$ есть подгруппы, которые сохраняют голоморфную, неизчезающую на X_M 3-форму Ω или, что эквавалентно, сохраняет $\prod_{i=1}^5 x_i$. Такие подгруппы называются допустимыми. Пусть $SL(M)$ обозначает максимальную допустимую подгруппу.

Имеет место цепочка вложений $Q_M \subseteq SL(M) \subseteq \subseteq \mathrm{Aut}(M)$.

Теперь мы можем определить орбифолд в X_M следующим образом. Выберем в $SL(M)$ некоторую подгруппу $H(M)$, которая включает (или равна) Q_M. Затем образуем из нее факторгруппу по Q_M

$$H'(M) := H(M)/Q_M. \tag{9}$$

Тогда по определению орбифолд:

$$Z(M, H) := X_M/H'(M). \tag{10}$$

Аналогичное построение мы можем сделать для матрицы M^T и получить четыре группы $Q_{M^T} \subseteq \subseteq H(M^T) \subseteq SL(M^T) \subseteq \mathrm{Aut}(M^T)$, где $H(M^T)$ – некоторая подгрупа $SL(M^T)$, а также орбифолд $Z(M^T, H^T)$.

Теперь встает вопрос: можно ли выбрать эти группы, и если можно, то как, чтобы $Z(M, H)$ и $Z(M^T, H^T)$ были зеркалами друг друга.

Конструкция Берглунда–Хубша–Кравитца (БХК) [4, 5] состоит в следующем. Пусть группа $H(M)$ оставляет инвариантными мономы

$$e_l(x) = \prod_{i=1}^5 x_i^{S_{li}} \tag{11}$$

для определенного подбора S_{li}. Такие мономы в сумме с $W_M(x)$ задают орбифолд $Z(M, H)$. Тогда по определению генераторами группы $H(M^T)$ являются

$$q(l) := \prod_{i=1}^5 q_i(M^T)^{S_{li}}, \tag{12}$$

где S_{li} как в (11), а генераторы группы $SL(M^T)$ определены действием на x_j

$$q_i(H^T) : x_j \mapsto e^{2\pi i B_{ij}} x_j. \tag{13}$$

Из (13) следует, что генераторы группы $H(M^T)$ действуют на координатах как

$$q(l) : x_j \mapsto e^{2\pi i B_{ij} S_{li}} x_j. \tag{14}$$

Определим теперь мономы как $e_m^T := \prod_{i=1}^5 z_i^{R_{mi}}$ из требования их инвариантности относительно этого действия группы $H(M^T)$.

Это требование удобно записать как

$$\langle l, m\rangle := B_{ij} S_{li} R_{mj} \in \mathbb{Z}. \tag{15}$$

Отметим, что ниже в этой статье речь будет идти об орбифолдах Квинтики, для которой $B_{ij} = \delta_{ij}/5$. В этом случае (15) переходит в условия

$$\sum_i S_{li} R_{mi} = 0 \ (\mathrm{mod}\ 5). \tag{16}$$

Гипотеза БХК предполагает,что полином W_{M^T} в сумме с суперпозицией e_m^T определяет зеркальный орбифолд $Z(M^T, H^T)$.

А теорема Киодо–Руана [6] утверждает зеркальную симметрию орбифолдов $Z(M, H)$ и $Z(M^T, H^T)$ на уровне когомологий.

В простейшем случае мы можем взять $H(M) = = Q_M$. Тогда орбифолд является исходным Калаби–Яу X_M, т.е. $Z(M, Q_M) = X_M$. Тогда зеркальным многообразием Калаби–Яу, обозначим его Y_M, является орбифолд по группе $SL'(M^T) := SL(M^T)/Q_{M^T}$.

$$Y_M \equiv Z(M^T, SL^T) = X_{M^T}/SL'(M^T). \tag{17}$$

Вторым подходом построения зеркальных пар Калаби–Яу является конструкция Батырева [7, 8]. Согласно этой конструкции, зеркало Y к исходному орбифолду X задается как гиперповерхность в торическом многообразии. Для начала опишем построение самого торического многообразия по X. Запишем полином, задающий семейство X_M в виде

$$W_X(x, \varphi) = \sum_{i=1}^5 \prod_{j=1}^5 x_j^{M_{ij}} + \sum_{l=1}^{h_X} \varphi_l \prod_{j=1}^5 x_j^{S_{jl}} = \\ = \sum_{a=1}^{5+h_X} C_a(\varphi) \prod_{j=1}^5 x_j^{V_{aj}}. \tag{18}$$

Показатели степеней мономов исходного полинома (18), задающего орбифолд X, являются векторами в решетке $\mathbb{Z}^5$, а именно $(\mathbf{V}_a)_j = V_{aj}$. Их также можно представить в виде матрицы $V^T = (M^T \mid S^T)$. В силу квазиоднородности, имеет место соотношение $\sum_{j=1}^5 V_{aj} k_j = d$. Поэтому вектора $(\mathbf{V}_a)_j$ лежат в четырехмерной решетке $\mathbb{Z}^4$ и образуют многогранник Батырева [8]. С другой стороны, те же вектора $\mathbf{V}_a$ являются ребрами веера [7], который определяет торическое многообразие T. Поскольку $h_X + 5$ векторов $\mathbf{V}_a$ лежат в четырехмерном пространстве, они должны удовлетворять h_X линейным соотношениям

$$\sum_{a=1}^{h_X+5} Q_{la} \mathbf{V}_a = 0, \quad l = 1, \ldots, h_X. \tag{19}$$

Эти соотношения определяют веса действия абелевой группы $(\mathbb{C}^*)^{h_X}$ в $\mathbb{C}^{h_X+4}$

$$y_a \to \lambda^{Q_{la}} y_a, \quad a = 1,\ldots,h_X+4, \quad l = 1,\ldots,h_X, \tag{20}$$

задающее торическое многообразие

$$T := \frac{\left(\mathbb{C}^{h_X+4} - Z\right)}{\left(\mathbb{C}^*\right)^{h_X}}, \tag{21}$$

где множество Z является инвариантным относительно этого действия [7].

Следующим шагом будет построение гиперповерхности в T.

Зеркальное Калаби–Яу Y задается как нули некоторого квази-однородного полинома [9–11] $W_Y(y_1,\ldots,y_{h_X+4})$, т.е.

$$Y := \left\{(y_1,\ldots,y_{h_X+4}) \in T \;\middle|\; W_Y(y) = 0\right\}. \tag{22}$$

Мы находим явный вид полинома W_Y из условий однородности:

$$\begin{aligned} &W_Y(\lambda^{Q_{l1}} y_1,\ldots,\lambda^{Q_{l,h_X+4}} y_{h_X+4}) = \\ &= \lambda^d W_Y(y_1,\ldots,y_{h_X+4}), \quad i = 1,\ldots,h_X. \end{aligned} \tag{23}$$

Запишем многочлен W_Y в виде суммы некоторых мономов $L_i(y)$, которые мы найдем позднее

$$W_Y(y) = \sum_{i=1}^{h_Y+5} \tilde{C}_i(\psi) L_i(y), \quad L_i(y) = \prod_{a=1}^{h_X+4} y_a^{n_a^i}. \tag{24}$$

Из (23) и (24) получим системы уравнений на показатели степеней n_a (здесь мы опустили индекс i для краткости)

$$\sum_{a=1}^{h_X+4} Q_{la} n_a = d, \quad l = 1,\ldots,h_X. \tag{25}$$

Заметим, что всегда мы знаем шесть решений системы (25). Поскольку

$$\sum_{i=1}^{5} V_{ai} k_i = d, \quad \sum_{a=1}^{h_X+5} Q_{la} V_{ai} = 0, \quad Q_{h_X,h_X+5} = -d, \tag{26}$$

то эти $5+1$ решения (25) имеют вид

$$n_a^i = V_{ai}, \quad i = 1,\ldots,5, \tag{27}$$

$$n_a^6 = 1, \tag{28}$$

где $a = 1,\ldots,h_X+4$.

Полином W_Y состоит всего из h_Y+5 инвариантных мономов, и их степени находятся из решений (25) наложением дополнительных условий неотрицательности степеней $n_a^i \geqslant 0$. Здесь $h_Y := h_{21}^Y$ – число Ходжа многообразия Калаби–Яу Y. Таким образом, нужно решать систему

$$\begin{gathered} \sum_{a=1}^{h_X+4} Q_{la} n_a = d, \; n_a \geqslant 0, \\ l = 1,\ldots,h_X, \; a = 1,\ldots,h_X+4. \end{gathered} \tag{29}$$

Используя симметрию действия тора, можно сделать замену на инвариантные относительно $(\mathbb{C}^*)^{h_X}$ (проективные) координаты

$$z_j = \prod_{a=1}^{h_X+4} y_a^{V_{aj}/5}. \tag{30}$$

Тем самым мы сводим торическое многообразие к проективному пространству $\mathbb{P}^4$. В координатах z_j полином W_Y имеет вид

$$W_Y(z) = \sum_{i=1}^{5} \prod_{j=1}^{5} x_j^{M_{ji}} + \sum_{m=1}^{h_Y} \psi_m e_m^T(z). \tag{31}$$

Мы видим, что зеркало Y определяется транспонированной матрицей M^T.

По виду деформаций $e_m^T(z)$ пространства комплексных модулей многообразия Y мы находим группу симметрии полинома W_Y и можем проверить, совпадает ли она с группой H^T, получаемой процедурой Кравитца.

Ниже мы рассмотрим применение этих двух конструкций к орбифолдам Квинтики. Полное семейство в этом случае задается уравнением в проективном пространстве

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} = \Bigg\{ &(x_1,\ldots,x_5) \in \\ &\in \mathbb{P}^4 \;\Bigg|\; W_{\mathcal{Q}}(x,\varphi) := W_0(x) + \sum_{s=1}^{101} \varphi_l e_l(x) = 0 \Bigg\}, \end{aligned} \tag{32}$$

где

$$W_0(x) := x_1^5 + x_2^5 + x_3^5 + x_4^5 + x_5^5, \;\; e_l = \prod_{i=1}^{5} x_i^{S_{li}}, \; 0 \le S_{li} \le 3, \tag{33}$$

а φ_l – модули комплексной структуры многообразия $\mathcal{Q}$.

В случае Квинтики матрица степеней диагональна и равна $M = 5I$, где I – единичная. А также $W_M = W_{M^T} \equiv W_0$. Исходный полином $W_0(x)$ имеет группу квантовой симметрии $Q_{5I} = \mathbb{Z}_5[1,1,1,1,1]$. Полная группа симметрии молинома есть $\mathrm{Aut}(5I) = \mathbb{Z}_5^5$ с генераторами, действующими как $q_i(5I)$:

$x_i \mapsto e^{2\pi i/d} x_i$. А группа, сохраняющая произведение $\prod_{i=1}^5 x_i$, есть

$$SL(5I) = \mathbb{Z}_5^4 = \mathbb{Z}_5[1,0,0,0,4] \oplus \mathbb{Z}_5[0,1,0,0,4] \oplus \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,1,0,4] \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,0,1,4]. \quad (34)$$

Группу $SL(5I)$ иногда называют макисмально допустимой группой полинома W_0. Она содержит диагональ $Q_{5I} = \mathbb{Z}_5[1,1,1,1,1]$, а факторгруппа равна

$$SL'(5I) := SL(5I)/Q_{5I} = \mathbb{Z}_5[0,1,0,0,4] \oplus \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,1,0,4] \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,0,1,4]. \quad (35)$$

Мы будем работать с орбифолдами Квинтики $X = \mathcal{Q}/H'$, которые задаются уравнением в $\mathbb{P}^4$

$$W_X(x,\varphi) := x_1^5 + x_2^5 + x_3^5 + x_4^5 + x_5^5 + \sum_{l=1}^{h_X} \varphi_l e_l(x) = 0. \quad (36)$$

Здесь $h_X := h_{21}^X$ – число Ходжа. Мономы e_l являются инвариантными относительно группы H. Согласно процедуре, описанной выше, мы будем строить зеркальный орбифолд Калаби–Яу

$$Y := \mathcal{Q}/H'^T, \quad (37)$$

или в терминах исходного полинома

$$W_Y(z,\varphi) := z_1^5 + z_2^5 + z_3^5 + z_4^5 + z_5^5 + \sum_{m=1}^{h_Y} \psi_m e_m^T(z) = 0. \quad (38)$$

Мономы $e_m^T(z)$, в свою очередь, инвариантны относительно группы H^T.

Перейдем непосредственно к вычислению на примере трех орбифолдов.

Пример 1. В качестве первого примера рассмотрим орбифолд [12]

$$X = \frac{\mathcal{Q}}{\mathbb{Z}_5[0,1,1,4,4]}, \quad h_X = 17, \quad (39)$$

который задается нулями полинома

$$W_X(x) = x_1^5 + x_2^5 + x_3^5 + x_4^5 + x_5^5 + \sum_{l=1}^{17} \varphi_l e_l(x) = = \sum_{a=1}^{22} C_a \prod_{j=1}^5 x_j^{V_{aj}}, \quad (40)$$

где $e_l(x) := \prod_{i=1}^5 x_i^{S_{li}}$ инвариантны относительно действия $H = \mathbb{Z}_5[1,1,1,1,1] \oplus \mathbb{Z}_5[0,1,1,4,4]$. Они равны:

$$\begin{gathered} e_1 = x_2^3 x_3^2,\ e_2 = x_2^2 x_3^3,\ e_3 = x_4^2 x_5^3, \\ e_4 = x_4^3 x_5^2,\ e_5 = x_1^3 x_2 x_4,\ e_6 = x_1^3 x_3 x_4, \\ e_7 = x_1^3 x_3 x_5,\ e_8 = x_1^3 x_2 x_5,\ e_9 = x_1 x_2^2 x_4^2, \\ e_{10} = x_1 x_3^2 x_5^2,\ e_{11} = x_1 x_3^2 x_4^2,\ e_{12} = x_1 x_2^2 x_5^2, \\ e_{13} = x_1 x_2 x_3 x_4^2,\ e_{14} = x_1 x_2 x_3 x_5^2, \\ e_{15} = x_1 x_2^2 x_4 x_5,\ e_{16} = x_1 x_3^2 x_4 x_5, \\ e_{17} = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5. \end{gathered} \quad (41)$$

Согласно конструкции БХК зеркальное Калаби–Яу строится как орбифолд $Y = \mathcal{Q}/H'^T$. Группа H^T определяется генераторами $q(l) = \prod_{i=1}^5 q_i(5I)^{S_{li}}$, где S_{li} – суть степени мономов $e_l(x)$ в (41), а $q_i(5I)$ порождают группы $\mathbb{Z}_5[1,0,0,0,0], \ldots, \mathbb{Z}_5[0,0,0,0,1]$. Иначе говоря, группа H'^T порождена аддитивными группами $\mathbb{Z}_5[S_{l1}, S_{l2}, S_{l3}, S_{l4}, S_{l5}]$ по модулю действия $\mathbb{Z}_5[1,1,1,1,1]$. Оказывается, что в данном случае у группы H'^T два генератора, и она равна

$$H'^T = \mathbb{Z}_5[0,1,4,0,0] \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,0,1,4]. \quad (42)$$

Альтернативно получить явный вид мономов $e_m(z) = \prod_{i=1}^5 z_i^{R_{mi}}$ в (44) можно, решая уравнения (16), т.е.

$$\sum_i S_{li} R_{mi} = 0 \ (\mathrm{mod}\ 5). \quad (43)$$

Решения уравнений (43) дают нам степени мономов. Они равны

$$\begin{gathered} e_1^T(z) = z_1 z_2^2 z_3^2,\ e_2^T(z) = z_1 z_4^2 z_5^2, \\ e_3^T(z) = z_1^3 z_4 z_5,\ e_4^T(z) = z_1^3 z_2 z_3, \\ e_5^T(z) = z_1 z_2 z_3 z_4 z_5. \end{gathered} \quad (44)$$

Тогда семейство зеркального орбифолда

$$Y = \frac{\mathcal{Q}}{\mathbb{Z}_5[0,1,4,0,0] \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,0,1,4]}, \quad h_Y = 5 \quad (45)$$

определяется как решения

$$W_Y(z) = z_1^5 + z_2^5 + z_3^5 + z_4^5 + z_5^5 + \sum_{m=1}^5 \psi_m e_m^T(z) = 0. \quad (46)$$

Применим теперь подход Батырева. Перепишем полином W_X в виде

$$W_X(x,\varphi) = \sum_{a=1}^{22} C_a(\varphi) \prod_{j=1}^5 x_j^{V_{aj}}. \quad (47)$$

По векторам $\mathbf{V}_a$ мы находим веса действия тора. Запишем их в виде матриц

$$\begin{gathered}(V)_{aj} := V = \begin{pmatrix} 5I_{5\times5} \\ S \end{pmatrix}, \\ (Q)_{la} := Q = \begin{pmatrix} S & | -5I_{17\times17} \end{pmatrix},\end{gathered} \tag{48}$$

где $S \in \mathrm{Mat}(\mathbb{Z})_{17\times5}$ определяется из (40). Используя данные Q_{la}, определим торическое многообразие

$$T = \frac{\mathbb{C}^{21} - Z}{\mathbb{C}^{*17}}, \tag{49}$$

а также определим полином, задающий зеркальный орбифолд Y

$$W_Y(y) = \sum_{i=1}^{h_Y+5} \tilde{C}_i \prod_{a=1}^{21} y_a^{n_a^i}. \tag{50}$$

Накладывая необходимые условия (23), получим систему уравнений:

$$\sum_{a=1}^{21} Q_{la} n_a = 5, \quad n_b \geqslant 0, \quad b = 1, \ldots, 21. \tag{51}$$

Решая уравнения (51), получаем наборы n_a и делаем замену координат в T, сводя его к $\mathbb{P}^4$. Получим полином, задающий орбифолд Y

$$W_Y(z) = z_1^5 + z_2^5 + z_3^5 + z_4^5 + z_5^5 + \sum_{m=1}^{5} \psi_m e_m^T(z), \tag{52}$$

где мономы $e_m^T(z)$ как в (44).

Таким образом результаты вычисления по двум конструкциям совпадают.

Пример 2. Следующий пример орбифолда

$$X = \frac{Q}{\mathbb{Z}_5[0,1,2,3,4]}, \quad h_X = 21. \tag{53}$$

Калаби–Яу X определяются нулями полинома

$$\begin{aligned}W_X(x) &= x_1^5 + x_2^5 + x_3^5 + x_4^5 + x_5^5 + \sum_{l=1}^{21} \varphi_l e_l(x) = \\ &= \sum_{a=1}^{26} C_a \prod_{j=1}^{5} x_j^{V_{aj}},\end{aligned} \tag{54}$$

деформации полинома $e_l(x)$ инвариантны относительно группы $H = \mathbb{Z}_5[1,1,1,1,1] \oplus \mathbb{Z}_5[0,1,2,3,4]$:

$$\begin{gathered}e_1 = x_1^3x_3x_4,\ e_2 = x_1^3x_2x_5,\ e_3 = x_1^2x_2x_3^2, \\ e_4 = x_1^2x_2^2x_4,\ e_5 = x_1^2x_3x_5^2,\ e_6 = x_1^2x_4^2x_5, \\ e_7 = x_1x_2x_4^3,\ e_8 = x_1x_2^2x_5^2,\ e_9 = x_1x_4x_5^3, \\ e_{10} = x_1x_3^3x_5,\ e_{11} = x_1x_2^3x_3,\ e_{12} = x_1x_3^2x_4^2, \\ e_{13} = x_3^2x_4x_5^2,\ e_{14} = x_2x_3^3x_4,\ e_{15} = x_2x_3x_5^3, \\ e_{16} = x_2x_4^2x_5^2,\ e_{17} = x_2^2x_3x_4^2,\ e_{18} = x_2^2x_3^2x_5, \\ e_{19} = x_2^3x_4x_5,\ e_{20} = x_3x_4^3x_5, \\ e_{21} = x_1x_2x_3x_4x_5.\end{gathered} \tag{55}$$

Аналогично, как и в прошлом случае, конструкция БХК дает нам зеркальный орбифолд $Y = \mathcal{Q}/H'^T$, где

$$H'^T = \mathbb{Z}_5[0,1,3,1,0] \oplus \mathbb{Z}_5[0,1,1,0,3]. \tag{56}$$

А единственный моном, инвариантный относительно H^T есть $\prod_i z_i$. Тогда зеркальный орбифолд Калаби–Яу

$$Y = \frac{Q}{\mathbb{Z}_5[0,1,3,1,0] \oplus \mathbb{Z}_5[0,1,1,0,3]}, \quad h_Y = 1 \tag{57}$$

задается нулями полинома

$$W_Y(z) = z_1^5 + z_2^5 + z_3^5 + z_4^5 + z_5^5 + \psi z_1z_2z_3z_4z_5. \tag{58}$$

Перейдем к конструкции Батырева. Аналогично определяются набор векторов $\mathbf{V}_a$, $a = 1, \ldots, 26$, и целые числа Q_{la}, $l = 1, \ldots, 21$. Зеркало Y задается нулями полинома W_Y в торическом многообразии

$$T = \frac{\mathbb{C}^{25} - Z}{\mathbb{C}^{*21}}. \tag{59}$$

Накладывая аналогичные ограничения на степени мономов полинома W_Y, а также делая замену на проективные координаты, получаем его явный вид, который совпадает с (58).

Пример 3. Рассмотрим теперь орбифолд

$$X = \frac{Q}{\mathbb{Z}_5[0,0,0,1,4]}, \quad h_X = 25. \tag{60}$$

Полное семейство орбифолда Калаби–Яу X задается уравнением

$$\begin{aligned}W_X &= x_1^5 + x_2^5 + x_3^5 + x_4^5 + x_5^5 + \sum_{l=1}^{25} \varphi_l e_l(x) = \\ &= \sum_{a=1}^{30} C_a \prod_{j=1}^{5} x_j^{V_{aj}},\end{aligned} \tag{61}$$

где мономы e_l инвариантны относительно $H = \mathbb{Z}_5[1,1,1,1,1] \oplus \mathbb{Z}_5[0,0,0,1,4]$:

$$\begin{gathered}
e_1 = x_1^3 x_2^2,\ e_2 = x_1^3 x_3^2,\ e_3 = x_2^3 x_3^2,\\
e_4 = x_1^2 x_2^3,\ e_5 = x_1^2 x_3^3,\ e_6 = x_2^2 x_3^3,\\
e_7 = x_1^3 x_2 x_3,\ e_8 = x_1 x_2^3 x_3,\ e_9 = x_1 x_2 x_3^3,\\
e_{10} = x_1^2 x_2^2 x_3,\ e_{11} = x_1^2 x_2 x_3^3,\ e_{12} = x_1 x_2^2 x_3^2,\\
e_{13} = x_1^3 x_4 x_5,\ e_{14} = x_2^3 x_4 x_5,\ e_{15} = x_3^3 x_4 x_5,\\
e_{16} = x_1^2 x_2 x_4 x_5,\ e_{17} = x_1^2 x_3 x_4 x_5,\\
e_{18} = x_2^2 x_3 x_4 x_5,\ e_{19} = x_1 x_2^2 x_4 x_5,\\
e_{20} = x_1 x_3^2 x_4 x_5,\ e_{21} = x_2 x_3^2 x_4 x_5,\\
e_{22} = x_1 x_4^2 x_5^2,\ e_{23} = x_2 x_4^2 x_5^2,\\
e_{24} = x_3 x_4^2 x_5^2,\ e_{25} = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5.
\end{gathered} \tag{62}$$

Отметим, что в оригинальной статье Грина и Плессера [12] полное число Ходжа

$$h_X^{\text{Full}} = h_X + h_X^{\text{Laurent}} = 49. \tag{63}$$

Таким образом, есть еще 24 лорановских мономов среди деформаций исходного полинома W_0:

$$\begin{gathered}
g_1 = x_1^{-1} x_2 x_3^3 x_4 x_5,\ g_2 = x_1 x_2^{-1} x_3^3 x_4 x_5,\\
g_3 = x_1^3 x_2 x_3^{-1} x_4 x_5,\ g_4 = x_1^{-1} x_2^2 x_3^2 x_4 x_5,\\
g_5 = x_1^2 x_2^{-1} x_3^2 x_4 x_5,\ g_6 = x_1^2 x_2^2 x_3^{-1} x_4 x_5,\\
g_7 = x_1^{-1} x_2^3 x_3 x_4 x_5,\ g_8 = x_1 x_2^3 x_3^{-1} x_4 x_5,\\
g_9 = x_1^3 x_2^{-1} x_3 x_4 x_5,\ g_{10} = x_1^{-1} x_3^2 x_4^2 x_5^2,\\
g_{11} = x_2^{-1} x_3^2 x_4^2 x_5^2,\ g_{12} = x_1^2 x_3^{-1} x_4^2 x_5^2,\\
g_{13} = x_1^{-1} x_2 x_3 x_4^2 x_5^2,\ g_{14} = x_1 x_2^{-1} x_3 x_4^2 x_5^2,\\
g_{15} = x_1 x_2 x_3^{-1} x_4^2 x_5^2,\ g_{16} = x_1^{-1} x_2^2 x_4^2 x_5^2,\\
g_{17} = x_2^2 x_3^{-1} x_4^2 x_5^2,\ g_{18} = x_1^2 x_2^{-1} x_4^2 x_5^2,\\
g_{19} = x_1^{-1} x_4^3 x_5^3,\ g_{20} = x_2^{-1} x_4^3 x_5^3,\\
g_{21} = x_3^{-1} x_4^3 x_5^3,\ g_{22} = x_1^{-1} x_2^3 x_3^3,\\
g_{23} = x_1^3 x_2^{-1} x_3^3,\ g_{24} = x_1^3 x_2^3 x_3^{-1}.
\end{gathered} \tag{64}$$

По конструкции БХК зеркальное Калаби–Яу есть

$$Y = \frac{Q}{\mathbb{Z}_5[0,1,4,0,0] \oplus \mathbb{Z}_5[0,3,0,1,1]}, \quad h_Y = 5, \tag{65}$$

и задается нулями полинома

$$\begin{gathered}
W_Y = \sum_{j=1}^{5} z_j^5 + \psi_1 z_4^2 z_5^3 + \psi_2 z_4^3 z_5^2 + \psi_3 z_1 z_2 z_3 z_5^2 + \\
+ \psi_4 z_1 z_2 z_3 z_4^2 + \psi_5 z_1 z_2 z_3 z_4 z_5.
\end{gathered} \tag{66}$$

При конструкции Батырева зеркальный орбифолд реализуется как гиперповерхность в торическом многообразии

$$T = \frac{\mathbb{C}^{29} - Z}{\mathbb{C}^{*25}}. \tag{67}$$

Аналогичные приведенным выше вычисления дают явный вид полинома в проективных координатах, который совпадает с (66).

Также вычисления дают два дополнительных монома $z_4 z_5^4$ и $z_4^4 z_5$, но они лежат в ядре кольца Милнора $\mathbb{C}[z_1, \ldots, z_5]/\frac{\partial W_0}{\partial z_i}$. Результаты построения по двум конструкциям совпадают.

Таким образом, мы показали совпадение результатов двух конструкций построения зеркальных пар для случая орбифолдов Квинтики. Интересно понять связь этих конструкций в общем случае.

Авторы выражают благодарность А. Литвинову за полезные обсуждения.

Работа была выполнена в Институте теоретической физики им. Л. Д. Ландау. Исследования А. Белавина выполнены в рамках госзадания # 0033-2019-0004.

Работа Б. Еремина поддержана грантом Российского научного фонда под номером 18-12-00439.

1. P. Candelas, G. T. Horowitz, A. Strominger, and E. Witten, Nucl. Phys. B **258**, 46 (1985); doi:10.1016/0550-3213(85)90602-9.
2. A. Strominger, Commun. Math. Phys. **133**, 163 (1990); doi:10.1007/BF02096559.
3. M. Kreuzer, Phys. Lett. B **328**, 312 (1994); doi: 10.1016/0370-2693(94)91485-0; arXiv:hep-th/9402114 [hep-th].
4. P. Berglund and T. Hubsch, AMS/IP Stud. Adv. Math. **9**, 327,(1998); doi:10.1016/0550-3213(93)90250-S; arXiv:hep-th/9201014 [hep-th].
5. M. Krawitz, arXiv: 0906.0796.
6. A. Chiodo and Y. Ruan arXiv: 0908.0908.
7. K. Hori, S. Katz, A. Klemm, R. Pandharipande, R. Thomas, C. Vafa, R. Vakil, and E. Zaslow, *Mirror symmetry*, Published by the American Mathematical Society, Providence, RI, for the Clay Mathematics Institute, Cambridge, MA, Printed in the United States of America (2003), p. 101.
8. V. V. Batyrev, J. Alg. Geom. **3**, 493 (1994); arXiv: alg-geom/9310003 [math.AG].
9. K. Aleshkin, A. Belavin, and A. Litvinov, doi: 10.1088/1742-5468/ab081a; arXiv:1812.00478 [hep-th].
10. K. Aleshkin and A. Belavin, Pis'ma v ZhETF **110**(11), 727 (2019); arXiv:1911.11678 [hep-th].
11. A. Belavin and B. Eremin, Theor. Math. Phys. **201**(2), 1606 (2019); doi:10.1134/S0040577919110060; arXiv:1907.11102 [hep-th].
12. B. R. Greene and M. R. Plesser, Nucl. Phys. B **338**, 15 (1990); doi:10.1016/0550-3213(90)90622-K.

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 394 – 400 © 2020 г. 25 сентября

Ляпуновская экспонента в задаче Уитни со случайной накачкой

Н. А. Степанов[+*×1)], *М. А. Скворцов*[+*1)]

[+] *Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия*

[*] *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

[×] *Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 августа 2020 г.
После переработки 20 августа 2020 г.
Принята к публикации 20 августа 2020 г.

Мы рассматриваем статистические свойства непадающей траектории в задаче Уитни о перевернутом маятнике, возбуждаемом внешней силой. В случае, когда внешняя сила является белым шумом, мгновенная функция распределения угла маятника и его скорости на бесконечном временном интервале была найдена в нашей недавней работе с помощью трансфер-матричного анализа суперсимметричной теории поля. В настоящей публикации мы обобщаем наш подход на случай конечных временных интервалов и многоточечных корреляционных функций. С помощью развитого формализма вычислена ляпуновская экспонента, определяющая скорость затухания корреляций на непадающей траектории.

DOI: 10.31857/S1234567820180093

1. Балансирование перевернутого маятника, находящегося под действием заданной зависящей от времени горизонтальной силы $f(t)$, – это знаменитая математическая задача, сформулированная Курантом и Роббинсом в книге “Что такое математика?” (первое издание в 1941 г.) [1], где ее авторство было приписано Уитни. Используя довольно общие математические аргументы, основанные на теореме о среднем значении, они показали, что для любой силы $f(t)$, действующей на конечном временном интервале $[0, T]$, можно так выбрать начальное положение маятника в верхней полуплосткости, что он будет оставаться в верхней полуплоскости на протяжении дальнейшей эволюции при всех $t \in [0, T]$. Существование *непадающей траектории* (НПТ) в задаче Уитни было предметом непрекращающихся дебатов в математической литературе [2, 3], в результате которых исходные аргументы Куранта и Роббинса были критически проанализированы и уточнены. Свежий интерес к задаче о перевернутом маятнике связан с именем Арнольда, с точки зрения которого в 2002 г. эта задача еще ждала строгого решения [4]. В 2014 г. Полехин представил доказательство существования НПТ, используя топологический принцип Важевского [5]. Эта работа вызвала ряд публикаций, обобщивших его подход и предложивших новые топологические методы [6–8]. Хорошие обзоры истории задачи Уитни можно найти в статьях [8, 9].

1)e-mail: stepanov@itp.ac.ru; skvor@itp.ac.ru

В недавней работе нами была разработана теория статистического описания *никогда не падающей траектории* (ННПТ) перевернутого маятника под действием случайной силы [10]. Никогда не падающая траектория может быть рассмотрена как предел непадающих траекторий в задаче Уитни при стремлении длины T временного интервала к бесконечности. Концепция ННПТ проиллюстрирована на рис. 1, где построены численные решения краевой задачи для уравнения маятника (угол θ отсчитывается от вертикали)

$$\ddot{\theta} = \omega^2 \sin\theta + f(t)\cos\theta \qquad (1)$$

с различными начальными $\theta(0) = \theta_1$ и конечными $\theta(T) = \theta_2$ значениями и достаточно быстро меняющейся силой $f(t)$. Для любых $\theta_{1,2}$ в полосе $-\pi/2 < \theta_{1,2} < \pi/2$ непадающее решение ($-\pi/2 < \theta(T) < \pi/2$) этой краевой задачи существует и единственно [10]. По мере того, как θ_1 и θ_2 пробегают все возможные значения в полосе, множество соответствующих НПТ образуют пучок, показанный цветом на рис. 1. Этот пучок сужается при отходе от края, становясь экспоненциально тонким в середине интервала при больших T. В пределе $T \to \infty$, когда маятник нужно балансировать на всей действительной оси, пучок НПТ для задачи Уитни, определенной на конечном интервале, становится бесконечно тонким и определяет единственную *никогда не падающую траекторию*, являющуюся функционалом заданной силы $f(t)$.

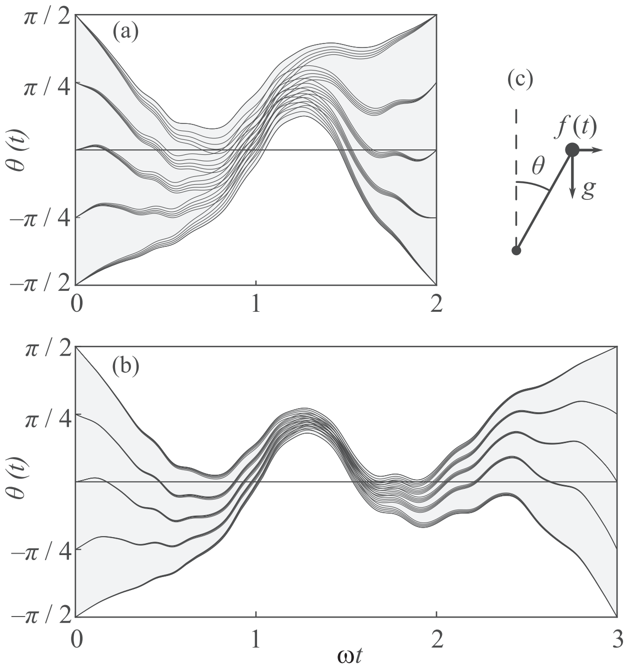

Рис. 1. (Цветной онлайн) Примеры непадающих траекторий для уравнения движения маятника (1), рассматриваемого на двух временных интервалах: (a) – $T = 2/\omega$ и (b) – $T = 3/\omega$. Для любого выбора θ_1 и θ_2 в верхней полуплоскости ($|\theta| < \pi/2$) существует единственное непадающее решение, удовлетворяющее граничным условиям $\theta(0) = \theta_1$ и $\theta(T) = \theta_2$. На графиках потроено по 25 таких траекторий с $\theta_{1,2} = (-1, -0.5, 0, 0.5, 1) \times \pi/2$. В обоих случаях возбуждающая сила выбрана в виде $f(t) = 4\sum_{n=1}^{40}\cos(k\omega t + k^4)$. (c) – Перевернутый маятник под действием горизонтальной силы

Статистические свойства НПТ в случае, когда возбуждающая сила представляет собой гауссов белый шум с коррелятором

$$\langle f(t)f(t')\rangle = 2\alpha\delta(t-t'), \qquad (2)$$

были изучены нами в работе [10], где мы вычислили одновременную фукнцию распределения $P(\theta, p)$ угла θ и его скорости $p = \dot{\theta}$. Наш подход основан на суперсимметричной теоретико-полевой формулировке стохастической динамики, предложенной в работах Паризи и Сурла [11–13], которая позволяет провести усреднение по случайной силе в самом начале вычислений. Существенно, что для рассматриваемой задачи метод Паризи–Сурла свободен от проблемы знака фермионного детерминанта в силу единственности НПТ. Используя идею сведения одномерного функционального интеграла к эффективной квантовой механике [14], нам удалось выразить функцию распределения $P(\theta, p)$ через нулевую моду трансфер-матричного гамильтониана, который сводится к оператору Фоккера–Планка с особым видом граничных условий, обеспечивающих невыход траекторий из полосы.

В настоящей публикации мы развиваем идеи, заложенные в работе [10], и рассматриваем круг вопросов, связанных с ляпуновской экспонентой для НПТ. Ляпуновская экспонента определяет как закон сходимости НПТ на конечном временном интервале к ННПТ на бесконечном временном интервале (см. рис. 1), так и затухание разновременных корреляторов на ННПТ. С технической точки зрения, наш результат состоит в описании всего спектра трансфер-матричного гамильтониана, в то время как в работе [10] была исследована только его нулевая мода. На этом языке ляпуновская экспонента определяется энергией первого возбужденного состояния. Развитая теория позволяет вычислять любые корреляционные функции на НПТ на бесконечном, полубесконечном и конечных интервалах.

Мы показываем, что ляпуновская экспонента в задаче Уитни с накачкой в виде белого шума (2) может быть записана в виде

$$\lambda = \omega g(\alpha/\omega^3), \qquad (3)$$

где функция $g(x)$ имеет следующие асимптотики:

$$g(x) = \begin{cases} 1 + \dfrac{3}{8}x - \dfrac{525}{1024}x^2 + \ldots, & x \ll 1; \\ 0.66\, x^{1/3} + 0.26 + 0.30\, x^{-1/3} \ldots, & x \gg 1. \end{cases} \qquad (4)$$

В отсутствие накачки ($\alpha = 0$) ляпуновская экспонента $\lambda = \omega$ определяется экспоненциальной неустойчивостью траекторий вблизи верхнего положения маятника. При слабой накачке ($\alpha/\omega^3 \ll 1$) типичный угол НПТ имеет порядок $\theta \sim (\alpha/\omega^3)^{1/2}$ [10], и нелинейность уравнения (1) приводит к увеличению ляпуновской экспоненты, которая может быть разложена в асимптотический ряд по степеням малого параметра α/ω^3. Наконец, при сильной накачке ($\alpha/\omega^3 \gg 1$) ляпуновская экспонента выходит на предельное значение $\lambda \approx 0.66\,\alpha^{1/3}$. Найденная численно зависимость ляпуновской экспоненты от параметра α/ω^3 показана на рис. 2.

2. Согласно подходу, развитому в работе [10], статистические свойства НПТ выражаются через двухкомпонентную “волновую функцию” $\hat{\Psi}(\theta, p) = (\Psi, \Phi)^T$, чья эволюция дается уравнением Шредингера во мнимом времени с соответствующим трансфер-матричным гамильтонианом:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\Psi \\ \Phi\end{pmatrix} = -\mathcal{H}\begin{pmatrix}\Psi \\ \Phi\end{pmatrix}, \qquad \mathcal{H} = \begin{pmatrix} L & -1 \\ V_2 & L\end{pmatrix}, \qquad (5)$$

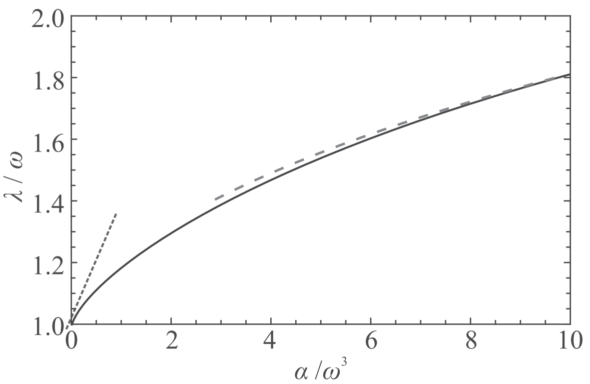

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость ляпуновской экспоненты для НПТ от силы накачки, измеряемой параметром α/ω^3. Пунктиром показана линейная часть асимптотики при малых α, а штриховой линией – первые три члена разложения (4) на больших x

где L – оператор Фоккера–Планка для задачи Крамерса [15]:

$$L = p\partial_\theta + \omega^2 \sin\theta\, \partial_p - \alpha \cos^2\theta\, \partial_p^2, \tag{6}$$

а потенциал V_2 имеет вид:

$$V_2 = -\omega^2 \cos\theta - \alpha \sin 2\theta\, \partial_p. \tag{7}$$

В работе [10] мы исследовали одноточечную корреляционную функцию ННПТ на бесконечном временном интервале, которая определяется нулевой модой $\hat{\Psi}_0$ гамильтониана $\mathcal{H}$. Нахождение нулевой моды значительно упрощается благодаря наличию симметрии Бекки–Руэ–Стора–Тютина (БРСТ) действия стохастической динамики в представлении Паризи и Сурла [13], что позволяет выразить обе компоненты $\hat{\Psi}(\theta,p)$ через скалярный суперпотенциал $\psi(\theta,p)$ посредством

$$\Psi = \partial_p\psi, \qquad \Phi = -\partial_\theta\psi. \tag{8}$$

При этом временнáя эволюция суперпотенциала ψ определяется оператором Фоккера–Планка L:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -L\psi. \tag{9}$$

Однако редукция (8) не работает ни для вычисления разновременных корреляционных функций ННПТ, ни для описания статистики НПТ на интервалах с краем. В первом случае БРСТ симметрия нарушается операторами физически наблюдаемых величин, действующих одинаково на Ψ и Φ компоненты волновой функции, а во втором – БРСТ-несимметричным начальным условием на краю интервала (см. уравнение (10) ниже). В обоих случаях для описания статистики НПТ необходимо работать с двухкомпонентной волновой функцией (Ψ,Φ) и понимать свойства гамильтониана $\mathcal{H}$.

Обсудим, как выглядит начальное условие для волновой функции на краю интервала. Для обеспечения единственности НПТ необходимо зафиксировать значение θ на краю. (Вообще говоря, можно задавать значение $\dot{\theta}$ или даже линейную комбинацию θ и $\dot{\theta}$, но для простоты будем считать, что фиксирован угол.) По построению, волновая функция $\hat{\Psi}$ тесно связана со статистической суммой суперсимметричного функционального интеграла [10]. На краю интервала она не может содержать грассмановых переменных, что приводит к занулению компоненты Φ. Таким образом, волновая функция на краю интервала, где зафиксировано значение $\theta = \theta_0$, имеет вид

$$\hat{\Psi}^{(\mathrm{b})}_{\theta_0} = \begin{pmatrix} \omega^{-1}\,\delta(\theta-\theta_0) \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Рассмотрим краевую задачу на интервале $[T_\mathrm{L}, T_\mathrm{R}]$ с граничными условиями $\theta(t_\mathrm{L}) = \theta_\mathrm{L}$ и $\theta(t_\mathrm{R}) = \theta_\mathrm{R}$. Суть сведения функционального интеграла Паризи–Сурла к квантовой механике (5) заключается в том, что корреляционная функция $\langle O_1(t_1) O_2(t_2)\ldots\rangle$ физических величин O_i в моменты времени t_i $(t_1 < t_2 < \ldots)$ может быть представлена как матричный элемент

$$\langle \hat{\Psi}^{(\mathrm{b})}_{\theta_\mathrm{R}} | \ldots O_2(t_2) e^{-\mathcal{H}(t_2-t_1)} O_1(t_1) e^{-\mathcal{H}(t_1-t_\mathrm{L})} | \hat{\Psi}^{(\mathrm{b})}_{\theta_\mathrm{L}} \rangle, \tag{11}$$

где скалярное произведение двух волновых функций определено как [10]

$$\langle \hat{\Psi} | \hat{\Psi}' \rangle = \int d\theta\, dp\, [\Psi(\theta,p)\Phi'(\theta,-p) + \Phi(\theta,p)\Psi'(\theta,-p)]. \tag{12}$$

В работе [10] мы изучали одновременную совместную функцию распределения $P(\theta,p)$ угла и скорости для ННПТ, которая соответствует оператору $O = \delta(\theta-\theta_0)\delta(p-p_0)$. Заменяя $\hat{\Psi}_{L,R}$ на нулевую моду и используя уравнение (8), можно выразить $P(\theta,p)$ через скобку Пуассона от суперпотенциала ψ:

$$P(\theta,p) = \big\{\psi(\theta,p), \psi(\theta,-p)\big\}_{\theta,p}. \tag{13}$$

Гамильтониан $\mathcal{H}$ в уравнении (5), равно как и оператор Фоккера–Планка (6), является неэрмитовым. Такие операторы, вообще говоря, могут не иметь полной системы собственных функций. Известно, однако, что в присутствии вязкости оператор Фоккера–Планка может быть приведен к диагональному виду [15], что позволяет построить систему биортогональных собственных функций и работать с ними практически как с собственными функциями эрмитового оператора [16]. В нашем случае вязкость отсутствует, поэтому следует ожидать, что операторы $\mathcal{H}$ и L приводятся к нормальной жордановой форме. Следствием этого является не простое экспоненциальное затухание корреляторов при $t \to \infty$, а появление дополнительных степеней времени (как это видно, например, в выражении (30)).

3. Для иллюстрации развитого подхода остановимся подробно на случае *слабого шума* ($\alpha/\omega^3 \ll 1$), когда жорданова структура операторов $\mathcal{H}$ и L может быть исследована аналитически. Начнем с оператора Фоккера–Планка. В рассматриваемом пределе отклонение маятника от вертикали мало ($\theta \ll 1$), и оператор (6) может быть заменен на

$$L = p\partial_\theta + \omega^2\theta\partial_p - \alpha\partial_p^2. \tag{14}$$

Нулевая мода этого оператора, отвечающая ННПТ, имеет вид [10]

$$\psi_0(\theta, p) = \operatorname{erf}(z)/2, \tag{15}$$

где мы ввели "голоморфную" и "антиголоморфную" координаты, отличающиеся знаком импульса:

$$z = \kappa\,(p - \omega\theta), \quad \overline{z} = -\kappa\,(p + \omega\theta), \tag{16}$$

где $\kappa = \sqrt{\omega/2\alpha}$. Спектр оператора (14) может быть найден с помощью тождества $[L, \partial_z] = \omega\partial_z$, что позволяет получать собственные функции, последовательно дифференцируя нулевую моду по z. Таким образом находим собственную функцию n-го возбужденного состояния ($n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$) с энергией $\epsilon_n = n\omega$:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} H_{n-1}(z) e^{-z^2}, \tag{17}$$

где $H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} d^n e^{-z^2}/dz^n$ – полиномы Эрмита (в физическом определении). Однако построенные таким образом функции $\psi_n(\theta, p)$ зависят только от разности $p - \omega\theta$ (не содержат $\overline{z}$) и, следовательно, не образуют полного базиса. Данное обстоятельство связано с тем, что неэрмитов оператор (6) приводится к жордановой нормальной форме, и помимо собственных имеет ряд присоединенных функций, отвечающих тому же самому собственному числу ε_n. Легко убедиться, что собственная функция ψ_n имеет $n-1$ присоединенных функций, которых мы выберем в виде

$$\psi_{n,k} = \frac{(-1)^k}{2^k k! \sqrt{\pi}} H_k(\overline{z}) H_{n-k-1}(z) e^{-z^2}, \tag{18}$$

где индекс k пробегает значения от 1 до $n-1$. Вместе с $\psi_{n,0} = \psi_n$ они образуют базис жордановой клетки размерности n, отвечающей энергии $\epsilon_n = n\omega$:

$$L\psi_{n,k} = \epsilon_n \psi_{n,k} + \omega\psi_{n,k-1} \tag{19}$$

(чтобы оборвать цепочку на собственной функции $\psi_{n,0}$, положим $\psi_{n,-1} = 0$).

Построенная система функций является полной. Произвольная функция может быть разложена по базису $\psi_{n,k}$, используя соотношения ортогональности

$$\langle \psi_{n,k} | \psi_{n',k'} \rangle_z = (-1)^{n-1} \delta_{n,n'} \delta_{k+k'+1,n}, \tag{20}$$

где скалярное произведение $\langle \cdot | \cdot \rangle_z$ определено как

$$\langle \psi | \psi' \rangle_z = \int dz\, d\overline{z}\, \psi(\overline{z}, z) \psi'(z, \overline{z}), \tag{21}$$

так что перестановка аргументов в одной из функций согласована со сменой знака p в уравнении (12). Отметим, что меры интегрирования в уравнениях (12) и (21) связаны посредством $dz\, d\overline{z} = 2\omega\kappa^2 d\theta\, dp$.

При эволюции волновой функции $\psi_{n,k}$ под действием оператора L к ней подмешиваются другие состояния жордановой клетки, отвечающие той же энергии, что приводит к появлению степеней t на фоне экспоненциального затухания:

$$e^{-Lt}\psi_{n,k} = e^{-n\omega t} \sum_{m=0}^{k} \frac{(-\omega t)^m}{m!} \psi_{n,k-m}. \tag{22}$$

Перейдем теперь к изучению спектральных свойств гамильтониана $\mathcal{H}$ в уравнении (5). В рассматриваемом случае слабого шума уравнение (7) дает $V_2 = -\omega^2$, что разбивает пространство состояний $\mathcal{H}$ на четный и нечетный сектора с волновыми функциями $\hat{\Psi}_{e,o} = (\Psi, \pm\omega\Psi)^T$, которые эволюционируют независимо с гамильтонианами $\mathcal{H}_{e,o} = L \mp \omega$. Таким образом, построенная выше система собственных и присоединенных функций оператора L позволяет полностью описать эволюцию дублета $\hat{\Psi}$ под действием гамильтониана $\mathcal{H}$.

Найдем, как в пределе $\alpha/\omega^3 \ll 1$ происходит эволюция волновой функции (10) при удалении от границы. Раскладывая ее на четную и нечетную компоненту, получаем

$$e^{-\mathcal{H}t}\hat{\Psi}^{(\mathrm{b})}_{\theta_0} = \begin{pmatrix} \omega^{-1}\cosh\omega t \\ \sinh\omega t \end{pmatrix} e^{-Lt}\delta(\theta - \theta_0). \tag{23}$$

Для вычисления эволюции дельта функции, разложим ее по базису $\psi_{n,k}$:

$$\delta(\theta - \theta_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} c_{n,k} \psi_{n,k}. \tag{24}$$

Коэффициенты $c_{n,k}$ находятся с помощью соотношений ортогональности (20) и свойства полиномов Эрмита

$$H_n(x+y) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (2y)^{n-k} H_k(x), \tag{25}$$

следующего из разложения в ряд Тейлора, и даются формулой

$$c_{n,k} = (-1)^{n-1} 2\kappa\omega \frac{(2\kappa\omega\theta_0)^{n-2k-1}}{(n-2k-1)!}. \qquad (26)$$

Эволюции дельта функции в уравнении (23) находится из разложения (24) и соотношений (22). Память о границе забывается за характерное время ω^{-1} (обратная ляпуновская экспонента). За это время теряется различие между двумя компонентами волновой функции $\hat{\Psi}$, и обе они выходят на значение, определяемое состоянием $\psi_{1,0}$, отвечающим минимальной энергии $\epsilon_1 = \omega$:

$$\lim_{t\to\infty} e^{-Ht} \hat{\Psi}^{(\mathrm{b})}_{\theta_0} = \hat{\Psi}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \end{pmatrix} \kappa\psi_{1,0}, \qquad (27)$$

что и есть нулевая мода уравнения (5) в пределе $\alpha/\omega^3 \ll 1$.

4. Покажем, как построенная спектральная теория операторов $\mathcal{H}$ и L позволяет систематически вычислять различные корреляционные функции НПТ *в случае слабого шума.* Результаты данного раздела могут быть получены и напрямую, используя явное выражение для НТП через $f(t)$ с последующим усреднением по гауссовому белому шуму (2) [10], однако их вывод с помощью трансфер-матричного формализма представляется методически важным, так как иллюстрирует общую схему и позволяет убедиться в ее работоспособности.

Начнем рассмотрение с вычисления парного коррелятора углов для ННПТ на всей действительной оси. Подставляя в общую формулу (11) нулевую моду в виде (27) и учитывая, что в результате остается только четный сектор теории, искомый коррелятор можно выразить через скалярное произведение (21) в z-представлении следующим образом:

$$\langle\theta(0)\theta(t)\rangle = \langle\psi_{1,0}|\theta e^{-(L-\omega)t}\theta|\psi_{1,0}\rangle_z. \qquad (28)$$

С помощью уравнений (16) и (18) можно выразить $\theta\psi_{1,0}$ через функции $\psi_{2,0}$ и $\psi_{2,1}$. Используя закон эволюции (22), находим

$$e^{-(L-\omega)t}\theta\psi_{1,0} = e^{-\omega t}\frac{\psi_{2,1} - (1/2+\omega t)\psi_{2,0}}{2\kappa\omega}. \qquad (29)$$

Считая матричный элемент (28) как перекрытие между состояниями $e^{-(L-\omega)t}\theta\psi_{1,0}$ и $\theta\psi_{1,0}$ с помощью соотношений (20), находим искомый парный коррелятор:

$$\langle\theta(0)\theta(t)\rangle = \langle\theta^2\rangle(1+\omega t)e^{-\omega t}, \qquad (30)$$

где, как получено в работе [10],

$$\langle\theta^2\rangle = \alpha/2\omega^3. \qquad (31)$$

Появление на фоне $e^{-\omega t}$ линейно растущего со временем вклада связано с возбуждением состояний $\psi_{2,0}$ и $\psi_{2,1}$, отвечающих жорданову блоку размерности 2.

Аналогичным образом можно вычислить и более сложные корреляторы ННПТ. Например,

$$\langle\theta^2(0)\theta^2(t)\rangle = \langle\theta^2\rangle^2\left[1 + 2(1+\omega t)^2 e^{-2\omega t}\right]. \qquad (32)$$

Формально, здесь оператор θ^2, примененный к $\psi_{1,0}$, возбуждает жорданов триплет $\psi_{3,0}$, $\psi_{3,1}$, $\psi_{3,2}$, что приводит к появлению членов вплоть до t^2 на фоне экспоненциального убывания. Структура же коррелятора (32) связана с гауссовой статистикой θ на ННПТ [10], позволяющей выразить его через парный коррелятор (30) с помощью теоремы Вика. Обобщение развитого формализма на многоточечные корреляторы также не представляет труда.

В качестве следующего примера рассмотрим вычисление среднего значения угла $\langle\theta(t)\rangle_{\theta_0}$ для НПТ на полубесконечном временном интервале $t > 0$ с граничным условием $\theta(0) = \theta_0$. Согласно уравнению (11), средний угол дается матричным элементом $\langle\theta(t)\rangle_{\theta_0} = \langle\hat{\Psi}_0|\theta e^{-\mathcal{H}t}|\hat{\Psi}^{(\mathrm{b})}_{\theta_0}\rangle$. Проще всего его вычислить, свернув найденное выше выражение (29) с волновой функцией на границе (10). Интегрируя по импульсу, видим, что вклад от $\psi_{2,0} = 2ze^{-z^2}/\sqrt{\pi}$ исчезает в силу нечетности по z, и получаем простое экспоненциальное убывание

$$\langle\theta(t)\rangle_{\theta_0} = \theta_0 e^{-\omega t}. \qquad (33)$$

Этот же ответ можно получить и другим способом, посчитав матричный элемент θ между нулевой модой $\psi_{1,0}$ и проэволюционированной граничной волновой функцией (23). Такие матричные элементы отличны от нуля только с жордановым дублетом $\psi_{2,0}$ и $\psi_{2,1}$. Однако, согласно (26), $\psi_{2,1}$ не входит в разложение дельта функции, а $\psi_{2,0}$ является собственной и не генерирует при эволюции линейного члена. В результате, мы снова приходим к выражению (33).

Сравнение выражений (30) и (33) показывает, что, несмотря на наличие дополнительного множителя ωt в уравнении (30), ляпуновская экспонента может быть стандартным образом определена из асимптотического поведения как одного, так и другого коррелятора на больших временах:

$$\lambda = -\lim_{t\to\infty}\frac{\partial \ln\langle\theta(0)\theta(t)\rangle}{\partial t} = -\lim_{t\to\infty}\frac{\partial \ln\langle\theta(t)\rangle_{\theta_0}}{\partial t}. \qquad (34)$$

5. Остановимся теперь на вопросе о вычислении ляпуновской экспоненты для НПТ *при произвольных значениях параметра* α/ω^3. Ляпуновская экспонента, определяющая затухание корреляций на больших

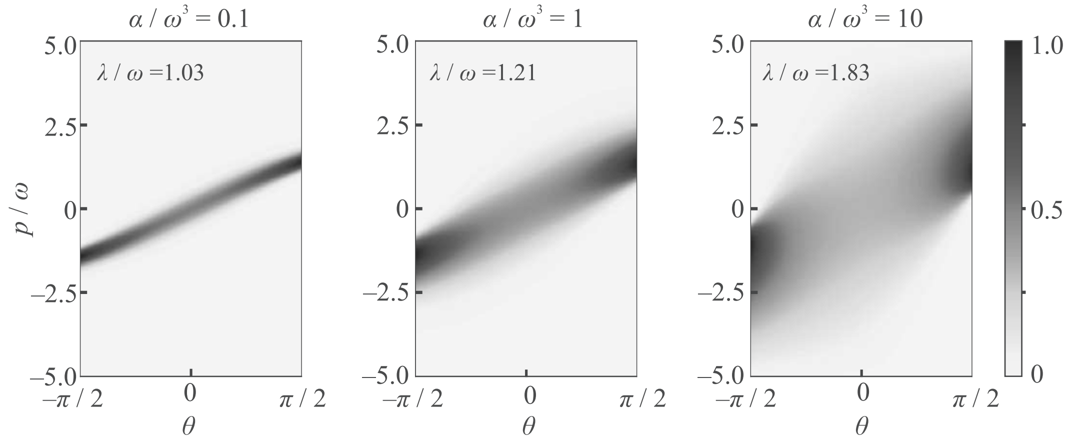

Рис. 3. (Цветной онлайн) Первое возбужденное состояние $\psi_1(\theta,p)$ оператора (6) при трех значениях параметра $\alpha/\omega^3 = 0.1,\ 1,\ 10$. Волновая функция нормирована на максимальное значение

временах, определяется энергией первого возбужденного состояния. Как мы показали выше, в случае слабой накачки $\lambda = \omega$. При увеличении параметра α/ω^3 ангармонизм маятника приводит к отклонению λ от ω.

При малом значении параметра $\alpha/\omega^3 \ll 1$ нелинейные члены в уравнении (6) могут быть учтены по теории возмущений, что позволяет получить как поправку к собственной функции ψ_n, которая становится зависящей и от "антиголоморфной" координаты $\overline{z}$, так и поправку к собственному значению ϵ_n. Особенно просто данная процедура выглядит для первого возбужденного состояния, которое не вырождено и не имеет присоединенных собственный функций. Для этого представим собственную функцию и соответствующую энергию как ряды по степеням малого параметра $x = \alpha/\omega^3$:

$$\psi_1 = [1 + h_1(z,\overline{z})x + h_2(z,\overline{z})x^2 + \ldots]e^{-z^2},$$
$$\epsilon_1 = \omega(1 + \gamma_1 x + \gamma_2 x^2 + \ldots),$$

где $h_m(z,\overline{z})$ – полином степени не выше $4m$. Подставляя эти выражения в уравнение $L\psi_1 = \epsilon_1\psi_1$ и последовательно разрешая в каждом порядке по x, можно вычислить несколько первых полиномов $h_m(z,\overline{z})$ и коэффициентов γ_m. Результат для ϵ_1, определяющий ляпуновскую экспоненту, приведен в уравнении (4).

Отметим, что аналогичный подход позволяет найти поправки и к нулевой моде (15) суперпотенциала ψ_0 по степеням α/ω^3. Как и следовало ожидать, ее энергия остается нулевой в силу суперсимметрии теории. Найденные поправки позволяют получить аналитическое разложение для одноточечной статистики ННПТ, численно изученной в работе [10]. В частности, они позволяют уточнить формулу (31) для $\langle\theta^2\rangle$:

$$\langle\theta^2\rangle = \frac{x}{2} - \frac{13}{16}x^2 + \frac{26989}{12288}x^3 + \ldots, \qquad (35)$$

а также описать негауссовость функции распределения $P(\theta)$, характеризующейся четвертым кумулянтом $\langle\langle\theta^4\rangle\rangle = \langle\theta^4\rangle - 3\langle\theta^2\rangle^2$:

$$\langle\langle\theta^4\rangle\rangle = -\frac{241}{256}x^3 + \frac{64725}{8192}x^4 + \ldots \qquad (36)$$

Отметим, что отличие от нормального распределения, измеряемое куртозисом $\langle\langle\theta^4\rangle\rangle/\langle\theta^2\rangle^2$, возникает лишь в первом порядке по $x = \alpha/\omega^3$. Отрицательное значение $\langle\langle\theta^4\rangle\rangle$ отвечает подавлению хвостов $P(\theta)$ за счет конечности интервала $(-\pi/2,\pi/2)$.

В случае произвольной силы шума возбужденные состояния оператора (6) могут быть построены только численно. Для определения ляпуновской экспоненты $\lambda = \epsilon_1$ необходимо найти первое возбужденное состояние, решив уравнение $L\psi = \epsilon_1\psi$ с граничными условиями

$$\psi(\pi/2, p<0) = \psi(\theta,-\infty) = 0, \qquad (37a)$$
$$\psi(-\pi/2, p>0) = \psi(\theta,\infty) = 0. \qquad (37b)$$

Данные граничные условия схожи с граничными условиями для нулевой моды суперпотенциала, выведенными в работе [10]. Единственное отличие заключается в том, что в той части границы, где волновая функция задана, ее значение равно нулю, а не $\pm 1/2$.

Результаты численного определения первого возбужденного состояния для различных значений параметра α/ω^3 представлены на рис. 3. При малом α/ω^3 функция $\psi_1(\theta,p)$ близка к гауссиане $\psi_{1,0}(z)$, слегка увеличиваясь вблизи $\theta = \pm\pi/2$. По мере увеличения α/ω^3 максимумы $\psi_1(\theta, p)$ вблизи краев интервала становятся более выраженными, так что при $\alpha/\omega^3 \to \infty$ первая мода имеет два горба, локализованных вблизи краев. Энергия первой моды, определяющая ляпуновскую экспоненту, как функция параметра α/ω^3 построена на рис. 2. При малых α/ω^3 численный счет согласуется с выражением (4), полученным с помощью теории возмущений, вплоть до значений $\alpha/\omega^3 \approx 0.25$. При бóльших α/ω^3 ляпуновская экспонента в единицах ω раскладывается по степеням $(\alpha/\omega^3)^{-1/3}$ с ведущим членом $\lambda \approx 0.66\,\alpha^{1/3}$.

В заключение отметим, что развитая нами теория является обобщением суперсимметричного подхода, предложенного в работе [10], на случай непадающих траекторий, рассматриваемых на конечных временных интервалах, и многоточечных корреляционных функций. Построенная классификация возбужденных состояний трансфер-матричного гамильтониана завершает построение теории статистических свойств непадающих траекторий в задаче Уитни со случайной короткопериодной накачкой. Предложенный формализм позволяет находить произвольные корреляционные функции на непадающей траектории путем решения уравнений в частных производных типа Фоккера–Планка со специфическими граничными условиями.

Авторы благодарны А. В. Хвалюку, И. В. Побойко за помощь с численном счетом.

Данная работа поддержана грантом Российского научного фонда # 20-12-00361.

1. R. Courant and H. Robbins, *What is Mathematics?: an elementary approach to ideas and methods*, Oxford University Press, N.Y. (1996).
2. A. Broman, Nordisk Matematisk Tidskrift **6**, 78 (1958).
3. T. Poston, Manifold **18**, 6 (1976).
4. V. Arnold, *What is mathematics?*, MCCME, Moscow (2002) (in Russian).
5. И. Ю. Полехин, Нелинейная динам. **10**, 465 (2014); arXiv:1407.4787.
6. O. Zubelevich, Appl. Math. (Warsaw) **42**, 159 (2015).
7. S. V. Bolotin and V. V. Kozlov, Izv. Math. **79**, 894 (2015).
8. R. Srzednicki, Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S **12**, 2127 (2019).
9. A. Shen, arXiv:1907.01598 (in Russian).
10. N. A. Stepanov and M. A. Skvortsov, arXiv:2006.13819.
11. G. Parisi and N. Sourlas, Phys. Rev. Lett. **43**, 744 (1979).
12. G. Parisi and N. Sourlas, Nucl. Phys. B **206**, 321 (1982).
13. J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (2015), ch. 16.
14. K. B. Efetov and A. I. Larkin, ZhETF **85**, 764 (1983) [Sov. Phys. JETP **58**, 444 (1983)].
15. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*, Springer, Berlin (1996).
16. G. E. Shilov, *Linear Algebra*, Dover, N.Y. (1977).

Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 6, с. 401 – 411 © 2020 г. 25 сентября

О новой атаке на квантовое распределение ключей: совместные измерения с определенным исходом зондирующих состояний и PNS атака на информационные состояния

С. Н. Молотков[1)]

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Академия криптографии Российской Федерации, 121552 Москва, Россия

Центр квантовых технологий, МГУ им. М. В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 августа 2020 г.
После переработки 15 августа 2020 г.
Принята к публикации 16 августа 2020 г.

Предложена новая атака на квантовое распределение ключей, основанная на совместных квантовых измерениях с определенным исходом отраженных зондирующих состояний от модулятора интенсивности и PNS измерениях (Photon Number Splitting – неразрушающие измерения числа фотонов) информационных состояний в квантовом канале связи. Данная атака не изменяет относительной статистики фотоотсчетов состояний с разным числом фотонов, не производит ошибок на приемной стороне, поэтому не детектируется ни одним из известных методов, включая модифицированный Decoy State метод. Атака приводит только к дополнительным потерям в линии связи, за которыми не "следит" Decoy State метод. Дана оценка привносимых потерь в зависимости от интенсивности отраженных зондирующих состояний. Критический уровень потерь зависит от конкретной физической реализации системы квантовой криптографии, которая определяет верхнюю границу интенсивности отраженных зондирующих состояний. Знание данной границы принципиально необходимо для обеспечения секретности ключей. Тот факт, что атака не приводит к ошибкам на приемной стороне и не изменяет относительной статистики фотоотсчетов, а приводит только к дополнительным потерям, которые зависят от интенсивности, соответственно различимости отраженных зондирующих состояний, *не означает*, что данная атака переводит системы квантовой криптографии из разряда криптографических систем, где секретность ключей гарантируется фундаментальными законами квантовой механики, в разряд систем, где секретность гарантируется техническими ограничениями. Даже при наличии побочных каналов утечки информации секретность ключей по-прежнему гарантируется фундаментальными ограничениями квантовой механики на различимость состояний. Низкий уровень различимости ("интенсивности") квантовых состояний в побочных каналах, естественно, достигается техническими средствами.

DOI: 10.31857/S123456782018010X

1. Введение. Методы несакционированного съема информации развиваются по мере развития способов передачи и защиты информации. В классической области носителями информации являются электромагнитные сигналы, которые передаются либо через открытое пространство, по кабельным или волоконным линиям связи. Несанкционированный съем информации для классических сигналов возможен как с кабельных линий связи, так и с волоконно-оптических линий.

Для получения информации не обязательно иметь непосредственный доступ к самой линии связи, поскольку работа передающей и приемной аппаратуры приводит к побочному электромагнитному излучению, которое может детектироваться. Детектирование побочного электромагнитного излучения может приводить к компроментации работы электронного криптографического оборудования. Различные типы интерфейсов между отдельными модулями аппаратуры также приводят к компрометирующему побочному излучению.

Существуют и другие побочные каналы утечки информации: электромагнитное излучение, оптическое излучение (электромагнитное в оптическом диапазоне), акустические каналы, ультразвуковые, механические и пр., которые могут приводить к утеч-

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

ке информации без непосредственного доступа к источнику информации. Большой набор методов и экспериментальных устройств, существующих в данной области, обычно широко не освещается. Некоторые аспекты детектирования побочных сигналов в классических криптографических системах, а также исторические примеры см., например, в [1–7].

Понижение уровня оптического сигнала до однофотонного уровня приводит к тому, что сигнал становится квантовым, и это приводит к принципиально качественно новой ситуации. В отличии от интенсивного классического оптического сигнала, передаваемого по волоконной линии связи, попытки подслушать – измерить неизвестное состояние в линии связи приводят к возмущению квантового состояния и ошибкам на приемной стороне [8]. По этой причине любое вторжение в квантовый канал связи детектируется, что гарантируется фундаментальными законами квантового мира. Более того, фундаментальные ограничения квантовой механики позволяют связать наблюдаемый уровень возмущения квантовых состояний (уровень ошибок) на приемной стороне с верхней границей утечки информации [9–11]. Собственно, на этом и строится квантовая криптография – квантовое распределение секретных ключей.

В этом смысле, системы квантовой криптографии защищены от атак непосредственно на линию связи. Более того, считается, что линия связи непосредственно доступна для активного прослушивания – вторжения.

На сегодняшний день касательно атак на квантовые состояния в квантовой линии связи – попыток съема передаваемой ключевой информации достигнуто достаточно глубокое понимание. Существуют методы учета не строгой однофотонности источника квантовых состояний, потерь в линии связи, не единичной квантовой эффективности однофотонных детекторов и пр. Относительно атак на квантовый канал связи можно говорить, что квантовая криптография обеспечивает безусловную секретность ключей, которая базируется только на фундаментальных законах квантовой механики.

Системы квантовой криптографии представляют собой достаточно сложные и насыщенные активными волоконными компонентами устройства – фазовыми модуляторами, модуляторами интенсивности, контроллерами поляризации, управляющей электроникой с различными внешними и внутренними интерфейсами. Работа электроники и электронно-управляемых активных волоконных элементов приводит к побочному излучению, которое несет на себе информацию о передаваемых ключах.

В квантовой криптографии ситуация еще более деликатная, чем в классических криптографических системах. Системы квантовой криптографии являются открытыми системами, в том смысле, что кроме детектирования побочного излучения, подслушиватель может активно зондировать через волоконную линию связи состояние волоконных элементов (фазовых модуляторов, модуляторов интенсивности, контроллеров поляризации и пр.), которые дают информацию о передаваемых ключах.

Без понимания и учета утечки информации по побочным каналам невозможно всерьез говорить о секретности ключей в реальных системах квантовой криптографии.

Еще одно принципиальное отличие побочных каналов в квантовой криптографии от побочных каналов в классических системах состоит в том, что невозможно рассматривать состояния в побочных каналах классическим образом. Подслушиватель может совместно измерять информационные квантовые состояния и состояния в побочных каналах, что требует полного квантового рассмотрения.

На сегодняшний день полный набор методов учета атак на аппаратуру и учет побочных каналов утечки находится в стадии активного исследования. В отличии от классических криптографических систем исследование утечки информации по побочных каналам началось совсем недавно [12–20].

В реальных системах источник информационных состояний представляет собой ослабленные когерентные состояния с пуассоновской статистикой по числу фотонов, и не является строго однофотонным. Секретный ключ набирается только из однофотонной компоненты когерентных состояний. Информация, заключенная в многофотонных компонентах состояний с числом фотонов $k > 1$, консервативно в пользу Евы, считается ей известной. Доля однофотонной компоненты на приемной стороне оценивается модифицированным Decoy State методом (см. детали в [21–23]). Без побочных каналов утечки информации самой общей атакой на однофотонную компоненту состояний является унитарная атака. Для протокола BB84 такую оптимальную атаку можно построить явно [24, 25].

Поскольку многофотонные компоненты состояний “отдаются” (считаются известными) подслушивателю, то дальнейшая задача сводится к построению атаки на однофотонную компоненту с учетом побочных каналов утечки.

Принципиально важно для Decoy State метода, что не имея дополнительной информации, подслушиватель не знает, из какого состояния и с каким средним числом фотонов произошла компонента с данным числом фотонов k. Искажение однофотонной компоненты в посылках, относящихся к когерентным состояниям с разной интенсивностью, приводит к искажению относительного наблюдаемого полного темпа отсчетов – статистики на приемной стороне для посылок, в которых посылались состояния с разной интенсивностью. Изменение относительного полного темпа отсчетов позволяет оценить долю однофотонной компоненты и ошибку в ней на приемной стороне.

Все сказанное справедливо до тех пор, пока у подслушивателя нет дополнительной информации о том, какое состояние и с какой интенсивностью (средним числом фотонов) посылалось в квантовый канал связи в каждой посылке.

При наличии побочных сигналов, предположения, на которых базируется Decoy State метод, нарушаются. При активном зондировании состояния модулятора интенсивности, подслушиватель получает дополнительную информацию об интенсивности передаваемого состояния.

Измерения над отраженными от модулятора интенсивности зондирующими состояниями дают дополнительную информацию об интенсивности передаваемого состояния в каждой посылке. Возможны измерения двух типов.

1) Измерение, минимизирующее ошибку различения отраженных состояний.

2) Измерения с определенным исходом – Unambiguous Measurements (UM).

Измерения первого типа позволяют различить квантовые состояния, но с некоторой вероятностью ошибки. Измерения второго типа различают состояния с определенностью, если получен *conclusive* исход. При неопределенном исходе, обычно обозначаемым "?", ничего о состоянии сказать нельзя. При различении N состояний, измерение первого типа имеет N исходов. Измерение второго типа имеет $N+1$ исход, N определенных, и один "?" – неопределенный. Отметим, что для существования UM измерений необходимым и достаточным условием является линейная независимость набора N состояний [26–33], что выполнено для отраженных состояний (см. ниже).

Атака на распределяемые ключи в случае измерений первого типа детектируется Decoy State методом, поскольку изменяет пуассоновскую статистику отсчетов. Однако стандартный Decoy State метод [21–23] требует радикального изменения, что было сделано в работах [17, 18].

В данной работе будет предъявлена новая атака, которая сводится к активному зондированию модулятора интенсивности, UM измерений отраженных состояний и PNS атака с неразрушающим измерением числа фотонов в информационных состояниях в квантовом канале, которая до сих пор, насколько нам известно, не рассматривалась.

При такой атаке подслушиватель *знает весь ключ*, не производит ошибок на приемной стороне, не изменяет пуассоновской статистики фотоотсчетов на приемной стороне в посылках, отвечающих когерентным состояниям с разной интенсивностью (средним числом фотонов).

Данная атака принципиально не детектируется Decoy State методом, поскольку не меняет наблюдаемой относительной статистики отсчетов на приемной стороне состояний с разной интенсивностью. Атака приводит лишь к снижению общего темпа фотоотсчетов, т.е. приводит лишь к увеличению наблюдаемых потерь без изменения статистики отсчетов в фоковских компонентах состояний с разным числом фотонов.

Важно отметить, что полные потери в линии связи в Decoy State методе явно не фигурируют [17, 21–23], т.е. за общими потерями не нужно следить в стандартном [21–23] и модифицированном Decoy State методе [17, 18].

Поскольку предлагаемая атака приводит лишь к дополнительным потерям – снижению темпа отсчетов на приемной стороне и не производит ошибок, и не нарушает статистики отсчетов, то важно знать, к какому уровню потерь приводит такая атака.

Точнее говоря, атака не детектируется известными методами, но является эффективной – не детектируемой, если уровень потерь, производимый атакой будет не менее некоторой величины.

Цель работы – оценить критический наблюдаемый уровень потерь – снижение темпа фотоотсчетов, при котором такая атака становится возможной.

2. Описание атаки. Идея атаки достаточно проста. В системах квантовой криптографии с фазовым кодированием на передающей стороне используются активные элементы – фазовый модулятор и модулятор интенсивности. Если известно состояние фазового модулятора, то известен передаваемый бит ключа. Если известно состояние модулятора интенсивности, то известна интенсивность когерентного состояния (и среднего числа фотонов) в нем. Если подслушивателю достоверно известно состояние обоих активных элементов, то подслушиватель знает весь передаваемый ключ.

Поскольку системы квантовой криптографии являются открытыми системами, то подслушиватель, кроме доступа к квантовому каналу связи, может активно зондировать через волоконную линию связи состояние активных элементов, посылая зондирующее излучение, и затем измеряя отраженное состояние.

Степень различимости отраженных состояний от активных элементов передающей станции зависит от интенсивности отраженных состояний. Интенсивные – классические состояния достоверно различимы. Если интенсивность информационных состояний, выходящих из передающей станции, контролируется передатчиком, то интенсивность отраженных состояний контролируется подслушивателем. Чем более интенсивные зондирующие состояния посылает подслушиватель, тем более интенсивными будут отраженные зондирующие состояния.

Для того, чтобы знать верхнюю границу интенсивности отраженных состояний, нужно знать верхнюю границу по интенсивности входных зондирующих состояний. Такая граница по интенсивности диктуется плавлением оптического волокна [34–36]. Иначе говоря, интенсивность входных состояний не может быть больше предела, при котором волокно плавится [34–36].

Верхняя граница интенсивности отраженных состояний при известной верхней границе интенсивности входных состояний может регулироваться использованием оптических изоляторов, которые ослабляют выходные отраженные состояния до нужного уровня. Данный уровень будем считать известным. Данный уровень будет определять вероятность различимости выходных зондирующих состояний.

Ниже будем иметь в виду применение к протоколу BB84, как наиболее распространенному. Фазовый модулятор может быть в 4-х состояниях, отвечающих значениям $x = 0$ и $x = 1$ в прямом базисе $b = +$ и сопряженном $b = \times$. Обозначим отраженные от фазового модулятора состояния, отвечающие 4-м значениям $|\psi_{x_b}\rangle_{PM}$.

В Decoy State методе [17, 23] обычно используются состояния с тремя разными интенсивностями (средним числом фотонов) μ, ν_1, ν_2, которые отвечают трем разным состояниям модулятора интенсивности. Отраженные от модулятора интенсивности состояния для трех значений интенсивности (среднего числа фотонов) $\xi = \mu, \nu_1, \nu_2$, $|\psi_{\xi}\rangle_{MI}$ обозначим $|\psi_{x_b}\rangle_{PM}$. Всего имеется 12 отраженных состояний в побочном канале активного зондирования

$$|\psi_{x_b\xi}\rangle_{PMMI} = |\psi_{x_b}\rangle_{PM} \otimes |\psi_{\xi}\rangle_{MI}. \qquad (1)$$

Если в качестве входных зондирующих состояний на практике используется когерентное состояние, то после отражения от активного оптического элемента на выходе в линию связи будет когерентное состояние со сдвинутой фазой, зависящей от состояния активного элемента, и другой интенсивностью. В пользу Евы считаем отраженные состояния чистыми, поскольку они имеют большую различимость. В этих предположениях можно представить отраженные состояния как

$$\begin{gathered}|\alpha_{x_b\xi}\rangle_{PMMI} = |\alpha_{x_b}\rangle_{PM} \otimes |\alpha_{\xi}\rangle_{MI},\\ x_b = \{0+, 1+, 0\times, 1\times\},\ \xi = \{\mu, \nu_1, \nu_2\}.\end{gathered} \qquad (2)$$

2.1. Непосредственное различение состояний в побочном канале. Первая стратегия сводится к различению непосредственно 12-ти отраженных (1), (2) зондирующих состояний при помощи UM измерений. Однако такая стратегия не является наилучшей изза малой вероятности определенного исхода при UM измерениях, поскольку требует различения 12-ти состояний.

Такая стратегия приводит к вероятности определенного исхода порядка $\mathrm{Pr}_{OK} \approx \mu_{\max}^{11}$, где $\mu_{\max} = \max_{x_b,\xi}\{|\alpha_{x_b,\xi}|^2\}$ – максимальное среднее число фотонов в отраженных состояниях.

Считаем, что использование оптических изоляторов, среднее число фотонов в отраженных состояниях не превышает среднего числа фотонов $\mu \approx 0.2{-}0.5$ в информационных состояниях, $\mu_{\max} < \max_{\xi}\{\xi\} = \mu$. При такой атаке вероятность успешного различения интенсивности передаваемых информационных состояний и значений бита ключа оказывается ничтожной, соответственно в таком виде атака приводит к слишком большим потерям. Более эффективной будет следующая стратегия.

2.2. Измерение интенсивности отраженных от модулятора интенсивности состояний и PNS атака на информационные состояния в квантовом канале. Напомним, что цель Евы узнать передаваемый бит, не произвести ошибок, и не быть обнаруженной Decoy State методом. Для последнего Ева должна знать интенсивность состояния в каждой посылке, что передается μ, ν_1, ν_2.

Атака:

Ева при помощи UM измерений различает состояния $|\alpha_{\mu}\rangle_{MI}$, $|\alpha_{\nu_1}\rangle_{MI}$ и $|\alpha_{\nu_2}\rangle_{MI}$. Если исход измерения неопределенный, посылка блокируется.

Если исход определенный, то известно состояние: или $|\alpha_\mu\rangle_{MI}$, или $|\alpha_{\nu_1}\rangle_{MI}$, или $|\alpha_{\nu_2}\rangle_{MI}$. Затем производятся неразрушающие измерения числа фотонов в информационных состояниях – PNS атака. Если обнаружены посылки с числом фотонов $k < 3$, то посылка блокируется. Если в информационных состояниях обнаружено число фотонов $k \geq 3$, то проводятся UM измерения над информационным состоянием.

Необходимым и достаточным условием для существования UM измерений является линейная независимость состояний [31]. В протоколе BB84 при фазовом кодировании, если базис неизвестен, то необходимо различать 4-е состояния. В посылках с 3-мя фотонами 4-е состояния имеют вид:

$$|\Phi_k^x\rangle = \sqrt{\frac{3!}{2^3}} \sum_{m=0}^{3} e^{i\varphi_x m} \frac{|m\rangle_1 \otimes |k-m\rangle_2}{\sqrt{m!(k-m)!}}, \qquad (3)$$

т.е. 4-е состояния (3) становятся линейно независимыми, начиная с 3-х фотонных посылок.

Действительно, базисные векторы в фоковском подпространстве с 3-мя фотонами ($k = 3$) в двух временных окнах есть

$$|3\rangle_1|0\rangle_2, \quad |2\rangle_1|1\rangle_2, \quad |1\rangle_1|2\rangle_2, \quad |0\rangle_1|3\rangle_2.$$

Информационных состояний при $k = 3$ в двух базисах также имеется 3 вектора (см. ф-лу (3))

$$\text{basis} + \begin{cases} 0+ \to & \frac{1}{\sqrt{3!}}|3\rangle_1|0\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2!}}|2\rangle_1|1\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2!}}|1\rangle_1|2\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{3!}}|0\rangle_1|3\rangle_2 \\ \\ 1+ \to & \frac{1}{\sqrt{3!}}|3\rangle_1|0\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2!}}|2\rangle_1|1\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2!}}|1\rangle_1|2\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{3!}}|0\rangle_1|3\rangle_2 \end{cases},$$

$$\text{basis} \times \begin{cases} 0\times \to & \frac{1}{\sqrt{3!}}|3\rangle_1|0\rangle_2 + \frac{i}{\sqrt{2!}}|2\rangle_1|1\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2!}}|1\rangle_1|2\rangle_2 - \frac{i}{\sqrt{3!}}|0\rangle_1|3\rangle_2 \\ \\ 1\times \to & \frac{1}{\sqrt{3!}}|3\rangle_1|0\rangle_2 - \frac{i}{\sqrt{2!}}|2\rangle_1|1\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2!}}|1\rangle_1|2\rangle_2 + \frac{i}{\sqrt{3!}}|0\rangle_1|3\rangle_2 \end{cases}.$$

Для однофотонной компоненты состояний фоковское подпространство является двумерным, информационных состояний по-прежнему 4-е, поэтому они линейно зависимы. Размерность подпространства с 2-мя фотонами равна 3, состояний 4-е, и они линейно зависимы. По этой причине измерения с определенным исходом над информационными состояниями возможны только, начиная с трехфотонной компоненты состояний.

Вероятность $\Pr_\xi(k \geq 3)$, $\xi = \mu, \nu_1, \nu_2$ присутствия в квантовом канале посылок с тремя и более фотонами зависит от интенсивности информационного когерентного состояния – среднего числа фотонов в нем μ, ν_1, ν_2, имеем

$$\Pr_\xi(k \geq 3) = e^{-2\xi} \sum_{k=3}^{\infty} \frac{(2\xi)^k}{k!} \leq (\xi)^3. \qquad (4)$$

Для того, чтобы знать передваемый бит ключа, Ева должна иметь посылки с числом фотонов $k \geq 3$ для посылок с любой интенсивностью, поэтому вероятность успеха определяется минимальной вероятностью обнаружить три и более фотонов в посылках с разным средним числом фотонов $\xi = \mu, \nu_1, \nu_2$. Для минимальной вероятности, учитывая иерархию интенсивностей $\mu > \nu_1 > \nu_2$, находим

$$\Pr_{\min}(k \geq 3) = \min_{\xi=(\mu,\nu_1,\nu_2)} \left\{ e^{-2\xi} \sum_{k=3}^{\infty} \frac{(2\xi)^k}{k!} \right\} \leq (\nu_2)^3. \qquad (5)$$

После проведения UM измерений над 3-х фотонными состояниями Ева знает передаваемый бит. Если исход UM измерений над информационными состояниями неопределенный, то посылка блокируется.

PNS атака с последующими UM измерениями информационных состояний и отбрасыванием неопределенных исходов, без знания к какой посылке и с каким средним числом фотонов относится трехфотонное состояние, приведет к искажению статистики фотоотсчетов в посылках с разным средним числом фотонов μ, ν_1, ν_2, что будет обнаружено Decoy State методом.

Однако у Евы в распоряжении имеются отраженные от модулятора интенсивности состояния. UM измерение данных состояний, при определенном исходе после PNS атаки и UM измерений над информационными состояниями, позволяют Еве, при определенном исходе над отраженными состояниями, знать как

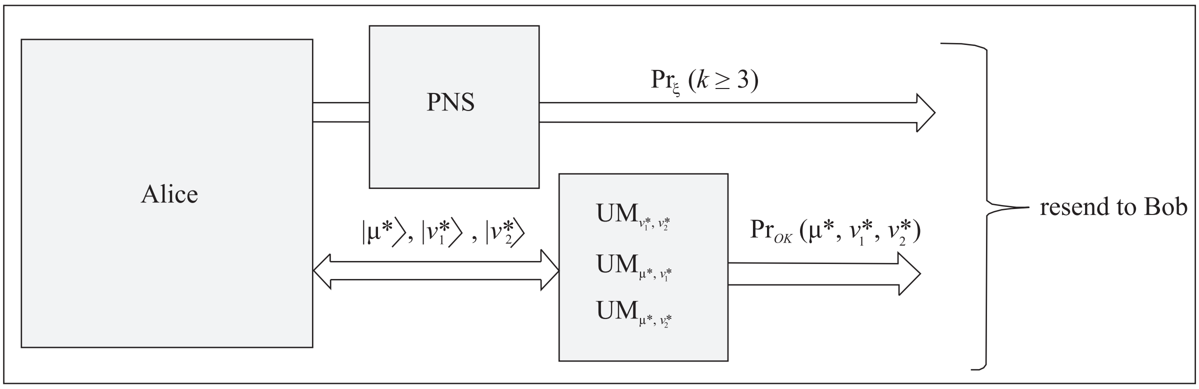

Рис. 1. Схематическое изображение атаки с UM измерениями отраженных состояний и PNS измерениями информационных состояний

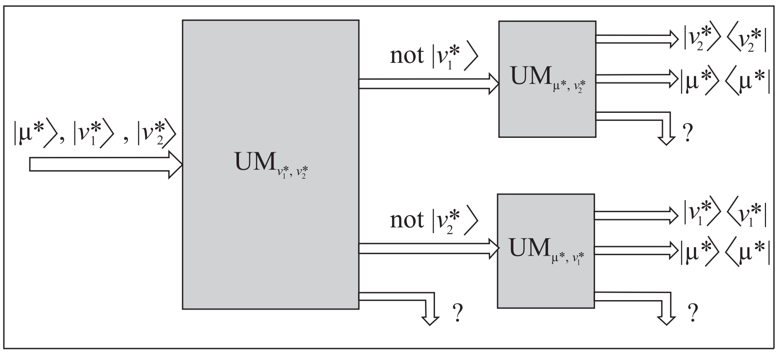

Рис. 2. Схематическое изображение второго каскада измерений с определенным исходом

информационный бит, так и значение интенсивности в данной посылке – μ, ν_1, ν_2.

В итоге, при двух последовательных определенных исходах Ева знает все о передаваемых состояниях – значение бита ключа и значение μ, ν_1, ν_2. Все остальные посылки, где был неопределенный исход, либо при PNS и UM измерениях над информационными состояниями, либо над отраженными от модулятора интенсивности, блокируются.

Сделаем теперь оценку минимальной вероятности определенного исхода при различении состояний, отраженных от модулятора интенсивности. Оптимальные UM измерения для двух чистых состояний известны [29–31]. Имеется ряд результатов для различения более чем двух чистых и смешанных состояний. Для получения конкретных числовых значений требуется знать точную структуру квантовых состояний и использовать численную минимизацию.

Для оценки порядка величины вероятности определенных исходов, соответственно, потерь, к которым приводит данная атака, удобнее воспользоваться точными аналитическими результатами для различения двух состояний, а для различения трех состояний воспользоваться каскадными измерениями с определенным исходом, где на каждом шаге различается пара состояний (см. рис. 1). При этом не придется прибегать к численной минимизации.

2.3. Каскадные измерения зондирующих состояний. При различении трех состояний, отраженных от модулятора интенсивности, которые для краткости обозначим $|\mu^*\rangle$, $|\nu_1^*\rangle$, $|\nu_2^*\rangle$, каскадные UM измерения содержат два шага. На первом шаге различается пара состояний $|\nu_1^*\rangle$, $|\nu_2^*\rangle$, точнее при одном из двух определенных исходов, исключается третье состояние. Например, исключение на первом шаге состояния $|\nu_1^*\rangle$ приводит к тому, что после такого исхода измерения остаются неразличенными состояния $|\mu^*\rangle$ и $|\nu_1^*\rangle$. При исключении на первом шаге состояния $|\nu_2^*\rangle$, определенными остаются состояния $|\mu^*\rangle$, и $|\nu_2^*\rangle$, которые различаются на втором шаге UM измерений (см. рис. 2). На втором шаге UM измерений различаются две данные пары состояний (рис. 2) $|\mu^*\rangle$ и $|\nu_1^*\rangle$, либо $|\mu^*\rangle$ и $|\nu_2^*\rangle$.

На первом шаге выполняется измерение UM_{ν_1*,ν_2^*} (рис. 2), которое дается разложением единицы

$$I = \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*} + \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*} + \mathcal{P}^{?}_{\nu_1^*,\nu_2^*}, \tag{6}$$

где

$$\mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*} = \frac{I - |\nu_1^*\rangle\langle\nu_1^*|}{1 + |\langle\nu_1^*|\nu_2^*\rangle|}, \quad \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*} = \frac{I - |\nu_2^*\rangle\langle\nu_2^*|}{1 + |\langle\nu_1^*|\nu_2^*\rangle|}, \qquad \mathcal{P}^{?}_{\nu_1^*,\nu_2^*} = I - \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*} - \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*}, \tag{7}$$

где I – единичный оператор. Операторно-значные меры в (6), (7) $\mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*}$ и $\mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*}$ с точностью до нормировки являются проекторами, в том смысле, что $(\mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*,\nu_1^*})^2 \propto \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*,\nu_2^*}$, это потребуется далее.

Вероятности определенного исхода и состояния на выходе на первом каскаде имеют вид

$$\mathrm{UM}_{\nu_1^*,\nu_2^*}\left\{\begin{array}{l} \text{not } |\nu_1^*\rangle \to \left\{\begin{array}{ll} \Pr(|\nu_2^*\rangle|\text{not } |\nu_1^*\rangle) = 1 - |\langle\nu_2^*|\nu_1^*\rangle|, & \text{output state } |\nu_2^*\rangle\langle\nu_2| \\ \Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_1^*\rangle) = \frac{1-|\langle\mu^*|\nu_1^*\rangle|}{1+|\langle\nu_2^*|\nu_1^*\rangle|}, & \text{output state } |\mu^*\rangle\langle\mu^*| \end{array}\right\} \to \mathrm{UM}_{\mu^*,\nu_2^*} \\ \\ \text{not } |\nu_2^*\rangle \to \left\{\begin{array}{ll} \Pr(|\nu_1^*\rangle|\text{not } |\nu_2^*\rangle) = 1 - |\langle\nu_2^*|\nu_1^*\rangle|, & \text{output state } |\nu_1^*\rangle\langle\nu_1^*| \\ \Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_2^*\rangle) = \frac{1-|\langle\mu^*|\nu_2^*\rangle|}{1+|\langle\nu_2^*|\nu_1^*\rangle|}, & \text{output state } |\mu^*\rangle\langle\mu^*| \end{array}\right\} \to \mathrm{UM}_{\mu^*,\nu_1^*} \end{array}\right. . \tag{8}$$

Вероятность определенного исхода на первом шаге, с учетом (8), не более

$$\Pr^{(1)}_{OK} \le \min\left\{\Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_1^*\rangle), \Pr(|\nu_1^*\rangle|\text{not } |\nu_2^*\rangle), \Pr(|\nu_2^*\rangle|\text{not } |\nu_1^*\rangle)\right\}. \tag{9}$$

Второй каскад измерений с определенным исходом (рис. 2) выбирается в зависимости от исхода на первом шаге. Выбирается одно из двух измерений, каждое из которых дается своим разложением единицы. При исходе на первом шаге (not $|\nu_1^*\rangle$) на втором каскаде выбирается измерение $\mathrm{UM}_{\mu^*,\nu_2^*}$ (рис. 2)

$$I = \mathcal{P}^{\perp}_{\mu^*} + \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*} + \mathcal{P}^{?}_{\mu^*,\nu_2^*}, \tag{10}$$

где

$$\mathcal{P}^{\perp}_{\mu^*} = \frac{I - |\mu^*\rangle\langle\mu^*|}{1 + |\langle\mu^*|\nu_2^*\rangle|}, \quad \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*} = \frac{I - |\nu_2^*\rangle\langle\nu_2^*|}{1 + |\langle\mu^*|\nu_2^*\rangle|}, \quad \mathcal{P}^{?}_{\mu^*,\nu_2^*} = I - \mathcal{P}^{\perp}_{\mu^*} - \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_2^*}, \tag{11}$$

$$\mathrm{UM}_{\mu^*,\nu_2^*}\left\{\begin{array}{lll} \text{not } |\mu^*\rangle \to & \Pr(|\nu_2^*\rangle|\text{not } |\mu^*\rangle) = 1 - |\langle\mu^*|\nu_2^*\rangle|, & \text{output state } |\nu_2^*\rangle\langle\nu_2^*| \\ \text{not } |\nu_2^*\rangle \to & \Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_2^*\rangle) = 1 - |\langle\mu^*|\nu_2^*\rangle|, & \text{output state } |\mu^*\rangle\langle\mu^*| \end{array}\right. . \tag{12}$$

При исходе на первом шаге (not $|\nu_2^*\rangle$) на втором каскаде выбирается измерение $\mathrm{UM}_{\mu*,\nu_1^*}$ (рис. 2)

$$I = \mathcal{P}^{\perp}_{\mu^*} + \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*} + \mathcal{P}^{?}_{\mu^*,\nu_1^*}, \tag{13}$$

где

$$\mathcal{P}^{\perp}_{\mu^*} = \frac{I - |\mu^*\rangle\langle\mu^*|}{1 + |\langle\mu^*|\nu_1^*\rangle|}, \quad \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*} = \frac{I - |\nu_1^*\rangle\langle\nu_1^*|}{1 + |\langle\mu^*|\nu_1^*\rangle|}, \quad \mathcal{P}^{?}_{\mu^*,\nu_1^*} = I - \mathcal{P}^{\perp}_{\mu^*} - \mathcal{P}^{\perp}_{\nu_1^*}, \tag{14}$$

$$\mathrm{UM}_{\mu^*,\nu_1^*}\left\{\begin{array}{lll} \text{not } |\mu^*\rangle \to & \Pr(|\nu_1^*\rangle|\text{not } |\mu^*\rangle) = 1 - |\langle\nu_1^*|\mu^*\rangle|, & \text{output state } |\nu_1^*\rangle\langle\nu_1^*| \\ \text{not } |\nu_1^*\rangle \to & \Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_1^*\rangle) = 1 - |\langle\nu_1^*|\mu^*\rangle|, & \text{output state } |\mu^*\rangle\langle\mu^*| \end{array}\right. . \tag{15}$$

Вероятность определенного исхода на втором шаге, с учетом (10)–(15), не более

$$\Pr^{(2)}_{OK} \le \min\left\{\Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_1^*\rangle), \Pr(|\nu_1^*\rangle|\text{not } |\mu^*\rangle), \Pr(|\mu^*\rangle|\text{not } |\nu_2^*\rangle), \Pr(|\nu_2^*\rangle|\text{not } |\mu^*\rangle)\right\}. \tag{16}$$

В итоге вероятность определенного исхода в двух каскадах при измерении отраженных состояний от модулятора интенсивности не более

$$\Pr_{OK}(\min) = \Pr^{(1)}_{OK} \cdot \Pr^{(2)}_{OK}. \tag{17}$$

Считая отраженные состояния когерентными различными фазами и средним числом фотонов $\xi, \xi' \ll \ll 1$, для скалярных произведений в (8), (12), (15) получаем $1 - |\langle\xi|\xi'\rangle|^2 = 1 - e^{-|\xi-\xi'|^2} \le |\xi - \xi'|$, где

ξ, ξ' принимают значения μ^*, ν_1^*, ν_2^*.[2)] Учитывая естественную иерархию интенсивностей отраженных состояний, т.е. считая, что $\mu^* > \nu_1^* > \nu_2^*$, для оценки получаем

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \le \mu^* \nu_1^* (\nu_2^*)^2. \tag{18}$$

2.4. Финальная стадия атаки – перепосыл состояний на приемную станцию. В посылках, где получены определенные исходы над отраженными состояниями и информационными состояниями в квантовом канале связи, Ева знает как информационный бит, так и с каким средним числом фотонов было состояние в данной посылке.

Все посылки с совместным определенным исходом разбиваются на три множества. Одно множество посылок, где посылались состояния со средним числом фотонов μ, второе множество посылок с ν_1 и третье с ν_2. Во всех этих посылках Еве также известен передаваемый бит ключа.

Как Ева может использовать данную атаку, чтобы не произвести ошибок на приемной стороне и не изменить относительную статистику фотоотсчетов в посылках с разным средним числом фотонов?

Нужно напомнить следующий факт, если когерентное состояние со средним числом фотонов ξ проходит через канал связи с коэффициентом прохождения T, соответственно с потерями $1-T$, то непосредственно на входе приемной стороны будут состояния

$$\rho^x(\xi) \to \rho^x(\xi T) = e^{-2\xi T} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\xi T)^k}{k!} |\Phi_k^x\rangle\langle\Phi_k^x|, \tag{19}$$

здесь T – коэффициент прохождения через канал связи ($T = 10^{-\frac{\delta L}{10}}$, L – длина линии связи, δ – коэффициент удельных потерь). Соответственно, вероятность компонент состояний с ненулевым числом фотонов *на входе станции Боба* есть

$$Q(\xi T) = e^{-2\xi T} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2\xi T)^k}{k!} = 1 - e^{-2\xi T}. \tag{20}$$

Иначе говоря, формула (20) дает вероятность достижения входа приемной стороны Боба каждой компонентой $|\Phi_k^x\rangle\langle\Phi_k^x|$ с числом фотонов k без искажений после прохождения канала с потерями. Вероятность достижения приемной стороны компоненты состояния $|\Phi_k^x\rangle\langle\Phi_k^x|$ с $k = 0, 1\ldots$ фотонами есть

$$e^{-2\xi T} \frac{(2\xi T)^k}{k!}. \tag{21}$$

[2)] Не путать обозначения когерентных состояний $|\xi\rangle$ со средним значением числа фотонов ξ.

Пусть T_μ, T_{ν_1}, T_{ν_2} – прозрачности канала, при которых выполнены равенства

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_\mu(k \ge 3) = Q(\mu T_\mu) \approx 2\mu T, \tag{22}$$

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_{\nu_1}(k \ge 3) = Q(\nu_1 T_{\nu_1}) \approx 2\nu_1 T, \tag{23}$$

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_{\nu_2}(k \ge 3) = Q(\nu_2 T_{\nu_2}) \approx 2\nu_2 T. \tag{24}$$

Фомулы дают вероятность совместного определенного исхода для различения состояния и с каким средним числом фотонов произошла данная посылка и вероятности определения передаваемого бита ключа. Неформально, это доля посылок со средним числом фотонов при разных $\xi = \mu, \nu_1, \nu_2$, в которых Ева знает все про данные посылки.

Далее выберем минимальный коэффициент прохождения из T_ξ в (22)–(24)

$$T_{\min} = \min_{\xi\in\{\mu,\nu_1,\nu_2\}}\{T_\xi\} =$$
$$= \min_{\xi\in\{\mu,\nu_1,\nu_2\}} \left\{ \frac{1}{\xi} Q^{-1} \left(\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_\xi(k \ge 3)\right) \right\}, \tag{25}$$

здесь $Q^{-1}(\ldots)$ – обратная функция к $Q(\ldots)$.

Пусть для определенности это будет $\xi = \nu_2$, тогда

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_\mu(k \ge 3) \ge Q(\mu T_{\min}), \tag{26}$$

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_{\nu_1}(k \ge 3) \ge Q(\nu_1 T_{\min}),$$

$$\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_{\nu_2}(k \ge 3) = Q(\nu_2 T_{\min}).$$

Неформально (26) определяет размеры множеств посылок с μ, ν_1 и ν_2, в которых Ева знает все – среднее число фотонов и передаваемый бит ключа.

Если $\xi = \mu$, то в доле посылок

$$\frac{Q(\mu T_{\min})}{\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_\mu(k \ge 3)}, \tag{27}$$

с совместным определенным исходом Ева *подает непосредственно на вход станции Боба* (см. рис. 1), состояния

$$|\Phi_k^x\rangle_{BB}\langle\Phi_k^x| \tag{28}$$

с нужными вероятностями

$$e^{-2\mu T_{\min}} \frac{(2\mu T_{\min})^k}{k!}, \quad k \ge 1. \tag{29}$$

А в доле посылок

$$1 - \frac{Q(\mu T_{\min})}{\mathrm{Pr}_{OK}(\min) \cdot \mathrm{P}_\mu(k \ge 3)} \tag{30}$$

ничего не передает Бобу (см. рис. 1), даже если получен совместный определенный исход. Говоря другими словами, часть посылок с совместным определенным исходом в (22) и (23) является избыточной.

Размер множества посылок с совместным определенным исходом для посылок с μ больше, чем требуется для удовлетворения неравенств (26).

Аналогично Ева поступает для посылок с ν_1, где получен совместный определенный исход. В посылках с ν_2 на вход приемной станции Ева доставляет все посылки с совместным определенным исходом.

В итоге, *на входе станции Боба* при любом $\xi = \mu, \nu_1, \nu_2$ возникают состояния, которые даются матрицами плотности

$$\rho^x(\xi T_{\min}) = e^{-2\xi T_{\min}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\xi T_{\min})^k}{k!} |\Phi_k^x\rangle_{BB}\langle\Phi_k^x|,$$
$$\xi = \mu, \nu_1, \nu_2. \tag{31}$$

Состояния на входе приемной станции выглядят так, как, если бы неискаженные состояния прошли через канал с прозрачностью $T_{\min}$. При этом относительная и внутренняя пуассоновская статистика состояний по числу фотонов и сами фоковские состояния остаются неискаженными, и все состояния выглядят как, если бы они прошли через один и тот же идеальный канал с потерями $1 - T_{\min}$. В итоге на входе приемной станции Боб видит неискаженные состояния с неискаженной внутренней и относительной пуассоновской статистикой для состояний с разными ξ. Напомним, что Decoy State метод не следит за потерями, поэтому такая атака не детектируется Decoy State методом.

2.5. Некоторые численные оценки. Сделаем численные оценки потерь, к которым приводит данная атака. Наблюдаемые потери зависят от среднего числа фотонов в отраженных зондирующих состояниях от модулятора интенсивности. Пусть среднее число фотонов в отраженных состояниях, когда состояние модулятора интенсивности отвечает посылкам информационных состояний со средним числом фотонов μ равно $\mu^* = 0.1$. Соответственно для информационных посылок с ν_1 и ν_2 есть $\nu_1^* = 0.01$, $\nu_2^* = 0.01$. С учетом полученных выше формул (24), (27), для коэффициента прохождения T_{Eve} (коэффициент потерь $1 - T_{Eve}$) при такой атаке, получаем

$$\Pr_{OK}(\min) \cdot \Pr_{\min}(k \geq 3) \leq \nu_2 T_{\text{Eve}},$$
$$T_{\text{Eve}} \leq \mu^* \nu_1^* \nu_2^* \approx 10^{-5}. \tag{32}$$

Напомним, что при стандартных потерях в одномодовом волокне $\delta = 0.2\,$Дб/км, при длине линии $L = 100\,$км, вероятность прохождения линии связи составляет $T_{100} = 10^{-\frac{\delta L}{10}} = 10^{-2}$, что на три порядка больше, чем при такой атаке и используемой для оценок интенсивности отраженных зондирующих состояний. Чем меньше интенсивность отраженных состояний, тем больше будут вносимые потери при такой атаке. Обеспечить низкую интенсивность отраженных зондирующих состояний можно использованием односторонних оптических изоляторов на выходе из передающей станции. Коэффициент ослабления оптических изоляторов будет определяться конкретной технической реализацией системы квантовой криптографии.

3. Заключение. Системы квантовой криптографии были предложены для квантового распределения ключей, секретность которых гарантируется фундаментальными запретами квантовой механики на различимость квантовых состояний. Более точно, запрет на копирование неизвестного квантового состояния (*no cloning* теорема [37]) запрещает создать копию неизвестного квантового состояния *с вероятностью единица*, что является элегантной переформулировкой фундаментальных соотношений неопределенностей Гайзенберга–Робертсона [38, 39]. Применительно к квантовой криптографии, этот запрет означает, что подслушиватель не может сделать копию информационного состояния (соответственно, любое число копий, если можно было бы сделать хоть одну) для своих измерений при подслушивании. Соотношения неопределенностей Гайзенберга–Робертсона есть выражение математического факта, что пара некоммутирующих наблюдаемых (эрмитовых операторов) не может иметь общей системы собственных векторов, поэтому любые вторжения в квантовый канал связи неизбежно будут приводить к ошибкам на приемной стороне.

Следующий фундаментальный факт состоит в том, что квантовая теория позволяет получить верхнюю фундаментальную границу утечки информации к подслушивателю при данной наблюдаемой ошибке на приемной стороне. Данную фундаментальную границу позволяют получить энтропийные соотношения неопределенностей [11], которые также являются следствием некоммутируемости наблюдаемых.

Все сказанное касалось однофотонных состояний. В реальных системах, ввиду отсутствия на данный момент строго однофотонного источника информационных состояний, используются квазиоднофотонные состояния лазерного излучения – сильно ослабленное когерентное состояние, которое является суперпозицией состояний с разным фоковским числом фотонов. Секретный ключ формируется только из однофотонной компоненты состояний, достигающей приемной стороны. Вся информация, содержащаяся в многофотонных компонентах состояний, считается известной подслушивателю (“отдается” подслушивателю). Decoy State метод [21–23] позволяет оценить долю однофотонной компоненты, достигающей приемной стороны.

Таким образом, относительно атак на информационные состояния в квантовом канале связи на сегодняшний день достигнуто глубокое понимание. Однако системы квантовой криптографии являются открытыми системами, в том смысле, что подслушиватель имеет в своем распоряжении, кроме квантового канала, побочные каналы утечки информации, а также может активно зондировать оптические компоненты системы – фазовые модуляторы, модуляторы интенсивности, состояние которых несет на себе информацию о передаваемом ключе. Измерение подслушивателем зондирующих состояний не приводит к ошибкам на приемной стороне, поскольку не возмущает информационных состояний, и является дополнительным информационным "бонусом" для подслушивателя.

Без учета утечки информации по побочным каналам невозможно всерьез говорить о секретности ключей в квантовой криптографии.

В данной работе предложена новая атака на системы квантовой криптографии с использованием совместной атаки на информационные квантовые состояния (PNS атака) и атаки с измерениями с определенным исходом (UM измерения) отраженных состояний от модулятора интенсивности в побочном канале. Данная атака не детектируется известными методами, поскольку не изменяет относительной статистики фотоотсчетов в Decoy State методе, но приводит только к дополнительным потерям в квантовом канале связи, которые Decoy State метод не регистрирует. Более того, считалось до сегодняшнего дня, что за потерями в линии связи следить не нужно, поскольку напрямую они не влияют на секретность, если используется Decoy State метод.

Приведенное выше рассмотрение показывает, что учет утечки информации по побочным каналам требует учета потерь в квантовом канале связи при получении оценок для длины секретного ключа. Наши оценки дают уровень потерь при известной максимальной интенсивности отраженных зондирующих состояний, при которых подслушиватель знает весь ключ и не производит ошибок на приемной стороне, и не детектируется, если не следить за общими потерями в линии. При уровне потерь меньше критического, подслушиватель неизбежно будет производить либо ошибки, либо изменение относительной статистики фотоотсчетов на приемной стороне.

Еще раз подчеркнем, что критический уровень потерь зависит от конкретной физической реализации системы квантовой криптографии, которая определяет верхнюю границу интенсивности отраженных зондирующих состояний. Знание данной границы принципиально необходимо для обеспечения секретности ключей. Например, если система должна гарантировать секретность ключей при длине линии 100 км (коэффициент прохождения $T = 10^{-2}$), а ее физическая реализация такова, что интенсивность отраженных состояний приводит к критическим потерям при описанной выше атаке, того же порядка (коэффициент прохождения линии того порядка $T_{\mathrm{Eve}} = 10^{-2}$) или больше, то система будет неспособна гарантировать секретность распределяемых ключей – подслушиватель не будет детектироваться.

Детектирование атаки обеспечивается не средствами протокола квантового распределения ключей, а физической реализацией системы, которая должна "приводить" к тому, что подслушиватель при данной атаке будет производить уровень потерь, заметно превышающий уровень потерь при длине линии, при которой должна работать система.

В заключение, во избежание недоразумений отметим. Не нужно думать, что учет побочных каналов утечки информации переводит системы квантовой криптографии из разряда криптографических систем, где секретность ключей гарантируется фундаментальными законами квантовой механики, в разряд систем, где секретность гарантируется техническими ограничениями. Даже при наличии побочных каналов утечки информации секретность ключей по-прежнему гарантируется фундаментальными ограничениями квантовой механики на различимость состояний.

Интенсивность (среднее число фотонов) в информационных состояниях – квазиоднофотонных, в идеале однофотонных, выходящих из передающей станции, также достигается техническими средствами – ослаблением до нужного уровня исходного сигнала. При заданном уровне сигналов их максимально допустимая – наилучшая возможная различимость диктуется квантовой механикой. Точно также и для состояний в побочных каналах. Верхняя граница интенсивности состояний в побочных каналах достигается техническими средствами – реализацией системы, которая дает верхний предел различимости состояний, который также диктуется фундаментальными запретами квантовой механики.

Выражаю благодарность И. М. Арбекову, К. А. Балыгину, С. П. Кулику, А. Н. Климову за интересные и многочисленные обсуждения, а также коллегам по Академии криптографии Российской Федерации за обсуждения и поддержку.

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда # 16-12-00015 (продолжение).

---

1. A. O. Bauer, *Some aspects of military line communications as deployed by the German armed forces prior to 1945. The History of Military Communications, Proceedings of the Fifth Annual Colloquium, Centre for the History of Defence Electronics*, Bournemouth University, 24 September (1999).
2. *Electromagnetic Pulse (EMP) and Tempest Protection for Facilities*, Engineer Pamphlet EP 1110-3-2, U.S. Army Corps of Engineers, Publications Depot, Hyattsville, December 31 (1990).
3. W. van Eck, Computers & Security **4**, 269 (1985).
4. P. Kocher, J. Jaffe, and B. Jun, *Differential Power Analysis*, in *Advances in Cryptology – CRYPTO'99, LNCS 1666*, ed. by M. Wiener, Springer, 388 (1999).
5. P. Wright, *Spycatcher – The Candid Autobiography of a Senior Intelligence Officer*, William Heinemann Australia (1987).
6. P. Smulders, Computers & Security **9**, 53 (1990).
7. M. G. Kuhn, Technical Report, Cambridge University, UCAM-CL-TR-577, **577** (2003).
8. C. H. Bennett and G. Brassard, in *Proc. of IEEE Int. Conf. on Comp. Sys. and Sign. Process. (IEEE, 1984)*, p. 175.
9. R. Renner, *Security of Quantum Key Distribution*, PhD thesis, ETH Zürich, (2005); arXiv:0512258.
10. J. M. Renes and J.-C. Boileau, Phys. Rev. Lett. **103**, 020402 (2009).
11. M. Tomamichel and R. Renner, Phys. Rev. Lett. **106**, 110506 (2011).
12. M. Lucamarini, I. Choi, M. B. Ward, J. F. Dynes, Z. L. Yuan, and A. J. Shields, Phys. Rev. X **5**, 031030 (2015); arXiv:1506.01989.
13. K. Tamaki, M. Curty, and M. Lucamarini, New J. Phys. **18**, 065008 (2016).
14. W. Wang, K. Tamaki, and M. Curty, New J. Phys. **20**, 083027 (2018).
15. S. N. Molotkov, Laser Phys. Lett. **17**, 015203 (2020).
16. S. N. Molotkov, K. A. Balygin, A. N. Klimov, and S. P. Kulik, Laser Phys. **29**, 124001 (2019).
17. S. N. Molotkov and K. A. Balygin, Laser Phys. **30**, 065201 (2020).
18. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **157**, 963, (2020).
19. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **111**, 778 (2020).
20. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **111**, 608 (2020).
21. W.-Y. Hwang, arXiv[quant-ph]: 0211153.
22. X.-B. Wang, Phys. Rev. Lett. **94**, 230503 (2005).
23. H.-K. Lo, X. Ma, and K. Chen, Phys. Rev. Lett. **94**, 230504 (2005); X. Ma, B. Qi, Y. Zhao, and H.-K. Lo, arXiv[quant-ph]: 0503005.
24. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **153** 895 (2018).
25. S. N. Molotkov, Laser Phys. Lett. **16**, 075203 (2019).
26. A. Chefles, Phys. Lett. A **239**, 339 (1998).
27. I. D. Ivanovic, Phys. Lett. A **123**, 257 (1987).
28. D. Dieks, Phys. Lett. A **126**, 303 (1988).
29. G. Jaeger and A. Shimony, Phys. Lett. A **197**, 83 (1995).
30. A. Peres and D. R. Terno, J. Phys. A **31**, 7105 (1998).
31. U. Herzog, Phys. Rev. A **75**, 052309 (2007).
32. T. Rudolph, R. W. Spekkens, and P. S. Turner, Phys. Rev. A **68**, 010301 (2003).
33. P. Raynal and N. Lütkenhaus, Phys. Rev. A **72**, 022342 (2005).
34. S. W. Allison, G. T. Gillies, D. W. Magnuson, and T. S. Pagano, Appl. Opt. **24**, 1 (1985).
35. L. W. Tutt and T. F. Boggess, Progress in Quantum Electronics **17**, 299 (1993).
36. R. M. Wood, *Laser-induced damage of optical materials*, Taylor & Francis (2003).
37. W. K. Wooters and W. H. Zurek, Nature **299**, 802 (1982).
38. W. Heisenberg, Z. Phys. **43**, 172 (1927).
39. H. P. Robertson, Phys. Rev. **34**, 163 (1929).

Инструкция для авторов

Журнал “Письма в ЖЭТФ” (и его англоязычная версия “JETP Letters”) публикует краткие статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты. Журнал также публикует краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале. (Правила написания комментариев см. на сайте http://www.jetpletters.ac.ru/.)

“Письма в ЖЭТФ” является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить у авторов для опубликования русскую версию статьи.

В “JETP Letters” все статьи публикуются на английском языке. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК “Наука/Интерпериодика”. Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т. п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер статьи, как правило, не должен превышать **пяти** страниц русского издания, что примерно соответствует **25 KBytes** в формате LATEX, считая 1 kByte на каждый рисунок. Более точно объем текста можно оценить, оформив текст по образцу, с использованием стилевого файла jetpl.cls.

Статьи в редакцию можно направлять

– по электронной почте letters@kapitza.ras.ru – направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (..ps), EncapsulatedPostScript (..eps) или PaintBrush (..pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроенными рисунками.

– по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, “Письма в ЖЭТФ” – два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр). К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск с текстом в формате LATEX;

Для статей из России и других стран СНГ должно быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензия на отклоненные статьи, как правило, не сообщается. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

Оформление рукописи

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — *Учреждения, где работают авторы* (*включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов*)

Дата поступления

Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по- английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе.

Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур. Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках.

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается. В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt}, а не $P_{\text{опт}}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из "Писем в ЖЭТФ" в "JETP Letters" все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторов, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах $(3 \div 4)\%$ от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются "on-line" в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы в черно-белом печатном варианте.

Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно списать с WWW- страницы "Писем в ЖЭТФ" (http://www.jetpletters.ac.ru/).

Текущий авторский указатель томов 110–112 [1)]

[1)] В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 109(1)–111(9).

Содержание
Том 112, выпуск 5

Поля, частицы, ядра

Оптика, лазерная физика

Конденсированное состояние

Разное

Содержание
Том 112, выпуск 6