ISSN 0044-4510

Том 164, Выпуск 6

Декабрь 2023

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ *и* ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА *ТОМ 164, ВЫПУСК 6 (12)*

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД *ДЕКАБРЬ 2023*

МОСКВА РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

«Темные» состояния как частный случай спектра излучения особой поверхностной волны ..... **Сухорукова О. С., Тарасенко А. С., Тарасенко С. В., Шавров В. Г.** 874

Определение тензора деформаций и полей упругих напряжений в алмазной пластине с большой кривизной изгиба на основе данных локального дифракционного метода Лауэ ..... **Дигуров Р. В., Бланк В. Д., Денисов В. Н., Мартюшов С. Ю., Сорокин Б. П., Терентьев С. А., Поляков С. Н.** 885

Чувствительность измерения спектра оптически детектируемого магнитного резонанса одиночного NV^--центра в алмазе ..... **Кукин Н. С., Мурадова А. Р., Никитин А. К., Бухтияров А. А., Семенов П. А., Васильев А. Н., Каргин Н. И., Смирнова М. О., Терентьев С. А., Тарелкин С. А., Корнилов Н. В.** 896

Комментарий к статье Р. М. Фещенко «Об интеграле по времени от электромагнитного поля» ЖЭТФ **163**, 461 (2023) ..... **Архипов М. В., Архипов Р. М., Розанов Н. Н.** 906

Ответ на комментарий к статье Р. М. Фещенко «Об интеграле по времени от электромагнитного поля» ЖЭТФ **163**, 461 (2023) ..... **Фещенко Р. М.** 908

Фантомная волоконная эндоскопия с несколькими однопиксельными датчиками в объектном канале ..... **Балакин Д. А., Белинский А. В.** 910

Моделирование методом Монте-Карло диссипации энергии при каскадном распаде внутренних вакансий в атоме железа, помещенном в воду **Чайников А. П., Кочур А. Г., Дуденко А. И.** 927

© Российская академия наук, 2023
© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2023

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

Улучшенные космологические ограничения для сценариев смешивания трех поколений стерильных нейтрино ..... **Дубинин М. Н., Казаркин Д. М.** 942

Поиск нового межнуклонного взаимодействия с помощью порошковой дифракции нейтронов ..... **Воронин В. В., Шапиро Д. Д., Семенихин С. Ю., Хансен Т. С.** 955

Универсальность нуклонных корреляций в ядрах и кумулятивное образование пионов ..... **Киселев Ю. Т.** 964

Quantum supermembranes and AdS/CFT duality ..... **Tseytlin A. A.** 977

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Точность, производительность и переносимость межчастичных потенциалов для сплавов Al–Cu: сравнение моделей погруженного атома и глубокого машинного обучения ..... **Хазиева Е. О., Щелкачев Н. М., Типеев А. О., Рыльцев Р. Е.** 980

Взаимодействие атомов на межфазной границе Al–TiC ..... **Решетняк В. В., Аборкин А. В., Филиппов А. В.** 996

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Экспериментальное исследование прототипа сверхпроводящего сигма-нейрона для адиабатических нейронных сетей ..... **Ионин А. С., Шуравин Н. С., Карелина Л. Н., Россоленко А. Н., Сидельников М. С., Егоров С. В., Чичков В. И., Чичков М. В., Жданова М. В., Щеголев А. Е., Больгинов В. В.** 1008

О теплоемкости квантовой системы твердых сфер ..... **Стишов С. М.** 1022

Магнитные межчастичные взаимодействия и суперпарамагнитная блокировка порошковых систем наночастиц биогенного ферригидрита ..... **Красиков А. А., Князев Ю. В., Балаев Д. А., Столяр С. В., Ладыгина В. П., Балаев А. Д., Исхаков Р. С.** 1026

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Инжекция спина движущейся доменной стенкой на границе раздела антиферромагнитного изолятора с двумерным металлом ..... **Мальшуков А. Г.** 1039

Термоэдс и эффект Холла в коррелированных металлах и допированных мотт-хаббардовских диэлектриках: DMFT-приближение . . **Кучинский Э. З., Кулеева Н. А., Садовский М. В.** 1056

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Расчетно-экспериментальное исследование процесса дробления капли жидкости под действием воздушной ударной волны ..... **Анисифоров К. В., Георгиевская А. Б., Левкина Е. В., Невмержицкий Н. В., Раевский В. А., Сеньковский Е. Д., Сотсков Е. А.** 1070

Динамика, симметрия и ударно-индуцированное «пыление» при квазиизэнтропическом и изэнтропическом ускорении цилиндрических лайнеров ..... **Ерунов С. В., Огороднников В. А., Бликов А. О., Князев В. Н., Кулаков Е. В., Георгиевская А. Б., Давыдов Н. Б., Соколова А. С., Чудаков Е. А., Жерноклетов М. В., Романов А. В., Блинов И. А., Аринин В. А., Антипов М. В., Явтушенко А. П.** 1087

Квазилинейное моделирование развития вейбелевской турбулентности в анизотропной бесстолкновительной плазме **Кузнецов А. А., Нечаев А. А., Гарасёв М. А., Кочаровский Вл. В.** 1098

Магнитоиндуцированные течения в тромбированных каналах со слоем феррожидкости ..... **Мусихин А. Ю., Зубарев А. Ю.** 1120

Алфавитный указатель тома 164 за 2023 г. 1128

Предметный указатель тома 164 за 2023 г. 1137

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 874–884 © 2023

«ТЕМНЫЕ» СОСТОЯНИЯ КАК ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ ОСОБОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ВОЛНЫ

О. С. Сухорукова [a,b], ***А. С. Тарасенко*** [b], ***С. В. Тарасенко*** [b*], ***В. Г. Шавров*** [c]

[a] *Донецкий государственный университет,*
Физико-технический факультет
283001, Донецк, Россия

[b] *Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина*
283114, Донецк, Россия

[c] *Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова*
Российской академии наук
125009, Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 февраля 2023 г.,
после переработки 10 апреля 2023 г.
Принята к публикации 18 апреля 2023 г.

В случае полного внутреннего отражения плоской объемной электромагнитной волны, падающей извне на поверхность оптически прозрачной слоистой структуры, одновременное обращение в нуль числителя и знаменателя входного поверхностного волнового импеданса может отвечать формированию «темного» состояния. Это связано с появлением на фоне сплошного спектра излучательных мод точки вырождения спектров вытекающих особых поверхностных волн первого и второго типа. Для этих волн мгновенный поток энергии через границу раздела с полуограниченной оптически более плотной средой в открытом канале излучения равен нулю в любой момент времени. При приближении к точке реализации «темного» состояния локальные максимумы эффектов незеркального отражения первого порядка, сопровождающих резонансное возбуждение вытекающих особых поверхностных волн, неограниченно возрастают.

DOI: 10.31857/S0044451023120015
EDN: NBINTU

1. ВВЕДЕНИЕ

Предсказанная в [1] принципиальная возможность формирования связанных состояний с бесконечной добротностью в сплошном спектре излучения открытых электромагнитных структур (связанных состояний в континууме (ССК) или «темных» состояний) в последние годы стала представлять также и значительный практический интерес, что и лежит в основе резкого всплеска исследовательской активности в этом направлении [2, 3]. Как известно, условия формирования поверхностных ССК в электромагнитном (ЭМ) спектре излучения полуограниченных сред с учетом дискретности их структуры были рассмотрены еще в [4]. Это послужило основой для значительного числа исследований и, в частности, была выполнена серия работ [5–8] по изучению условий формирования «темных» состояний в сплошном спектре отражения слоя в асимметричном окружении при наличии только одного открытого канала радиационного излучения (он может определяться уходящей на бесконечность плоской объемной электромагнитной волной TM- или TE-типа). Однако лишь в самое последнее время появились работы, связанные с анализом возможности реализации ССК в условиях полного внутреннего отражения (ПВО) для уединенной границы раздела двух полуограниченных пространственно однородных сред [9].

Вместе с тем, результаты в [5–9] были получены с использованием существенного для темы и целей предлагаемой нами работы допущении: найденные в [5–9] условия формирования ССК в полуоткрытой слоистой структуре (в ней имеется только одно полупространство с открытым радиационным каналом) были результатом совместного решения не одной, а двух граничных задач. Целью решения одной из них было определение условий существова-

* E-mail: s.v.tarasenko@mail.ru

ния и дисперсионных свойств распространяющихся вытекающих (несобственных [10]) ЭМ-волн (что с точки зрения квантовой механики отвечает распаду квазистационарного состояния [11]) при наличии стандартных максвелловских межслоевых граничных условий [12]. В ходе решения второй краевой задачи в [5–9] определялся спектр распространяющихся собственных ЭМ-колебаний обсуждаемой слоистой структуры при дополнительном условии равенства нулю (независимо от частоты и угла распространения) амплитуды объемной волны в открытом канале излучения.

Однако необходимо учитывать следующее.

1. Предложенное в [5–9] условие существования поверхностных «темных» состояний (в полуограниченной оптически более плотной среде амплитуда излучаемой волны в открытом радиационном канале равна нулю) является не причиной, а только следствием формирования подобных ССК.

2. Такое дополнительное условие на структуру волновых полей в открытом радиационном канале оптически более плотной среды не позволяет изучить ни спектр высокодобротных («суперрезонансных») состояний, возникающих в окрестности ССК [13], ни характер сопровождающих их формирование незеркальных эффектов для падающей извне квазиплоской или квазимонохроматической объемной волны [14,15]. Вместе с тем, именно анализ особенностей реализации резонансных эффектов с участием соответствующего типа вытекающих поверхностных ЭМ-волн вблизи поверхностного «темного» состояния и представляет практический интерес.

3. Согласно своему определению, поверхностное ССК является собственной волной спектра ЭМ-возбуждений, в том числе и для полуоткрытой слоистой структуры. Это значит, что в соответствии с общими положениями теории волновых процессов в слоистых средах [15] его спектр должен определяться как полюс коэффициента отражения для соответствующей плоской объемной волны, излучаемой в открытом радиационном канале, а значит, быть результатом решения одной, а не двух [5–9] краевых задач. Таким образом, в условиях полного внутреннего отражения (ПВО) формирование обсуждаемой поверхностной ССК будет иметь место при таких сочетаниях частоты и продольного волнового числа падающей извне объемной ЭМ-волны, при которых и мнимая и действительная части знаменателя коэффициента отражения от поверхности полуоткрытой слоистой структуры одновременно обращаются в нуль.

Как следует из [2,3,5–8,16], формирование ССК в спектре прохождения слоя в симметричном окружении возможно при вырождении по частоте и продольному волновому числу резонансно возбуждаемых вытекающих волновых мод слоя на фоне деструктивной интерференции их полей излучения (механизм Фридриха – Винтгена [17]). Это означает, что и в условиях ПВО для полностью отражающей структуры (например, слоя с асимметричным окружением) возникновение поверхностного «темного» состояния на фоне сплошного спектра излучения также в принципе возможно, но как результат слияния поверхностных поляритонных резонансов, связанных с вытекающими поверхностными волнами. В этом случае поверхностное «темное» состояние также будет формироваться вследствие деструктивной интерференции в открытом радиационном канале полей излучения вытекающих волноводных мод, но теперь не объемных, а поверхностных. Следует отметить, что, подобно резонансно возбуждаемым вытекающим волноводным модам из [5–8], вытекающие поверхностные волны при формальном стремлении к нулю их радиационного затухания также должны трансформироваться в собственные (теперь уже поверхностные) моды спектра отражающей полуограниченной слоистой структуры с полностью экранированной внешней поверхностью.

Из результатов [18,19] следует, что в условиях ПВО подобными характеристиками могут обладать вытекающие (несобственные) особые поверхностные волны (ОПВ) с поляризацией $\gamma = o, e$. В частности, в [18,19] впервые было показано, что в этом случае для падающей из оптически более плотной среды плоской объемной ЭМ-волны типа ТМ ($\gamma = e$) или ТЕ ($\gamma = o$) сопутствующий поток энергии через уединенную границу раздела сред с единичным вектором нормали $\mathbf{q}$ может быть строго равен нулю в любой момент времени. Если $\mathbf{a}$ — единичный вектор нормали к плоскости падения, то в случае однопарциальной ОПВ ТЕ-типа $\mathbf{H}\cdot\mathbf{b} = 0$, ($\mathbf{b} = \mathbf{q}\times\mathbf{a}$). Что же касается однопарциальной ОПВ ТМ-типа, то для нее касательное к поверхности электрическое поле удовлетворяет соотношению $(\mathbf{Eb}) = 0$. В [18] было показано, что в условиях ПВО возбуждение ОПВ ТМ- или ТЕ-типа падающей извне плоской объемной волной соответствующей поляризации может быть поверхностным резонансом, а интенсивность возбуждаемой ОПВ будет вчетверо превосходить интенсивность падающей ЭМ-волны (электромагнитный аналог угла Рэлея в акустике [18,19]). Это связано с тем, что в бездиссипативном пределе при таком поверхностном резонансе падающая

извне объемная ЭМ-волна ТМ-типа отражается от поверхности диэлектрика как от идеального электрического проводника, а падающая объемная ЭМ-волна ТЕ-типа — как от идеального магнитного проводника. Согласно [18, 19], в условиях ПВО формирование ОПВ возможно как в случае уединенной границы раздела, так и в случае слоистой гетероструктуры. Однако до сих пор анализ связи структуры поля ЭМ-излучения ОПВ и условий формирования поверхностных ССК в сплошном спектре ЭМ-отражения полуоткрытых слоистых структур независимо от числа границ раздела не проводился.

В связи с этим, цель предлагаемой работы — показать принципиальную возможность формирования «темных» состояний как части спектра излучения ОПВ в условиях полного отражения плоской объемной ЭМ-волны от поверхности оптически прозрачной полуоткрытой слоистой структуры. Изучить динамику сопутствующих незеркальных эффектов отражения первого порядка, используя иной, чем в [5–9], критерий существования связанных состояний в континууме излучательных ЭМ-мод указанной слоистой структуры.

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Пусть имеется плоская граница раздела (нормаль к границе $\mathbf{q}\|OY$) оптически одноосных, полуограниченных, оптически прозрачных диэлектриков с материальными соотношениями вида [20] ($\overline{\overline{I}}$ — единичный тензор, $\mathbf{D}$ и $\mathbf{B}$ — вектора электрической и магнитной индукции соответственно, индексы $\pm$ относятся к величинам, характеризующим верхнее ($y > 0$) и нижнее ($y < 0$) полупространство):

$$\mathbf{D}_\pm = (\varepsilon_{o\pm}\overline{\overline{I}} - (\varepsilon_{e\pm} - \varepsilon_{o\pm})\mathbf{c}_\pm \otimes \mathbf{c}_\pm)\mathbf{E}_\pm \qquad (1)$$

и максвелловскими граничными условиями вида

$$\begin{gathered}\mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{a} = \mathbf{E}_- \cdot \mathbf{a}, \quad \mathbf{E}_+ \cdot \mathbf{b} = \mathbf{E}_- \cdot \mathbf{b}, \\ \mathbf{H}_+ \cdot \mathbf{a} = \mathbf{H}_- \cdot a, \quad H_+ \cdot b = \mathbf{H}_- \cdot b, \quad \mathbf{y} = 0, \\ |\mathbf{E}_-(y \to -\infty)| \to 0, \qquad |\mathbf{H}_-(y \to -\infty)| \to 0.\end{gathered} \qquad (2)$$

В дальнейшем будем полагать, что при всех рассматриваемых значениях ω и h среда «+», занимающая верхнее полупространство, является оптически более плотной по отношению к среде «-», расположенной при $y < 0$ (см.рис. 1).

Здесь ϑ — угол определяющий относительную ориентацию оптической оси $\mathbf{c}$ и вектора $\mathbf{b} = \mathbf{q} \times \mathbf{a}$ в плоскости с нормалью вдоль $\mathbf{q}$ (см. рис. 2).

В каждой из сред (1) при произвольной ориентации оси оптической анизотропии $\mathbf{c}_\pm$ относительно выбранной плоскости падения с нормалью вдоль

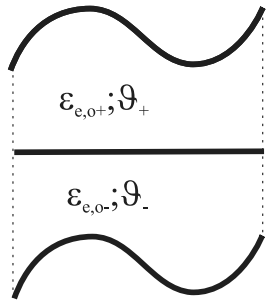


Рис. 1. Уединенная граница раздела полуограниченных одноосных диэлектриков (1) оптические оси которых лежат в плоскости границы раздела ($\mathbf{c}_\pm \perp \mathbf{q}$), а их ориентация определяется углами $\vartheta_\pm$ с плоскостью падения волны

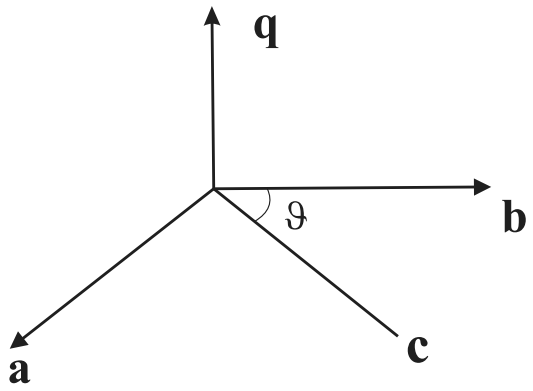


Рис. 2. Относительное положение оптической оси одноосного диэлектрика $\mathbf{c}$, нормали к границе раздела сред $\mathbf{q}$ и к плоскости распространения ЭМ-волны $\mathbf{a}$, $\mathbf{b} = \mathbf{q} \times \mathbf{a}$

$\mathbf{a}$ плоская ЭМ-волна будет иметь в общем случае двухпарциальную структуру. Если $\mathbf{q} \perp \mathbf{c}_\pm$, то амплитуда коллинеарной направлению $\mathbf{q} \| oy$ компоненты волнового вектора $\mathbf{k}_{\gamma\pm} = h\mathbf{b} + k^\pm_{\|\gamma}\mathbf{q}$ ($\gamma = o$ или $\gamma = e$) в каждой из граничащих сред в (1) определяется [12, 20] следующими соотношениями:

$$\begin{gathered}\eta^2_{o\alpha} = h^2 - k_0^2\varepsilon_{o\alpha}, \alpha = \pm, \\ \eta^2_{e\alpha} = \frac{\varepsilon_{e\alpha}}{\varepsilon_{o\alpha}}\left(\eta^2_{o\alpha} - \frac{\varepsilon_{e\alpha} - \varepsilon_{o\alpha}}{\varepsilon_{e\alpha}}(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{a})^2 h^2\right).\end{gathered} \qquad (3)$$

Здесь

$$\eta^2_{\gamma\pm} \equiv -(k^\pm_{\|\gamma})^2,$$

$$\mathbf{c}_\pm = \cos\vartheta_\pm \mathbf{b} + \sin\vartheta_\pm \mathbf{a}, \quad 0 < \vartheta_\pm < \pi/2.$$

В результате, если из среды «+» на поверхность (2) падает, например, плоская объемная волна с заданной поляризацией $\gamma = o$ или $\gamma = e$, то при $y = 0$ пространственную структуру магнитного и электрического полей для падающей (i) и отраженной (r)

волн в полуограниченном одноосном диэлектрике «+» и прошедшей в нижнее полупространство «-» волны (t) с учетом (3) можно представить в виде ($\psi \equiv hz - \omega t$ (при $\mathbf{b}\|oz$), $\gamma \neq \bar{\gamma}$, $\bar{\gamma} = e, o$)

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_+ &= (\mathbf{E}^i_\gamma + V_{\gamma\gamma}\mathbf{E}^r_\gamma + V_{\gamma\bar{\gamma}}\mathbf{E}^r_{\bar{\gamma}})\exp(i\psi), \\ \mathbf{H}_+ &= (\mathbf{H}^i_\gamma + V_{\gamma\gamma}\mathbf{H}^r_\gamma + V_{\gamma\bar{\gamma}}\mathbf{H}^r_{\bar{\gamma}})\exp(i\psi)), \\ \mathbf{E}_- &= (W_{\gamma\gamma}\mathbf{E}^t_\gamma + W_{\gamma\bar{\gamma}}\mathbf{E}^t_{\bar{\gamma}})\exp(i\psi), \\ \mathbf{H}_- &= (W_{\gamma\gamma}\mathbf{E}^t_\gamma + W_{\gamma\bar{\gamma}}\mathbf{E}^t_{\bar{\gamma}})\exp(i\psi). \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $\mathbf{E}^p_\gamma$, $\mathbf{H}^p_\gamma$ ($p = i, r, t$) — единичные векторные амплитуды магнитного и электрического полей падающей (i), отраженной (r) и прошедшей (t) волн с волновыми векторами

$$\mathbf{k}^p_\gamma = h\mathbf{b} + k^p_{\|\gamma}\mathbf{q},$$

$$(k^{i,r}_{\|\gamma})^2 \equiv -\eta^2_{\gamma+}, \quad (k^t_{\|\gamma})^2 \equiv -\eta^2_{\gamma-},$$

$V_{\gamma\delta}$ ($W_{\gamma\delta}$) — амплитудные коэффициенты отражения (прохождения) плоской обыкновенной ($\gamma = o$) и необыкновенной ($\gamma = e$) ЭМ-волн. При заданных ориентации плоскости падения волны и направлении оси оптической анизотропии $\mathbf{c}_\alpha$ явный вид $\mathbf{E}^p_\gamma$ и $\mathbf{H}^p_\gamma$ определяется из уравнений Максвелла (см. Приложения, а также [12,20]). Ограничимся такими оптическими конфигурациями и значениями внешних параметров, при которых в полуограниченном одноосном диэлектрике «+» имеется только один открытый канал излучения, сформированный уходящей на бесконечность плоской объемной ЭМ-волной, а все остальные радиационные каналы закрыты, так как связаны с эванесцентными волнами. Пользуясь (1) – (4), введем обозначения

$$\overline{\overline{\mathbf{E}}}_p \equiv \begin{pmatrix} (\mathbf{E}^p_e\mathbf{a})(\mathbf{E}^p_o\mathbf{a}) \\ (\mathbf{E}^p_e\mathbf{b})(\mathbf{E}^p_o\mathbf{b}) \end{pmatrix}, \overline{\overline{\mathbf{H}}}_p \equiv \begin{pmatrix} (\mathbf{H}^p_e\mathbf{a})(\mathbf{H}^p_o\mathbf{a}) \\ (\mathbf{H}^p_e\mathbf{b})(\mathbf{H}^p_o\mathbf{b}) \end{pmatrix}. \tag{5}$$

В этом случае из стандартной теории волновых процессов в слоистых средах [15] следует, что на фоне сплошного спектра отражения формирование поверхностных ССК становится принципиально возможным, если их частота и продольное волновое число одновременно таковы, что

$$\begin{aligned} |\mathrm{Re}\{K(\omega,h\}| + |\mathrm{Im}\{K(\omega,h\}| = 0, \\ K \equiv |\overline{\overline{E}}_r - \overline{\overline{Z}}_{in}\overline{\overline{H}}_r|, \qquad \overline{\overline{Z}}_{in} \equiv \overline{\overline{E}}_t\overline{\overline{H}}_t^{-1} \end{aligned} \tag{6}$$

где $K(\omega, h)$- знаменатель коэффициентов отражения $V_{\gamma\gamma}, V_{\gamma\bar{\gamma}}$, в (4). Заметим, что (6) представляет собой вариант условия поперечного резонанса, определяющего спектр как собственных, так и несобственных поверхностных волн [10]. В случае поверхностного «темного» состояния входящая в (6) матрица поверхностных волновых импедансов $\overline{\overline{Z}}_{in}$ является эрмитовой (см. также [21,22]). Для выполнения (6) достаточно, чтобы на плоскости внешних параметров ω и h в области ПВО как минимум у одной из компонент матрицы $\overline{\overline{Z}}_{in}$ в точке поверхностного ССК и числитель и знаменатель одновременно стремились к нулю. Данное утверждение справедливо независимо от того, одно- или двухпарциальная плоская объемная ЭМ-волна формирует в условиях ПВО открытый радиационный канал в полуограниченной оптически более плотной среде.

В связи с этим в дальнейшем, для большей наглядности и уменьшения объема вычислений, ограничимся анализом условий формирования «темных» состояний ССК только для таких оптических конфигураций, у которых в оптически более плотной среде «+» открытый радиационный канал связан с излучением на бесконечность плоской объемной волны только TE- или только TM-типа.

3. «ТЕМНОЕ» СОСТОЯНИЕ КАК ТОЧКА ВЫРОЖДЕНИЯ СПЕКТРА ВЫТЕКАЮЩИХ ОСОБЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН

Пусть в (1) $\mathbf{c}_+\|\mathbf{a}$, $\mathbf{c}_- \perp \mathbf{q}$, а сочетания ω, h таковы, что с учетом (3) имеет место одна из нижеследующих систем неравенств:

$$\eta^2_{e+} < 0, \quad \eta^2_{o\pm} > 0, \quad \eta^2_{e-} > 0, \tag{7}$$

или

$$\eta^2_{o+} < 0, \quad \eta^2_{e\pm} > 0, \quad \eta^2_{o-} > 0. \tag{8}$$

Это означает, что в условиях ПВО в оптически более плотной среде «+» имеется только один открытый канал радиационного излучения, связанный с уходящей на бесконечность плоской объемной волной: только TM-типа в случае (7), или только TE-типа в случае (8). В результате, для падающей в среде с на поверхность (2) плоской объемной волны с поляризацией TM- или TE-типа знаменатель $K(\omega, h)$ соответствующего коэффициента отражения $V_{\gamma\gamma}$ (5), (6) в условиях ПВО (7) при $\gamma = e$ или (8) при $\gamma = o$ принимает вид

$$\begin{aligned} K \equiv iZ_{\gamma+}D_\gamma(\omega,h) - N_\gamma(\omega,h), \\ Z_{e+} \equiv \frac{k^r_{\|e}}{k_0\varepsilon_{o+}}, \quad Z_{o+} \equiv \frac{k_0}{k^r_{\|o}}, \end{aligned} \tag{9}$$

а значит, вследствие (6) спектр ССК определяется для (9) как

$$|D_\gamma| + |N_\gamma| = 0, \quad \gamma = e, o. \tag{10}$$

Согласно [18, 19], если открытый канал излучения связан с необыкновенной волной $\gamma = e$ (7), то в (9), (10) условиям $|N_e(\omega, h)| = 0$ и $|D_e(\omega, h)| = 0$ отвечают $\mathbf{E}_e^t \cdot \mathbf{b} = 0$ и $\mathbf{H}_e^t \cdot \mathbf{a} = 0$ соответственно. Если же открытый канал излучения связан с обыкновенной волной $\gamma = o$ (8), то в (9), (10) $|N_o(\omega, h)| = 0$ соответствует $\mathbf{E}_o^t \cdot \mathbf{a} = 0$, тогда как $|D_o(\omega, h)| = 0$ соответствует $\mathbf{H}_o^t \cdot \mathbf{b} = 0$. В дальнейшем возникающие в области ПВО в оптически менее плотной среде неоднородные ЭМ-волны, обладающие такой характеристикой, будем называть ОПВ-I с поляризацией $\gamma = e$ или $\gamma = 0$, если $|N_\gamma(\omega, h)| = 0$, и ОПВ-II, если $|D_\gamma(\omega, h)| = 0$. В этом случае рассмотренные в [18,19] однопарциальная ОПВ ТМ-типа является ОПВ-I, а ОПВ ТЕ-типа — ОПВ-II. По аналогии с предложенной в [23] классификацией вытекающих поверхностных упругих волн, согласно (9), и ОПВ-I, и ОПВ-II отвечают вытекающим поверхностным ЭМ-волнам первого типа на фоне спектра излучательных мод рассматриваемой полуоткрытой структуры.

Если в (9), (10) для открытого радиационного канала, связанного с излучением на бесконечность плоской объемной волны с поляризацией γ и заданной частотой волны ω, возможно $|D_\gamma(\omega, h = h_D(\omega))| = 0$, $|N_\gamma(\omega, h = h_N(\omega))| = 0$ то спектр ССК (10) можно представить и как $h_N(\omega) = h_D(\omega)$. Таким образом, формирование ССК (10) в спектре излучения полуоткрытой структуры (9) можно рассматривать как результат деструктивной интерференции радиационных полей (с поляризацией волны $\gamma = e$ или $\gamma = o$) одновременно существующих (при одних и тех же ω, h) в открытом канале излучения вытекающих ОПВ-I и ОПВ-II. Это означает, что, несмотря на псевдоповерхностный характер и ОПВ-I и ОПВ-II, и в этом случае можно говорить о формировании «темных» состояний по механизму Фридриха–Винтгена [17]. Что же касается использованного в [5–9] условия для нахождения ССК, то оно является следствием предлагаемого в данной работе механизма. Отметим также, что в рассматриваемой оптической конфигурации с учетом (5), (6), (19) соотношение для входного поверхностного волнового импеданса в (6) оптически менее плотной среды в случае падающей извне ($y > 0$) плоской объемной ЭМ-волны с поляризацией γ принимает вид

$$Z_{in\gamma} = \frac{N_\gamma(\omega, h)}{D_\gamma(\omega, h)}, \quad \gamma = e, o. \tag{11}$$

В результате, при $\mathbf{c}_+ \| \mathbf{a}$, $\mathbf{c}_- \perp \mathbf{q}$ для падающей в среде «+» на поверхность (2) плоской объемной волны с поляризацией $\gamma = e$ (7) или $\gamma = o$ (8), с учетом (11), можно представить как

$$V_{\gamma\gamma} = \frac{iZ_{\gamma+} + Z_{in\gamma}}{iZ_{\gamma+} - Z_{in\gamma}}, \quad \gamma = e, o. \tag{12}$$

Нули числителя и знаменателя $Z_{in\gamma}$ (11) соответственно отвечают законам дисперсии ОПВ-I или ОПВ-II. Таким образом, согласно (12), по мере приближения параметров падающей волны (ω. h) к точке формирования «темного» состояния, в соответствии с (9), (10), и числитель, и знаменатель входного волнового импеданса $Z_{in\gamma}$ (11) будут одновременно стремиться к нулю, обращаясь в нуль в самой точке ССК (точке вырождения спектров ОПВ-I и ОПВ-II).

4. РЕЗОНАНСНОЕ УСИЛЕНИЕ НЕЗЕРКАЛЬНЫХ ЭФФЕКТОВ ПЕРВОГО ПОРЯДКА В ОКРЕСТНОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО ССК

По мере приближения к точке возможного существования рассматриваемого поверхностного ССК (9), (10) радиационная ширина линии вытекающих и ОПВ-I, и ОПВ-II неограниченно уменьшается, что отвечает увеличению времени жизни таких квазистационарных возбуждений (формируются «суперрезонансные» (высокодобротные) состояния). В результате, при выполнении условий поверхностного резонанса с участием ОПВ-I или ОПВ-II, возникает возможность для аномального роста сопутствующих эффектов незеркального волнового отражения первого порядка [18, 19]. В частности это имеет место, если падающая извне на поверхность отражающей слоистой структуры ЭМ-волна соответствующей поляризации является квазиплоской (пространственный эффект Гуса–Хенхен [14, 15]) или квазимонохроматической (эффект Вигнеровского запаздывания [24]). Начнем с рассмотрения первого из указанных эффектов. Согласно [15], в условиях ПВО для падающей из среды (1) плоской объемной волны с поляризацией $\gamma = e$ (7) (или $\gamma = o$ (8)) коэффициент отражения (12) можно представить как $V_{\gamma\gamma} = \exp i\phi_\gamma$ ($\mathrm{tg}(\phi_\gamma/2) = Z_{in\gamma}/Z_{\gamma_+}$). В этом случае для отраженного остронаправленного пучка объемных ЭМ-волн с поляризацией γ его продольное смещение вдоль границы раздела сред в направлении $\mathbf{b}$ (пространственный эффект Гуса–Хенхен) определяется как $\Delta_\gamma = -\mathrm{sign}(h)\partial\phi_\gamma/\partial h$ [14, 15]. В результате, если падающая из среды (1) квазиплоская объемная ЭМ-волна с поляризацией

может резонансно возбуждать вытекающую ОПВ-I ($|N_\gamma(h = h_N, \omega)| = 0$), то в окрестности этого поверхностного поляритонного резонанса величина продольного смещения отраженного пучка с учетом (9), (11), (12) определяется как ($\gamma = e, o$)

$$\Delta_\gamma \approx \frac{2\beta_{h_N}}{(h_N - h)^2 + \beta_{h_N}^2}, \qquad \beta_{h_N} \equiv \frac{Z_{\gamma+} D_\gamma}{(\partial N_\gamma/\partial h)_{h_N}}. \quad (13)$$

В случае, когда падающая извне квазиплоская объемная волна с $\gamma = e$ или $\gamma = o$ в условиях ПВО резонансно возбуждает ОПВ-II ($|D_\gamma(h = h_D, \omega)| = 0$), то для отраженного пучка

$$\Delta_\gamma \approx \frac{2\beta_{h_D}}{(h_D - h)^2 + \beta_{h_D}^2}, \qquad \beta_{h_D} \equiv \frac{N_\gamma}{Z_{\gamma+}(\partial D_\gamma/\partial h)_{h_D}}. \quad (14)$$

Таким образом, на плоскости внешних параметров «ω-h» при прохождении на заданной частоте как линии ОПВ-I (т. е. при $h = h_N(\omega)$), так и линии ОПВ-II (т. е. при $h = h_D(\omega)$) пространственный эффект Гуса – Хенхен [14,15] достигает локального максимума [19]. Его величина, по мере приближения к точке существования поверхностного ССК (10) (т. е. если в (13), (14)$|h_N(\omega) - h_D(\omega)| \to 0$), неограниченно увеличивается. Если же при анализе соотношений (4) – (12) фиксировать не частоту падающей волны ω, а угол ее падения (т. е. h), возможны и иные особенности реализации незеркальных эффектов в окрестности ССК (10). Предположим, что в этой же оптической конфигурации из среды (1) на импедансную поверхность (2) падает не квазиплоская, а квазимонохроматическая волна с поляризацией $\gamma = e$ (или $\gamma = o$). В этом случае аналог соотношения (10) можно представить в виде

$$|N_\gamma(h, \omega = \omega_N(h))| = 0, \quad |D_\gamma(h, \omega = \omega_D(h))| = 0.$$

Учитывая, что для квазимонохроматической волны с поляризацией γ эффект Вигнеровского запаздывания определяется как $\Delta t_\gamma = \partial\phi_\gamma/\partial\omega$, несложно показать, что его локальный максимум при заданном h также достигается на линиях и ОПВ-I и ОПВ-II. Это коррелирует с возможностью усиления пространственного эффекта Гуса – Хенхен (13), (14) в условиях (4)–(10) (см. также [24]). Как следствие, при одновременно одном открытом и одном закрытом каналах излучения в оптически более плотной среде «+», величина обсуждаемого эффекта Вигнера также может неограниченно увеличиваться (в рамках рассматриваемой модели) по мере приближения к точке поверхностного ССК (10), т. е. теперь при $|\omega_N(h) - \omega_D(h)| \to 0$. Физической причиной неограниченного (в рамках рассматриваемой модели) увеличения при приближении к точке ССК вдоль линии ОПВ (9) обоих отмеченных эффектов незеркального отражения первого порядка (пространственного эффекта Гуса – Хенхен и вигнеровского запаздывания) является переход на фоне непрерывного спектра излучательных мод в открытом радиационном канале от квазистационарного состояния (вытекающей ОПВ (9)) к стационарному (ССК (10)).

До сих пор мы не конкретизировали тип ССК, несмотря на то, что ранее (см., например, [2, 3]) уже были предложены различные варианты классификации этого класса собственных состояний на фоне сплошного спектра излучения открытой динамической системы. В частности, согласно [2], помимо ССК, являющихся результатом инверсной конструкции потенциала, физические механизмы, приводящие к появлению ССК, можно в целом разделить на симметрийно-защищенные и интерференционные. Далее на конкретных примерах рассмотрим, как в условиях ПВО работает сформулированный выше критерий формирования поверхностных ССК для обоих этих вариантов.

5. СЛУЧАЙ СИММЕТРИЙНО-ЗАЩИЩЕННОГО «ТЕМНОГО» СОСТОЯНИЯ

Как пример рассмотрим границу раздела оптически отрицательных одноосных полуограниченных диэлектриков (1) с максвелловскими граничными условиями (2). Если $\mathbf{c}_+ \| \mathbf{a}$ и $|(\mathbf{c}_- \mathbf{a})| + |(\mathbf{c}_- \mathbf{b})| \neq 0$, $\mathbf{c}_\pm \perp \mathbf{q}$ (см. рис. 1a, b), то в случае (8) для коэффициента отражения падающей в среде $y > 0$ в условиях ПВО ($\eta_{e\pm}^2 > 0$, $\eta_{o+}^2 < 0$, $\eta_{o-}^2 > 0$) на границу раздела плоской объемной обыкновенной волны, с учетом (4) – (6), (11), (12) получим

$$V_{oo} = -\frac{iZ_{o+}D_o + N_o}{iZ_{o+}D_o - N_o}, \quad \gamma = e, o, \qquad (15)$$

$$N_o \equiv (\mathbf{E}_o^t \mathbf{a})\delta + (\mathbf{E}_e^t \mathbf{a})((\mathbf{E}_o^t \mathbf{b}) + Z_{e+}(\mathbf{H}_o^t \mathbf{a})),$$
$$D_o \equiv (\mathbf{H}_o^t \mathbf{b})\delta + (\mathbf{H}_e^t \mathbf{b})((\mathbf{E}_o^t \mathbf{b}) + Z_{e+}(\mathbf{H}_o^t \mathbf{a})), \qquad (16)$$
$$\delta \equiv (\mathbf{E}_e^t \mathbf{b}) + Z_{e+}(\mathbf{H}_e^t \mathbf{a}), Z_{e+} \equiv -\frac{\eta_{e+}}{\varepsilon_{o+} k_0}.$$

При $\mathbf{c}_- \cdot \mathbf{a} \to 0$ в (15), (16) имеем

$$|(\mathbf{E}_o^t \mathbf{b})| + |(\mathbf{H}_o^t \mathbf{a})| \to 0$$

и

$$|(\mathbf{H}_e^t \mathbf{b})| + |(\mathbf{E}_e^t \mathbf{a})| \to 0$$

(см. Приложения).

В результате, если $\varepsilon_{o\pm} > 0$, $\varepsilon_{e-} < 0$, $\varepsilon_{e+} > 0$, то при выполнении (8) для $|\mathbf{c}_- \cdot \mathbf{a}| + |\delta| \to 0$ в (15), (16) получим

$$|D_{\gamma=o}| + |N_{\gamma=o}| \to 0.$$

Это значит, что для падающей извне плоской объемной волны типа и числитель и знаменатель входного волнового импеданса (11) с $\gamma = o$ будут одновременно стремиться к нулю. В результате для рассматриваемой уединенной границы раздела сред (2) при $\mathbf{c}_+ \| \mathbf{a}$, $\mathbf{c}_- \| \mathbf{b}$ (на рис. 1 а) симметрийно-защищенным поверхностным ССК (10) будет поверхностный поляритон типа, закон дисперсии которого $\delta = 0$ с учетом (3), (16) и введенных выше обозначений можно представить как $\eta_{e-}\varepsilon_{o+} = -\eta_{e+}\varepsilon_{e-}$ (см. [25]). При этом в самой точке ССК (точке слияния законов дисперсии ОПВ-I ($N_o(\omega, h) = 0$) и ОПВ-II ($D_o(\omega, h) = 0$)) коэффициент отражения (11), (12), (15), (16) принимает вид

$$V_{oo} = -\frac{iZ_{o+} + Z_{o-}}{iZ_{o+} - Z_{o-}}, \quad Z_{o-} \equiv \frac{k_0}{\eta_{o-}}, \quad |(\mathbf{c}_- \mathbf{a})| + |\delta| = 0. \tag{17}$$

Предложенный критерий формирования в условиях ПВО ССК в спектре излучения полуоткрытой отражающей структуры, основанный на поиске точек вырождения спектров ОПВ первого и второго типа (одновременного обращения в нуль числителя и знаменателя поверхностного волнового импеданса), может быть эффективным не только для симметрийно-защищенных ССК, но и в случае интерференционного механизма формирования «темных» состояний на фоне сплошного спектра излучательных мод [2, 17] при наличии нескольких границ раздела.

6. СЛУЧАЙ «ТЕМНОГО» СОСТОЯНИЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОГО ТИПА

В условиях ПВО (7) или (8) спектр вытекающих волноводных ЭМ-мод слоя в асимметричном окружении также можно рассматривать и как ЭМ-аналог вытекающих поверхностных волн Лява, хорошо изученных в акустике слоистых сред (см., например, [22, 23]). С этой точки зрения рассматриваемый в данной работе и основанный на структуре входного поверхностного волнового импеданса критерий определения условий формирования ССК как точки вырождения спектров особых поверхностных волн (но теперь интерференционных [19]) применим и в данном случае. Пусть имеется оптически прозрачная диэлектрическая структура, образованная оптически прозрачными одноосными диэлектриками: слой среды толщиной $2d$, обе поверхности которого связаны с полуограниченными диэлектрическими полупространствами (среда «+» при $y > d$ и среда «-» при $y < -d$). Величины, относящиеся к верхнему и нижнему полупространствам, в дальнейшем по-прежнему будем отмечать индексами «±» соответственно, тогда как у величин, относящиеся к слою, индекса не будет (см. рис. 3).

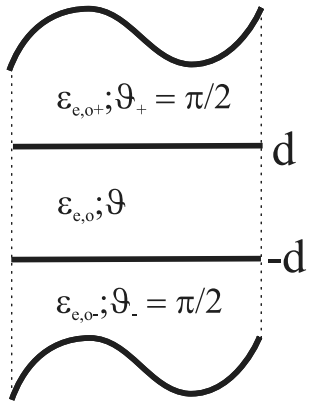


Рис. 3. Слой толщиной $2d$ одноосного диэлектрика (оптическая ось $\mathbf{c} \perp \mathbf{q}$, $\cos\vartheta \equiv (\mathbf{cb})$, в асимметричном окружении полуограниченных одноосных диэлектриков (1) с $\mathbf{c}_\pm \| \mathbf{a}$

Чтобы избежать неоправданно громоздких для целей данной работы соотношений, в дальнейшем также ограничимся рассмотрением случая, когда на обеих интерфейсных границах ($y = \pm d$) рассматриваемой слоистой структуры имеет место следующая система граничных условий :

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{E}_\pm \cdot \mathbf{a} = 0, \quad \mathbf{E} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{E}_\pm \cdot \mathbf{b}, \quad \mathbf{H} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{H}_\pm \cdot \mathbf{a}, \quad y = \pm d, \quad |\mathbf{E}_-(y \to -\infty)| \to 0, \quad |\mathbf{H}_-(y \to -\infty)| \to 0. \tag{18}$$

Согласно [26], она отвечает анизотропно проводящей поверхности ультратонкой толщины. В результате, для случая (7), когда на поверхность оп-

тически анизотропного слоя среды (1) падает извне ($y > d$) плоская объемная необыкновенная волна ($\gamma = e$) с плоскостью падения $k \in yz$, для верхней и нижней поверхностей слоя (т. е. при $y = \pm$) пространственная структура электрического и магнитного полей в полуограниченных средах «±» попрежнему может быть представлена в виде (4). Что же касается самого слоя оптически одноосного диэлектрика, оптическая ось которого **c** лежит в плоскости границы раздела сред ($\mathbf{c} \perp \mathbf{q}$), то для него в плоскости падения с нормалью вдоль **a** пространственную структуру магнитного и электрического полей можно представить как

$$\begin{aligned}\mathbf{E} = \mathbf{E}_o A_o s_{oy} + \mathbf{E}_o B_o c_{oy} + \\ + \mathbf{E}_e A_e c_{ey} + \mathbf{E}_e B_e s_{ey}, \\ \mathbf{H} = \mathbf{H}_o A_o c_{oy} + \mathbf{H}_o B_o s_{oy} + \\ + \mathbf{H}_e A_e s_{ey} + \mathbf{H}_e B_e c_{ey}, \quad (19)\end{aligned}$$

$$s_{\gamma y} \equiv \mathrm{sh}(\eta_\gamma y),\ c_{\gamma y} \equiv \mathrm{ch}(\eta_\gamma y),$$
$$\eta_\gamma^2 \equiv -(\mathbf{k}_\gamma \cdot \mathbf{q})^2,\ \gamma = e, o.$$

Здесь $\mathbf{E}_{e,o}$, $\mathbf{H}_{e,o}$ — единичные векторные амплитуды магнитного и электрического полей плоской электромагнитной волны со смешанной поляризацией. Их явный вид также может быть получен из Приложения, следуя аналогии с (3), (4). В (19) $\mathbf{k}_\gamma$- волновой вектор парциальной ЭМ-волны с поляризацией $\gamma = e$ или $\gamma = o$, распространяющейся вдоль слоя ($-d < y < d$) одноосного диэлектрика с оптической осью $\mathbf{c} = \cos\vartheta\mathbf{b} + \sin\vartheta\mathbf{a}$ ($0 \le \vartheta \le \pi/2$). Подчеркнем, что в этом случае на плоскости внешних параметров $\omega - h$ эффект двулучепреломления ($\eta_e^2 < 0$,$\eta_o^2 < 0$), необходимый (согласно модели [17]) для формирования ССК, должен сочетаться с условиями (7): существованием в этой же области ω и h одного закрытого (для $\gamma = o$) и одного открытого (для $\gamma = e$) канала радиационного излучения в оптически более плотной среде «+» (при этом в среде «-» открытые каналы излучения отсутствуют). Исключим, по аналогии с [15], из дальнейшего рассмотрения с помощью первого из условий в (18) амплитуды A_o,B_o входящие в соотношения (19). В этом случае, с учетом принятых выше сокращений, получим следующую матрицу перехода для обсуждаемого варианта анизотропного слоя (см. Приложения):

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{Ha}) \\ (\mathbf{Eb}) \end{pmatrix}_{y=d} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\mathbf{Ha}) \\ (\mathbf{Eb}) \end{pmatrix}_{y=-d}, \quad (20)$$

$$\overline{\overline{T}} = \overline{\overline{Q}}(y = d)\overline{\overline{Q}}^{-1}(y = -d).$$

В результате, если для оптических осей в каждой из полуограниченных сред имеет место $\mathbf{c}_\pm \| \mathbf{a}$, то структура амплитуды френелевского коэффициента отражения V_{ee} для падающей из среды «+» на поверхность структуры «слой–полупространство ($y < -d$)» плоской объемной ЭМ-волны с $\gamma = e$ в соответствии с (5), (6), (11) в условиях ПВО (7) с учетом (20) имеет вид

$$\begin{aligned} V_{ee} = \frac{iZ_{e+}D_e + N_e}{iZ_{e+}D_e - N_e}, \quad \eta_o^2 < 0,\ \eta_e^2 < 0, \\ Z_{e+} \equiv \frac{k_{\|e}^r}{\varepsilon_{o+}}, Z_{e-} \equiv \frac{\eta_{e-}}{\varepsilon_{o-}k_0}, \quad (21) \\ N_e(\omega.h) \equiv (T_{21} + T_{22}Z_{e-})|\overline{\overline{Q}}|, \\ D_e(\omega.h) \equiv (T_{11} + T_{12}Z_{e-})|\overline{\overline{Q}}|. \end{aligned}$$

Здесь, в соответствии с принятым определением, Z_{e-} (Z_{e+}) — поверхностный волновой импеданс для необыкновенной волны в нижней ($y < -d$) или верхней ($y > d$) полуограниченной среде (1) [27] в случае $\mathbf{c}_\pm \| \mathbf{a}$. Из анализа соотношений (9), (20), (21) следует, что в рассматриваемом случае формирование ССК (10) — следствие вырождения спектров интерференционных ОПВ-I ($N_e = 0$) и ОПВ-II ($D_e = 0$). По мере приближения к точкам ССК, (10), (15), (16), (20), (21), и числитель, и знаменатель поверхностного волнового импеданса (11) с $\gamma = e$ одновременно стремятся к нулю. В результате, в условиях (7) спектр рассматриваемых поверхностных ССК (10) в зависимости от относительного положения оптической оси в плоскости границы раздела сред ($\mathbf{c} \perp \mathbf{q}$) на плоскости внешних параметров «$\omega - h$» будет определяться как

$$|c_{od}||s_{od}| = 0, \quad \eta_o^2 < 0, \quad (22)$$

если $\vartheta = 0$, и как

$$(|c_{od}| + |c_{ed}|)(|s_{od}| + |s_{ed}|) = 0, \quad \eta_o^2 < 0,\ \eta_e^2 < 0, \quad (23)$$

в случае $0 < \vartheta < \pi/2$.

В результате соотношения (10), (18), (22) совместно определяют, согласно классификации [2], спектр симметрийно-защищенных ССК TE-типа в слое с асимметричным окружением на фоне сплошного спектра излучения необыкновенных плоских объемных волн в верхнем полупространстве ($h^2 < \varepsilon_{e+}k_0^2$, $\mathbf{c}_\pm \| \mathbf{a}$). Что же касается ССК (10) со спектром (19)–(21), (23), то в условиях (7) они формируются вследствие деструктивной интерференции их полей излучения в открытом

радиационном канале и этот тип «темных» состояний относятся к интерференционным ССК [2, 17]. В данном случае это возможно вследствие наличия в диэлектрике образующем слой, эффекта двулучепреломления. Если ν и ρ — номера мод распространяющихся вдоль слоя объемных ЭМ-волн ЕН-типа, то для них при выполнении (23) на плоскости внешних параметров «$\omega - h$» точки формирования интерференционных ССК (10) определяются как

$$\varepsilon_o k_0^2 = h^2 \left(\frac{\varepsilon_o \sin^2\vartheta + \varepsilon_e \cos^2\vartheta}{\varepsilon_e} \right) + \left(\frac{\pi\rho}{2d}\right)^2 \frac{\varepsilon_o}{\varepsilon_e}$$
$$\rho = 1, 2, ..., \qquad (24)$$
$$h^2 \sin^2\vartheta = \frac{\varepsilon_e \nu^2 - \varepsilon_o \rho^2}{\varepsilon_o - \varepsilon_e} \left(\frac{\pi}{2d}\right)^2 > 0,$$
$$\nu = 1, 2, ..., \ \ \nu \neq \rho.$$

Анализ показал, что согласно (10), (21), (24), это возможно в точках вырождения спектра распространяющихся вдоль оптически анизотропного слоя с $\mathbf{c} \perp \mathbf{q}$ ($0 < \vartheta < \pi/2$) нормальных объемных ЭМ-волн ЕН-типа, при условии, что обе поверхности слоя ($y = \pm d$) покрыты идеальным электрическим проводником ($(\mathbf{E}_\gamma^{r,t}\mathbf{a}) = (\mathbf{E}_\gamma^{r,t}\mathbf{a}) = 0$ см. рис. 4.).

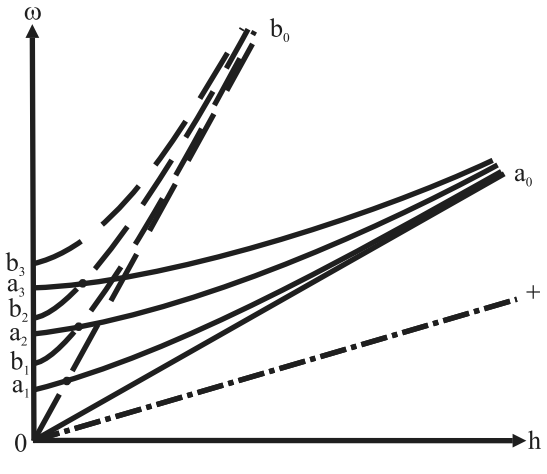


Рис. 4. Расположение точек ССК (24) на фоне спектра волноводных мод ЕН-типа слоя одноосного диэлектрика (1) с $\max(\varepsilon_{o\pm}, \varepsilon_{e-}) < \varepsilon_o, \varepsilon_e < \varepsilon_{e+}$ и обеими полностью металлизированными поверхностями, «+»-$\omega = ch/\varepsilon_{e+}$, $b_j^2 \equiv \varepsilon_o^{-1} c^2 [h^2 + (\pi\nu/(2d))^2]$, $a_j^2 \equiv \varepsilon_e^{-1} c^2 [(\varepsilon_e \cos^2\vartheta + \varepsilon_o \sin^2\vartheta) h^2 \varepsilon_o^{-1} + (\pi\nu/(2d)^2]$, $\nu = 2j$ (если $|s_{od}| + |s_{ed}| = 0$); если же $|c_{od}| + |c_{ed}| = 0$, то $\nu = 2j + 1$ и ветви a_0, b_0 отсутствуют, $j = 0, 1, 2, ...$

В результате, в случае (7) при $\vartheta = 0$ в каждой из точек спектра симметрийно-защищенных ССК, определяемых из (10), (20) – (22), амплитудный коэффициент отражения падающей плоской объемной необыкновенной волны V_{ee} (21) принимает вид

$$V_{ee} = \frac{iZ_{e+}D_e + N_e}{iZ_{e+}D_e - N_e}, \quad \eta_e^2 < 0,$$
$$Z_e \equiv \frac{\eta_e}{\varepsilon_e k_0}, \qquad (25)$$
$$N_e(\omega.h) \equiv Z_e s_e + Z_{e-} c_e,$$
$$D_e(\omega.h) \equiv c_e + s_e Z_e^{-1} Z_{e-}.$$

При выполнении (23) матрица перехода для слоя $\overline{\overline{T}}$ в (21) становится единичной (следствие формирования «темного» состояния интерференционного типа) и в результате в условиях (7)

$$V_{ee} = \frac{iZ_{e+} + Z_{e-}}{iZ_{e+} - Z_{e-}}, \quad 0 < \vartheta < \pi/2. \qquad (26)$$

Отметим, что как в случае (16), (17), так и (20) – (24) при резонансном возбуждении вытекающей ОПВ-I в (12) $V_{\gamma\gamma} = 1$, а в случае вытекающей ОПВ-II в (12) $V_{\gamma\gamma} = -1$. Так как в самой точке ССК спектры указанных ОПВ-I ($N_\gamma = 0$) и ОПВ-II ($D_\gamma = 0$) вырождаются, то формирование ССК в условиях ПВО можно рассматривать и как результат слияния поверхностных поляритонных резонансов, связанных с возбуждением вытекающих ОПВ-I и ОПВ-II.

В условиях ПВО, согласно (13), (14), в окрестности рассмотренных выше и симметрийно-защищенных ССК, и интерференционных ССК становится возможным неограниченное возрастание индуцированных ОПВ-I и ОПВ-II локальных максимумов незеркальных эффектов первого порядка при приближении к точке конкретного «темного» состояния (10).

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе впервые показано, что для полуоткрытых оптически прозрачных слоистых структур с одной или несколькими границами раздела формирование поверхностных ССК (как интерференционных, так и симметрийно-защищенных) в области полного внутреннего отражения (ПВО) может быть результатом существования в открытом радиационном канале вытекающих особых поверхностных электромагнитных волн (ОПВ). Для них мгновенный поток энергии через границу раздела с оптически более плотной средой строго равен нулю в любой момент времени. Спектр ОПВ-I определяется условием равен-

ства нулю входного поверхностного импеданса рассматриваемой отражающей слоистой структуры, тогда как дисперсионная кривая, отвечающая спектру ОПВ-II, — результат равенства нулю знаменателя того же входного волнового импеданса. По мере приближения в условиях ПВО к точке существования в открытом канале волнового излучения поверхностного "темного"состояния (к точке вырождения спектров ОПВ-I и ОПВ-II) и числитель, и знаменатель входного поверхностного волнового импеданса полуоткрытой слоистой структуры будут одновременно стремиться к нулю, обращаясь в нуль в точке ССК. Это отвечает деструктивной интерференции в открытом радиационном канале полей излучения ОПВ первого и второго типа. Условие формирования ССК, используемое при расчетах в [5–9], является прямым следствием сформулированного выше критерия. В отличие от расчетной схемы использованной [5–9], метод развитый в предлагаемой работе позволяет не только выяснить условия формирований «темных» состояний в сплошном спектре излучения полуоткрытой структуры, но и изучить аномалии динамики незеркальных эффектов отражения первого порядка сопутствующих возникновению связанных состояний в континууме. В частности было показано, что по мере приближения поверхностных резонансов с участием как ОПВ-I, так и ОПВ-II, к точке слияния (точке существования «темного» состояния) локальные максимумы эффектов незеркального отражения первого порядка, достигаемые в точках резонанса будут неограниченно возрастать. Это отражает переход от высокодобротных (квазистационарных) состояний, связанных с вытекающими ОПВ-I или ОПВ-II, к стационарному (локализованному состоянию в сплошном спектре отражения, т. е. поверхностному ССК). Примером может служить падение из оптически более плотной среды на слоистую гетероструктуру объемной квазиплоской (пространственный эффект Гуса – Хенхен) или квазимонохроматической (вигнеровское запаздывание) волны. В частности это может быть полезным при экспериментальном поиске как интерференционных, так и симметрийно-защищенных типов ССК.

Предложенный в данной работе критерий формирования «темных» состояний как точки вырождения в спектре излучения вытекающих особых поверхностных волн для полностью отражающей структуры (в частности слоистой) формально не зависит от того, одно- или двухпарциальная плоская объемная электромагнитная волна отвечает открытому радиационному каналу в оптически более плотной полуограниченной среде. Несложно убедиться, что сформулированный выше критерий существования поверхностных ССК (как интерференционного типа, так и симметрийно-защищенных [2]) основанный на структуре входного поверхностного волнового импеданса может оставаться в силе и при другой физической природе вытекающих особых поверхностных волн. Примером может быть полное отражение плоской объемной упругой волны падающей извне на поверхность слоя (или N- слойного акустического волновода) в асимметричном окружении из полуограниченных диэлектриков.

Для упрощения расчетов, приведенные в данной работе конкретные примеры касались лишь случаев, когда открытый канал излучения отвечал плоской объемной однопарциальной волне только TM- или TE-типа. Вариант, при котором для полуограниченной слоистой или пространственно однородной структуры в условиях ПВО «темное» состояние формируется в сплошном спектре излучения, связанном с уходящей на бесконечность плоской объемной волной EH-типа (как, например, в [5–9]), предполагается рассмотреть отдельно.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант номер 20-19-00745-П.

ПРИЛОЖЕНИЕ A

$$\mathbf{E}_o^{t,r} = k_{\|o}^{t,r}\left(\pm\sin\vartheta\mathbf{b} \mp \cos\vartheta\mathbf{a}\right),$$

$$\mathbf{H}_o^{t,r} = \frac{h}{k_0}\left(k_{\|o}^{t,r}\right)^2\cos\vartheta\mathbf{b} + \left(\frac{k_0}{h}\varepsilon_{o\mp}\sin\vartheta\right)\mathbf{a},$$

$$\mathbf{E}_e^{t,r} = \left(k_{\|o}^{t,r}\right)^2\cos\vartheta\mathbf{b} + \left(\frac{k_o^2}{h^2}\varepsilon_{o\mp}\sin\vartheta\right)\mathbf{a},$$

$$\mathbf{H}_e^{t,r} = \frac{k_0}{h}\varepsilon_{o\mp}k_{\|e}^{t,r}\left(\mp\sin\vartheta\mathbf{b} \mp \cos\vartheta\right).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ B

$$\overline{\overline{Q}} \equiv \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix},$$

$$Q_{11} = (\mathbf{H}_e\mathbf{a})s_{ey} - \frac{(\mathbf{E}_e\mathbf{a})c_{ed}}{(\mathbf{E}_o\mathbf{a})c_{od}}(\mathbf{H}_o\mathbf{a})s_{oy},$$

$$Q_{12} = (\mathbf{H}_e\mathbf{a})c_{ey} - \frac{(\mathbf{E}_e\mathbf{a})s_{ed}}{(\mathbf{E}_o\mathbf{a})s_{od}}(\mathbf{H}_o\mathbf{a})c_{oy},$$

$$Q_{21} = (\mathbf{E}_e\mathbf{b})c_{ey} - \frac{(\mathbf{E}_e\mathbf{a})c_{ed}}{(\mathbf{E}_o\mathbf{a})c_{od}}(\mathbf{E}_o\mathbf{b})c_{oy},$$

$$Q_{22} = (\mathbf{E}_e\mathbf{b})s_{ey} - \frac{(\mathbf{E}_e\mathbf{a})s_{ed}}{(\mathbf{E}_o\mathbf{a})s_{od}}(\mathbf{E}_o\mathbf{b})s_{oy}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. J. von Neuman and E. Wigner, Z. Phys. **30**, 467 (1929).

2. S. I. Azzam and A. V. Kildishev, Adv. Opt. Mater. **9**, 2001469 (2021).

3. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone et al., Nature Reviews Materials **1**, 16048 (2016).

4. M. I. Molina, A. E. Miroshnichenko, Y. S. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **108**, 070401 (2012).

5. J. Gomis-Bresco, D. Artigas, and L. Torner, Nature Photonics **11**, 232 (2017).

6. S. Mukherjee, J. Gomis-Bresco, P. Pujol-Closa et al., Phys. Rev. A **98**, 063826 (2018).

7. S. Mukherjee, J. Gomis-Bresco, P. Pujol-Closa et al., Optics Lett. **44**, 5362 (2019).

8. S. Mukherjee, J. Gomis-Bresco, D. Artigas et al., Optics Lett. **46**, 2545 (2021).

9. S. Mukherjee, D. Artigas, and L. Torner, Phys. Rev. B **105**, L201406 (2022).

10. T. Tamir, A. A. Oliner, Proc. IEEE **110**, 310 (1963).

11. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1966).

12. Ф. И. Федоров *Оптика анизотропных сред*, Изд. 2, УРСС, Москва (2004).

13. M. Rybin and Y. Kivshar, Nature **541**, 164 (2017).

14. T. Tamir and H. L. Bertoni, J. Opt. Soc. Am. **61**, 1397 (1971).

15. Л. М. Бреховских, *Волны в слоистых средах*. Изд-во АН СССР, Москва (1957).

16. Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, Ю.С.Джо и др., ЖЭТФ **116**, 263 (1999).

17. H. Friedrich and D. Wintgen, Phys. Rev. A **32**, 3231 (1985).

18. Д. В. Кулагин, А. С. Савченко, А. С. Тарасенко, др., Письма в ЖЭТФ **95**, 253 (2012).

19. Ю. В. Гуляев, С. В. Тарасенко, В. Г. Шавров, УФН **190**, 933 (2020).

20. В. И. Альшиц, В. Н. Любимов, А .Радович, ЖЭТФ **131**, 14 (2007).

21. М. А. Миллер, В .И. Таланов, Изв. вузов. Радиофизика **4**, 795 (1961).

22. С. В. Бирюков, Ю. В. Гуляев, В. В. Крылов, В. П. Плесский *Поверхностные акустические волны в неоднородных средах*. Наука, Главная редакция физ.-мат. литературы, Москва (1991).

23. И. А. Викторов, *Звуковые поверхностные волны в твердых телах*, Наука, Москва (1981).

24. D. Chauvat, O. Emile, F. Bretenaker et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 71 (2000).

25. В. Н. Любимов, Д. Г. Санников, ФТТ **14**, 675 (1972).

26. Л. Г. Нарышкина, М. Е. Герценштейн, Изв. вузов. Радиофизика **10**, 91(1967).

27. Х. Хаус, *Волны и поля в оптоэлектронике*, Мир, Москва (1988).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 885–895 © 2023

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕНЗОРА ДЕФОРМАЦИЙ И ПОЛЕЙ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В АЛМАЗНОЙ ПЛАСТИНЕ С БОЛЬШОЙ КРИВИЗНОЙ ИЗГИБА НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ЛОКАЛЬНОГО ДИФРАКЦИОННОГО МЕТОДА ЛАУЭ

Р. В. Дигуров [a*], ***В. Д. Бланк*** [a], ***В. Н. Денисов*** [a,b], ***С. Ю. Мартюшов*** [a], ***Б. П. Сорокин*** [a], ***С. А. Терентьев*** [a], ***С. Н. Поляков*** [a,c**]

[a] *Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов 108840, Москва, Троицк, Россия*

[b] *Институт спектроскопии Российской академии наук 108840, Москва, Троицк, Россия*

[c] *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук 119071, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 31 марта 2023 г.,
после переработки 26 мая 2023 г.
Принята к публикации 29 мая 2023 г.

Алмазные монокристаллические пластины с цилиндрическим изгибом имеют большой потенциал для создания энергодисперсионных спектрометров и фокусирующих кристалл-монохроматоров. При их конструировании требуется учитывать значительные напряжения, возникающие при изгибе пластин. Представлены результаты расчета тензора деформаций и полей упругих напряжений в цилиндрически изогнутой монокристаллической алмазной пластине с ориентацией поверхности (110). Расчеты основаны на экспериментальных данных, полученных с помощью локального дифракционного метода Лауэ. Результаты расчетов могут быть использованы при проектировании новых рентгенооптических устройств с возможностью управления их параметрами.

DOI: 10.31857/S0044451023120027

EDN: NBMVBN

1. ВВЕДЕНИЕ

Работа рентгенооптических элементов в условиях сверхъярких пучков синхротронных источников 4-го поколения и рентгеновских лазеров требует использование материалов, устойчивых к таким экстремальным нагрузкам. Алмаз является наилучшим материалом для изготовления элементов рентгеновской оптики, пригодных для работы в таких условиях [1–3]. Большие перспективы для фокусировки рентгеновских пучков в геометрии Лауэ имеют монокристаллические пластины с цилиндрическим изгибом. В работе [4] предложен новый подход для реализации метода энергодисперсионной рентгеновской абсорбционной спектроскопии с использованием в качестве фокусирующего элемента цилиндрически изогнутого монокристалла кремния с радиусом изгиба 2 м, что позволило достичь высокой интенсивности в фокусе размером 5 мкм. Проблема использования кремниевых пластин с малым радиусом изгиба обусловлена возникновением напряжений при изгибе, близких к пределу разрушения. Для уменьшения радиуса изгиба до 1 м в работе [5] создана и испытана оригинальная конструкция фокусирующего кремниевого кристалл-монохроматора. Изогнутые кремниевые пластины толщиной 10 мкм использовались для создания спектрометра, работающего в геометрии на отражение по Брэггу [6]. К недостаткам таких фокусирующих монохроматоров из кремния следует отнести их низкую теплопроводность и сравнительно большой коэффициент поглощения, особенно для энергий менее 10 кэВ, что

* E-mail: roman.digurov@yandex.ru
** E-mail: spolyakov@phys.msu.ru

ограничивает их применение для работы в мощных пучках. Эти недостатки можно устранить за счет использования для фокусировки рентгеновских пучков монокристаллических пластин из алмаза. Вследствие высокой прозрачности алмаза для рентгеновского излучения, для энергий 8–10 кэВ толщина пластин в несколько десятков микрометров становится сравнимой с глубиной экстинкции при дифракции на просвет, что позволит значительно повысить интенсивность в фокусе лауэ-монохроматоров. Высокая теплопроводность алмаза, которая на порядок выше, чем у кремния, будет обеспечивать высокую стабильность работы монохроматоров в условиях высоких тепловых нагрузок. Это послужило стимулом для создания конструкции для изгиба тонких алмазных пластин, позволяющей многократно изменять радиус изгиба в широком диапазоне от 1 м до нескольких миллиметров. Это открывает перспективу для разработки рентгенооптических модулей различного назначения. В частности, такая конструкция была использована для создания спектрографов, работающих в геометрии на отражение по Брэггу, для анализа спектров излучения рентгеновских лазеров [7, 8]. Однако, с нашей точки зрения, потенциал изогнутых алмазных пластин для создания других элементов рентгеновской оптики до конца не исчерпан. Особенно это касается использования лауэ-геометрии на просвет для фокусировки рентгеновских пучков различной энергии, их коллимации и деления с целью создания нескольких рабочих станций. При толщинах пластин, сравнимых с глубиной экстинкции, значительно снижаются потери фотонов при прохождении рентгеновских пучков через кристалл. Важно отметить, что возможность изменения радиуса изгиба пластин в больших пределах позволит создавать энергодисперсионные спектрографы для анализа спектров в широком диапазоне энергий от 5 до 100 кэВ. При малых радиусах изгиба в тонких алмазных пластинах будут возникать значительные напряжения сжатия и растяжения, достигающие в максимуме десятков гигапаскалей, которые необходимо учитывать при проектировании новых рентгенооптических систем, например, фокусирующих кристалл-монохроматоров и широкодиапазонных спектрографов, работающих в геометрии на просвет [9].

Цель настоящей работы — расчет тензора деформаций и полей упругих напряжений в цилиндрически изогнутой алмазной пластине, которая может быть использована для изготовления фокусирующих элементов рентгеновской оптики, работающих при высоких радиационных нагрузках. Расчет проводился на основе экспериментальных данных, полученных с помощью локального дифракционного метода Лауэ.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

2.1. Конструкция для цилиндрического изгиба алмазной пластины

Цилиндрический изгиб тонкой алмазной пластины осуществлялся с помощью специально разработанной конструкции (рис. 1*b*). Для изгиба использовалась пластина треугольной формы из структурносовершенного монокристалла алмаза с ориентацией поверхности (110). Алмазная пластина изготавливалась из монокристаллического алмаза, выращенного методом температурного градиента при высоких температурах и давлениях [10]. Ее структурное совершенство контролировалось на каждой стадии технологической операции с помощью методов рентгеновской топографии и дифрактометрии высокого разрешения [11]. По данным рентгеновской топографии пластина практически свободна от дефектов (дислокаций, дефектов упаковки, объемных включений). Полуширина кривой дифракционного отражения (220) по данным дифрактометрии высокого разрешения близка к полуширине кривой, рассчитанной теоретически. Пластина толщиной 40 мкм вырезалась из ростового монокристалла с помощью наносекундного импульсного лазера с длиной волны 532 нм, энергией в импульсе 1 мДж и частотой повторения импульсов 5 кГц. Механическая полировка проводилась с использованием стандартного оборудования для огранки. Шероховатость поверхности пластины составляла примерно 2 нм. Ориентация поверхности и кристаллографические направления определялись с помощью дифракционного метода Лауэ. После осуществления технологических операций пластина отжигалась для устранения остаточных напряжений, особенно на краях пластины (рис. 2). Высокое структурное совершенство монокристаллической пластины делает ее пригодной для работы с когерентным рентгеновским излучением и в геометриях на просвет и отражение в сверхъярких пучках современных синхротронных источников и рентгеновских лазеров [12].

Толщина пластины позволяет изменять радиус кривизны в широких пределах от 1 м до 5 мм. Изгиб пластины осуществлялся с помощью перемещения ползунка клиновидной формы в продольном направлении, изготовленного из монокристаллического алмаза. Треугольная пластина жестко крепилась

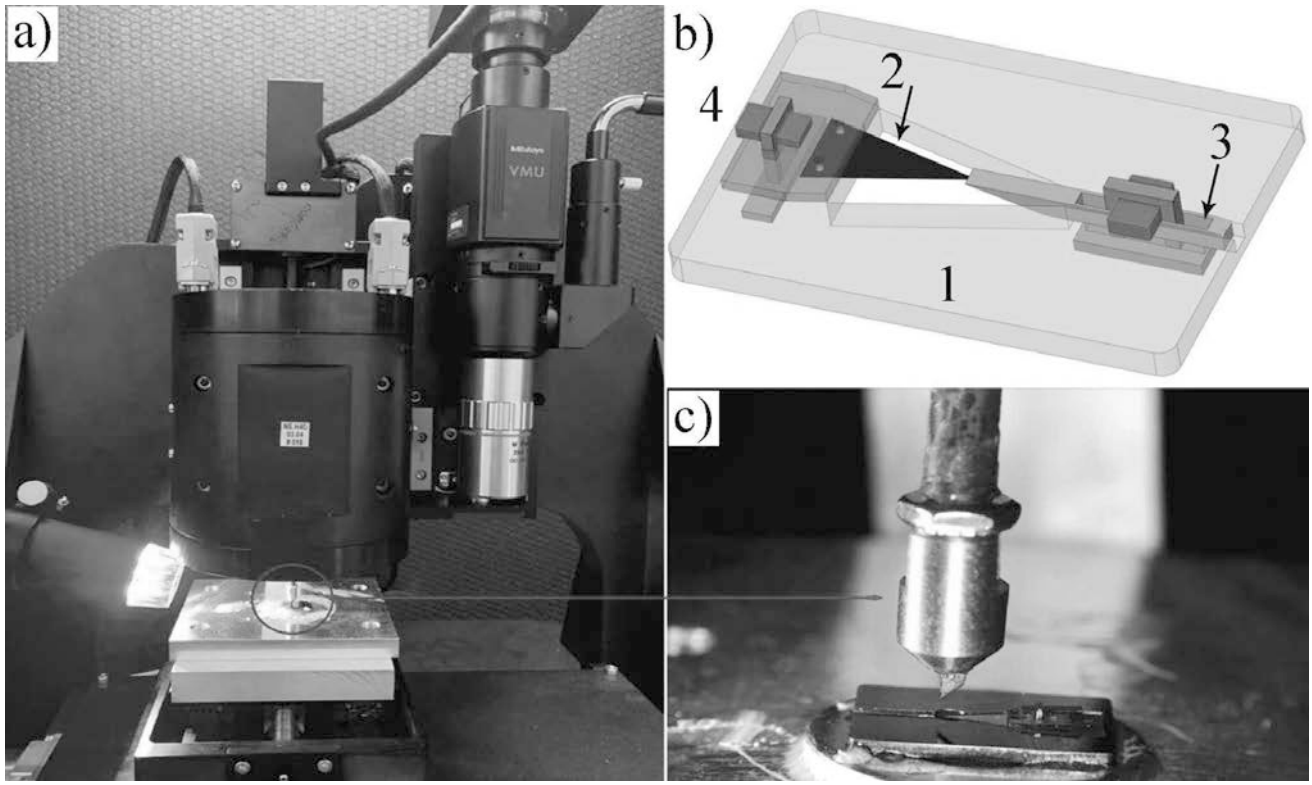


Рис. 1. (В цвете онлайн) *a*) Устройство для определения значений нагрузки на вершину пластины в зависимости от величины смещенния индентора. *b*) Конструкция для цилиндрического изгиба алмазной пластины: *1* — основание из поликристаллического алмаза; *2* — алмазная пластина треугольной формы; *3* — графитовый клин для изгиба пластины; *4* — прижимная графитовая деталь. *c*) Увеличенное изображение индентора

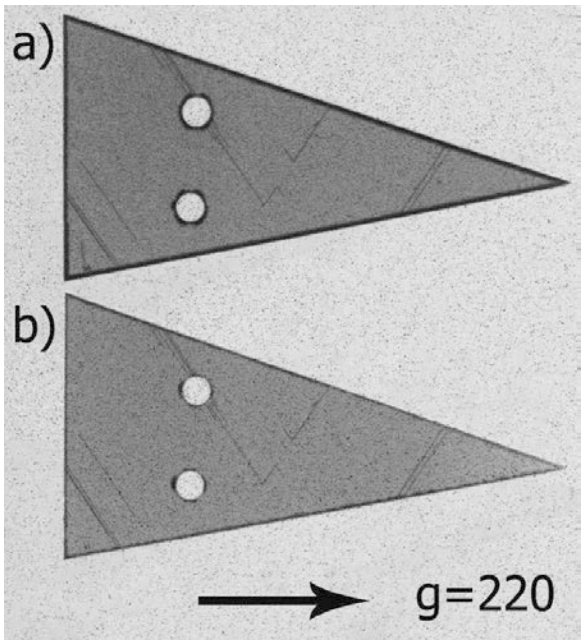


Рис. 2. Рентгеновские топограммы по Лангу монокристаллической пластины алмаза до (*a*) и после (*b*) отжига. Стрелкой указано направление вектора дифракции

к основанию, изготовленному из поликристаллического алмаза, с помощью натяжного графитового клина. Другие крепежные элементы также изготавливались из алмаза, что в целом обеспечивало эффективность теплоотвода от пластины. Конструкция для изгиба пластины разрабатывалась для работы в ярких пучках синхротронных источников и рентгеновских лазеров. В частности, в работе [6] на основе этой конструкции был создан спектрограф для контроля спектра каждого импульса излучения лазера на свободных электронах, работающего в режиме самоусиления спонтанного ондуляторного излучения на станции MDI (Material Imaging and Dynamics) Европейского лазера на свободных электронах.

Для сопоставления величины смещения вершины треугольной пластины в вертикальном направлении, осуществляемого с помощью ползунка, с величиной нагрузки, которая приводит к такому же смещению, использовался нанотвердомер НаноСкан-4D (рис. 1*a*) [13]. Фактически выполнялась калибровка зависимости смещений от величины приложенных нагрузок. Воздействие на вершину пластины осу-

ществлялось с помощью специально изготовленного алмазного индентора. Подвод индентора для нагружения выполнялся вертикальным транслятором (рис. 1*c*). Точность позиционирования контролировалась шаговым двигателем с редуктором. В процессе нагружения задавалась величина смещения, а расстояние, на которое сместился индентор (d_{ind}), равнялось разнице смещений штока (d_{tr}) и вершины треугольной пластины (d_s), т. е. определялась как

$$d_{ind} = d_{tr} - d_s. \tag{1}$$

Сила, прикладываемая к образцу, вычислялась по формуле

$$F_s = d_{ind} S_{ind}, \tag{2}$$

где S_{ind} — коэффициент жесткости штока.

В итоге, после серии экспериментов, были определены значения величин нагрузок на вершину треугольной пластины в зависимости от заданных смещений. Эти данные в дальнейшем были использованы для расчетов полей упругих напряжений в пластине с цилиндрическим изгибом.

2.2. Локальный дифракционный метод Лауэ

С целью определения тензора деформаций использовался рентгенодифракционный метод Лауэ. Достоинством метода для достижения этой цели является возможность получения полной картины дифракции без необходимости выполнения операции сканирования образца. Картина дифракции от неподвижного монокристалла в методе Лауэ формируется при облучении его рентгеновским пучком с непрерывным спектром (рис. 3). Благодаря такой специфике метода Лауэ, его можно отнести к категории самых быстрых методов сбора дифракционных данных. В работе [14] тензор деформаций в изогнутом

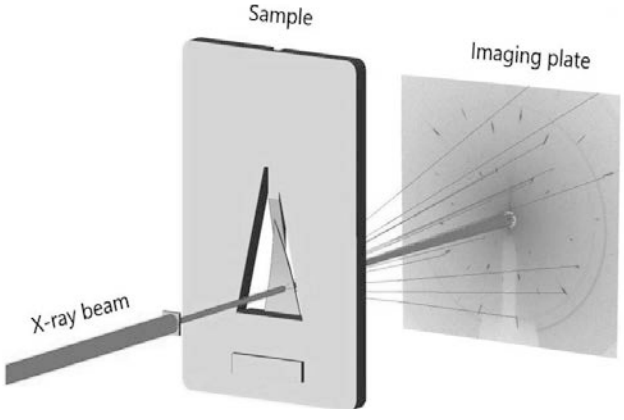


Рис. 3. (В цвете онлайн) Схема регистрации лауэграмм от цилиндрически изогнутого алмаза с использованием пластины с оптической памятью

монокристалле меди для случая объемного сжатия–растяжения в гидростатическом приближении определялся с помощью дифракционного метода Лауэ в геометрии на отражении и метода рентгенофлуоресцентного анализа. Эксперименты по регистрации лауэграмм в геометрии на отражение проводились на станции CRG-IF BM32 синхротронного источника ESRF (Гренобль, Франция). В экспериментах использовался полихроматический рентгеновский пучок (5–23 кэВ) размерами 0.5×0.5 мкм^2 и 0.8×0.8 мкм^2, сформированный с помощью двух зеркал Кирпатрика – Баеза. Входным параметром для расчета деформации служило значение энергии, определяемой на основе данных рентгенофлуоресцентного анализа. Углы Брэгга для конкретных отражений рассчитывались с использованием именно этих данных. Аналогичным способом осуществлялся расчет деформаций в поликристаллических пленках алюминия на кремниевой подложке и в медной фольге [15]. Эксперименты в геометрии на просвет проводились на станции синхротронного источника NSLS Брукхейвенской национальной лаборатории (США). Для получения лауэграмм использовался полихроматический пучок диаметром 300 и 30 мкм, сформированный с помощью прямых и конусообразных стеклянных капилляров. Расчет деформаций кристаллической решетки проводился с использованием метода пси-наклона, применимым только для поликристаллических материалов. Работа [16] посвящена сравнительному анализу деформаций, определенных методами Лауэ и комбинационного рассеяния света (КРС) при растяжении полоски монокристаллического германия. Используемая авторами конструкция позволяет создавать только деформацию растяжения. Напряжения, возникающие при растяжении, определялись по сдвигу фононного пика в спектрах КРС германия в сторону меньших частот. Эксперименты проводились, как и в работе [14], на станции BM32 синхротронного источника ESRF с использованием сфокусированного до размера 0.5×0.5 мкм^2 полихроматического рентгеновского пучка. Метод конфокального КРС нами применялся для определения упругих напряжений растяжения и сжатия в изогнутой алмазной пластине по сдвигу фононного пика алмаза 1332 см$^{-1}$ в сторону низких (растяжение) и высоких (сжатие) частот.

В настоящей работе тензор деформаций определялся для случая одноосного растяжения–сжатия в изогнутой тонкой алмазной пластине с применением только дифракционного метода Лауэ в лабораторных условиях. Для случая одноосного растяжения–

сжатия деформация определяется только тремя линейными компонентами: ε_{xx}, ε_{yy}, ε_{zz}. Длины пятен Лауэ являлись входными параметрами для определения деформаций в различных кристаллографических направлениях в диапазоне энергий 9–50 кэВ с учетом анизотропии упругих свойств алмаза.

В экспериментах по регистрации лауэграмм от цилиндрически изогнутой пластины алмаза использовалось «белое излучение» рентгеновского источника Rigaku UltraX-18 с вращающимся серебряным анодом. Для повышения яркости излучения использовался острофокусный катод с размерами по вертикали и горизонтали $0.3 \times 0.3\,\text{мм}^2$. Размер падающего на образец рентгеновского пучка круглого сечения ограничивался вольфрамовыми диафрагмами диаметром 400, 200, 100 мкм. Вольфрам использовался с целью предотвращения возникновения флуоресцентного излучения на краях отверстий диафрагм, что обеспечивало высокое соотношение сигнал/фон. Расстояние от фокуса источника рентгеновского излучения до диафрагмы составляло 1100 см, расстояние от диафрагмы до образца было равно 15 см, а от образца до пластины с оптической памятью (imaging plate, IP) — 2.75 см. Позиционирование алмазной пластины относительно оси рентгеновского пучка осуществлялось с помощью гониометра рентгеновской топографической системы Rigaku XRT-100CCM.

Для регистрации лауэграмм использовалась IP-пластина марки Fujifilm BAS-TR2025 с поперечными размерами $126 \times 126\,\text{мм}^2$, размер пикселя составлял 50 мкм. Считывание картины дифракции осуществлялось с помощью устройства FUJIFILM BAS-1800 II (IP-reader). Среднее время регистрации лауэграммы составляло 40 мин при работе источника излучения в режиме $V = 50$ кВ, $I = 100$ мА. Для индицирования лауэграмм использовалась программа LauePt [17].

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Цилиндрический изгиб алмазной пластины приводит к тому, что кристаллографические плоскости (110) принимают форму дуги окружности, а поперечные плоскости $(1\bar{1}0)$ остаются прямыми, но развернутыми на некоторый угол, зависящий от радиуса изгиба (рис. 4). В каждой цепочке атомов, расположенных на дуге окружности в плоскостях (110), расстояние между атомами остается одинаковым благодаря осуществлению «чистого» изгиба [18]. Это эквивалентно случаю одноосного растяжения или сжатия. В атомарных цепочках, расположенных на других дугах окружности, эти расстояния различаются, т. е. имеет место градиент однородной деформации. Максимального значения деформации достигают на поверхностях пластины. На выпуклой поверхности имеет место деформация растяжения, а на вогнутой — деформация сжатия. Межплоскостные расстояния $d_\perp$ в радиальном (поперечном) направлении практически не изменяются из-за малого значения у алмаза коэффициента Пуассона $\nu \approx 0.03$ и остаются практически равными значению межплоскостных расстояний d_0 в неизогнутой пластине. Вследствие этого, при рассмотрении брэгговской дифракции на отражение изменением межплоскостных расстояний можно пренебречь. Это свойство было использовано при создании спектрометров для работы в геометрии на отражение [7,8,19]. В случае дифракции Лауэ на просвет необходимо учитывать изменение межплоскостных расстояний, поскольку деформация вследствие изгиба может достигать значительных величин.

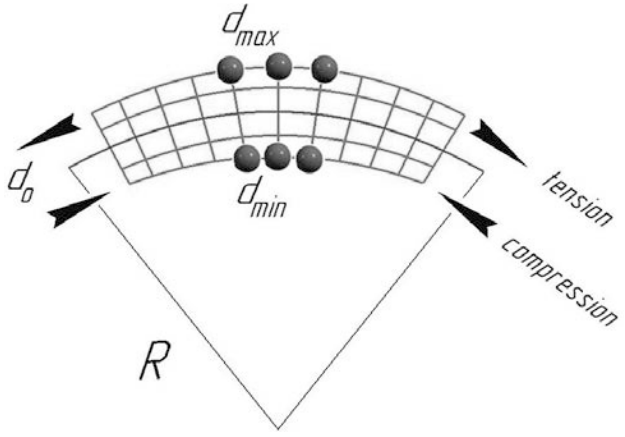


Рис. 4. Возникновение деформаций растяжения–сжатия при цилиндрическом изгибе алмазной пластины с ориентацией поверхности (110)

Информацию о деформации кристаллической решетки получали на основе данных обработки лауэграмм. Разница в наклоне брэгговских плоскостей $(1\bar{1}0)$ и деформация кристаллической решетки должны приводить к астеризму пятен Лауэ, что и наблюдалось в реальных экспериментах. Удлиненные пятна Лауэ содержат информацию о деформации кристаллической решетки в различных кристаллографических направлениях. Это позволяет строить карты деформаций, фактически определять часть полного тензора деформаций [20]. На рис. 5 представлены лауэграммы неизогнутой и изогнутой алмазных пластин с радиусом изгиба $R = 2.06$ см. Диаметр рентгеновского пучка составлял 400 мкм. Эксперименты по регистрации лауэ-

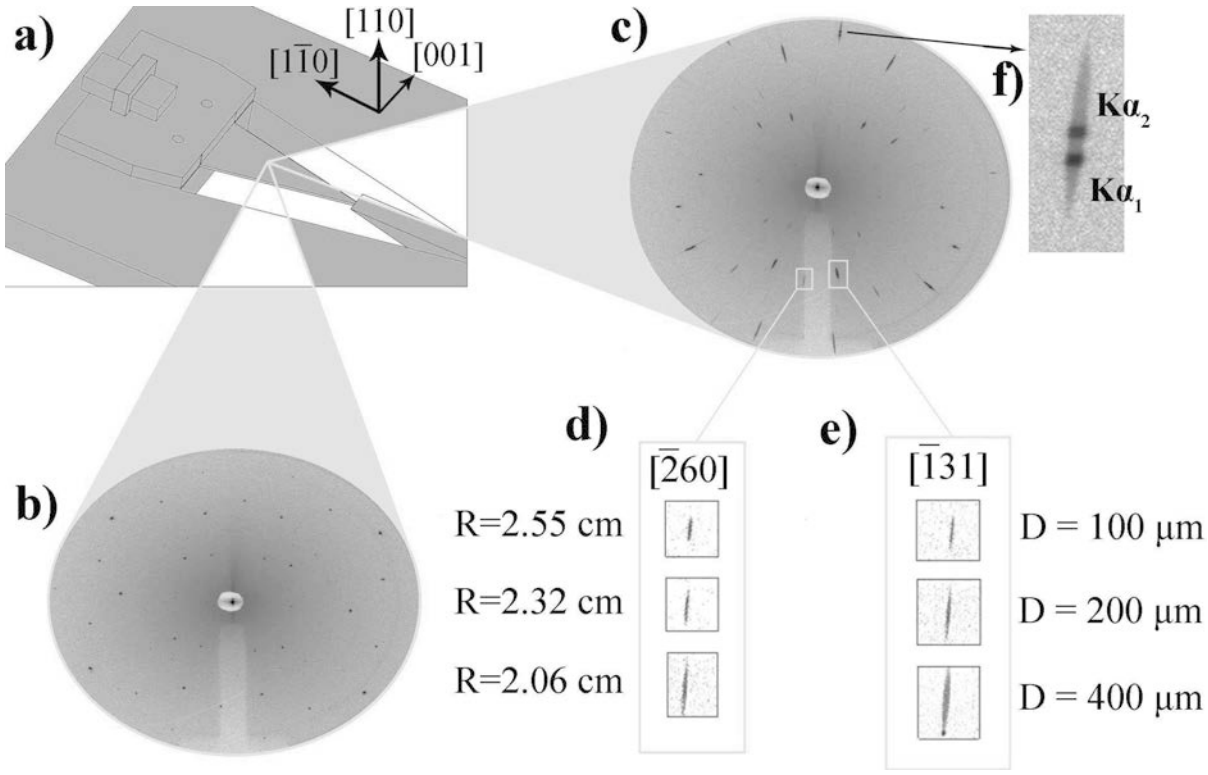


Рис. 5. (В цвете онлайн) a) Показаны закрепленная в держатель пластина и клиновидный ползунок для осуществления цилиндрического изгиба. Стрелками указаны направления векторов лабораторной системы координат и соответствующие им кристаллографические направления. Приведены лауэграммы неизогнутой (b) и изогнутой (c) алмазных пластин, зависимости длин пятен Лауэ рефлекса $(\bar{2}60)$ от радиуса изгиба (d) и от диаметра падающего на пластину рентгеновского пучка для рефлекса $(\bar{1}31)$ (e). Справа вверху (f) показано увеличенное изображение рефлекса $(6\bar{2}0)$

грамм проводились при радиусах изгиба пластины 2.55, 2.32, 2.06 см и диаметрах рентгеновского пучка 100, 200, 400 мкм (рис. 5*d,e*). На рис. 5*a* указаны кристаллографические направления и направления векторов лабораторной системы координат, показывающие, как ориентирована пластина относительно оси падающего рентгеновского пучка.

Как видно на рис. 5, лауэграммы неизогнутой и изогнутой пластин резко различаются. Для ненапряженного кристалла характерно наличие узких пятен Лауэ, в изогнутом же кристалле пятна имеют удлиненную форму и вытянуты в радиальном направлении. Поперечный размер вытянутых пятен значительно меньше их длины в радиальном направлении. Отметим, что интенсивности вытянутых пятен по всей длине практически одинаковы, что свидетельствует о непрерывном изгибе решетки кристалла при наличии градиента деформации в объеме [21]. На рис. 5*f* показано увеличенное изображение рефлекса $(6\bar{2}0)$, на котором наблюдаются характеристические линии Ag$K_{\alpha 1}$ и Ag$K_{\alpha 2}$, демонстрирующие работоспособность изогнутой пластины как диспергирующего элемента. Поскольку разница между энергиями этих линий хорошо известна, можно определить радиус изгиба пластины, используя приведенную ниже формулу (3). Как видно из лауэграммы изогнутой пластины, длины пятен Лауэ в разных кристаллографических направлениях различны. С учетом данных индицирования установлено, что наиболее вытянуты пятна Лауэ, расположенные ближе к направлению $[1\bar{1}0]$, совпадающему с осью изгиба, т. е. в направлении биссектрисы треугольника. Наиболее вытянуты следующие рефлексы: $(6\bar{2}0)$, $(\bar{2}60)$, $(3\bar{1}\bar{1})$, $(3\bar{1}1)$, $(\bar{1}3\bar{1})$, $(\bar{1}31)$. В противоположность этому рефлексы (113), $(11\bar{3})$, (135), $(31\bar{5})$, расположенные ближе к направлению [001], практически не удлинены, что и должно иметь место при цилиндрическом изгибе. Экспериментально показано, что удлинение пятен Лауэ линейно зависит от радиуса кривизны: чем меньше радиус, тем длиннее пятна Лауэ (рис. 5*d*). Также было установлено, что их длина зависит от диаметра рентгеновского пучка (см. рис. 5*e*). Для расчета максимальных значений деформации кристаллической решетки, которые имеют место на выпуклой и вогнутой поверхностях пластины, необходимо учитывать

два эффекта, влияющих на астеризм пятен Лауэ. Первый связан с различным наклоном брэгговских плоскостей из-за кривизны решетки в результате изгиба пластины (см. рис. 4). Этот эффект можно назвать эффектом геометрической кривизны. Это означает, что не учитывается сжатие или растяжение кристаллической решетки, приводящее к изменению межплоскостных расстояний d. Энергия каждого дифрагированного луча в основном определяется углом дифракции 2θ. Спектральная ширина падающего на изогнутый кристалл рентгеновского пучка зависит от угла Брэгга, диаметра рентгеновского пучка и радиуса кривизны пластины и может быть рассчитана по формуле [6]

$$\frac{\Delta E_g}{E} = \frac{D\cos\theta}{R\sin^2\theta}, \tag{3}$$

где D — диаметр рентгеновского пучка, R — радиус кривизны пластины, E — энергия излучения, ΔE_g — спектральная ширина в абсолютных единицах, θ — угол Брэгга. Второй эффект, также приводящий к астеризму пятен Лауэ в радиальном направлении, связан со сжатием и растяжением кристаллической решетки за счет деформации, возникающей при изгибе кристалла. Дифракция полихроматического пучка также происходит по закону Брэгга, однако разброс длин волн $\Delta\lambda$ или ширина спектра ΔE_p будет определяться исключительно разбросом межплоскостных расстояний Δd, т. е. деформацией кристаллической решетки, которая определяется соотношением

$$\Delta d/d = \Delta\theta\,\mathrm{ctg}\,\theta.$$

Для этого случая должно выполняться следующее соотношение:

$$\frac{\Delta E_p}{E} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta d}{d}.$$

При радиусе кривизны $R = 20.6$ мм и диаметрах рентгеновского пучка, используемых в эксперименте (50, 100 и 400 мкм), удлинение пятен Лауэ в основном определяется геометрической кривизной, т. е. первый эффект превалирует над вторым. В равной степени влияние этих эффектов на удлинение рефлексов будет иметь место, когда $\Delta E_p/E = \Delta E_g/E$. Используя рефлекс $(6\bar{2}0)$, оценим диаметр рентгеновского пучка, который будет соответствовать этому условию, которое можно назвать «условием равного влияния». Для расчета использовались формулы, приведенные в работе [22]. Согласно расчетам, условие равного влияния будет выполняться при диаметре рентгеновского пучка 8–10 мкм. Это означает, что при таком диаметре пучка лауэграмма может использоваться для визуализации полей деформаций изогнутого монокристалла алмаза. При радиусе изгиба $R = 4$–5 мм, что вполне достижимо для пластины толщиной 40 мкм, длина пятен Лауэ при расстоянии от изогнутого кристалла до регистрирующей системы $L = 50$ мм будет составлять 120–200 мкм. Это позволяет с достаточно высокой точностью определять величины деформаций $\Delta d/d$ в диапазоне энергий 9–50 кэВ, соответствующем ширине λ-кривой спектра «белого» излучения серебряного анода. Важно отметить, что упруго изогнутую пластину можно рассматривать как диспергирующий элемент, действующий в широком диапазоне энергий 9–50 кэВ, поскольку каждому пятну на лауэграмме соответствует конкретная энергия в этом диапазоне в соответствии с условиями дифракции метода Лауэ. Это открывает перспективу ее использования для создания широкодиапазонных энергодисперсионных спектрографов с возможностью управления дисперсией путем изменения диаметра рентгеновского пучка и радиуса изгиба пластины.

4. МЕТОДЫ РАСЧЕТА

4.1. Расчет полей упругих напряжений

Расчет полей упругих напряжений в объеме и на поверхностях пластины проводился с использованием программы конечно-элементного анализа Ansys. При расчетах учитывались физические свойства материалов, используемых в конструкции для цилиндрического изгиба тонкой алмазной пластины треугольной формы. Входными параметрами для моделирования служили граничные условия контакта алмазной пластины заданной толщины с крепежными элементами, значения смещений индентора, геометрические формы элементов конструкции и др. Шероховатось поверхности пластины не принималась в расчет ввиду ее малого значения (около 0.5 нм) [23]. По сути решались две симметричные задачи контактного взаимодействия, в одной из которых учитывался контакт алмазной пластины с основанием из поликристаллического алмаза и графитового клина для ее фиксации, а во второй — контакт индентора твердомера с вершиной пластины (см. рис. 2*c*).

Важно отметить, что усилие прижима пластины к основанию влияет на величины изгибающих моментов. Для решения второй задачи задавались величины смещений индентора по вертикали, и для

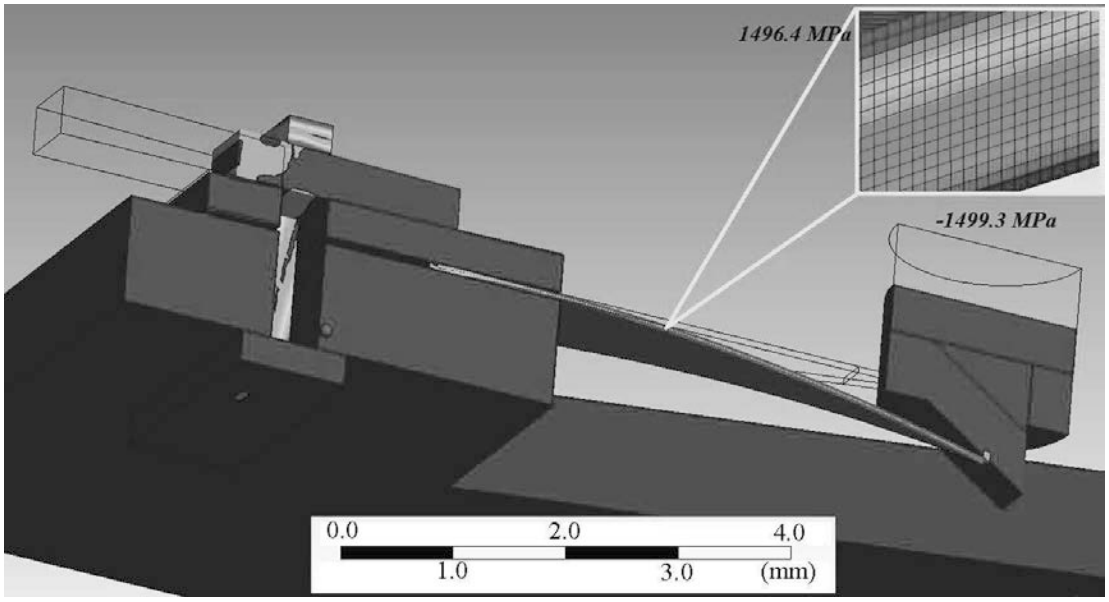


Рис. 6. (В цвете онлайн) Вид устройства для цилиндрического изгиба и результаты расчета распределения полей упругих напряжений в объеме изогнутой пластины алмаза

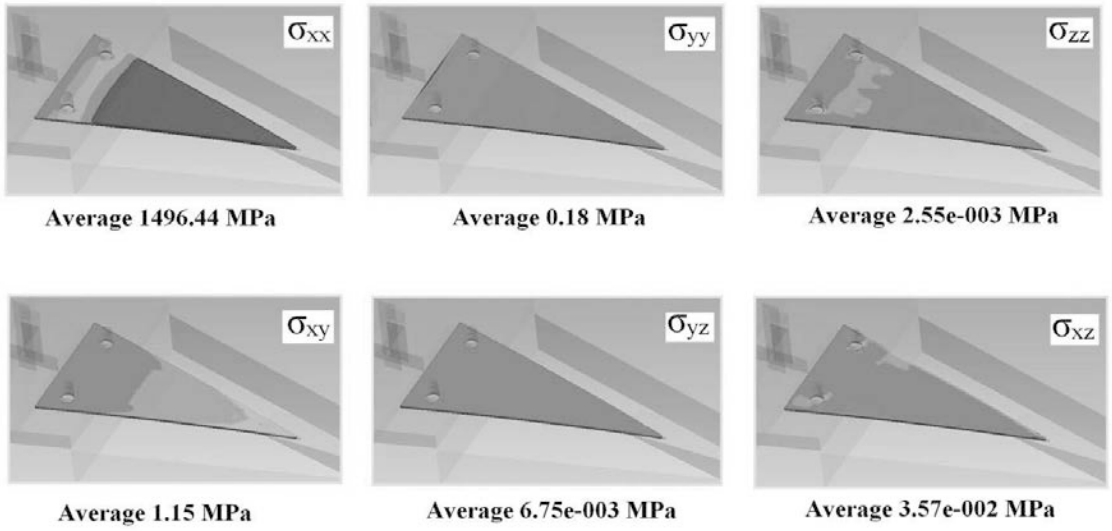


Рис. 7. (В цвете онлайн) Результаты расчета максимальных значений упругих напряжений для нормальных и сдвиговых компонент тензора

каждого значения смещения рассчитывалась сила реакции. В итоге ошибка отклонения экспериментальных значений прикладываемых нагрузок от расчетных не превышала 1%.

Поперечный размер плоской треугольной пластины изменяется по линейному закону:

$$a = a_0\left(1 - \frac{\xi}{L}\right), \tag{4}$$

где a_0 — поперечный размер закрепленного основания, L — расстояние от основания до вершины треугольника, ξ — координата сечения в направлении биссектрисы треугольника. Изгибающий момент $\mathbf{M}$ изменяется линейно вдоль направления биссектрисы от 0 в точке приложения силы до максимума в жестко закрепленном основании по закону [24]

$$\mathbf{M} = \iint_s [\mathbf{r} \times \mathbf{F}]\, ds = \frac{1}{6} k b^3 a_0 \left(1 - \frac{\xi}{L}\right)\mathbf{m}, \tag{5}$$

где b — толщина пластины, k — константа, определяющая упругие свойства материала, $\mathbf{F}$ — сила, действующая на каждый элемент слоя, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор точки приложения силы, $\mathbf{m}$ — единичный вектор, направленный вдоль основания треугольника. Определим тензор напряжений через величину изгибающего момента, используя формулу (4):

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{6M}{b^2 a_0} x_i' \mathbf{q}, \tag{6}$$

где $\mathbf{q}$ — единичный вектор вдоль оси растяжения–сжатия (биссектрисы треугольника пластины).

В лабораторной декартовой системе координат не равна нулю лишь одна компонента тензора напряжений, а именно $\sigma_{xx} \neq 0$, $\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \tau_{xy} = \tau_{yz} = \tau_{zx} = 0$.

Результаты расчета распределения полей упругих напряжений в объеме представлены на рис. 6 справа вверху. На этом же рисунке показан разрез конструкции для цилиндрического изгиба вдоль биссектрисы треугольной пластины. Справа показан разрез индентора. Как видно на рисунке, напряжения растяжения и сжатия достигают максимальных значений 1.5 ГПа на противоположных поверхностях пластины. В радиальном направлении имеет место градиент однородной деформации. Несмотря на большие абсолютные значения напряжений на поверхностях, они значительно ниже предела разрушения алмаза. Это позволяет избежать ее разрушения с течением длительного времени под действием изменяющихся нагрузок. Кроме того, такая конструкция обеспечит стабильную работу в условиях воздействия значительных тепловых нагрузок.

На рис. 7 представлены результаты расчета максимальных значений упругих напряжений для нормальных и сдвиговых компонент тензора. Как видно на рисунке, расчеты подтверждают правомерность допущения о неравенстве нулю лишь одной компоненты σ_{xx} тензора, как и должно быть при цилиндрическом изгибе.

4.2. Расчет тензора деформаций

Расчеты тензора деформаций проводились с учетом условия «равного влияния» (см. разд. 2). Поскольку упругие константы алмаза строго зависят от кристаллографических направлений, точный расчет следует проводить с учетом этого обстоятельства. В расчетах используются значения длин пятен Лауэ, которые определяются из экспериментальных лауэграмм с учетом значений радиуса изгиба и диаметра рентгеновского пучка. Для расчетов

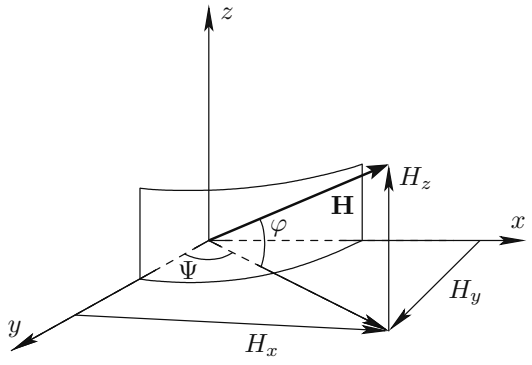


Рис. 8. Направления вектора обратной решетки **H** и его компонент в лабораторной системе координат (x, y, z)

применялись формулы теории дифракции рентгеновских лучей. В уравнения для определения приращений компонент вектора обратной решетки (ΔH_x, ΔH_y, ΔH_z) деформированного кристалла подставлялись значения упругих податливостей S_{11}, S_{12}, S_{44}. Эти уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} \Delta H_x &= -H_x 2\sigma E^{-1}_{[1\bar{1}0]}, \\ \Delta H_y &= H_y 2\sigma E^{-1}_{[1\bar{1}0]} \nu_{[001][1\bar{1}0]}, \\ \Delta H_z &= H_z 2\sigma E^{-1}_{[001]} \nu_{[110][1\bar{1}0]}, \end{aligned} \tag{7}$$

где $E^{-1}_{[110]}$ и $E^{-1}_{[001]}$ — модули Юнга, определяемые по формулам

$$E^{-1}_{[110]} = \frac{1}{4}(2S_{11} + 2S_{12} + S_{44}), E^{-1}_{[001]} = S_{11},$$

а $\nu_{[001][1\bar{1}0]}$ и $\nu_{[110][1\bar{1}0]}$ — коэффициенты Пуассона для анизотропных тел, определяемые по формуле

$$\nu(\mathbf{m}, \mathbf{q}) = -S_{ijkl} m_i m_j q_k q_l / S_{mprs} q_n q_p q_r q_s. \tag{8}$$

В нашем случае эти коэффициенты вычисляются следующим образом:

$$\nu_{[001][1\bar{1}0]} = -\frac{S_{12}}{2S_{11} + 2S_{12} + S_{44}},$$

$$\nu_{[110][1\bar{1}0]} = -\frac{2S_{11} + S_{12} - S_{44}}{2S_{11} + 2S_{12} + S_{44}}.$$

Значения упругих податливостей S_{11}, S_{12}, S_{44} были взяты из работы [25]. На рис. 8 указаны направления вектора обратной решетки **H** и его компонент относительно лабораторной системы координат (x, y, z). Рентгеновский пучок направлен вдоль оси y.

Итоговая формула для расчета длин пятен Лауэ имеет вид

$$\Delta\theta = \frac{1}{\cos\theta}\sum\frac{\partial}{\partial H_i}\frac{Hy}{\sqrt{Hx^2+Hy^2+Hz^2}}\Delta H_i = \\ = \sigma\,\mathrm{tg}\,\theta\cos^2\alpha\left(E^{-1}_{[1\bar{1}0]}+\nu_{[110][1\bar{1}0]}E^{-1}_{[001]}\right)+ \\ +\sin^2\varphi\left(\nu_{[110][1\bar{1}0]}E^{-1}_{[1\bar{1}0]}-\nu_{[110][1\bar{1}0]}E^{-1}_{[001]}\right), \quad (9)$$

где $\cos\alpha = \cos\psi\sin\varphi$ — угол между вектором $\mathbf{H}$ и осью x, ψ — долгота стереографической проекции, φ — широта стереографической проекции.

Результаты расчета максимальных значений деформации приведены в таблице.

Таблица. Результаты расчета максимальных значений деформаций

hkl	Энергия, кэВ	$\Delta\theta_{exp}$	$\Delta\theta_{calc}$	$(\Delta d/d)_{max}$, 10^{-4}
$6\bar{2}0$	24.5943	1.8°	0.10°	17.7
$\bar{2}60$	24.5696	1.5°	0.09°	15.6
$3\bar{1}\bar{1}$	13.6629	1.5°	0.09°	16.7
$\bar{1}31$	13.3802	1.1°	0.07°	13.1
$\bar{1}3\bar{1}$	13.6490	1.2°	0.08°	14.8
$3\bar{1}1$	13.3935	1.6°	0.10°	18.2
$\bar{1}51$	16.5045	1.7°	0.10°	13.3

В третьей колонке таблицы представлены значения длин пятен Лауэ ($\Delta\theta_{exp}$), взятых из экспериментальной лауэграммы, полученной от пластины с радиусом кривизны 20.6 мм при диаметре рентгеновского пучка 400 мкм. Длина пятен в этом случае определяется в основном за счет наклона брэгговских плоскостей, т. е. геометрической кривизной. В четвертой колонке таблицы приведены расчетные величины длин пятен Лауэ ($\Delta\theta_{calc}$), соответствующие «условиям равного влияния», когда можно считать, что длина определяется только деформацией кристаллической решетки.

Таким образом, при малых радиусах изгиба пластины в различных кристаллографических направлениях деформация кристаллической решетки имеет значительную величину, что необходимо учитывать при проектировании фокусирующих кристалл-монохроматоров и широкодиапазонных спектрографов для работы в геометрии на просвет. Конструкция держателя позволяет использовать монокристаллические пластины алмаза разной толщины и с другими ориентациями поверхности, деформация в которых, возникающая при их изгибе, может быть рассчитана с помощью разработанной методики.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Локальный дифракционный метод Лауэ показал свою высокую информативность при исследовании тонкой цилиндрически изогнутой алмазной пластины за счет возможности регистрации полной картины дифракции. На основе экспериментальных данных этого метода рассчитаны максимальные значения деформаций на поверхностях пластины в различных кристаллографических направлениях с учетом анизотропии упругих свойств алмаза. Сформулированы условия, при которых астеризм пятен Лауэ в равной степени зависит от наклона брэгговских плоскостей вследствие изгиба и деформации кристаллической решетки. Это позволяет использовать метод Лауэ для визуализации полей деформации в пластинах с большой кривизной изгиба. С помощью программы конечно-элементного анализа определены поля упругих напряжений в объеме и на поверхностях упруго изогнутой алмазной пластины. Высокие напряжения, достигающие несколько единиц гигапаскалей, открывают перспективу использования метода комбинационного рассеяния света как независимого метода для определения их значений по сдвигу фононного пика алмаза 1332 $\mathrm{см}^{-1}$. Продемонстрировано, что метод Лауэ можно использовать для управления дисперсионными характеристиками изогнутых пластин путем изменения диаметра рентгеновского пучка или радиуса изгиба. Универсальность конструкции для изгиба пластины позволяет на ее основе создавать многофункциональные рентгенооптические модули. В частности, используя пластины с разной кристаллографической ориентацией поверхности и толщиной, сравнимой с глубиной экстинкции, можно разрабатывать фокусирующие кристалл-монохроматоры и широкодиапазонные энергодисперсионные спектрографы для работы в геометрии на просвет. Высокое структурное совершенство алмазной пластины обеспечит возможность работы с когерентными рентгеновскими пучками. Разработанная методика обладает общностью и может быть использована для определения тензора деформаций и полей упругих напряжений в тонких изогнутых пластинах других монокристаллов.

Благодарности. Эксперименты проводились на оборудовании Центра коллективного пользования «Исследования наноструктурных, углеродных и сверхтвердых материалов ФГБНУ ТИСНУМ».

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания на 2023 год.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Shvyd'ko, S. Terentyev, V. Blank et al., J. Synchrotron Rad. **28**, 1720 (2021).

2. I. Nam, C.-K. Min, B. Oh et al., Nat. Photon. **15**, 435 (2021).

3. J. Amann, W. Berg, V. Blank et al., Nat. Photon. **6**, 693 (2012).

4. B. Larson, W. Yang, G.E. Ice et al., Nature **415**, 887 (2002).

5. Д. М. Хейкер, В. А. Шишков, Ю. Н. Шилин и др., Кристаллография **52**, 767 (2007).

6. U. Boesenberg, L. Samoylova, T. Roth et al., Opt. Express. **25**, 2852 (2017).

7. S. Terentyev, V. Blank, T. Kolodziej et al., Rev. Sci. Instrum. **87**, 125117 (2016).

8. L. Samoylova, U. Boesenberg, A. Chumakov et al., J. Synchrotron Rad. **26**, 1069 (2019).

9. P. Qi, N. Samadi, M. Martinson, O. Ponomarenko et al., Sci. Rep. **9**, 17734 (2019).

10. V. D. Blank, M. S. Kuznetsov, S. Nosukhin et al., Diam. Relat. Mater. **16**, 800 (2007).

11. S. Polyakov, V. Denisov, N. Kuzmin et al., Diam. Relat. Mater. **20**, 726 (2011).

12. S. Terentyev, V. Blank, S. Polyakov et al., Appl. Phys. Lett. **107**, 111108 (2015).

13. В. Н. Решетов, И. В. Красногоров, В. В. Соловьев и др., Наноиндустрия **7**–**8**, 466 (2022)

14. A. Abboud, C. Kirchlechner, J. Keckes et al., J. Appl. Cryst. **50**, 901 (2017).

15. P. C. Wang, G. S. Cargill, and I. C. Noyan, MRS Online Proc. Library **375**, 247 (1994).

16. S. Tardif, A. Gassenq, K. Guilloy et al., J. Appl. Cryst. **49**, 1402 (2016).

17. X. Huang, J. Appl. Cryst. **43**, 926 (2010).

18. С. Г. Лехницкий, *Теория упругости анизотропного тела*, Наука, Москва (1977), с 87.

19. L. Xing, K. Zhang, P. Liu et al., Proc. SPIE **12169**, 1216982 (2022).

20. Samuel Tardif, Alban Gassenq, Kevin Guilloy et al., J. Appl. Cryst. **43**, 926 (2010).

21. M. Morita and O. Umezawa, in *Optical Measurements, Modeling, and Metrology*, Vol. 5 (2011), p. 91.

22. P. Qi, X. Shi, N. Samadi et al., Proc. SPIE **11108**, 111080E (2019).

23. M. A. Doronin, S. N. Polyakov, K. S. Kravchuk et al., Diam. Relat. Mater., **87**, 149 (2018).

24. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Наука, Москва (1979).

25. Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, М. С. Кузнецов и др., Журнал СФУ, сер. Матем. и физ. 6:1 (2013).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 896–905 © 2023

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ИЗМЕРЕНИЯ СПЕКТРА ОПТИЧЕСКИ ДЕТЕКТИРУЕМОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ОДИНОЧНОГО NV^--ЦЕНТРА В АЛМАЗЕ

Н. С. Кукин [a,b*], ***А. Р. Мурадова*** [a,b], ***А. К. Никитин*** [a,b], ***А. А. Бухтияров*** [a], ***П. А. Семенов*** [b], ***А. Н. Васильев*** [b], ***Н. И. Каргин*** [b], ***М. О. Смирнова*** [b], ***С. А. Терентьев*** [c], ***С. А. Тарелкин*** [c], ***Н. В. Корнилов*** [c]

[a] *АНО «Институт инженерной физики»*
142210, Серпухов, Московская область, Россия

[b] *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*
115409, Москва, Россия

[c] *Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов»*
108840, Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 апреля 2023 г.,
после переработки 31 мая 2023 г.
Принята к публикации 7 июня 2023 г.

Экспериментально исследованы спектры оптически детектируемого магнитного резонанса одиночных NV^--центров в двух твердотельных образцах в области сверхтонкого взаимодействия спина электрона NV^--центра со спином ядра азота в этом же центре. Цель исследований — получить максимальное разрешение по частоте СВЧ в используемой экспериментальной установке. Для измерений были выращены два монокристаллических образца алмаза с низким содержанием азота (не более 50 ppb). Измеренное время спиновой декогеренции T_2^* NV^--центров составило в первом образце около 2 мкс, а на втором — 20 мкс. Для этих двух образцов был получен и исследован спектр оптически детектируемого магнитного резонанса сверхтонкого расщепления одиночного NV^--центра и атома ^{14}N. Оценка величины разрешения в этих образцах составляет 3.5 МГц и 0.18 МГц соответственно. Отмечено, что с увеличением времени спиновой декогеренции T_2^* одиночного NV^--центра улучшается разрешение спектра.

DOI: 10.31857/S0044451023120039
EDN: NBMXRL

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее перспективных квантовых систем для применения в области квантовых технологий являются отрицательно заряженные центры окраски NV^- в алмазе (далее NV). Они привлекают внимание исследователей благодаря своим беспрецедентным оптическим и спиновым свойствам при комнатной температуре [1–3]. Как квантовый объект NV-центры в алмазе имеют набор энергетических уровней, между которыми можно возбуждать переходы при приложении резонансного излучения. Частоты переходов NV-центров в микроволновом диапазоне зависят от магнитного поля. Схема переходов NV-центров в видимом диапазоне позволяет проводить эти измерения оптически. Традиционным методом исследований NV-центров является метод оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) [4, 5]. Прецизионное измерение спектра ОДМР позволяет оценить качество образцов алмаза, включая изучение структуры и состава добавок вокруг NV-центров.

В течение последних нескольких лет мы плотно работаем с ФГБНУ «ТИСНУМ» по получению полностью изготовленных в России образцов искусственных алмазов с одиночными NV-центрами, располагающимися в заранее запланированных местах внутри образцов. С каждым годом получаемые из

* E-mail: n.s.kukin@mail.ru

Рис. 1. Схема эксперимента

ТИСНУМ образцы становятся лучше и приближают нас к конечной цели. Главной задачей наших исследований, описанных в данной статье, была выработка рекомендаций для создания в России надежной технологии роста таких «чистых» образцов для приложений квантовой информатики. Для этого были исследованы два типичных образца, изготовленных в последнее время с интервалом в год с учетом рекомендаций, накопленных нами при исследовании предыдущих образцов. В качестве критерия необходимых для квантовой информатики российских образцов на этот раз было выбрано измерение чувствительности спектра ОДМР одиночного NV-центра в алмазе.

Заметим также, что центры окраски в алмазе являются перспективной квантовой системой для высокочувствительной оптической магнитометрии [6, 7]. Чувствительность сенсора для всех этих исследований определяется максимальным разрешением ОДМР-спектра по частоте.

В данной работе были исследованы два образца искусственных алмазов с целью достижения наилучшего для экспериментальной установки (рис. 1) разрешения по частоте СВЧ в ОДМР-спектре одиночных NV-центров. Кристаллические решетки в обоих образцах имели ориентацию в направлении [111]. Оба образца были выращены методом химического осаждения из газовой фазы (CVD-метод) по разработанной технологии синтеза сверхчистых алмазов с содержанием азота ниже определяемого порога чувствительности концентрации азота в алмазах. Оба образца имели низкий уровень концентрации азота (не более 50 ppb). Однако, поскольку технология синтеза постоянно развивается, есть основания полагать, что концентрация азота во втором образце оказалась ниже, по крайней мере в районе исследованных нескольких центров и их окружений. Кроме того, в процессе синтеза образцов были созданы условия для формирования слоя одиночных NV-центров на глубине в несколько микрометров от поверхности.

Исследования проводились в области расщепления по частоте СВЧ пиков ОДМР на три пика благодаря сверхтонкому взаимодействию спина электронов NV-центра со спином ядра азота ^{14}N ($S = 1$) в этом же центре. Для исключения неопределенности в спектре ОДМР при исследованиях применялось небольшое внешнее магнитное поле (10 мТл), направленное вдоль оси NV-центра и снимающее вырождение уровней для разных проекций спина NV-центра на направление магнитного поля за счет эффекта Зеемана.

Поскольку, как показано в работе [8], измерения с непрерывной лазерной накачкой дают ширину пиков в ОДМР-спектре на порядок больше, чем импульсные схемы, для проведения исследований был выбран метод с импульсной лазерной накачкой.

Взаимодействие одиночного NV-центра с окружающей его средой ограничивает чувствительность спектра ОДМР, уменьшая когерентность квантовых состояний. Поэтому важно найти такой NV-центр в образце, время когерентности которого будет максимальным для данного образца. Тогда можно ожидать наиболее высокое разрешение (по частоте СВЧ) измеренного спектра ОДМР в этом центре окраски, которое необходимо для многих задач квантовой информатики и которое, например, определит чувствительность квантового сенсора NV-магнитометрии.

В одиночном NV-центре за счет различных взаимодействий электронного спина этого NV-центра с его окружением, например с кристаллической ре-

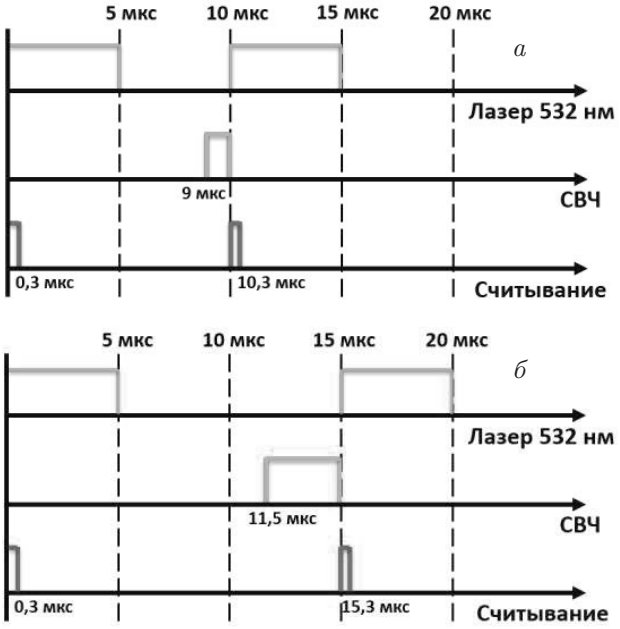


Рис. 2. Измерение ОДМР-спектра при малом малых ($а$) и больших ($б$) значениях T_2^*

шеткой алмаза, спиновая система будет релаксировать к состоянию равновесия. Время продольной релаксации T_1 связано с передачей энергии от спиновой системы к решетке, что приводит к деполяризации NV-центра.

Спин-спиновые взаимодействия, включающие все механизмы, посредством которых спины могут обмениваться энергией друг с другом, а не с решеткой в целом, разрушают когерентность между спиновыми состояниями. Время поперечной релаксации T_2 связано с этими взаимодействиями и определяет спиновую декогеренцию NV-центра.

В образце обязательно присутствуют разные локальные неоднородности, потенциалы, механические напряжения и другие факторы, которые приводят к уменьшению времени T_2. Такое время принято обозначать T_2^* и называть временем расфазировки. Поскольку оно является наименьшим, его влияние становится определяющим. Его называют временем спиновой декогеренции.

Время когерентности квантового состояния NV-центра было оценено из затуханий осцилляций Раби на этом центре. Данные хорошо аппроксимируются экспонентой с постоянной затухания τ [9]. Этот параметр определяется через время продольной релаксации T_1 и время декогерентности T_2^* по формуле [10]

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3}{4T_1} + \frac{1}{2T_2^*}.$$

Без разделения вкладов T_1 и T_2^* была получена оценка времени декогеренции центра окраски по величине параметра τ.

2. ОПИСАНИЕ СХЕМЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Экспериментальная установка включала в себя конфокальный микроскоп от компании НТ-МДТ (Зеленоград, Московская обл.), формирующий оптический тракт для расположенного в синтетическом монокристалле алмаза с ориентацией [111] одиночного NV-центра. Возбуждение осуществлялось импульсным или непрерывным модулированным лазером с длиной волны 532 нм и средней мощностью в непрерывном режиме 230 мкВт. Результаты измерений уровня флуоресценции после воздействия СВЧ нормировались на уровень флуоресценции при отсутствии СВЧ для исключения влияния долговременных воздействий (механическое смещение образца, нестабильность лазера и т. д.). Целесообразность нормировки была обусловлена наличием корреляции флуоресценции до и после воздействия СВЧ. Схема эксперимента и временная последовательность управляющих сигналов представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

3. ОПИСАНИЕ ИССЛЕДУЕМЫХ ОБРАЗЦОВ

Синтез образцов был проведен методом химического осаждения из газовой фазы в реакторе MPACVD BJS150 PLASSYS на монокристаллические алмазные подложки типа IIa, выращенные методом температурного градиента при высоком давлении и высокой температуре (HPHT-TG). Для синтеза используются высокочистые газы метан (чистота 6.0) и водород (чистота 7.0). Разработанный процесс синтеза CVD-алмаза позволяет достичь чистоты алмаза по азоту не хуже 50 ppb (50 атомов азота на миллиард атомов углерода). Данный уровень является предельным уровнем обнаружения азота в алмазе методами оптической спектроскопии поглощения на просвет. В процессе неравновесного CVD-синтеза небольшая часть атомов азота (от 0.1% до 1%) образует азот-вакансионные центры (NV).

Основным источником фонового загрязнения в камере при таком синтезе является остаточное натекание азота из атмосферы. Вклад натекания и, как следствие, парциальную концентрацию остаточного

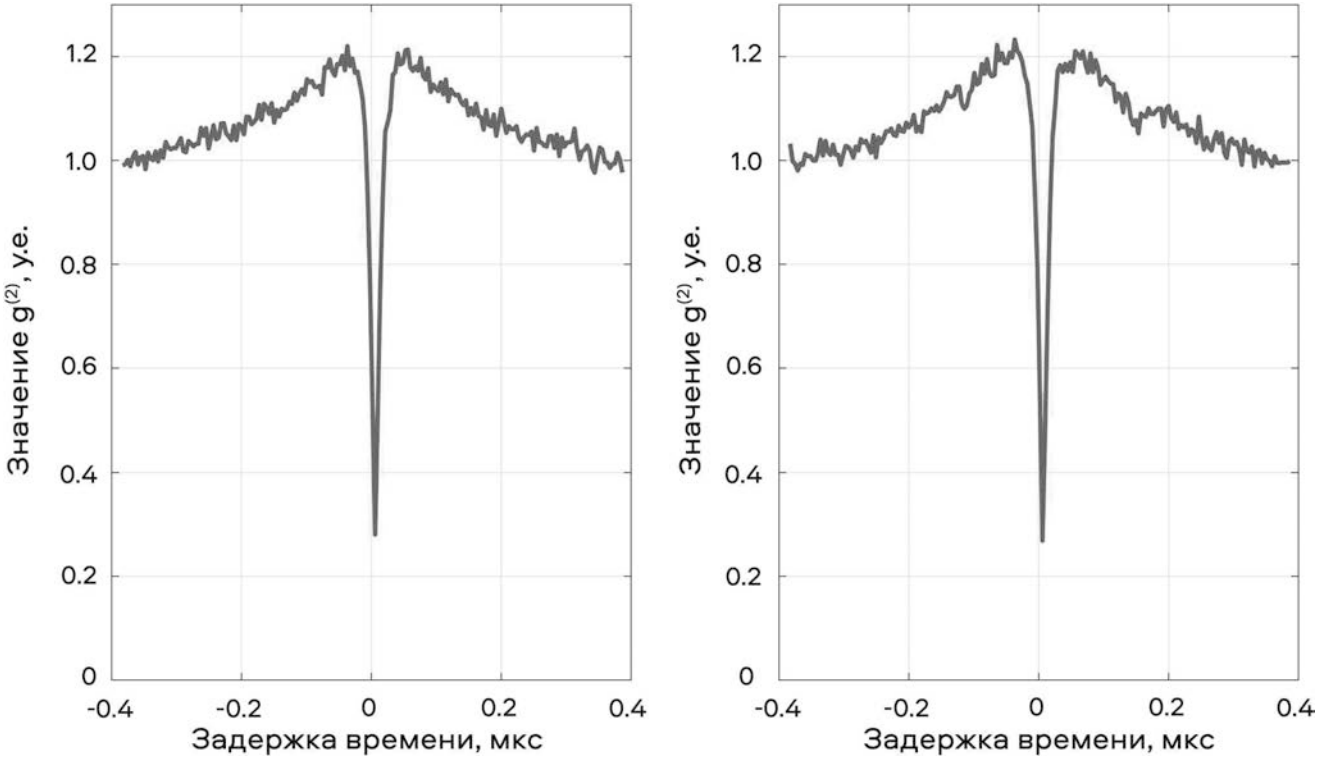


Рис. 3. Вид автокорреляционных функций второго порядка $g^{(2)}$ для NV-центров образцов № 1 (слева) и № 2 (справа) как доказательство того, что NV-центры являлись одиночными

азота можно изменять путем изменения интенсивности газообмена (потоков процесс-газов водорода и метана) при синтезе.

Для изучения влияния концентрации остаточного азота были выращены образцы с разными потоками процесс-газов. Интенсивность откачки камеры при разных потоках динамически подстраивается для обеспечения одинакового заданного давления газа во время синтеза, при этом вклад остаточного натекания из атмосферы увеличивается.

Далее в статье экспериментальные образцы алмаза именуются как образец № 1 и образец № 2. Параметры синтеза пластин приведены в таблице.

Перед началом исследований были отобраны одиночные центры в двух образцах, при этом для них были измерены автокорреляционные функции второго порядка $g^{(2)}$ для фотонов, испускаемых этими центрами окраски. Вид этих функций однозначно позволил идентифицировать одиночные NV-центры. На рис. 3 представлены автокорреляционные функции $g^{(2)}$ для обоих образцов.

4. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

4.1. Спектр ОДМР одиночного NV-центра в образце №1

Сначала исследовалась зависимость разрешения спектра ОДМР для синтетического монокристалла с ориентацией [111] от нахождения атома ^{13}C вблизи NV-центра. В этом образце алмаза были найдены два одиночных центра окраски — с атомом ^{13}C во второй координационной сфере и вдали от таких атомов. Был исследован NV-центр с близко расположенным атомом ^{13}C. В работе [11] предложен метод векторной магнитометрии, реализуемый с помощью одиночной спиновой системы NV–^{13}C в алмазе и основанный на априорном знании характеристик сверхтонкого взаимодействия и наличия экспериментально измеренных положений линий в спектре ОДРМ такой системы.

Исследования проводились с помощью импульсного лазера с длиной волны 532 нм. Ширина линии спектра ОДМР зависела от двух мощностей: мощно-

Таблица. Параметры CVD-роста образцов

Параметры	Номер образца	
	№ 1	№ 2
Средняя скорость роста, мкм/ч	≈ 1.4	≈ 0.5
Толщина эпитаксиального слоя, мкм	≈ 40	≈ 30
Толщина второго слоя, мкм	2–3	4–5
Температура в ростовой камере, °C	770 ± 10	770 ± 10
Давление в ростовой камере, Торр	190–200	190–200
Поток метана и водорода во время роста, $см^3$/мин	5/120	20/480

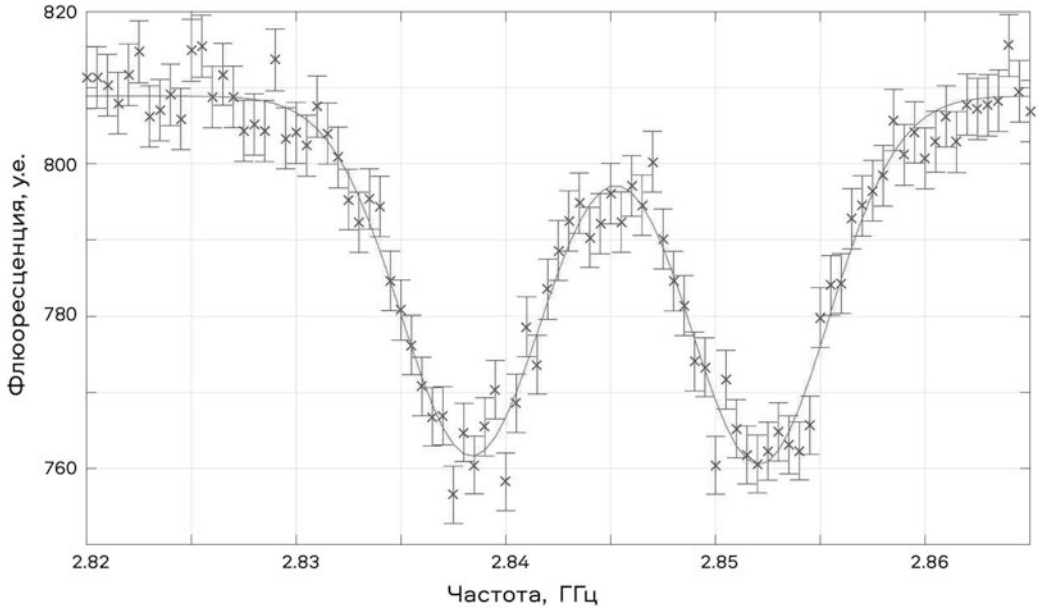


Рис. 4. ОДМР-спектр NV-центра с атомом ^{13}C. Расстояние между пиками примерно 14 МГц, что соответствует спектру связанной системы NV–^{13}C, в которой ядерный спин ^{13}C расположен во второй координационной сфере (место 224) вблизи вакансии NV-центра. Сверхтонкое расщепление состояний с $m_s = \pm 1$ в нулевом магнитном поле для таких систем около 13 МГц, что почти соответствует расщеплению 14 МГц линий в имеющемся экспериментальном спектре. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация. Относительная ошибка измерения интенсивности люминесценции при каждом значении частоты составила 0.5%, результатом аппроксимации является значение $\chi^2 = 0.87$ на степень свободы

сти лазера и мощности генератора СВЧ. Чтобы достичь минимальной ширины пиков в спектре ОДМР, определяющих чувствительность метода для магнитометрии, надо было уменьшать мощность как лазера, так и генератора СВЧ. Но одновременно уменьшалась и величина контраста спектра ОДМР. Поэтому были выбраны такие величины этих двух мощностей, чтобы контраст спектра ОДМР был не менее 5%. С помощью поля постоянного магнита величиной около 2 мТл энергетические уровни, соответствующие проекциям спина $m_s = \pm 1$, были раздвинуты для исключения их взаимного влияния на ОДМР-спектры. На рис. 4 показана левая часть ($m_s = -1$) ОДМР-спектра одиночного NV-центра с атомом ^{13}C во второй координационной сфере [12, 13] в постоянном магнитном поле.

Аппроксимирующая кривая описывается функцией

$$f(\nu) = f_0 - C_1 \exp\left(-\frac{(\nu-\nu_1)^2}{w_1^2}\right) - C_2 \exp\left(-\frac{(\nu-\nu_2)^2}{w_2^2}\right), \quad (1)$$

где C_1, C_2 — свободные коэффициенты, ν_1, ν_2 — центральные положения резонансных частот, w_1, w_2 — полные ширины на полувысоте (FWHM) пиков поглощения.

Из рис. 4 можно оценить FWHM пика в спектре ОДМР не лучше 10 МГц. При таком разрешении спектральные линии сверхтонкого взаимодействия спина электрона NV-центра и ядра азота не могут быть определены, поскольку расчетное значение разности энергий уровней составляет 2.15 МГц. Для повышения разрешения была предпринята попытка жесткой синхронизации фазы СВЧ-излучения. Данная процедура не привела к повышению разрешения ОДМР-спектра.

Была измерена постоянная затухания τ осцилляций Раби, и она оказалась равной примерно 1.7 мкс. Постоянная затухания τ определяется через T_1 и T_2^* (см. Введение). Однако известно, что время T_1 на несколько порядков больше, чем время T_2^*. Так, например, в работе [14] для одиночных NV-центров в наноалмазах получено $T_2^* = 0.325 \pm 0.020$ мкс, а $T_1 = 72 \pm 14$ мкс, т. е. более чем на два порядка больше. Также в этой работе измерено время T_1 для образцов алмаза миллиметровых размеров (габариты исследуемых образцов 4×4 мм^2), которое еще гораздо больше, чем в наноалмазах ($T_1 > 1000$ мкс). Отдельно время спиновой декогеренеции T_2^* не измерялось. Основываясь на результатах других групп, можно сделать вывод о том, что $T_1 \gg T_2^*$, и тогда T_2^* просто определяется с помощью измеренного времени τ. Получив плохое разрешение по частоте (10 МГц), далее мы перешли к поиску одиночного NV-центра, расположенного вдали от атомов ^{13}C.

Для дальнейших исследований был отобран одиночный NV-центр вдали от расположенного атома ^{13}C (на расстоянии примерно 15 мкм). Данные центры имеют схожие времена спиновой декогеренции T_2^*. Значение T_2^* получено как результат аппроксимации зависимостей от времени осцилляций Раби между квантовыми состояниями с проекциями спина $m_s = 0$ и $m_s = -1$, показанных на рис. 5. Эта величина составила около 2 мкс.

Аппроксимирующая кривая описывается функцией

$$f(t) = f_0 + C_1 e^{-t/\tau} \cos(2C_2 t\pi + \phi), \qquad (2)$$

где C_1, C_2 — свободные коэффициенты, τ — постоянная затухания, ϕ — начальная фаза.

В соответствии с результатами экспериментов можно сделать вывод о слабом влиянии расположенного (место 224 во второй координатной сфере) рядом с NV-центром атома ^{13}C на разрешение спектра ОДМР в данном образце.

Далее было проведено сравнение влияния импульсного и модулированного постоянного лазерного возбуждения на разрешение ОДМР-спектра. На рис. 6 показан фрагмент ОДМР-спектра одиночного NV-центра с расположенным вблизи атомом ^{13}C при возбуждении импульсным лазером с длиной волны 532 нм.

Аппроксимирующая кривая описывается функцией

$$f(\nu) = f_0 - C_1 \exp\left(-\frac{(\nu - \nu_c)^2}{w_c^2}\right), \qquad (3)$$

где C_1 — свободный коэффициент, ν_c — центральное положение резонансной частоты, w_c — полная ширина на полувысоте пика поглощения.

Из анализа рис. 6 следует, что сверхтонкое расщепление в ОДМР-спектре не выражено. Чувствительность метода к пикам в этом образце составила примерно 3.5 МГц (сигма разрешения).

Было отмечено, что повышение частоты импульсного лазера с 2 до 20 МГц и переход к непрерывному модулированному лазеру практически не меняют описанные выше результаты.

4.2. Спектр ОДМР одиночного NV-центра в образце № 2

Было проведено построение спектра ОДМР одиночного NV-центра в образце № 2. При проведении экспериментов для возбуждения NV-центра использовался модулированный непрерывный лазер с длиной волны 532 нм.

Для выбора параметров СВЧ-сигнала при построении спектра ОДМР была проведена оценка времени спиновой декогеренции T_2^* для одного из NV-центров на этом образце.

Оценка времени T_2^*, определяющего спиновую декогеренцию квантового состояния рассматриваемого NV-центра, была получена в соответствии с аппроксимацией графика осцилляций Раби на рис. 7.

Время спиновой декогеренции T_2^* составило величину примерно 20 мкс. Такое большое время T_2^* было получено еще для нескольких разных NV-центров в этом образце. Сравнивая графики осцилляций Раби на рис. 7 и рис. 4, можно сделать вывод о существенном (на порядок) увеличении времени спиновой декогеренции квантового состояния NV-центра для образца № 2.

Для оценки разрешения по частоте СВЧ был построен спектр ОДМР одиночного NV-центра без атома ^{13}C в образце №2 при возбуждении модулированным непрерывным лазером с длиной волны 532 нм. Для снижения влияния СВЧ-поля на спино-

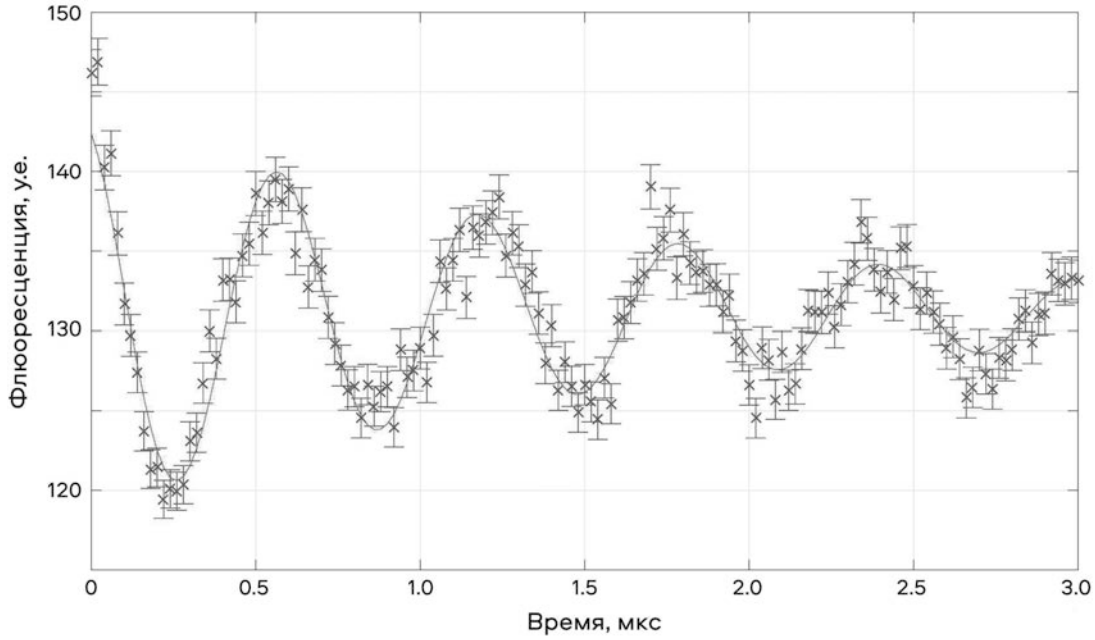


Рис. 5. Осцилляции Раби между квантовыми состояниями с проекциями спина $m_s = 0$ и $m_s = -1$ одиночного NV-центра без расположенного вблизи атома $^{13}\mathrm{C}$. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация. Относительная ошибка измерения интенсивности люминесценции при каждом значении длительности по времени СВЧ-сигнала составила 1%, результатом аппроксимации является значение $\chi^2 = 1.87$ на степень свободы

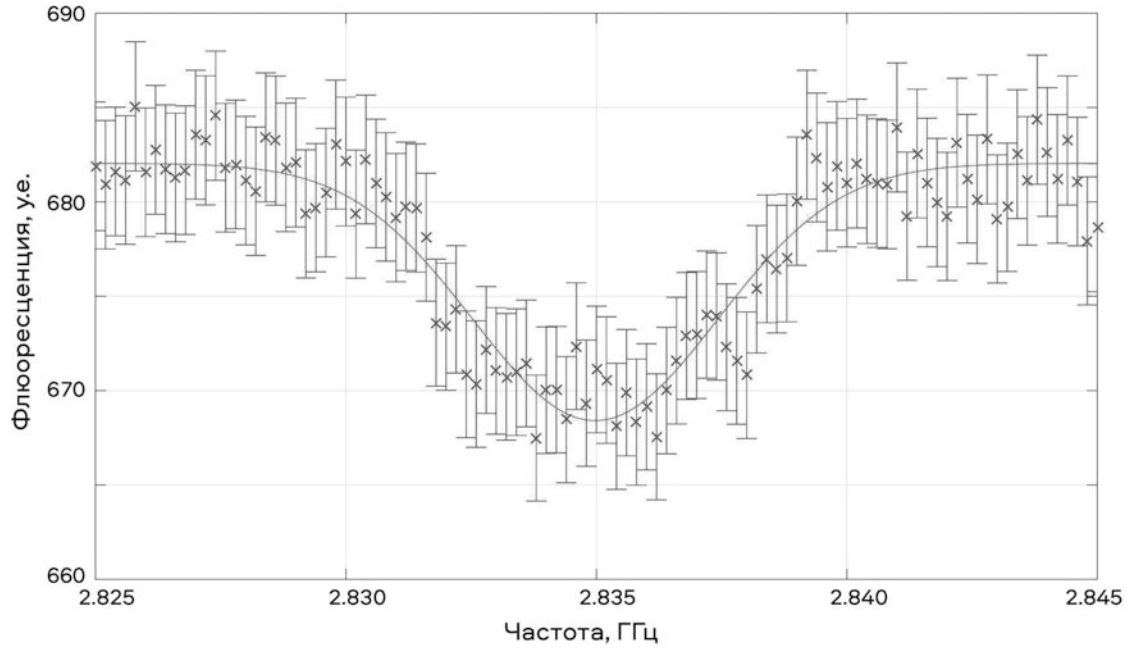


Рис. 6. Фрагмент ОДМР-спектра одиночного NV-центра с атомом $^{13}\mathrm{C}$, расположенным во второй координационной сфере (место 224) вблизи вакансии NV-центра. Возбуждение проводилось импульсным лазером. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация. Относительная ошибка измерения интенсивности люминесценции при каждом значении частоты составила 0.5%, результатом аппроксимации является значение $\chi^2 = 0.28$ на степень свободы. Видно, что ошибки завышены

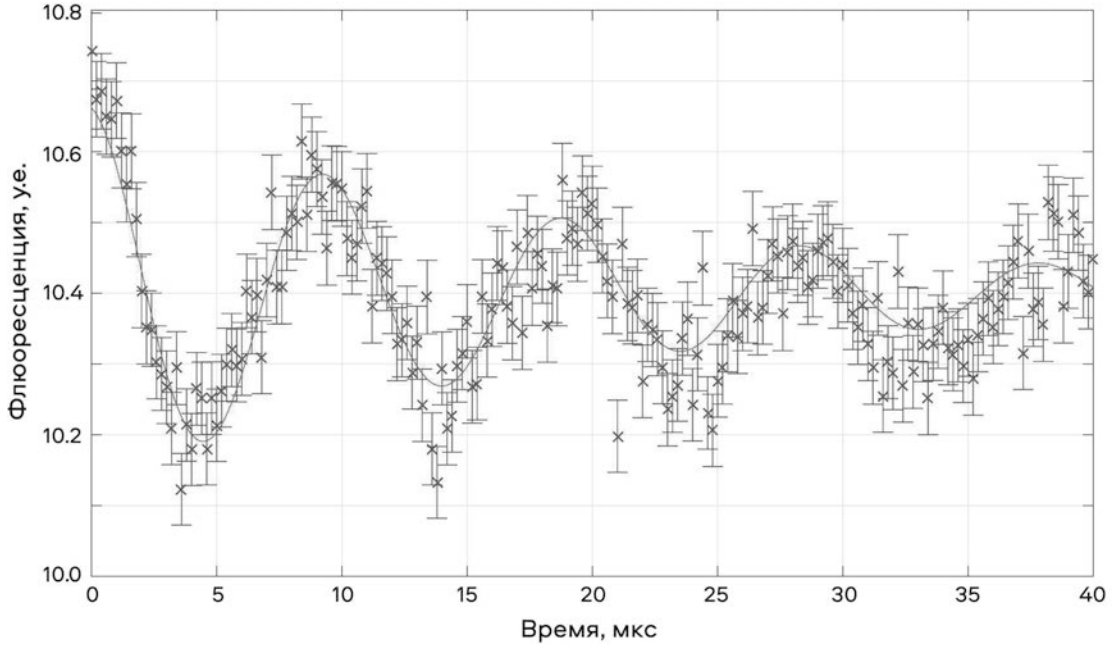


Рис. 7. Осцилляции Раби между квантовыми состояниями с проекциями спина $m_s = 0$ и $m_s = -1$ одиночного NV-центра без близко расположенного атома $^{13}\mathrm{C}$ в синтетическом монокристалле с пониженным содержанием азота. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация. Относительная ошибка измерения интенсивности люминесценции при каждом значении длительности по времени СВЧ-сигнала составила 0.5%, результатом аппроксимации является значение $\chi^2 = 1.27$ на степень свободы

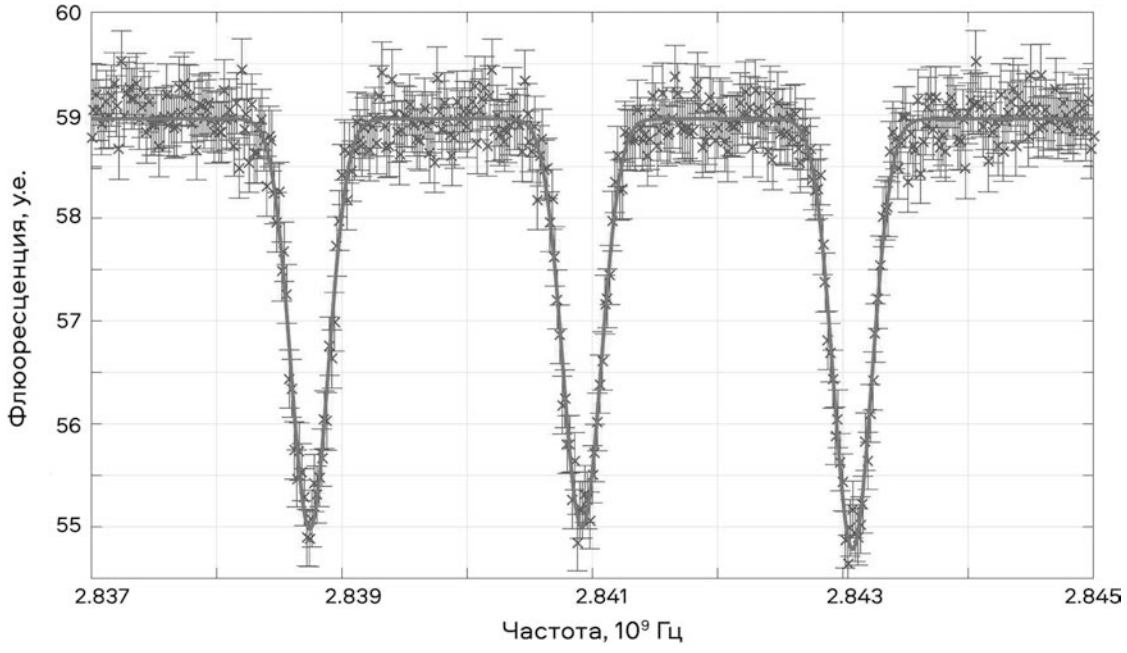


Рис. 8. Фрагмент ОДМР-спектра одиночного NV-центра без атома $^{13}\mathrm{C}$ в монокристалле № 2. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация. Относительная ошибка измерения интенсивности люминесценции при каждом значении частоты составила 0.5%, результатом аппроксимации является значение $\chi^2 = 0.5$ на степень свободы. Видно, что ошибки слегка завышены

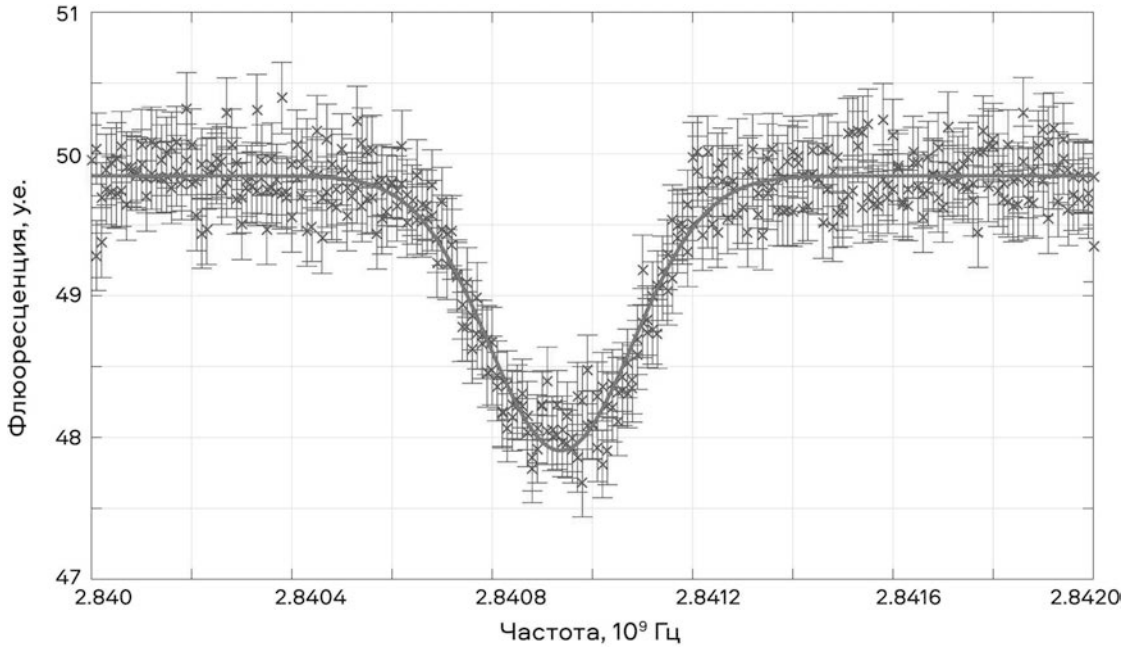


Рис. 9. Увеличенный фрагмент спектра ОДМР на рис. 8. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия — аппроксимация. Относительная ошибка измерения интенсивности люминесценции при каждом значении частоты составила 0.5%, результатом аппроксимации является значение $\chi^2 = 0.61$ на степень свободы. Видно, что ошибки слегка завышены

вую декогеренцию квантового состояния NV-центра мощность СВЧ-излучения была выбрана таким образом, чтобы длительность π-импульса составляла 4.5 мкс. Мощность генератора СВЧ-сигналов была 0.4 мВт. Время спиновой декогеренции T_2^* составило около 20 мкс.

Аппроксимирующая кривая описывается функцией

$$f(\nu) = f_0 - C_1 \exp\left(-\frac{(\nu-\nu_1)^2}{w_1^2}\right) - \\ - C_2 \exp\left(-\frac{(\nu-\nu_2)^2}{w_2^2}\right) - C_3 \exp\left(-\frac{(\nu-\nu_3)^2}{w_3^2}\right), \quad (4)$$

где C_1, C_2, C_3 — свободные коэффициенты, ν_1, ν_2, ν_3 — центральные положения резонансных частот, w_1, w_2, w_3 — полные ширины на полувысоте пиков поглощения.

На рис. 8 четко разрешаются пики, соответствующие сверхтонкому взаимодействию спинов электронов NV-центра со спином ядра азота. Величина расщепления (расстояние между пиками) составило около 2.1 МГц, что хорошо согласуется с результатом работы [8]. Ширина пиков на полувысоте составляет около 430 кГц, т. е. чувствительность метода к разрешению пиков в образце с низким содержанием азота составляет примерно 180 кГц (сигма разрешения). Это почти в 20 раз меньше, чем та же чувствительность в образце с невысоким значением T_2^*.

Для определения максимальной чувствительности были также проведены измерения с мощностью СВЧ 0.1 мВт. При такой мощности длительность π-импульса составила около 9 мкс. Однако существенного уменьшения ширины линий ОДМР-спектра не было зарегистрировано. На рис. 9 представлен спектр ОДМР для одного из пиков триплета с шагом 10 кГц по частоте СВЧ. Оценка ширины линии не изменилась и составила около 180 кГц. Плоская вершина пика позволяет сделать вывод о дополнительном взаимодействии, вероятно, со спином ядра изотопа ^{13}C во второй координационной сфере. Таким образом, для дальнейшего повышения разрешения спектра ОДМР требуются образцы с пониженным содержанием изотопа ^{13}C.

Отметим, что в работе [15] был представлен спектр ОДМР с тремя пиками от сверхтонкого взаимодействия спина электрона NV-центра со спином ядра ^{14}N. Однако образец алмаза был выращен методом HPHT (высокое давление, высокая температура) с высоким содержанием азота — около 10 ppm, что более чем на два порядка больше, чем в исследуемом CVD-образце. Эксперимент был выполнен на ансамбле NV-центров, и получено время T_2^* около 7 мкс, что в три раза меньше, чем в настоящем эксперименте. И, как результат, примерно во столько

же раз, по нашей оценке из рисунка с тремя пиками в работе [15], разрешение спектра ОДМР хуже, чем у нас на одиночном NV-центре. Заметим, что преимущество искусственного алмаза, выращенного методом CVD, над алмазом, выращенным методом HPHT, еще и в том, что в методе CVD можно при росте создавать плоскости с одиночными NV-центрами на любых заданных толщинах внутри образца, что крайне важно для задач квантовой информатики.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам проведенных исследований впервые получен выращенный в России методом CVD образец искусственного алмаза с временем спиновой декогеренции одиночного NV-центра около 20 мкс.

Можно однозначно утверждать, что достижимое разрешение спектра ОДМР заметно улучшается с ростом времени спиновой декогеренции T_2^* NV-центра.

В проведенном эксперименте разрешение (сигма) спектра ОДМР для образца №1 со временем спиновой декогеренции 2 мкс составило несколько мегагерц, при этом не удалось разделить три пика от сверхтонкого взаимодействия спина электрона NV-центра со спином азота из этого же центра. Расчетные значения разности частот между пиками составляют около 2.14 МГц.

Для образца №2 со временем спиновой декогеренции 20 мкс это разрешение составило уже примерно 180 кГц, что позволило четко увидеть искомые три пика. Такие результаты удалось получить еще для нескольких NV-центров на этом образце с такими же временами спиновой декогеренции.

Можно предположить, что разные значения времени спиновой декогеренции T_2^* в двух образцах получились из-за разных концентраций азота, по крайней мере, в областях исследований на обоих образцах.

Полученное разрешение 180 кГц — это вполне приемлемое разрешение для использования прецизионного измерения спектров ОДМР одиночных NV-центров в алмазе при комнатной температуре для многих задач квантовой информатики, включая магнитометрию слабых магнитных полей.

Благодарности. Работа выполнена в АНО «Институте инженерной физики» (г. Серпухов). Авторы благодарят А. Н. Царькова, С. В. Смурова и А. И. Алатарцева за поддержку работы. Синтез и подготовка образцов проводилась с использованием оборудования ЦКП «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов» [ТИСНУМ] (http://tisnum.ru/suec). Авторы выражают благодарность Д. В. Тетеруку за участие в росте образца алмаза №1 и В. Д. Бланку за стимулирующие дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-42-04416).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Wrachtrup and F. Jelezro, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 807 (2006).

2. T. Shröder, F. Gädeke, M. J. Banholzer, and O. Benson, New J. Phys. **13**, 055017 (2011).

3. J. Joo and E. Ginossar, Sci. Rep. **6**, 26338 (2016).

4. J. L. Webb, J. D. Clement, L. Troise et al., Appl. Phys. Lett. **114**, 231103 (2019).

5. R. L. Patel, L. Q. Zhou, A. C. Frangeskou et al., Phys. Rev. Appl. **14**, 044058 (2020).

6. L. Rodnin, J.-P. Tetienne, T. Hingant et al., Rep. Prog. Phys. **77**, 056503 (2014).

7. J. F. Barry, J. M. Schloss, E. Bauch et al., Rev. Mod. Phys. **92**, 015004 (2020).

8. A. Dreau, M. Lesik, L. Rondin et al., Phys. Rev. B **84**, 195204 (2011).

9. L. Robdelo, H. Bernien, I. V. Weperen, R. Hanson et al., Phys. Rev. Lett. **105**, 177403 (2010).

10. W. E. Moerner, W. E. Moerner, M. Orrit, and U. E. Wild, *Single Molecule Optical Detection, Imaging and Spectroscopy*, Wiley-VCH, Weinheim (1996).

11. А. П. Низовцев, Н. С. Кукин, А. Р. Мурадова и др., ЖПС **89**, 807 (2022).

12. A. P. Nizovtsev, S. Ya. Kilin, A. L. Pushkarchuk et al., New J. Phys. **16**, 083014 (2014).

13. A. P. Nizovtsev, S. Ya. Kilin, A. L. Pushkarchuk et al., New J. Phys. **20**, 023022 (2018).

14. Yu. L. Raikher and V. I. Stepanov, Appl. Phys. Lett. **105**, 063111 (2015).

15. O. R. Rubinas, V. V. Vorobyov, V. V. Soshenko et al., J. Phys. Commun. **2**, 115003 (2018).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 906–907 © 2023

КОММЕНТАРИЙ К СТАТЬЕ Р. М. ФЕЩЕНКО «ОБ ИНТЕГРАЛЕ ПО ВРЕМЕНИ ОТ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ» ЖЭТФ 163, 461 (2023)

М. В. Архипов [a*], ***Р. М. Архипов*** [a,b**], ***Н. Н. Розанов*** [a***]

[a] *Физико-техничесикий институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук 194021, Санкт-Петербург, Россия*

[b] *Санкт-Петербургский государственный университет 199034, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 21 июня 2023 г.,
после переработки 21 июня 2023 г.
Принята к публикации 4 июля 2023 г.

Статья Р. М. Фещенко [ЖЭТФ **163**, 461 (2023)] посвящена важному вопросу об общих свойствах импульсов электромагнитного поля и содержит, в частности, критику наших работ [Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, КЭ **50**, 801 (2020); R. Arkhipov, M. Arkhipov, A. Pakhomov, I. Babuslkin, and N. Rosanov, Laser Phys. Lett. **19**, 043001 (2022); М. В. Архипов, А. Н. Цыпкин, М. О. Жукова, А. О. Исмагилов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **115**, 3 (2022)]. Ниже мы отвечаем на эту критику и отмечаем ряд неточностей в укзанной статье.

DOI: 10.31857/S0044451023120040
EDN: NBRXWO

Основное внимание в статье Р. М. Фещенко [1] посвящено свойствам интеграла по времени t в бесконечных пределах от электрической напряженности поля $\mathbf{E}$ импульсов электромагнитного поля ($\mathbf{r}$ — радиус-вектор),

$$\mathbf{S}_E(\mathbf{r}) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)dt, \qquad (1)$$

и критике ряда работ, в том числе наших [2–4], в которых рассматривались родственные вопросы. Сразу укажем, что при наличии у поля статической компоненты интеграл (1) обращается в бесконечность. Тем самым, (1) имеет смысл лишь для импульсов, у которых напряженность электрического поля отлична от нуля только на протяжении конечного интервала времени. Интеграл (1) ниже называется электрической площадью импульса. Обсуждение некоторых свойств электрической площади можно найти в монографии Дж. Джексона [5], статье Е. Г. Бессонова [6] и большом числе последующих публикаций.

Первое утверждение статьи [1] состоит в том, что электрическая площадь импульса в неограниченном вакууме равна нулю при естественном условии конечности энергии импульса. Этот вывод совпадает с полученным в [7] иным способом, при уточнении, что он справедлив, если во всем пространстве во все моменты времени отсутствовали заряды и среды. Такое ограничение, которое, естественно, нереально, снижает значимость утверждения. Например, в полом коаксиальном волноводе, в котором отсутствует частота отсечки, могут распространяться со скоростью света в вакууме электромагнитные импульсы с конечной энергией и произвольной формой, в том числе униполярные, с ненулевой электрической площадью [8].

Дальнейшее содержание [1] относится уже к свойствам электрической площади импульсов в присутствии движущихся зарядов. К сожалению, здесь имеют место терминологические неопределенности и неточности. Так, электромагнитное поле разделяется на «поле излучения» и «статическое поле», без четкого

* E-mail: m.arkhipov@klnran.ru
** E-mail: arkhipovrostislav@gmail.com
*** E-mail: nnrosanov@mail.ru

указания такого разделения. Такая терминология вряд ли приемлема ввиду указанного выше отсутствия статической компоненты у электромагнитных импульсов с конечной энергией. С физической точки зрения важно, что детекторы и микрообъекты не различают каких-либо частей действующего на них поля. Кроме того, поля, связанные с зарядами, могут преобразовываться в распространяющиеся со скоростью света на значительные расстояния, например, при дифракционном излучении [9]. Невозможность разделения электромагнитного поля на «поле излучения» и «поле зарядов» в ряде случаев отмечается и в монографии [10].

Заслуживает возражения и высказывание автора относительно ошибочности экспериментов [4], где количественно измерена ненулевая площадь коротких импульсов. Автор [1] считает, что ненулевой результат измерения связан с существованием статических полей от неподвижных зарядов в лаборатории. Однако статические поля, т. е. неизменные во времени, не обладают электродвижущей силой, которая бы вызывала постоянное движение зарядов в электрических цепях систем регистрации и тем более, в моменты регистрации импульсов. Даже если бы такое было возможно, то это приводило бы к наличию постоянной составляющей регистрируемого напряжения, которая бы учитывалась. Так же обстоит дело и при электрооптической регистрации ненулевой электрической площади. В этом случае, если предполагать, что статические заряды могут воздействовать на оптические параметры нелинейного кристалла, то их величина должна быть сравнима с напряженностью поля в световой волне (сотни киловольт на метр), что никак не соответствует действительности.

Другое дело, что электроника в системах регистрации подвержена действию полей движущихся зарядов, т. е. электромагнитного излучения так называемых «наводок», создаваемых работающим электронным оборудованием. Наводки всегда являлись проблемой точных экспериментов, которая требовала изучения и устранения. Что и делалось при выполнении обсуждаемых экспериментов. Заметим, что в случае измерения даже в условиях электромагнитных помех, если следовать логике автора, наводки не должны в самом общем случае искажать регистрацию электрической площади импульса, так как их излучение имеет нулевую электрическую площадь.

По нашему мнению, критика экспериментов также полностью несостоятельна.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. М. Фещенко, ЖЭТФ **163**, 461 (2023) [R. M. Feshchenko, JETP **136**, 256 (2023)].

2. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, Квант. Электрон. **50**, 801 (2020) [R.M. Arkhipov, M.V. Arkhipov, and N.N. Rosanov, Quant. Electron. **50**, 801 (2020)].

3. R. Arkhipov, M. Arkhipov, A. Pakhomov, I. Babuslkin, and N. Rosanov, Laser Phys. Lett. **19**, 043001 (2022).

4. М. В. Архипов, А. Н. Цыпкин, М. О. Жукова, А. О. Исмагилов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов и Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **115**, 3 (2022) [M. V. Arkhipov, A. N. Tsypkin, M. O. Zhukova, A. O. Ismagilov, A. V. Pakhomov, N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, JETP Letters **115**, 1 (2022)].

5. J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, New York–London, J. Willey (1962); Русский перевод: Дж. Джексон, *Классическая электродинамика*, Мир, Москва (1965).

6. Е. Г. Бессонов, ЖЭТФ **80**, 852 (1981) [E. G. Bessonov, Sov. Phys. JETP **53**, 433 (1981)].

7. А. Б. Плаченов, Н. Н. Розанов, Изв. вузов. Радиофизика **65** (12), 1003 (2022).

8. Н. Н. Розанов, Опт. Спектр. **127**, 960 (2019) [N. N. Rosanov, Opt. Spectr. **127**, 1050 (2019)].

9. Б. М. Болотовский, Г. В. Воскресенский, УФН **88**, 209 (1966) [B. M. Bolotovskii, G. V. Voskresenskii, Sov. Phys. Usp. **9** 73 (1966)].

10. В. Л. Гинзбург, В. Н. Цытович, *Переходное излучение и переходное рассеяние*, Наука, Москва (1984).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 908–909 © 2023

ОТВЕТ НА КОММЕНТАРИЙ К СТАТЬЕ Р. М. ФЕЩЕНКО «ОБ ИНТЕГРАЛЕ ПО ВРЕМЕНИ ОТ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ» ЖЭТФ 163, 461 (2023)

Р. М. Фещенко *

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
199991, Ленинский проспект 53, Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 августа 2023 г.,
после переработки 9 августа 2023 г.
Принята к публикации 9 августа 2023 г.

Ответ на комментарий к статье Р. М. Фещенко «ОБ ИНТЕГРАЛЕ ПО ВРЕМЕНИ ОТ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ» ЖЭТФ **163**, 461 (2023).

DOI: 10.31857/S0044451023120052
EDN: NAUGNY

Настоящая работа представляет собой ответ на комментарий [1] к статье [2]. Автор согласен с тем, что свойства интеграла Бессонова (электрической площади импульса) рассматривались во многих опубликованных работах, хотя детальный обзор литературы не был целью работы [2].

Что касается импульсов в коаксиальном кабеле, то можно отметить, что униполярный импульс, распространяющийся в нем, останется униполярным лишь до тех пор пока не выйдет в свободное пространство. При дальнейшем распространении в свободном пространстве он перестанет быть униполярным.

Если говорить о разделении полного поля на излучательную и неизлучательную части, то оно действительно в некоторой степени неоднозначно, но лишь при неограниченном в пространстве движении электрических зарядов. В остальных случаях такое разделение вполне однозначно, в частности в экспериментах с генерацией терагерцевого излучения рассмотренных в [3], где излучательным будет поле остающееся после исчезновения макроскопических зарядов зарядов и токов вызванных лазерным импульсом.

Далее, что касается экспериментов с терагерцевым излучением [3], генерируемым при взаимодействии сверхкоротких лазерных импульсов с конденсированными средами и в частности с жидкостями. Надо отметить, что терагерцевое излучение здесь является следствием существования в облучаемом объеме жидкости в течении короткого времени порядка $\tau \sim 1$ пс макроскопических направленных плазменных токов [4], которые приводят к разделению зарядов в облучаемом объеме и в частности к возникновению некоторого макроскопического дипольного момента d. Этот дипольный момент в свою очередь создает (помимо излучательного поля) электрическое поле $E_s \propto d/r^3$, где r — это расстояние от источника. Поле E_s, хотя и меняется во времени (из-за эволюции дипольного момента), но описывается теми же соотношениями, что и обычное статическое поле электрического диполя. Его в этом смысле можно назвать статическим или квазистатическим, а интеграл Бессонова от него не равен нулю в общем случае. При этом площадь импульса связанная с полем E_s будет также убывать с расстоянием как и само поле, т. е. как $\propto 1/r^3$. Именно подобные поля прежде всего имелись ввиду в [2] под «неучтенными статическими полями», которые могут приводить к ненулевому измеренному интегралу Бессонова, а вовсе не какие-то совершенно посторонние наводки.

Хотелось бы особо подчеркнуть, что поле E_s не имеет никакого отношения к генерируемому терагерцевому излучению. Его величина будет меньше поля излучения E_{rad} в $(r/\lambda)^2$ раз, где $\lambda \approx 0.3$ мм — длина волны излучения. То есть на расстоянии 1 мм от источника (как в [3]) поле E_s будет меньше поля излучения на порядок, а на больших расстояниях

* E-mail: rusl@lebedev.ru

оно будет еще меньше. Поскольку поля излучения на расстоянии порядка 1 мм от источника могут достигать значений порядка многих МВ/м [4], объяснить с помощью такого механизма ненулевую измеренную площадь импульса, а также измеренное квазистатическое электрическое поле порядка 20 кВ/м не составляет большого труда. Необходимо отметить, что площадь собственно электромагнитного импульса, излученного диполем d, будет всегда равна нулю, поскольку для диполя $E_{rad} \propto \ddot{d}$.

В заключение, автор выражает согласие с утверждением в комментарии, что «детекторы и микрообъеты не различают каких либо частей действующего поля». Тем не менее, автор считает, что в отношении полей, являющихся по сути квазистатическими версиями обычных статических дипольных полей, было бы нежелательным использовать термин «излучение» или тем более «свет».

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, ЖЭТФ **164**(12), (2023) [R.M. Arkhipov, M.V. Arkhipov, and N.N. Rosanov, JETP **137**(12), (2023)].

2. Р.М. Фещенко, ЖЭТФ **163**, 461 (2023); [R. M. Feshchenko, JETP **136**, 256 (2023)].

3. М. В. Архипов, А. Н. Цыпкин, М. О. Жукова, А. О. Исмагилов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов и Р. М. Архипов, Письма в ЖЭТФ **115**, 3 (2022) [M. V. Arkhipov, A. N. Tsypkin, M. O. Zhukova, A. O. Ismagilov, A. V. Pakhomov, N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, JETP Letters **115**, 1 (2022)].

4. I. Dey, K. Jana, V.Yu. Fedorov, A.D. Koulouklidis, A. Mondal, M. Shaikh, D. Sarkar, A.D. Lad, S. Tzortzakis, A. Couairon et al., Nature Communications, **8**, 1184 (2017).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 910–926 © 2023

ФАНТОМНАЯ ВОЛОКОННАЯ ЭНДОСКОПИЯ С НЕСКОЛЬКИМИ ОДНОПИКСЕЛЬНЫМИ ДАТЧИКАМИ В ОБЪЕКТНОМ КАНАЛЕ

Д. А. Балакин [*]***, А. В. Белинский*** [**]

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

Поступила в редакцию 14 июня 2023 г.,
после переработки 10 июля 2023 г.
Принята к публикации 12 сентября 2023 г.

Описан новый способ формирования оптических фантомных изображений, в котором используется регистрация излучения в объектном канале несколькими датчиками. Показано преимущество предлагаемого метода в числе шаблонов освещения, требуемом для восстановления изображения объекта исследования, по сравнению с традиционными схемами формирования фантомных изображений. Предложены варианты алгоритмов редукции измерений к виду, свойственному формированию изображения объекта исследования, направленные на увеличение быстродействия вычислительной компоненты эндоскопа. Рассмотренный волоконно-оптический вариант формирования фантомных изображений пригоден для исследования труднодоступных полостей и органов человеческого организма, допускающих введения туда тонкого оптоволоконного жгута, что расширяет его применимость по сравнению с классическими методами оптической эндоскопии.

DOI: 10.31857/S0044451023120064

EDN: MYBPPY

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычная методика построения изображений предполагает наличие оптической системы, направленной на освещенный объект и формирующей дошедшее до нее излучение в удобном для наблюдателя виде. Научно-технический прогресс дает новые возможности как формирования и регистрации различных видов изображений, так и их обработки. Здесь мы рассмотрим на первый взгляд весьма экзотические возможности построения фантомных изображений, которые находят все более живой интерес и широкий круг приложений за счет их явных преимуществ по сравнению с традиционными методиками [1]. Для их формирования необходим источник коррелированных световых пучков, один из которых взаимодействует с объектом, а другой — нет. Детектор в том канале, который содержит один из пучков и исследуемый объект (в объектном канале), дает информацию только о полной интенсивности прошедшего излучения. Сопряженный пучок (в восстанавливающем канале) не взаимодействует с объектом, но регистрируется ПЗС-матрицей.

Первым и традиционным способом формирования фантомного изображения по показаниям однопиксельного датчика в объектном канале и показаниям матрицы датчиков или одиночного сканирующего детектора [2] в восстанавливающем канале стало вычисление корреляционной функция второго порядка сигнала однопиксельного датчика в объектном канале и сигнала, соответствующего каждому отдельному пикселю в восстанавливающем канале. Иными словами, если обозначить показания однопиксельного датчика $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n$, где индекс соответствует номеру измерения, а соответствующие показания матрицы датчиков суть $a_{111}, a_{121}, \ldots, a_{km1}, a_{112}, \ldots, a_{lmn}$, где первые два индекса соответствуют положению элемента матрицы датчиков или положению сканирующего датчика в восстанавливающем канале, а последний — номеру измерения, то восстанавливаемое фантомное изоб-

[*] E-mail: balakin_d_a@physics.msu.ru
[**] E-mail: belinsky@physics.msu.ru

ражение f вычисляется по формуле

$$f_{ik} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\xi_j - \frac{1}{n}\sum_{j'=1}^{n}\xi_{j'}\right)\left(a_{ikj} - \frac{1}{n}\sum_{j''=1} a_{ikj''}\right). \quad (1)$$

Исторически первыми появились так называемые квантовые фантомные изображения. Само это название пришло гораздо позже, но и сейчас в энциклопедиях и научных статьях встречается название «двухфотонная оптика», как, например, в названии статьи [3]. Почему? Дело в том, что обычные оптические системы не нуждаются в квантовом двухфотонном свете, а могут строить изображения при каком угодно освещении. Но открытие параметрического рассеяния света [4] привело к целому ряду новых направлений квантовой оптики за счет гарантированной генерации жестко коррелированных в пространстве и во времени пар фотонов в так называемом квантовом запутанном состоянии. Тем не менее, для формирования фантомных изображений достаточно получить коррелированные световые пучки, а природа этой корреляции не столь важна, хотя и влияет на характеристики получаемых изображений.

Позднее появился вычислительный вариант формирования фантомных изображений. В нем объект освещается случайными шаблонами [5], формируемыми пространственным модулятором света или цифровым микрозеркальным устройством. Регистрация фотонов в восстанавливающем канале заменяется ее численным моделированием, что позволяет обойтись без многопиксельной камеры, а восстанавливающий канал, таким образом, может быть сделан виртуальным. Понятно, что чем больше различных шаблонов освещения используется за время регистрации фантомного изображения, тем более точное изображение может быть построено, см., например, [6]. В самом деле, каждый новый шаблон позволяет оценить проекцию изображения объекта как вектора $\boldsymbol{f}$ на этот шаблон как вектор $\boldsymbol{a}$ того же евклидова пространства и, следовательно, извлечь новую информацию об объекте, если шаблон освещения не коллинеарен предыдущим. Примеры изменения формируемого изображения при увеличении числа шаблонов освещения приведены ниже в разд. 4.

Для математической обработки данных измерений — преобразования их в изображение — кроме традиционного корреляционного метода применимы и другие методы, в частности, метод сжатых измерений [6–11], метод редукции измерения [12–15] и методы, основанные на нейронных сетях [16–18]. В настоящей работе использован метод редукции измерения, поскольку он хорошо себя показал в сравнении с методом сжатых измерений в близкой к предлагаемой ниже схеме в [15]. Кроме того, для биологических приложений важно, что используется заранее сформулированная математическая модель объекта исследования, а не она восстанавливается обучением по тестовым данным, так как в этом случае необходима схожесть с объектом исследования тестовых объектов, поскольку ее отсутствие способно привести к появлению артефактов в восстановленном изображении.

Рассмотрим некоторые работы, в которых при формировании фантомных изображений также рассмотрена регистрация излучения в объектном канале не единственным однопиксельным датчиком.

В статьях [14, 19, 20] рассмотрено формирование квантового фантомного изображения вместе с обычным и задача их последующей редукции к виду, свойственному измерениям единственного изображения объекта исследования. При этом используется режим фотоотсчетов, поэтому появление дополнительной информации связано не с регистрацией излучения в объектном канале многопиксельным датчиком как таковым, а с различием влияния дифракции и неединичной квантовой эффективности датчиков на формируемое фантомное изображение и формируемое обычное изображение. В отличие от указанных статей, в настоящей работе не используется режим фотоотсчетов, а также не восстанавливается обычное изображение. Поэтому количество и положение (однопиксельных) датчиков в объектном канале может быть произвольным (но, разумеется, и то, и другое влияет на свойства восстанавливаемого изображения, см. далее).

В статье [21], как и в настоящей работе, используется несколько однопиксельных датчиков, одновременно регистрирующих излучение, взаимодействовавшее с объектом, и по их показаниям восстанавливается единая модель объекта. Отличие настоящей работы как в использовании оптических волокон для передачи излучения, так и в том, что восстанавливается не трехмерная поверхность объекта, а его изображение. Иными словами, не используется получение дополнительной информации об объекте за счет его наблюдения с разных ракурсов, а сам объект считается плоским.

2. КОМПОНОВКА ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Предлагаемая компоновка оптической системы аналогична ранее предложенной в [15]. Лазерное излучение модулируется пространственным модулятором света, в дальней зоне которого профиль интенсивности пучка представляет из себя спекл-картину. С помощью микрообъектива излучение заводится в многомодовое волокно. После распространения в волокне свет облучает объект исследования. Если выходной торец волоконного жгута невозможно совместить с объектом, между ними можно поставить проекционную оптическую систему, особенности расчета которой приведены далее. Отличие от [15] состоит в том, что излучение, взаимодействовавшее с объектом исследования, не собирается одним оптическим волокном и направляется в единственный однопиксельный датчик, а собирается несколькими оптическими волокнами, каждое из которых направляет собранное излучение в соответствующий ему однопиксельный датчик, см. рис. 1. Модулируемое лазерное излучение заводится в многомодовое волокно. После распространения в волокне свет облучает объект исследования. При необходимости оптическое сопряжение выходного торца многомодового волокна и объекта может быть осуществлено проекционным объективом, например, асферической линзой, см. Приложение. Излучение, взаимодействовавшее с объектом, собирается несколькими однопиксельными датчиками. Их сигналы поступают на персональный компьютер (ПК), формирующий изображение. Для наглядности участок оптической системы, по которому подается освещение, и участок, по которому передается регистрируемое излучение, показаны по разные стороны объекта.

Отметим следующие соображения о выборе положений торцов оптических волокон, проводящих излучение от объекта к однопиксельным датчикам. С одной стороны, желательно, чтобы объединение полей зрения датчиков не имело пропусков. Излучение от точек объекта, лежащих в пропусках, не регистрируется ни одним датчиком, поэтому при формировании изображения информация непосредственно об этих точках отсутствует и для восстановления изображения приходится использовать дополнительную информацию об объекте. С другой стороны, перекрытие полей зрения отдельных датчиков также нежелательно, поскольку увеличивает зависимость показаний датчиков друг от друга. В предельном случае, когда все поля зрения совпадают, сигналы датчиков совпают с точностью до погрешности измерений и, следовательно, не позволяют извлечь дополнительную информацию по сравнению с одним однопиксельным датчиком с тем же совокупным полем зрения.

3. МЕТОД РЕДУКЦИИ В ЗАДАЧЕ ФОРМИРОВАНИЯ ФАНТОМНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

В связи со существенной ролью методов обработки сигналов датчиков для формирования изображения вначале рассмотрим задачу редукции показаний датчиков к виду, свойственному прямому измерению изображения объекта исследования, в общем виде.

Измерения, выполняемые для формирования фантомных изображений, в частности — волоконных фантомных изображений (ВФИ), как правило, могут быть описаны схемой измерения

$$\boldsymbol{\xi} = A\boldsymbol{f} + \boldsymbol{\nu}, \tag{2}$$

где вектор $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{X}$ — последовательность $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{\dim \mathcal{X}}$ показаний однопиксельного датчика, неизвестный вектор $\boldsymbol{f} \in \mathcal{F}$ характеризует изучаемое распределение оптических характеристик объекта исследования, $\boldsymbol{\nu} \in \mathcal{X}$ — погрешность измерений, математическое ожидание которой равно нулю, а ковариационный оператор — $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}$, $\mathcal{F}, \mathcal{X}$ — конечномерные евклидовы пространства. При использовании структурированного освещения и однопиксельного датчика строки $\boldsymbol{a}_j^*$, $j = 1, 2, \ldots, \dim \mathcal{X}$ матрицы оператора A суть развернутые в строки шаблоны освещения. Измерение на идеальном измерительном преобразователе, результат которого интересует исследователя, моделируется линейным оператором $U\colon \mathcal{F} \to \mathcal{U}$. В рассматриваемом случае, когда процесс измерения не возмущает объект и восстанавливается именно изображение объекта, $U = I$. Примером ситуации, когда это не так, служит восстановление изображения отдельного слоя трехмерного объекта.

В статье [15] для формирования ВФИ был предложен следующий вариант метода редукции измерения.

1. Вычисление оценки

$$\hat{\boldsymbol{u}} = U(\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1/2}A)^{-}\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1/2}\boldsymbol{\xi} = R_*\boldsymbol{\xi} \tag{3}$$

линейной несмещённой редукции [12]. Ей соответствует минимальная погрешность

$$h(R_*, U) = \operatorname{tr}\left(U(A^*\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1}A)^{-}U^*\right). \tag{4}$$

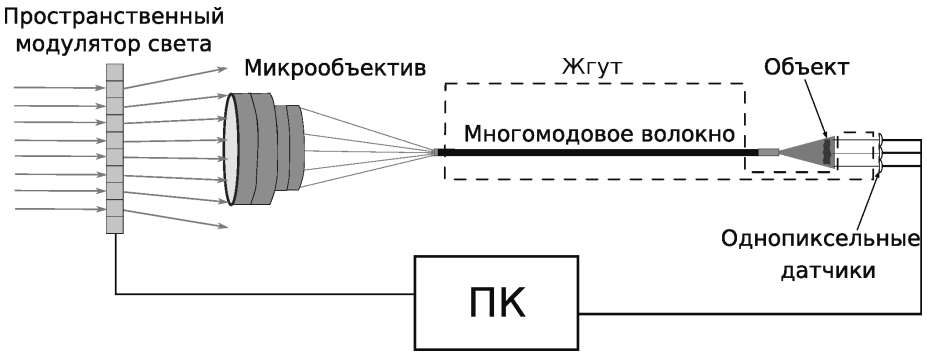


Рис. 1. Схема регистрации фантомных изображений при освещении объекта посредством многомодового волокна и регистрации излучения несколькими однопиксельными датчиками

2. Переход к собственному базису модели интерпретации измерения [12, §8.1], в котором искомое значение $TU\boldsymbol{f}$ интересующей исследователя характеристики ОБИ считается разреженным, то есть содержит много нулевых компонент по сравнению с его размерностью. Обозначим соответствующее преобразование T, а его результат — $T\hat{\boldsymbol{u}}$.

3. Формирование оценки $T\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}}$ по правилу: $(T\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}})_i = 0$, если гипотеза «$(T\hat{\boldsymbol{u}})_i = 0$» принимается, а именно, если выполнено условие

$$(T\hat{\boldsymbol{u}})_i^2 < \tau(T\Sigma_{R_*\boldsymbol{\xi}}T^*)_{ii}, \tag{5}$$

иначе

$$(T\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}})_i = (T\hat{\boldsymbol{u}})_i, \quad i = 1, \ldots, \dim\mathcal{U},$$

где

$$\Sigma_{R_*\boldsymbol{\xi}} = U(A^*\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1}A)^-U^*$$

— ковариационный оператор оценки $R_*\boldsymbol{\xi}$, $\tau \geq 0$ — параметр критерия (5).

4. Возвращение к исходному базису:

$$\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}} = T^{-1}T\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}}.$$

5. Вычисление наиболее соответствующей дополнительной информации версии составляющей $U(I - A^-A)\boldsymbol{f}$ при помощи (любого) решения задачи минимизации

$$\Omega(\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}} + U(I - A^-A)\boldsymbol{g}) \sim \min_{\boldsymbol{g}\in\mathcal{F}}, \tag{6}$$

где функционал Ω задан исследователем, который считает, что восстанавливаемое изображение тем более правдоподобно, чем меньше значение этого функционала. Обозначим результат действия оператора $U(I - A^-A)$ на ее решение $\hat{\boldsymbol{v}}_{\text{thr}}$.

6. Восстановление изображения как суммы $\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}} + \hat{\boldsymbol{v}}_{\text{thr}}$.

В часто встречающемся случае $U = I$ задача (6) упрощается до

$$\Omega(\hat{\boldsymbol{u}}_{\text{thr}} + \boldsymbol{v}) \sim \min_{\boldsymbol{v}\in\mathcal{F}:A\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0}}. \tag{7}$$

В методе сжатых измерений [6, 10, 11], который, как правило, используется для формирования вычислительных фантомных изображений, оценка вектора f определена решением задачи минимизации по g функционала

$$\|A\boldsymbol{g} - \boldsymbol{\xi}\|^2 + \alpha\Omega(\boldsymbol{g}) \sim \min_{\boldsymbol{g}\in\mathcal{F}}, \tag{8}$$

где функционал Ω характеризует регулярность объекта (обычно — гладкость его изображения как функции координат). Численное моделирование в [15] показало, что лучшие результаты восстановления фантомного изображения получаются, если использовать в (6) и (7) в качестве функционала Ω функционал анизотропной полной вариации

$$\Omega(\boldsymbol{g}) = \sum_{i=1}^{\dim\boldsymbol{g}} \left(|D_x^1\boldsymbol{g}|_i + |D_y^1\boldsymbol{g}|_i\right) = \|D_x^1\boldsymbol{g}\|_1 + \|D_y^1\boldsymbol{g}\|_1, \tag{9}$$

где $\|\cdot\|_1$ — норма L^1, а среди вариантов метода сжатых измерений лучшие результаты получаются, если взять в качестве регуляризующего функционала (9) [6] или альтернативный вариант функционала анизотропной полной вариации

$$\Omega(g) = \|D_x^1\boldsymbol{g}\| + \|D_y^1\boldsymbol{g}\|.$$

Более того, вариант выбора регуляризующего функционала (9) также положительно влияет на быстродействие [22]. В связи с этим на рисунках ниже рассмотрен именно эти вариант.

Для применения фантомных изображений в эндоскопии важно приемлемое для целей исследования быстродействие интеллектуальной системы формирования изображений и, в частности, ее части, отвечающей за оптимальное преобразование измерений собирающего детектора в формируемое изображение. Поэтому далее в этом разделе рассмотрены некоторые приемы повышения быстродействия вышеописанного варианта метода редукции измерения для формирования ВФИ. Заметим, что как использование нескольких датчиков в объектном канале, так и восстановление пространственного распределения оптических характеристик трехмерного, а не двумерного объекта требует обработки большего объема данных измерений, во втором случае — для восстановления оптических характеристик в большем числе вокселей, что увеличивает требования к быстродействию.

Основное время вычислений в вышеописанном варианте метода редукции приходится на два этапа: решение системы линейных уравнений при вычислении результата редукции (3) и численная оптимизация (6) или (7). В последующих формулах для упрощения выкладок считается, что $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}} = \sigma^2 I$. Если это не так, перейти к этой ситуации можно заменой $\boldsymbol{\xi}$ на $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1/2}\boldsymbol{\xi}$ и A на $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1/2}A$ («выбеливание» шума).

3.1. Рекуррентное восстановление фантомных изображений

Ускорение выполнения алгоритма редукции может быть получено при вычислении оценки линейной редукции (3) не прямым методом, а итерационным методом Качмажа [23, § 12.4]. В этом случае начальное приближение (им может быть и нулевой вектор) на каждой итерации последовательно уточняется сдвигом на

$$\lambda(\xi_k - \boldsymbol{a}_k^* \hat{\boldsymbol{f}}^{(k-1)})\frac{\boldsymbol{a}_k}{\|\boldsymbol{a}_k\|^2},$$

где k — номер итерации, при $k > \dim\mathcal{X}$ считается, что $\boldsymbol{a}_k = \boldsymbol{a}_{k \mod \dim\mathcal{X}}$, $\hat{\boldsymbol{f}}^{(k-1)}$ — оценка, полученная на предыдущей итерации, $0 < \lambda < 2$ — параметр алгоритма, влияющий на скорость сходимости. Затем, чтобы учесть неотрицательность значений прозрачности, полученное значение опционально ортогонально проецируется на неотрицательный конус. Заметим, что получающийся алгоритм, с одной стороны, сходен с рекуррентной версией метода редукции измерения [12, §5.5], в которой шаг линейного уточнения имеет более сложный вид сдвига на

$$\left(\xi_j - \boldsymbol{a}_j^* \hat{\boldsymbol{f}}^{(j-1)}\right)\frac{\left(A^{(j-1)*}A^{(j-1)}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_j}{1 + \boldsymbol{a}_j^*\left(A^{(j-1)*}A^{(j-1)}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_j},$$

где

$$\left(A^{(j)*}A^{(j)}\right)^{-1} = \left(A^{(j-1)*}A^{(j-1)}\right)^{-1} - \\ - \frac{\left(A^{(j-1)*}A^{(j-1)}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_j\boldsymbol{a}_j^*\left(A^{(j-1)*}A^{(j-1)}\right)^{-1}}{1 + \boldsymbol{a}_j^*\left(A^{(j-1)*}A^{(j-1)}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_j},$$

а $A^{(j)}$ — часть матрицы A, состоящая из строк до j-й включительно, причем процесс счета завершается после $\dim\mathcal{X}$ итераций (метод Качмажа требует *как минимум* этого числа итераций, в противном случае оказываются использованными не все результаты измерений). Указанный вид шага линейного уточнения, однако, относится к ситуации, когда ковариационный оператор начального приближения уже невырожден, и имеет существенно более громоздкий вид в общем случае. С другой стороны, использование метода Качмажа делает вычисление результата линейной редукции измерения похожим на традиционный метод формирования фантомных изображений (1), где шаг линейного уточнения имел бы вид сдвига на

$$\left(\xi_j - \frac{1}{\dim\mathcal{X}}\sum_{k=1}^{\dim\mathcal{X}}\xi_k\right)\left(\boldsymbol{a}_j - \frac{1}{\dim\mathcal{X}}\sum_{l=1}^{\dim\mathcal{X}}\boldsymbol{a}_l\right),$$

также с конечным числом итераций, но в этом случае линейное уточнение не зависит от ранее полученной оценки, см. также [24], где предложена асимптотически эквивалентная традиционному методу, но более удобная для вычисления оценка с шагом линейного уточнения

$$\frac{1}{2\dim\mathcal{X}}(\xi_j - \xi_{j-1})(\boldsymbol{a}_j - \boldsymbol{a}_{j-1}), j = 2, \ldots$$

Первое преимущество метода Качмажа перед прямыми методами вычисления результата линейной редукции состоит в возможности остановки вычислений в произвольный момент времени. В этом случае достигается ускорение процесса вычислений ценой увеличения погрешности: полученная на последней выполненной итерации оценка будет иметь худшее качество, чем та, что была бы получена при всех итерациях, см. рис. 2.

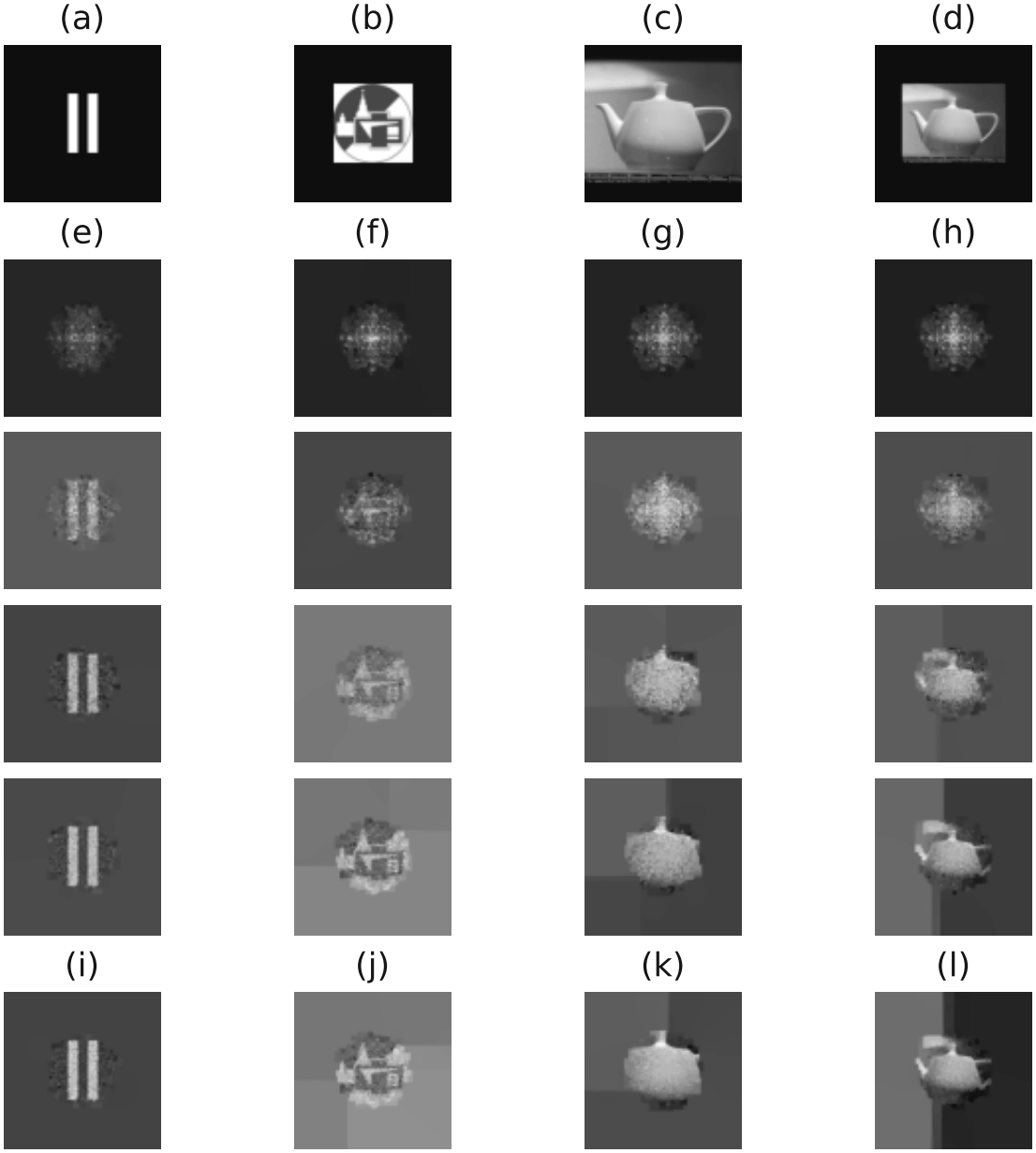


Рис. 2. Объекты (a–d), результаты (e–h) восстановления фантомных изображений этих объектов методом редукции измерений, получающиеся при остановке итерационного алгоритма после 2^{12}, 2^{15}, 2^{18} и 2^{20} итераций (сверху вниз) и аналогичные результаты при использовании нерекуррентной версии алгоритма (i–l). Видно, что для более сложных изображений (b–d) требуется большее число итераций, чем для (a). Здесь и далее в этом разделе при численном моделировании использованы 1024 шаблона освещения

Второе преимущество метода Качмажа состоит в возможности использования произвольного начального приближения и более быстрой сходимости к результату при использовании более точного приближения. Более того, если на некоторых номерах итераций при вычислениях, начавшихся с начального приближения нулевым вектором, и при вычислениях, начавшихся с какого-либо другого начального приближения, промежуточные оценки совпали, то совпадут и все последующие промежуточные оценки, и конечные результаты. Тем самым, во-первых, возможна «приостановка» вычислений в произвольный момент времени, определение пригодности качества сформированного изображения для его ис-

пользования в соответствии с целью исследования и, если качество недостаточно, продолжение вычислений «с того же места», причем — без дополнительных вычислений. Возможна также организация вычислений, когда параллельно продолжается формирование фантомного изображения и делаются заключения по сформированному промежуточному изображению.

Третье преимущество метода Качмажа состоит в допустимости произвольной одновременной перестановки результатов измерений и соответствующих им шаблонов освещения «по ходу» вычислений. Иными словами, если на момент начала вычислений выполнены еще не все измерения, до их получения можно итерировать по имеющимся результатам, а по мере получения добавлять их. В отличие от предыдущего абзаца, в этом случае дополнительные вычисления присутствуют, поскольку по наиболее старым результатам измерений производится больше итераций, чем по недавним.

3.2. Промежуточное восстановление изображения низкого разрешения

Другой способ быстрого получения фантомного изображения низкого разрешения также основан на возможности использовать произвольное начальное приближение при реализации линейной редукции измерений методом Качмажа. В этом случае вначале использованные шаблоны освещения передискретизируются с понижением разрешения и, как следствие, с уменьшением числа пикселей. Затем за счет уменьшения размера изображения в пикселях сравнительно быстро формируется фантомное изображение. После этого делаются те заключения об изображении, для которых это разрешение достаточно (например, принимается решение, подходит ли образец для последующего изучения). Если изображение подходит для дальнейшего изучения, то изображение низкого разрешения передискретизируются с повышением разрешения. Получившийся результат затем используется как начальное приближение при линейной редукции с использованием метода Качмажа, см. рис 3. Поскольку по сравнению с непосредственным восстановлением изображения высокого разрешения при этом выполняются «лишние» вычисления (каждое показание собирающего датчика используется, по крайней мере, дважды: при формировании изображения низкого разрешения и при формировании изображения высокого разрешения), такие действия целесообразны только тогда, когда не во всех случаях требуется построение изображений высокого разрешения. Отметим, что по мере работы метода Качмажа вначале также формируется изображение невысокого разрешения (см. рис. 2e–h, количество итераций увеличивается сверху вниз), но с двумя отличиями: во-первых, разрешение формируемого изображения непосредственно не регулируется исследователем, во-вторых, разрешение на фиксированной итерации зависит от самого объекта (изображение «более простого» объекта на рис. 2a восстанавливается быстрее).

Заметим также, что разрешение формируемых изображений необязательно должно быть постоянным во всей плоскости изображения, т. е. исследователь может, посмотрев изображение низкого разрешения, выбрать интересующую его область с последующим формированием изображения высокого разрешения только этой области. Такого рода ситуация возникает, в частности, когда поле зрения однопиксельного датчика выходит за границы сердцевины оптического волокна. В этом случае можно рассматривать пиксели, относящиеся к сердцевине, а всю остальную часть изображения рассматривать как одну область без разрешения в ней каких-либо деталей. Поскольку оптические волокна обычно имеют круглое сечение, таким образом достижимо уменьшение числа пикселей как минимум в $4/\pi$ раза без существенного ухудшения разрешения, см. рис. 4. Более сложные схемы дискретизации позволяют плавно регулировать разрешение в поле зрения однопиксельного детектора. Другим примером такого рода служит ситуация, когда исследователь может априори указать критерий отличия интересующего его объекта от фона (например, что фон — черный и образует односвязную область, включающую границы изображения).

Задачи численной оптимизации (6) и (7) близки в математическом плане к задаче оптимизации (8), что позволяет при их решении использовать известные итерационные методы численной оптимизации. Примером такого метода служит FISTA [25]. Тем не менее, численное моделирование показало, что использование FISTA не дает выигрыша по времени вычислений, если ставится задача восстановления изображения такого же качества, что и формируемая при использовании алгоритма OSQP [26]. Несмотря на это, FISTA все же имеет ситуативное преимущество при вычислениях «с паузами», см. выше.

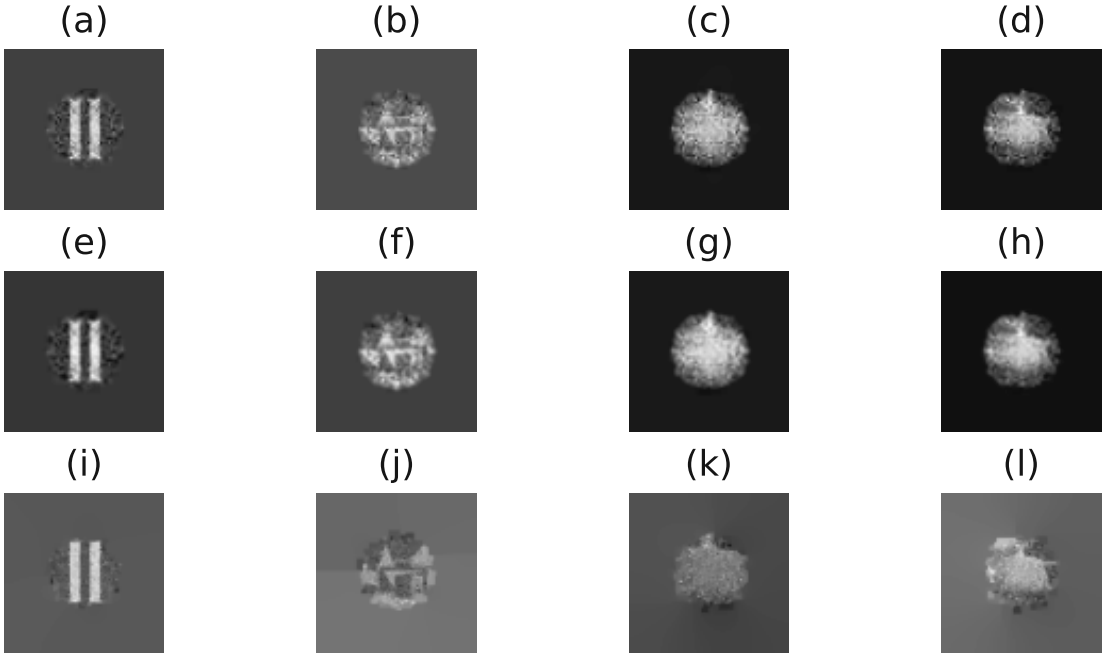


Рис. 3. Предварительно формируемые фантомные изображения низкого разрешения (a–d), 64×64 пикселя, их передискретизации методом линейной интерполяции (e–h) и восстановленные «итоговые» фантомные изображения (i–l), 128×128 пикселей, при использовании передискретизированного изображения как начального приближения при восстановлении «итогового» изображения. Моделируемые объекты и параметры моделирования те же, что на рис. 2. Более низкий контраст «итоговых» изображений (i–l) по сравнению с (e–h) связан с их большей зашумленностью

3.3. Выбор компромисса между подавлением шума и искажением изображения

На шаге 3 алгоритма выше требуется выбрать значение параметра алгоритма, отражающее приемлемый для исследователя компромисс между подавлением шума (чем больше τ, тем больше подавляется шум) и искажением изображений, компоненты которых близки к 0. Выбор значения τ путем моделирования регистрации тестового изображения, содержащего требуемые интересующие исследователя «тонкие» детали, и использования максимального значения параметра, при котором эти детали сохраняются, или, аналогично [27], путем минимизации средней погрешности восстановления по набору тестовых данных, в известном смысле оптимален, ибо, с одной стороны, позволяет учесть априорные представления исследователя об исследуемом объекте, а с другой стороны, не требует формулировать эти представления в явном виде. В то же время такой подход «более требователен» к математической модели формирования результатов измерений, поскольку модель измерения (2) не содержит достаточно информации для аналитического выбора значения τ и требует значительного объема вычислений для численного моделирования (например, для многократного моделирования регистрации результатов измерений и их обработки при использовании метода Монте-Карло). В связи с этим возникает потребность в менее требовательном методе выбора значения τ.

Для указанной цели подходит метод, аналогичный методу L-кривой [28]. В нем используется тот факт, что график зависимости числа компонент формируемого изображения, для которых условие (5) выполнено, от параметра τ в логарифмическом масштабе имеет два характерных участка. На первом из них, соответствующему значениям τ, меньшим рекомендуемого, выполнение условия (5), как правило, обусловлено высоким уровнем шума (благодаря переходу к собственному базису модели интерпретации измерений шум преимущественно сосредоточен в небольшом числе компонент), вследствие чего число компонент, для которых условие выполнено, при увеличении τ быстро растет. На втором, соответствующему большим значениям τ, выполнение условия (5), как правило, обусловлено подавлением информативной составляющей измере-

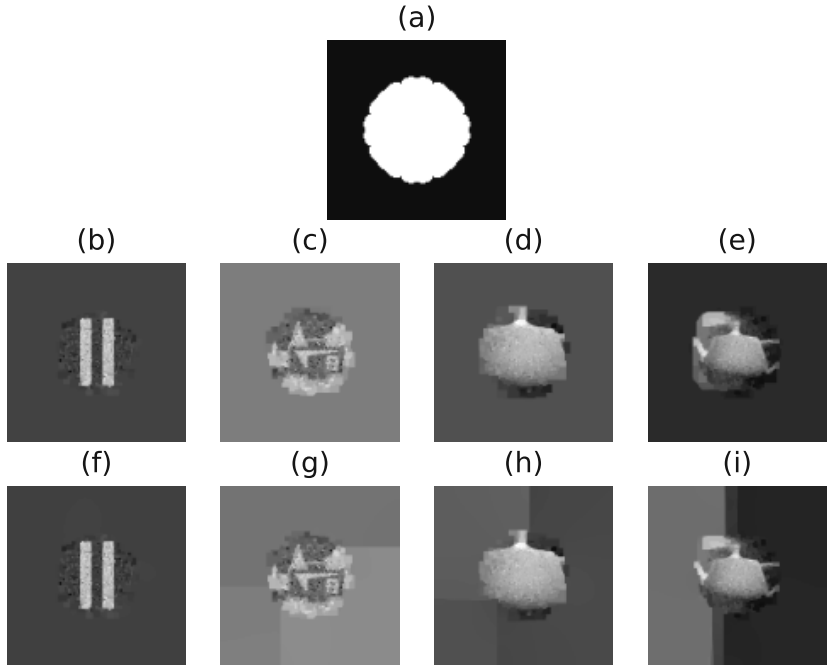


Рис. 4. Восстановление фантомного изображения в пределах области (a), излучение из которой проходит через оптическое волокно. Соответствующие результаты (b–e) лишь незначительно отличаются от результатов при восстановлении всего изображения (f–i) несмотря на значительное уменьшение размерности пространства изображений (4352 против 128^2, что близко к уменьшению размерности при восстановлении изображений низкого разрешения на рис. 3). При этом, в отличие от рис. 3, последующее восстановление «итогового» изображения не необходимо. Моделируемые объекты и параметры моделирования те же, что на рис. 2

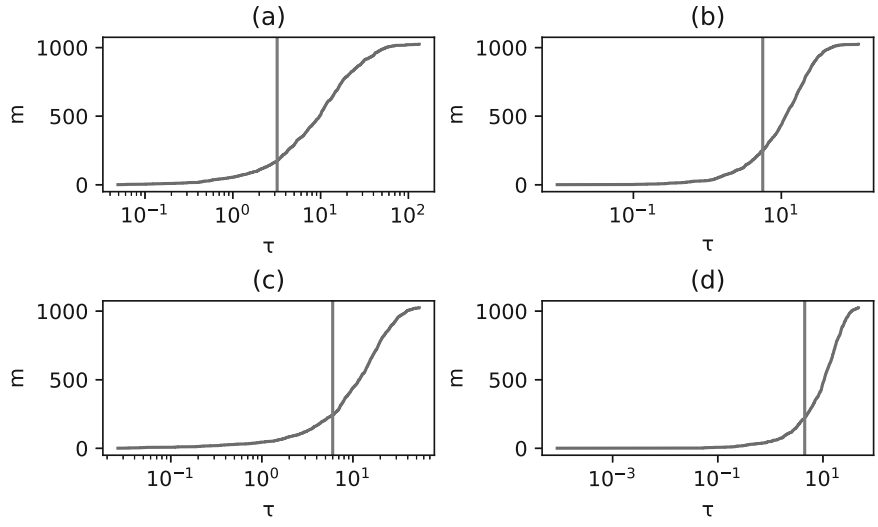


Рис. 5. Зависимости числа компонент m, для которых условие (5) выполнено, от параметра τ. Выделены значения τ, рассматриваемые как границы областей низких и высоких значений этого параметра и использованные на предыдущих рисунках. Изображения (a–d) соответствуют объектам, показанным на рис. 2a–d, соответственно

ний, и рост числа компонент, для которых условие выполнено, при увеличении τ замедляется. Рекомендуемое значение τ, таким образом, оказывается лежащим на границе этих двух участков, см. рис. 5.

Заметим, что, в отличие от метода L-кривой как такового, в этом методе не требуется многократное решение задачи оптимизации, поскольку вся информация, необходимая для построения графика, содержится в отношениях

$$\frac{(T\hat{u})_i^2}{(T\Sigma_{R_*\xi}T^*)_{ii}}, \quad i = 1, \ldots, \dim \mathcal{X},$$

которые при необходимости могут быть получены *до* этапа оптимизации.

Разработанный метод делает полуавтоматическим необходимость выбора границы участков. Его дополнение критерием выбора (например, таким, при котором максимизируется кривизна графика зависимости, поскольку в логарифмическом масштабе соответствующие участки графика близки к линейным) делает метод автоматическим.

3.4. Изменения, обусловленные использованием нескольких датчиков в объектном канале

Использованием нескольких датчиков (далее их число обозначим m) в объектном канале приводит к следующим изменениям в алгоритме выше. Во-первых, теперь $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{X}$ — последовательность показаний

$$\xi_{1,1}, \xi_{1,2}, ..., \xi_{1,m}, \xi_{2,1}, ..., \xi_{2,m}, ..., \xi_{\dim \mathcal{X},1}, ..., \xi_{\dim \mathcal{X},m}$$

всех однопиксельных датчиков, где $\xi_{k,l}$ — показания l-го датчика при использовании k-го шаблона освещения, порядок обхода датчиков произволен, но фиксирован. Во-вторых, $\boldsymbol{a}_j^*$ — строки матрицы оператора A — не развернутые в строки шаблоны освещения, а развернутые в строки поэлементные произведения шаблонов освещения и полей зрения датчиков. В изображении, описывающем поле зрения датчика, значение 0 отвечает тому, что излучение от соответствующего пикселя объекта не попадает на датчик, значение 1 — тому, что попадает полностью. Здесь $j = (k, l)$ — мультииндекс из двух компонент, первая отвечает за номер шаблона освещения, вторая — за номер датчика при том же порядке обхода. Поскольку о виде оператора A в предыдущих подразделах не делалось никаких предположений, другие изменения предложенных алгоритмов не требуются.

Из этой замены видно, что использование m однопиксельных датчиков увеличивает размерность $\boldsymbol{\xi}$ — «эффективное число использованных шаблонов освещения» — в m раз. Это связано с тем, что использование нескольких датчиков можно рассматривать как комбинацию структурированного освещения (задаваемого шаблоном освещения) и структурированного детектирования (задаваемого полем зрения датчика как маской). Заметим, что чем меньше перекрытие полей зрения датчиков, тем более ортогональны друг другу $\boldsymbol{a}_{(k,l)}^*$ и $\boldsymbol{a}_{(k,l')}^*$ (при одном и том же k и разных l) и, следовательно, тем больше новой информации извлекается при очередном измерении. Поэтому при малой степени перекрытия полей зрения датчиков m может служить оценкой уменьшения числа шаблонов освещения, необходимых для построения фантомного изображения объекта заданного качества, по сравнению с регистрацией излучения единственным однопиксельным датчиком, если используются «однородные» шаблоны освещения, в которых в среднем освещение не сконцентрировано в какой-либо пространственной области. При увеличении степени перекрытия выигрыш будет ослабевать до его отсутствия при полном перекрытии всех полей зрения. Требование отсутствия концентрации освещения в какой-либо области вызвано тем, что если, например, i-й шаблон освещения соответствует максимальной яркости i-го пикселя и нулевой яркости остальных, т. е. выполняется последовательное сканирование объекта, то, очевидно, для каждого шаблона освещения при отсутствии шума срабатывать будет не более чем один датчик, в поле зрения которого входит i-й пиксель. Это требование выполнено для шаблонов освещения, в которых яркости пикселя выбираются случайно независимо друг от друга, для шаблонов Адамара и многих других.

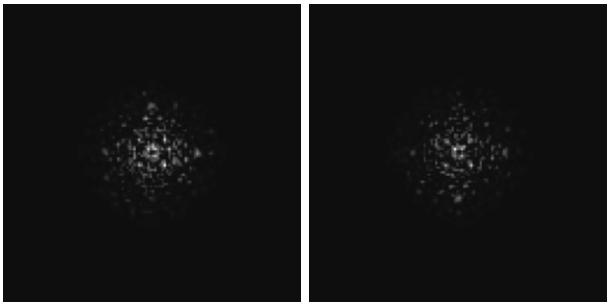


Рис. 6. Пример двух шаблонов освещения $\boldsymbol{a}_1$ и $\boldsymbol{a}_2$

Для более подробного анализа рассмотрим частный случай замены одного однопиксельного датчика в объектном канале на два, и ограничимся линейной оценкой (3) при одинаковой дисперсии σ^2 сигнала каждого датчика как наихудшим случаем.

Рассмотрим первые измерения. Как в схеме с одним датчиком два последовательных измерения с шаблонами освещения $\boldsymbol{a}_1$ и $\boldsymbol{a}_2$, см. рис. 6, так и в схеме с двумя датчиками два одновременных измерения с шаблоном освещения $\boldsymbol{a}_1$ и неколлинеарными произведениями этого шаблона и полей зрения датчиков $\boldsymbol{a}_{(1,1)}$ и $\boldsymbol{a}_{(1,2)}$ позволяют оценить проекцию изображения объекта на линейную оболочку векторов $\boldsymbol{a}_1$ и $\boldsymbol{a}_2$ и $\boldsymbol{a}_{(1,1)}$ и $\boldsymbol{a}_{(1,2)}$, соответственно. В первом случае ортонормальный базис линейного подпространства, может быть выбраны как $\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{a}_1/\|\boldsymbol{a}_1\|$ и $\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{a}_2 - (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{b}_1)\boldsymbol{b}_1/(\|\boldsymbol{a}_2\|^2 - |(\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{b}_1)|^2)$. Подставляя сужение оператора A на это подпространство, задаваемое матрицей

$$\begin{pmatrix} \|\boldsymbol{a}_1\| & 0 \\ (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{b}_1) & \|\boldsymbol{a}_2\|^2 - |(\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{b}_1)|^2 \end{pmatrix}$$

в (4), получаем, что погрешность оценивания равна

$$\sigma^2 \frac{\|\boldsymbol{a}_1\|^2 + \|\boldsymbol{a}_2\|^2}{\|\boldsymbol{a}_1\|^2 \|\boldsymbol{a}_2\|^2 - |(\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_1)|^2}. \tag{10}$$

Аналогично, в схеме с двумя датчиками после двух одновременных измерений погрешность равна

$$\sigma^2 \frac{\|\boldsymbol{a}_{(1,1)}\|^2 + \|\boldsymbol{a}_{(1,2)}\|^2}{\|\boldsymbol{a}_{(1,1)}\|^2 \|\boldsymbol{a}_{(1,2)}\|^2 - |(\boldsymbol{a}_{(1,2)}, \boldsymbol{a}_{(1,1)})|^2}. \tag{11}$$

Сравнение (10) и (11) показывает, что в рассматриваемой ситуации, во-первых, использование двух датчиков и одного шаблона освещения всегда лучше использования одного датчика и одного шаблона освещения. В самом деле, в последнем случае возможно оценить с априори конечной погрешностью лишь одну (соответствующую базисному вектору $\boldsymbol{b}_1$), а не две линейные компоненты. Во-вторых, преимущество использования двух датчиков и одного шаблона освещения вместо одного датчика и двух шаблонов освещения определяется отношением выражений (11) и (10)

$$\frac{\left(\|\boldsymbol{a}_{(1,1)}\|^2 + \|\boldsymbol{a}_{(1,2)}\|^2\right)\left(\|\boldsymbol{a}_1\|^2 \|\boldsymbol{a}_2\|^2 - |(\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_1)|^2\right)}{\left(\|\boldsymbol{a}_{(1,1)}\|^2 \|\boldsymbol{a}_{(1,2)}\|^2 - |(\boldsymbol{a}_{(1,2)}, \boldsymbol{a}_{(1,1)})|^2\right)\left(\|\boldsymbol{a}_1\|^2 + \|\boldsymbol{a}_2\|^2\right)}$$

и существенно зависит от «коэффициента корреляции» шаблонов освещения и произведений шаблонов и полей зрения датчиков. Если у произведений шаблона и полей зрения датчиков он не меньше, чем у последовательных шаблонов освещения, то использование двух датчиков позволит уменьшить число используемых шаблонов не меньше, чем вдвое.

Отметим, что увеличение числа датчиков в объектном канале до числа пикселей объекта не приводит к обычному изображению, а сохраняет присущие фантомным изображениям особенности. В частности, сохраняется подавление (по сравнению с обычными изображениями) шума, связанного с фоновой засветкой, и шума, связанного с темновыми токами фотодетекторов. Утверждение об уменьшении числа шаблонов освещения, требуемого для восстановления изображения объекта, в этом случае выполняется тривиально: достаточно одного измерения всеми датчиками в объектном канале, если (единственный) шаблон освещения таков, что все точки объекта освещены с ненулевой яркостью. В то же время при неединичной квантовой эффективности детекторов сохраняется, если восстанавливающий канал реален, а не виртуален, присущая фантомным изображениям зависимость погрешности восстановления от произведения квантовых эффективностей датчиков в объектном канале и в восстанавливающем канале, аналогично [14], поскольку без этого невозможно получить информацию об использованном шаблоне освещения. Эти утверждения согласуются со свойствами схемы формирования изображений, в которой, в отличие от фантомной оптики, в объектном канале расположен многопиксельный датчик, а в восстанавливающем — однопиксельный [29, 30] и также достигается высокое подавление шума.

3.5. Восстановление фантомных изображений, сформированных в квантовом свете

Измерения при формировании квантовых фантомных изображений также удовлетворяют схеме измерения (2), что позволяет применить для формирования метод редукции измерения, аналогично [13, 20, 31]. Можно указать следующие отличия, обусловленные различием квантовых и классических фантомных изображений.

Во-первых, при формировании квантовых фантомных изображений обычно отсутствует управляемый элемент (на рис. 1 им является пространственный модулятор света), а отличие шаблонов освещения обеспечивается процессом (например, СПР) рождения коррелированных фотонов. Это не позволяет поставить задачу об оптимизации шаблонов освещения, то есть их подборе, минимизирующем погрешность (4), ср. с задачами оптимального синтеза модели измерения и оптимизации измерений в [32, гл. 3].

Во-вторых, восстанавливающий канал при квантовом освещении реален, а не виртуален, и измерения в восстанавливающем канале, как и в объектном, сопровождаются погрешностями. Поэтому удобно рассматривать как результат измерения сигналы на выходе коррелятора, схемы совпадений или аналогичного узла, как это сделано в [13]. Тогда элементы A_{ji} матрицы оператора A суть вклады в корреляционную функцию флуктуаций интенсивности, измеренной по корреляциям показаний детектора в объектном канале и j-го детектора (или j-й пары детекторов, если в объектном канале несколько детекторов) в восстанавливающем канале, от оптической характеристики i-го пикселя. Если все детекторы работают в режиме фотоотсчетов, то преимущество от использования нескольких детекторов в объектном канале, как это отмечено во введении, снижается. Тем не менее, преимущество при использовании нескольких детекторов вызывается и другими факторами, в частности, неединичной квантовой эффективностью детекторов, влиянием дифракции и т. д., ср. с [14].

Заметим здесь, что выбор именно схемы совпадений или коррелятора для комбинирования информации с детекторов в объектном канале и в восстанавливающем канале в общем случае не оптимален. Оптимальный выбор зависит как от статистических свойств освещения, так и от свойств детекторов и в общем случае вычислительно сложен и может не существовать в смысле *равномерной* оптимальности. Пусть погрешности связаны только с неединичными квантовыми эффективностями детекторов η_{obj} и η_{ref} и их дробовым шумом, весь объект состоит из одного пикселя, характеризуемого коэффициентом прозрачности u, а вероятность того, что число фотонов освещения равно n, равна p_n. Тогда совместное распределение вероятностей показаний ξ и ζ детекторов —

$$\mathrm{P}(\xi=k,\zeta=m)= \\ =\sum_{n=\max(k,m)}^{\infty} C_n^k(u\eta_{\mathrm{obj}})^k(1-u\eta_{\mathrm{obj}})^{n-k}\times \\ \times p_n C_n^m \eta_{\mathrm{ref}}^m(1-\eta_{\mathrm{ref}})^{n-m}, \quad (12)$$

где k и m — числа отсчетов детекторов в объектном канале и в восстанавливающем канале, соответственно. Отсюда оценка максимального правдоподобия определяется решением уравнения

$$\sum_{n=\max(k,m)}^{\infty} C_n^k C_n^m p_n(1-u\eta_{\mathrm{obj}})^n\times \\ \times(nu\eta_{\mathrm{obj}}-k)(1-\eta_{\mathrm{ref}})^n=0$$

относительно u при наблюденных k и m. Если теперь мы рассмотрим объект, состоящий из большего числа пикселей, и потребуем независимую обработку показаний каждого детектора в восстанавливающем канале, то в распределении (12) случайная величина ζ будет иметь распределение, зависящее от прозрачностей всех остальных пикселей. В такой ситуации равномерно (по всем возможным распределениям прозрачности объекта) оптимального способа независимой обработки в общем (по распределению p_n) случае не существует. Постселекция устраняет эту проблему при достаточном временном разрешении датчиков, чтобы исключить неразличимые во времени регистрации фотонов в объектном канале: если это так, то по одновременному срабатыванию одного датчика в восстанавливающем канале и датчика в объектном канале можно исключить в ζ влияние остальных пикселей.

Третье, наиболее существенное отличие, состоит в том, что статистика фотоотсчетов излучения, прошедшего через исследуемый объект, зачастую существенно зависит от исследуемого объекта. Следовательно, ковариационный оператор погрешности $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}$ оказывается зависящим от $\boldsymbol{u}$. Использование знания этой зависимости приводит к требованию «самосогласованности», т. е. соответствующий полученной оценке $\hat{\boldsymbol{u}}$ ковариационный оператор $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}$ должен, будучи подставленным в алгоритмы редукции выше, приводить именно к этому значению $\hat{\boldsymbol{u}}$. Иными словами, каждый из алгоритмов, рассмотренных в предыдущих разделах, вначале выполняется для ковариационного оператора, например, соответствующего однородному объекту. Затем вычисляется соответствующий полученной оценке $\hat{\boldsymbol{u}}$ ковариационный оператор $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}$, после чего алгоритм повторяется при новом значении ковариационного оператора, и так далее. Это изменение увеличивает требуемое число итераций из-за уменьшения скорости сходимости (по меньшей мере, вдвое, за исключением рекуррентной версии алгоритма, в которой уточняемая на каждом шаге оценка может сразу же использоваться и для уточнения ковариационного оператора). Вместе с тем оно делает более привлекательным вариант алгоритма с промежуточным восстановлением изображения низкого разрешения, так как изображение низкого разрешения обычно подходит в качестве замены истинного при оценивании ковариационного оператора. Можно также использовать вариант алгоритма, в котором вместо ковариационного оператора используется лишь ограничение на его след, но соответствующая потеря информации способна значительно увеличить по-

грешность оценки [33]. Отметим также, что если $(\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1/2}A)^{-} = A^{-}\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{1/2}$ (например, если погрешности измерений некоррелированы) для значений $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}$, соответствующих всем возможным $\boldsymbol{u}$, то результат линейной редукции не зависит от ковариационного оператора и, следовательно, влияние ковариационного оператора ограничивается шагами 2–4 алгоритма на с. 912.

Указанные отличия могут как быть, так и не быть актуальными для конкретной схемы формирования фантомных изображений. Если, например, в схеме, показанной на рис. 1, освещение ослабляется так, чтобы объект был освещен в среднем лишь малым числом фотонов, то восстанавливающий канал, тем не менее, виртуален, и поэтому измерения в восстанавливающем канале не сопровождаются погрешностями. Управляющий элемент при этом остается тем же. С другой стороны, если ослабление достаточно велико, шаблоны освещения будут отличаться и за счет случайности поглощения фотонов без управляющего элемента. В этом случае регистрация многопиксельным датчиком в (реальном) восставливающем канале необходима, но если излучение в восстанавливающем канале специально не ослаблять, сопровождается много меньшей погрешностью.

Таким образом, ответ на вопрос о целесообразности использования квантового источника освещения по сравнению с классическим не может быть получен в общем виде, поскольку определяется тремя факторами: погрешностью измерений в восстанавливающем канале (если он реален, а не виртуален), возможностью эффективной постселекции и статистикой фотоотсчетов. Первый фактор играет отрицательную роль, второй — положительную, третий — как правило, положительную (поскольку отсутствие информации о статистике фотоотсчетов в математическом плане близко к ситуации кратного единичному ковариационного оператора [12, §1.7]). В связи с этим можно отметить малофотонные схемы с ослаблением источника до малого среднего числа фотонов как позволяющие сочетать преимущества квантовых и классических фантомных изображений.

4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

При моделировании как здесь, так и при получении иллюстраций, приведенных в предыдущем разделе, использованы следующие значения параметров: диаметр оптического волокна 50 мкм, длина

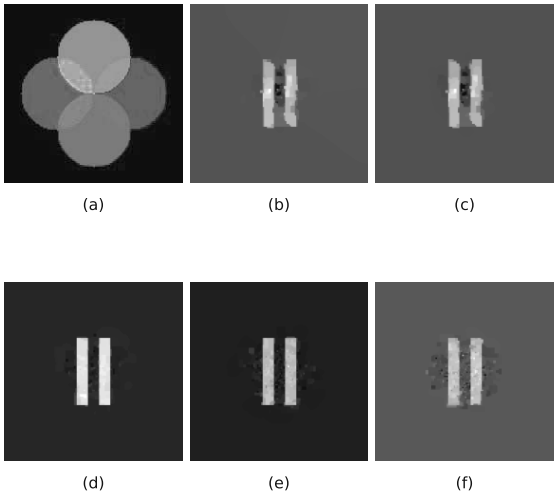


Рис. 7. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования (рис. 2a) при использовании одного однопиксельного датчика, поле зрения которого охватывает весь объект, или четырех однопиксельных датчиков, поля зрения которых показаны на рис. (a): (b) восстановление всего изображения по показаниям одного датчика при 2^5 шаблонах освещения; (c, d, e) восстановление изображения в пределах области, излучение из которой проходит через оптическое волокно (рис. 4a), по показаниям одного датчика при 2^5, 2^6 и 2^7 шаблонах освещения, соответственно; (f) восстановление изображения в пределах области, излучение из которой проходит через оптическое волокно (рис. 4a), по показаниям четырех датчиков при 2^5 шаблонах освещения

волокна 50 см, отсутствие изгиба, аппроксимация пространственного распределения показателя преломления параболическим профилем с $n_1 = 1.4613$ и $a = 31.25$ мкм, числовая апертура 0.275, длина волны 632.8 нм. Для освещения использованы шаблоны с псевдослучайной фазовой модуляцией, то есть на вход оптического волокна подается псевдослучайное изображение, каждый пиксель которого имеет единичную яркость, но вносится псевдослучайная фазовая задержка от 0 до 2π. Пример источника освещения, обладающего указанными свойствами, описан в статье [34]. Размер объекта, разбиваемого на 128×128 пикселей, равен 109.375×109.375 мкм. Положения четырех датчиков выбраны так, чтобы, с одной стороны, их поля зрения полностью покрывали область, в которую поступает освещение, а с другой стороны, их поля зрения минимально перекрывались. Результаты моделирования показаны на рис. 7–10.

По этим рисункам видно, что результат восстановления фантомного изображения по показаниям четырех датчиков не хуже, чем результат восста-

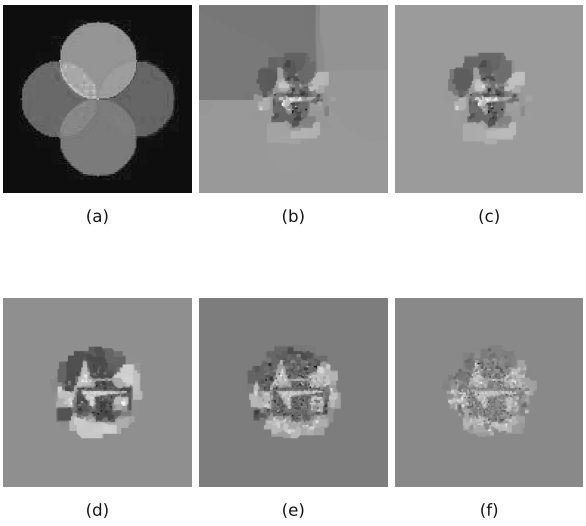


Рис. 8. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования на рис. 2b при использовании одного или четырех однопиксельных датчиков. Смысл частей рисунка аналогичен рис. 7, но на подрисунке (b) использованы 2^6 шаблона освещения, на подрисунках (c, d, e) — 2^6, 2^7 и 2^8 шаблона освещения, соответственно, на подрисунке (f) — 2^6 шаблона освещения

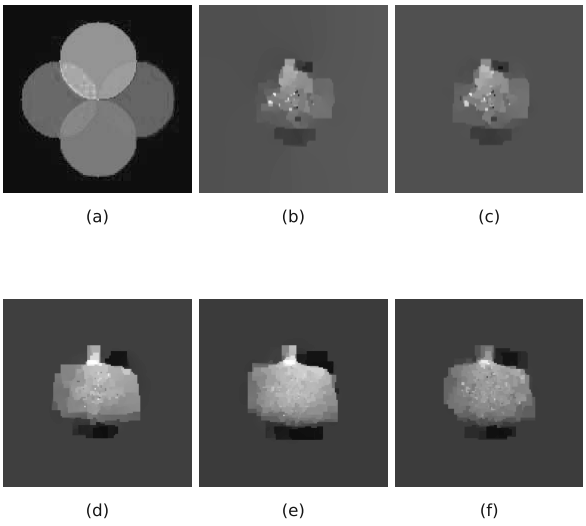


Рис. 9. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования на рис. 2c при использовании одного или четырех однопиксельных датчиков. Смысл частей рисунка аналогичен рис. 7

новления по показаниям одного датчика при вдвое большем числе измерений, и сравним с результатом восстановления по показаниям одного датчика при вчетверо большем числе измерений. Это в особенности хорошо видно по мелким деталям на рис. 8 и 10. На рис. 8c не видна верхняя часть «!», различимая на рис. 8d–f, причем на рис. 8f наиболее хорошо видна равномерность ее окраски. На рис. 10 светлая область над чайником и его носик отчетливо различимы лишь на рис. e и f. На рис. 7 выигрыш от использования четырех датчиков меньше в силу большей простоты исследуемого объекта.

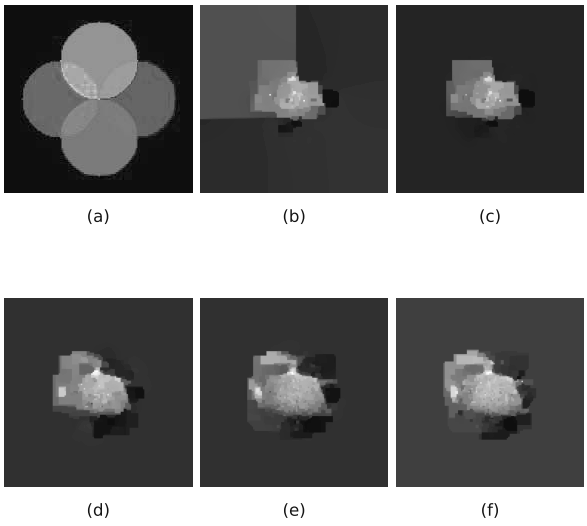


Рис. 10. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования на рис. 2d при использовании одного или четырех однопиксельных датчиков. Смысл частей рисунка аналогичен рис. 7

Можно указать два основных отличия от результата восстановления по показаниям одного датчика при вчетверо большем числе измерений: меньшую контрастности изображения, построенного по показаниям четырех датчиков, и больший уровень шума. Основная причина этого — в большей суммарной погрешностью измерений для четырех датчиков: при моделировании считалось, что дисперсии погрешностей показаний датчиков одинаковы как при четырех датчиках, так и при одном, поэтому дисперсия суммарной погрешности вчетверо больше. Это соответствует поведению составляющей погрешности, связанной с тепловым шумом в датчиках и проводах.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренный способ формирования изображений, интересен, как нам представляется, не только из-за необычного варианта его реализации, но и в силу его незаменимости в некоторых приложениях. Щадящий режим облучения объектов, переход в различные области спектра, повышенная помехо-

защищенность, предельная конфиденциальность передачи информации — вот далеко не полный перечень преимуществ фантомного метода.

По сравнению с более традиционными способами формирования фантомных изображений предложенный вариант позволяет использовать меньшее число шаблонов освещения при той же погрешности восстановления изображения, что позволяет уменьшить время, нужное для выполнения измерений, и общую энергию излучения, взаимодействующего с объектом за время измерений, ценой увеличения размера волоконного жгута. Представляется, что это увеличение незначительно, так как большую часть жгута занимает многомодовое волокно, ответственное за передачу освещения.

Можно ожидать, что предложенные в настоящей работе алгоритмы редукции измерений для восстановления фантомных изображений, направленные на увеличение быстродействия, будут полезными и в случае исследования не двумерного объекта и восстановления его изображения, а при трехмерном объекте и восстановлении пространственного распределения его оптических характеристик, поскольку в этой ситуации существенно возрастает количество измерений и, как следствие, объем вычислений.

Хотелось также бы обратить внимание на несомненные перспективы использования фантомных изображений в оптоволоконном варианте. Здесь их преимущества могут реализоваться в полном объеме, гарантируя как щадящий режим наблюдения исследуемых объектов, так и потенциальную возможность проникновения в труднодоступные для прямого наблюдения полости. Волоконные жгуты могут быть весьма небольшого диаметра, порядка 1 мм, что решает проблему.

Ультратонкие эндоскопы необходимы не только для выполнения диагностических процедур, но и при мониторинге в реальном времени во время оперативного вмешательства. Перспективным представляется также применение таких систем при эндоваскулярных процедурах, как диагностических, так и хирургических.

Благодарности. Авторы благодарны Н. А. Тимофееву за помощь в работе.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00155).

ПРИЛОЖЕНИЕ. ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА АСФЕРИЧЕСКОЙ ЛИНЗЫ В КАЧЕСТВЕ ПРОЕКЦИОННОЙ СИСТЕМЫ

В качестве проекционной оптической системы, переносящей изображение выходного торца волоконного жгута на исследуемый объект, в простейшем случае можно использовать симметричную двояковыпуклую асферическую линзу, работающую с минус единичным поперечным увеличением. Полная симметрия хода лучей обеспечивает отсутсвие нечетных аберраций: комы и дисторсии в монохроматическом случае, см., например, [35, 36], а асферичность позволяет устранить сферическую аберрацию. Казалось бы, что может быть нового в расчете асферической линзы? Почему бы не воспользоваться готовым решением? Но проекционные широкоугольные системы с минус единичным увеличением вообще используются крайне редко. Обычно объективы и нужны для того, чтобы существенно увеличить изображение объекта, как в кинопроекторах или объективах микроскопов. И до использования в них асферических поверхностей как-то дело не доходило, по крайней мере, мы ничего не нашли похожего в литературе, за исключением, пожалуй, вращающихся зеркал высокоскоростных камер, см., например, [37].

Итак, рассмотрим некоторые особенности расчета такой линзы.

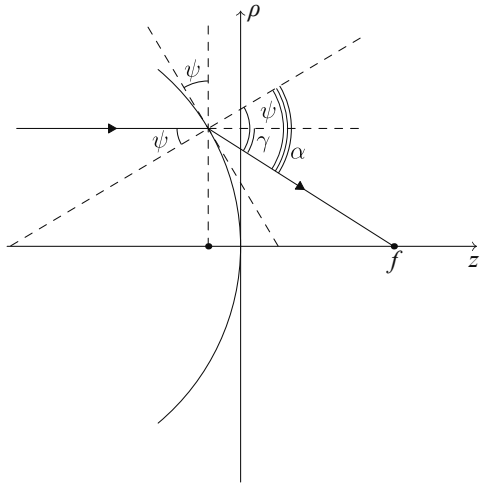


Рис. 11. Требуемый ход лучей в половине асферической линзы в приближении геометрической оптики

Найдем форму поверхности, обеспечивающей сходимость лучей осевой точки предмета в одну точку изображения при отсутствии дифракции. Поскольку сферическая аберрация равномерно

распределена по всему полю изображения, дополнительного критерия ее устранения не требуется.

Симметричность линзы позволяет рассматривать лишь одну ее поверхность — вторую по ходу лучей, фокусирующую коллимированный осевой пучок. Первая поверхность будет симметрична ей. Рассмотрим плоскость $\varphi = \text{const}$ в цилиндрических координатах, см. рис. 11. Луч $\rho = \text{const}$ в верхней среде с показателем преломления $n > 1$ испытывает преломление на границе сред в точке $(\rho, s(\rho))$, где функция $s(\cdot)$ характеризует поверхность линзы. После преломления, в нижней среде с единичным показателем преломления, луч проходит через точку $(0, f)$. Согласно закону Снеллиуса, $\sin\alpha = n\sin\psi$. Учитывая, что $\alpha = \gamma + \psi$, получаем $\sin\psi\cos\gamma + \cos\psi\sin\gamma = n\sin\psi$. Деля на $\cos\psi$, получаем $\operatorname{tg}\psi\cos\gamma + \sin\gamma = n\operatorname{tg}\psi$. Выразим функции

углов через заданные параметры, ρ и $s(\rho)$:

$$\operatorname{tg}\psi = s'(\rho),$$
$$\cos\gamma = \frac{f - s(\rho)}{\sqrt{\left(f - s(\rho)\right)^2 + \rho^2}},$$
$$\sin\gamma = \frac{\rho}{\sqrt{\left(f - s(\rho)\right)^2 + \rho^2}}.$$

Для определенности положим $s(0) = 0$, тогда f — вершинное фокусное расстояние симметричной половины линзы (подчеркнем, что оно никак не связано с вектором $\boldsymbol{f}$ в предыдущем разделе). В итоге получается задача Коши:

$$\begin{cases} \rho = \left(n\sqrt{\left(f - s(\rho)\right)^2 + \rho^2} - f + s(\rho)\right) s'(\rho), \\ s(0) = 0. \end{cases} \tag{13}$$

Итак, в рамках геометрической оптики сферическая аберрация может быть полностью устранена. Однако при освещении плоского объекта исследования кома не оказывается нулевой, как это было бы в полностью симметричной оптической системе. Причина в том, что неустранимая в одиночных линзах кривизна поля искажает симметрию лучей: если объект плоский, то изображение оказывается искривленным. Для восстановления симметрии надо одинаково искривить и пространство предметов, и пространство изображений. В этом случае поверхность освещающего волокна или жгута должна быть вогнутой. Соответственно, и поверхность изображения будет симметричной с такой же кривизной.

Единственной неисправленной монохроматической аберрацией остается астигматизм. Его принципиально невозможно устранить в одиночных двояковыпуклых линзах. Что же делать? Если для освещения используется жгут волокон, то можно размещать волокна жгута на некотором расстоянии друг от друга, причем тем бóльшим, чем удаленнее они от оптической оси, чтобы астигматические пятна рассеяния полевых пучков не перекрывались. В общем случае можно использовать более сложные объективы типа анастигматов, например, добавив с обеих сторон симметрично друг другу отрицательные линзы, расположенные на некотором расстоянии от асферической. Это позволит не только исключить астигматизм, но и скорректировать кривизну поля. Изображение при этом будет идеальным с точки зрения геометрической оптики, ограниченным лишь дифракцией на апертурной диафрагме, совпадающей с оправой асферической линзы.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Гатти, Э. Брамбилла, М. Баке и др., в *Квантовое изображение*, под ред. М. И. Колобова (ориг.), А. С. Чиркина (пер.), Физматлит, Москва (2009), с. 96 [A. Gatti, E. Brambilla, M. Bache et al., in *Quantum Imaging*, ed. by M. I. Kolobov, Springer (2007), p. 79].
2. T. B. Pittman, D. V. Strekalov, D. N. Klyshko et al., Phys. Rev. A **53**, 2804 (1996).
3. А. В. Белинский, Д. Н. Клышко, ЖЭТФ **105**, 487 (1994) [A. V. Belinskii, D. N. Klyshko, JETP **78**, 259 (1994)].
4. Д. Н. Клышко, Фотоны и нелинейная оптика, Наука, Москва (1980) [D. N. Klyshko, Photons Nonlinear Optics, Routledge, New York (1988)].
5. J. H. Shapiro, Phys. Rev. A **78**, 061802 (2008).
6. G. M. Gibson, S. D. Johnson, M. J. Padgett, Optics Express **28**, 28190 (2020).
7. D. L. Donoho, IEEE Trans. Inf. Theory **52**, 1289 (2006).
8. E. J. Candes, T. Tao, IEEE Trans. Inf. Theory **52**, 5406 (2006).
9. E. J. Candes, M. B. Wakin, IEEE Signal Processing Magazine **25**, 21 (2008).
10. M. F. Duarte, M. A. Davenport, D. Takhar et al., IEEE Signal Processing Magazine **25**, 83 (2008).
11. S. Han, H. Yu, X. Shen et al., Applied Sciences **8**, 1379 (2018).

12. Ю. П. Пытьев, *Методы математического моделирования измерительно–вычислительных систем*, Физматлит, Москва (2012), 3 изд.

13. D. A. Balakin, A. V. Belinsky, A. S. Chirkin, Quantum Inf. Process. **18**, 80 (2019).

14. Д. А. Балакин, А. В. Белинский, Квантовая электроника **49**, 967 (2019) [D. A. Balakin, A. V. Belinsky, Quantum Electronics **49**, 967 (2019)].

15. Д. А. Балакин, Д. П. Агапов, П. П. Гостев и др., ЖЭТФ **162**, 811 (2022) [D. A. Balakin, D. P. Agapov, P. P. Gostev et al., JETP **135**, 779 (2022)].

16. M. Lyu, W. Wang, H. Wang et al., Sci. Rep. **7**, 17865 (2017).

17. Y. He, G. Wang, G. Dong et al., Sci. Rep. **8**, 6469 (2018).

18. T. Shimobaba, Y. Endo, T. Nishitsuji et al., Opt. Commun. **413**, 147 (2018).

19. Д. А. Балакин, А. В. Белинский, Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 4, 12 (2020) [D. A. Balakin and A. V. Belinsky, Moscow University Physics Bulletin **75**(4), 295 (2020)].

20. D. A. Balakin and A. V. Belinsky, Quantum Inf. Process. **19**, 316 (2020).

21. M. P. Edgar, B. Sun, R. Bowman et al., in SPIE Proc. Vol. 8899, Emerging Technologies in Security and Defence; and Quantum Security II; and Unmanned Sensor Systems X, Dresden (2013), SPIE (2013), 889902.

22. Y. Kang, Y.-P. Yao, Z.-H. Kang et al., JOSA A **32**, 1063 (2015).

23. E. K. P. Chong and S. H. Zak, An Introduction to Optimization, 4th ed., John Wiley and Sons, Hoboken, NJ (2013).

24. Z. Yang, W.-X. Zhang, Y.-P. Liu et al., Opt. Express **28**, 3607 (2020).

25. A. Beck and M. Teboulle, SIAM Journal on Imaging Sciences **2**, 183 (2009).

26. B. Stellato, G. Banjac, P. Goulart et al., Mathematical Programming Computation **12**(4), 637 (2020).

27. J. Chung, M. I. Espanol, Inverse Problems **33**(7), 074004 (2017).

28. P. C. Hansen and D. P. O'Leary, SIAM Journal on Scientific Computing **14**, 1487 (1993).

29. P. A. Morris, R. S. Aspden, J. E. C. Bell et al., Nat. Commun. **6**, 5913 (2015).

30. J. Kim, T. Jeong, S.-Y. Lee et al., Appl. Phys. Lett. **119**(24), 244002 (2021).

31. Д. А. Балакин, А. В. Белинский, ЖЭТФ **149**, 915 (2016) [D. A. Balakin, A. V. Belinsky, JETP **122**, 787 (2016)].

32. Ю. П. Пытьев, *Математические методы интерпретации эксперимента*, Высшая школа, Москва (1989).

33. Д. А. Балакин, Ю. П. Пытьев, Ученые записки физического факультета Московского Университета 5, 1850301 (2018).

34. Д. П. Агапов, И. А. Беловолов, П. П. Гостев и др., ЖЭТФ **162**(2), 215 (2022) [D. P. Agapov, I. A. Belovolov, P. P. Gostev et al., JETP **135**, 188 (2022)].

35. Г. Г. Слюсарев, *Методы расчета оптических систем*, Машиностроение, Ленинград (1969) [G. G. Slyusarev, *Aberration and optical design theory*, A. Hilger, Bristol (1984)].

36. А. В. Белинский, Журнал научной и прикладной фотографии и кинематографии **3**, 198 (1983).

37. A. V. Belinsky and A. V. Plokhov, Applied Optics **34**, 174 (1995).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 927–941 © 2023

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ ПРИ КАСКАДНОМ РАСПАДЕ ВНУТРЕННИХ ВАКАНСИЙ В АТОМЕ ЖЕЛЕЗА, ПОМЕЩЕННОМ В ВОДУ

А. П. Чайников [*]***, А. Г. Кочур, А. И. Дуденко***

Ростовский государственный университет путей сообщения
344038, Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 26 июля 2023 г.,
после переработки 12 августа 2023 г.
Принята к публикации 15 августа 2023 г.

Проведено моделирование методом Монте-Карло процессов вторичной ионизации воды, индуцированных каскадными распадами внутренних вакансий в атоме железа, помещенном в воду. Получены спектры электронов и фотонов, испускаемых в ходе распада вакансий в K- и L-оболочках атома железа. Рассчитаны зависимости числа актов вторичной ионизации и поглощенной в результате них энергии от радиуса сферы, внутри которой они происходят. Распад одиночной $1s$-вакансии в атоме железа порождает в среднем 232 акта вторичной ионизации электронным ударом, в которых поглощается энергия 3274 эВ, и 18 актов вторичной фотоионизации, в которых поглощается 256 эВ. Рассчитаны зависимости поглощенной дозы в воде от расстояния от атома железа.

DOI: 10.31857/S0044451023120076
EDN: MWZHUI

1. ВВЕДЕНИЕ

В фотонной лучевой терапии злокачественных опухолей такие металлы, как железо, серебро, золото, платина и другие в составе соединений и наночастиц используются в качестве радиосенсибилизаторов, т. е. агентов, способствующих усиленному поглощению энергии облучающего пучка внутри опухоли. При используемых энергиях фотонов облучающих пучков большую вероятность имеют процессы фотоионизации внутренних оболочек атомов-радиосенсибилизаторов, приводящие к образованию ионов металлов с вакансиями в глубоких атомных электронных оболочках. Такие ионные состояния нестабильны и подвержены распаду.

Распад вакансии во внутренней электронной оболочке многоэлектронного атома представляет собой, как правило, каскад последовательных радиационных и безрадиационных переходов, продолжающийся до тех пор, пока после очередного перехода не образуется ион в устойчивом состоянии. При распаде внутренних вакансий в тяжелых атомах образуется обычно достаточно большое число оже-электронов с энергией от 10 эВ до 10 кэВ. Средняя неупругая длина свободного пробега таких электронов в воде находится в диапазоне от 1 до 100 нм, благодаря чему оже-электроны обладают высокой линейной передачей энергии и способны произвести множество вторичных актов ударной ионизации молекул воды в непосредственной близости от тяжелого атома с распадающейся вакансией. Это свойство оже-электронов, испускаемых в ходе каскадных распадов внутренних вакансий в атомах с высоким атомным номером, лежит в основе современного направления лучевой терапии онкологических заболеваний — оже-терапии (см., например, [1,2] и ссылки там). В качестве источников оже-электронов, вводимых в опухолевую ткань, могут использоваться радионуклиды, ядра которых испытывают электронный захват или внутреннюю конверсию, в результате которых во внутренней электронной оболочке радионуклида образуется вакансия. В альтернативном варианте оже-терапии, который называется фотонно-активационной терапией, используются радиосенсибилизаторы, представляющие собой соединения или наночастицы на основе тяжелых атомов, которые облучаются пучком рентгеновских или

[*] E-mail: chaynikov.a.p@gmail.com

γ-квантов, что приводит к созданию внутренних вакансий в электронных оболочках атомов металлов за счет фотоионизации.

Теоретическое описание каскадных распадов глубоких вакансий представляет собой сложную задачу, так как деревья распадов могут быть очень сложными и иметь до миллионов ветвей [3, 4]. К решению этой проблемы имеется два альтернативных подхода. Первый из них — метод статистических испытаний Монте-Карло, в котором многократно моделируется распад исходной вакансии и на каждом шаге каскада на основе относительных вероятностей возможных каналов распада очередного ионного состояния случайным образом выбирается один из возможных переходов. Первые расчеты методом Монте-Карло были проведены в работах Карлсона и Краузе с сотрудниками [5–7]. Позднее метод Монте-Карло использовали Мукояма и др. [8], Мирахмедов и Парилис [9], Эль-Шеми с соавторами [10]. Второй подход заключается в построении и анализе всего дерева каскадного распада. Впервые такой подход был реализован в работе Якобса и др. [11], затем независимо развит в работах Кочура с соавторами [12, 13], Омара и Хана [14–16], Йонаускаса и др. [17, 18].

В работе [19] с помощью метода построения и анализа дерева распада [12, 13] были рассчитаны спектры фотонов и электронов, испускаемых в результате каскадных распадов вакансий во внутренних оболочках атома железа. Было установлено, что большая часть энергии, которую атом железа получает в результате первичной ионизации одной из его внутренних подоболочек (эта энергия равна потенциалу ионизации соответствующей подоболочки), переизлучается в ходе каскадного распада вакансии. Так, например, при распаде одиночной $1s$-вакансии атом железа переизлучает в среднем примерно 63% энергии вместе с каскадными электронами, 34% вместе с фотонами, и только 3% энергии остается поглощенной самим атомом.

В работах [20, 21] с помощью метода Монте-Карло проведено моделирование воздействия фотонов на конденсированный неон и воду и исследован эффект увеличения поглощенной дозы при добавлении в облучаемое вещество небольшой примеси атомов железа. Следует отметить, что в работах [20, 21] поглощение энергии вокруг атомов железа отдельно не анализировалось; в них приведены данные, усредненные по состояниям начальной ионизации всех атомов образцов. В работе [22] этим же методом проведено моделирование облучения железной наночастицы фотонами УФ- и рентгеновского диапазонов. Рассчитаны спектры испускаемых наночастицей фотонов и оже-электронов, зависимости поглощенной энергии и чисел испущенных фотонов и оже-электронов от размера наночастицы и энергии первичных фотонов.

Целью данной работы является детальное исследование процессов вторичной ионизации, происходящих в жидкой воде вокруг помещенного в нее атома железа после его ионизации и создания единичных вакансий во внутренних K- и L-оболочках. Основное внимание при этом уделено пространственному распределению поглощения энергии за счет вторичных актов ионизации кислорода и водорода окружающих атом железа молекул воды.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Моделирование вторичных процессов ионизации, происходящих в воде в результате каскадного распада внутренних вакансий в помещенном в воду ионе железа Fe^+, проведено методом Монте-Карло, который был развит в работах [23–27]. В этом разделе приведено описание алгоритма Монте-Карло, а также описаны приближения, которые используются для расчета необходимых для проведения моделирования атомных характеристик и сечений взаимодействия фотонов и электронов с атомами.

Зона взаимодействия, т. е. объем, внутри которого проводится моделирование вторичных процессов ионизации, представляет собой сферу радиуса $R_{zone} = 10^4$ нм, заполненную водой. В центре зоны взаимодействия находится ион железа Fe^+ с вакансией в одной из внутренних nl_j-подоболочек. Вода рассматривается в приближении невзаимодействующих атомов кислорода и водорода с объемными концентрациями $n_O = 3.34 \cdot 10^{22}$ см$^{-3}$ и $n_H = 2n_O$, которые соответствуют жидкой воде с плотностью 1 г/см^3.

2.1. Моделирование каскадного распада вакансии

Каждое испытание в методе Монте-Карло начинается с моделирования каскадного распада nl_j-вакансии в ионе железа Fe^+, находящемся в центре зоны взаимодействия. Пусть $C^{(0)}$ есть начальная электронная конфигурация иона железа с одной вакансией в nl_j-подоболочке. На первом шаге распада анализируются все разрешенные по энергии радиационные и безрадиационные каналы распада $C^{(0)} \to C_\alpha^{(1)}$, приводящие к образованию кон-

фигураций $\{C_\alpha^{(1)}\}$. Для каждого разрешенного канала распада рассчитываются относительные вероятности, называемые также отношениями ветвления (branching ratios):

$$\chi(C^{(0)} \to C_\alpha^{(1)}) = \frac{\Gamma(C^{(0)} \to C_\alpha^{(1)})}{\sum_{\alpha'} \Gamma(C^{(0)} \to C_{\alpha'}^{(1)})}, \qquad (1)$$

где $\Gamma(C^{(0)} \to C_\alpha^{(1)})$ — парциальная ширина перехода, а суммирование в знаменателе выполняется по всем энергетически разрешенным радиационным и безрадиационным переходам из состояния $C^{(0)}$.

Затем с помощью генератора псевдослучайных чисел на основе рассчитанных относительных вероятностей (1) выбирается один из возможных каналов распада $C^{(0)} \to C_\alpha^{(1)}$, а испущенный в результате выбранного перехода фотон (в случае выбора радиационного перехода) или электрон (в случае безрадиационного) добавляется в список вторичных фотонов и электронов для дальнейшего моделирования его распространения в зоне взаимодействия.

Если выбранная на первом шаге каскада конфигурация $C_\alpha^{(1)}$ содержит вакансии во внутренних подоболочках, то моделирование каскада продолжается. Для этого на втором шаге анализируются все возможные каналы распада конфигурации $C_\alpha^{(1)}$, аналогичным образом рассчитываются их относительные вероятности, на основе которых случайным образом выбирается один из переходов $C_\alpha^{(1)} \to C_\beta^{(2)}$, а испущенный при этом фотон или электрон пополняет список анализируемых вторичных частиц.

Моделирование каскадного распада вакансий продолжается до тех пор, пока на очередном его шаге не будет выбран переход, приводящий к образованию иона устойчивой электронной конфигурации, в которой все вакансии находятся в самых внешних подоболочках.

Расчеты зарядовых спектров ионов, образующихся в результате каскадной релаксации внутренних вакансий в ионе Fe^+ [19], проведенные методом прямого построения и анализа дерева распада, показали, что каскады для начальных вакансий в K- и L-оболочках могут содержать достаточно большое число безрадиационных переходов, что приводит к образованию многозарядных ионов Fe^{q+}. Так, в случае распада одиночной вакансии $Fe1s^{-1}$ средний заряд образующихся ионов равен 4.79, а некоторые из возможных путей распада содержат до 7 безрадиационных переходов. В связи с этим при моделировании каскадного распада необходимо рассчитывать парциальные ширины радиационных и безрадиационных переходов для большого числа разнообразных многодырочных электронных конфигураций, которые могут возникнуть в ходе распада. Строгий расчет парциальных ширин для конфигураций с несколькими незаполненными подоболочками представляет собой достаточно трудоемкую вычислительную задачу [28, 29], которая при моделировании каскадных распадов вакансий методом Монте-Карло дополнительно осложняется необходимостью ее многократного повторения.

Для расчета парциальных ширин радиационных и безрадиационных переходов в данной работе используется приближение, предложенное в работах [12, 13], которое позволяет достаточно просто и с приемлемой точностью рассчитывать парциальные ширины переходов в произвольных многодырочных электронных конфигурациях. В рамках этого приближения парциальные ширины радиационных переходов из произвольной ионной конфигурации C рассчитываются в дипольном приближении по формуле

$$\Gamma_{i-j}(C) = N_i^{vac} N_j \gamma_{ij}, \qquad (2)$$

где индексы «i» и «j» обозначают соответственно подоболочки с начальной и конечной вакансиями перехода, N_i^{vac} и N_j — число вакансий в подоболочке i и число электронов в подоболочке j в конфигурации C (до перехода), а

$$\gamma_{ij} = \frac{4}{3}\left(\frac{E_{ij}}{c}\right)^3 \frac{\max(l_i, l_j)}{2(2l_i+1)(2l_j+1)} R_{ij}^2 \qquad (3)$$

представляет собой парциальную ширину радиационного $i-j$-перехода в расчете на одну $n_i l_i$-вакансию и один $n_j l_j$-электрон. В (3) E_{ij} — энергия испускаемого фотона, c — скорость света в вакууме, $R_{ij} = \langle n_i l_i | r | n_j l_j \rangle$ — радиальная часть оператора дипольного перехода в форме длины (все величины в атомной системе единиц). Для учета эффекта релаксации атомные орбитали $n_i l_i$ и $n_j l_j$, входящие в R_{ij}, оптимизируются в соответствующих конфигурациях $n_j l_j^{-1}$ и $n_i l_i^{-1}$.

Парциальные ширины безрадиационных переходов рассчитываются по формуле

$$\Gamma_{i-jk}(C) = N_i^{vac} N_{jk} \gamma_{ijk}, \qquad (4)$$

в которой нижние индексы обозначают подоболочки с начальной i- и конечными j- и k-вакансиями перехода, N_i^{vac} — число вакансий в подоболочке i, N_{jk} — число пар электронов в подоболочках j и k в конфигурации C:

$$N_{jk} = \begin{cases} N_j N_k, & j \neq k, \\ N_j(N_j - 1)/2, & j = k. \end{cases} \qquad (5)$$

В (4) γ_{ijk} представляет собой парциальную ширину безрадиационного i–jk-перехода в расчете на одну начальную вакансию и одну пару электронов:

$$\gamma_{ijk} = \frac{\Gamma^0_{i-jk}}{N^{max}_{jk}}. \tag{6}$$

Парциальные ширины Γ^0_{i-jk} в (6) рассчитываются для конфигурации с одной вакансией в подоболочке i и полностью заполненными подоболочками j и k и выражаются через слэтеровские интегралы $R^q(n_i l_i, \varepsilon l; n_j l_j, n_k l_k)$. Атомные орбитали подоболочек $n_i l_i$, $n_j l_j$ и $n_k l_k$ оптимизируются в конфигурации $n_i l_i^{-1}$, а волновая функция электрона непрерывного спектра εl оптимизируется в потенциале конфигурации $n_j l_j^{-1} n_k l_k^{-1}$, построенном на орбиталях конфигурации $n_i l_i^{-1}$. Величина N^{max}_{jk} в (6) есть число пар электронов, рассчитанное по формуле (5) для полностью заполненных подоболочек j и k.

В [30] было показано, что величины R_{ij} и γ_{ijk} слабо и практически линейно зависят от числа дополнительных вакансий, а вклады в изменения этих величин от дополнительных вакансий в различных подоболочках практически аддитивны. В данной работе используется линейная аппроксимация зависимостей величин R_{ij} и γ_{ijk} от числа вакансий, что позволяет с приемлемой точностью рассчитывать их для произвольных ионных конфигураций, возникающих в ходе каскадного распада вакансий.

Рассчитанные с помощью описанного выше приближения парциальные ширины радиационных $\Gamma_{i-j}(n_i l_i^{-1})$ и безрадиационных $\Gamma_{i-jk}(n_i l_i^{-1})$ переходов для конфигураций иона Fe^+ с одной вакансией в $n_i l_i$-подоболочке приведены в работе [19].

Радиальные части атомных орбиталей и энергии разнообразных многодырочных конфигураций, возникающих в ходе каскадных распадов вакансий, были вычислены в квазирелятивистском приближении Паули–Фока [31]. Всего для моделирования каскадных распадов внутренних вакансий в ионе Fe^+ потребовалось оптимизировать 1647 различных электронных конфигураций.

Энергии радиационных и безрадиационных переходов, анализируемых при моделировании каскадных распадов вакансий, рассчитываются как разности средних паули-фоковских энергий начальной и конечной конфигураций перехода. Мультиплетная структура ионных конфигураций учитывается приближенно с помощью метода глобальных характеристик атомных спектров [32,33]. В случае безрадиационных переходов между частично перекрывающимися мультиплетами парциальные ширины (4) и энергии переходов корректируются с помощью формул, приведенных в [3,34].

После завершения моделирования каскадного распада внутренней вакансии в ионе Fe^+, находящегося в центре заполненной водой сферической зоны взаимодействия, начинается моделирование распространения фотонов и электронов, испущенных атомом железа в ходе каскадного распада вакансии.

Взаимодействие фотонов и электронов с атомами кислорода и водорода рассматривается в рамках приближения парных столкновений как совокупность элементарных актов взаимодействия отдельных фотонов и электронов с отдельными атомами [35]. Между двумя последовательными актами взаимодействия (излучения, поглощения или рассеяния) рассматриваемая частица (фотон или электрон) движется прямолинейно. Длина свободного пробега между двумя последовательными актами взаимодействия определяется с помощью генератора псевдослучайных числе по формуле

$$s = -\lambda \ln \xi, \tag{7}$$

где ξ — значение случайной величины с равномерным законом распределением на интервале $(0; 1]$, а λ — средняя длина свободного пробега, рассчитанная на основе сечений взаимодействия σ_a рассматриваемой частицы с атомами среды и атомных концентраций n_a:

$$\lambda = \frac{1}{\sum\limits_{a=\mathrm{O,H}} n_a \sigma_a}. \tag{8}$$

2.2. Моделирование распространения фотонов

Среди возможных процессов взаимодействия фотонов с атомами в данной работе учитывается только фотоионизация атомов, являющаяся наиболее вероятным типом взаимодействия в рассматриваемой области энергии. В соответствии с этим, испущенный в ходе распада вакансии фотон либо поглощается в зоне взаимодействия одним из атомов O или H, либо покидает зону. Если выбранная длина свободного пробега (7) такова, что фотон поглощается внутри зоны, то на основе сечений фотоионизации атомов кислорода и водорода проводится случайный выбор атома, поглотившего фотон, и ионизированной подоболочки. Выбитый в результате фотоионизации фотоэлектрон добавляется в список вторичных частиц для дальнейшего моделирования его распространения внутри зоны, и если созданная в ионизированном атоме вакансия

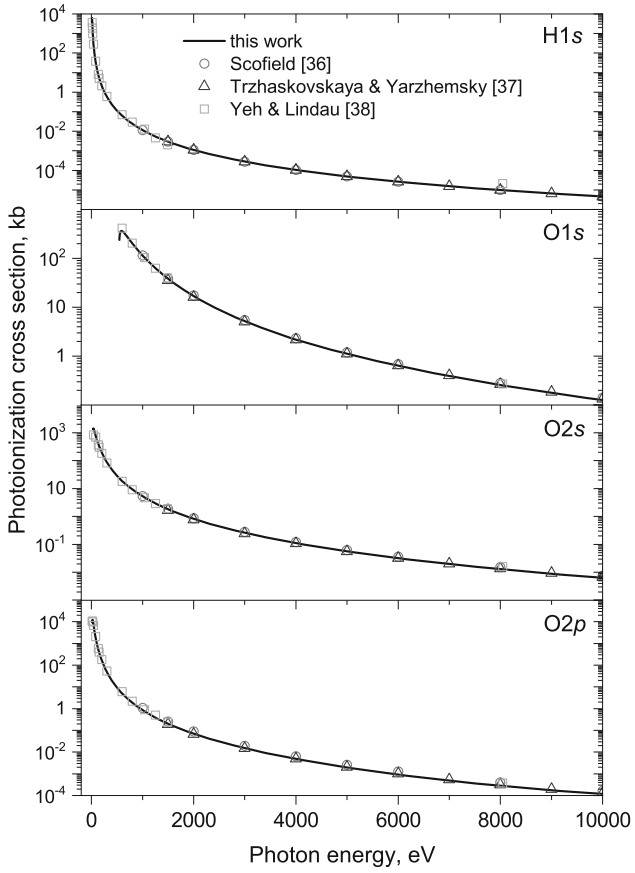


Рис. 1. (В цвете онлайн) Сечения фотоионизации атомов водорода и кислорода: сплошные линии — результаты расчета данной работы; кружки — расчет Скофилда в релятивистском приближении Хартри – Слэтера [36]; треугольники — расчет Тржасковской и Яржемского в приближении Дирака – Фока [37]; квадраты — расчет Йе и Линдау в приближении Хартри – Фока – Слэтера [38]

является внутренней и подвержена распаду (т. е. в случае фотоионизации $1s$- или $2s$-подоболочки кислорода), то проводится моделирование ее распада методом, описанным в разд. 2.1.

Парциальные сечения фотоионизации nl-подоболочек атомов кислорода и водорода рассчитаны в дипольном приближении по формуле

$$\sigma_{nl}(h\nu) = \frac{N_{nl}}{2(2l+1)} \sum_{l'=l\pm1} \sigma_{nl\to\varepsilon l'}(h\nu), \qquad (9)$$

где N_{nl} — число электронов в nl-подоболочке, а

$$\sigma_{nl\to\varepsilon l'}(h\nu) = \frac{8}{3}\pi^2 \alpha a_0^2 \max(l,l') h\nu \left\langle nl\,|r|\,\varepsilon l' \right\rangle^2. \quad (10)$$

Здесь α — постоянная тонкой структуры, a_0 — боровский радиус, $h\nu$ — энергия фотона (все величины

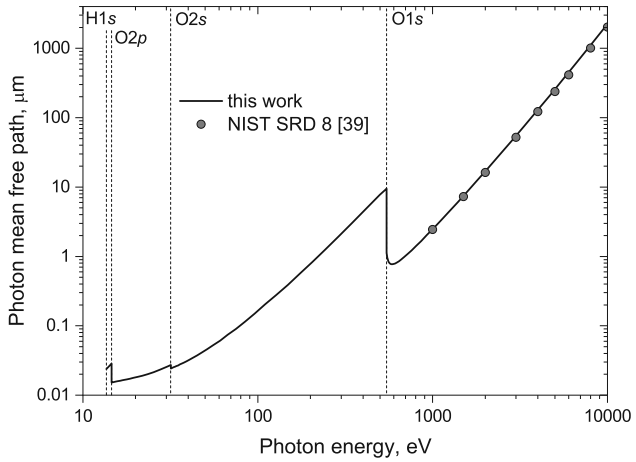


Рис. 2. Средняя длина свободного пробега фотона в воде в зависимости от энергии фотона. Сплошная линия — расчет данной работы на основе сечений фотоионизации атомов водорода и кислорода, кружки — данные базы NIST SRD 8 [39]. Вертикальными штриховыми линиями показано положение порогов ионизации атомов H и O

в атомной системе единиц), а

$$\left\langle nl\,|r|\,\varepsilon l' \right\rangle = \int_0^\infty P_{nl}^{[0]}\, r\, P_{\varepsilon l'}^{[nl^{-1}]}\, dr \qquad (11)$$

есть радиальная часть матричного элемента дипольного перехода между атомной орбиталью nl-электрона, оптимизированной в конфигурации основного состояния, и орбиталью $\varepsilon l'$-фотоэлектрона с энергией $\varepsilon = h\nu - I_{nl}$, рассчитанной в потенциале конфигурации $nl^{-1}\varepsilon l'$, I_{nl} — потенциал ионизации nl-подоболочки.

Рассчитанные парциальные сечения фотоионизации атомов кислорода и водорода представлены на рис. 1 и находятся в отличном согласии с результатами расчетов других авторов: Скофилда в релятивистском приближении Хартри – Слэтера [36]; Тржасковской и Яржемского в приближении Дирака–Фока [37]; Йе и Линдау в приближении Хартри – Фока – Слэтера [38]. На рис. 2 представлена рассчитанная на основе полных сечений фотоионизации атомов кислорода и водорода зависимость средней длины свободного пробега фотонов в воде от их энергии в сравнении с данными из базы NIST SRD 8 [39].

2.3. Моделирование распространения электронов

При моделировании распространения электронов в данной работе учитываются два типа процес-

сов: упругое рассеяние электрона атомом и ионизация атома электронным ударом.

Полное сечение взаимодействия электрона с атомом складывается из сечения упругого рассеяния σ^{elast} и сечения ударной ионизации σ^{ioniz}. Полные и дифференциальные сечения упругого рассеяния электрона на атомах водорода и кислорода при энергии электрона менее 50 эВ были рассчитаны в приближении парциальных волн [40]. При энергии электрона более 50 эВ были использованы сечения из базы NIST SRD 64 [41].

Сечения прямой ионизации атомов кислорода и водорода рассчитаны в данной работе в полуэмпирическом приближении бинарных столкновений Бете (binary-encounter Bethe, BEB), предложенном Кимом и Раддом в [42]. Пусть T — кинетическая энергия налетающего на атом электрона, а I_{nl} — потенциал ионизации nl-подоболочки атома. В результате ионизации nl-подоболочки в конечном состоянии образуются два электрона, которые делят между собой энергию $T - I_{nl}$. Будем условно называть выбитым электроном тот из них, энергия которого W меньше. Тогда рассеянный электрон имеет энергию $T' = T - I_{nl} - W > W$. Дифференциальное по энергии выбитого электрона W сечение ионизации электронным ударом nl-подоболочки атома в BEB-приближении определяется формулой

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{nl}(w,t)}{dw} = \frac{S_{nl}}{t+u_{nl}+1}\times \\ \times\left\{\frac{Q_{nl}-2}{t+1}\left[\frac{1}{w+1}+\frac{1}{t-w}\right]+\right. \\ +(2-Q_{nl})\left[\frac{1}{(w+1)^2}+\frac{1}{(t-w)^2}\right]+ \\ \left.+Q_{nl}\ln(t)\left[\frac{1}{(w+1)^3}+\frac{1}{(t-w)^3}\right]\right\},\end{aligned} \tag{12}$$

где

$$t = T/I_{nl}, \quad w = W/I_{nl}, \quad S_{nl} = 4\pi a_0^2 N_{nl}(R/I_{nl})^2,$$

$R \approx 13.6$ эВ — ридберговская энергия, $u_{nl} = U_{nl}/I_{nl}$, U_{nl} — средняя кинетическая энергия электрона nl-подоболочки:

$$U_{nl} = \left\langle nl \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right| nl \right\rangle. \tag{13}$$

Величина Q_{nl} в (12) называется дипольной постоянной и определяется формулой

$$Q_{nl} = \frac{2}{N_{nl}} \int\limits_0^\infty \frac{1}{w+1} \frac{df_{nl}(w)}{dw}\, dw, \tag{14}$$

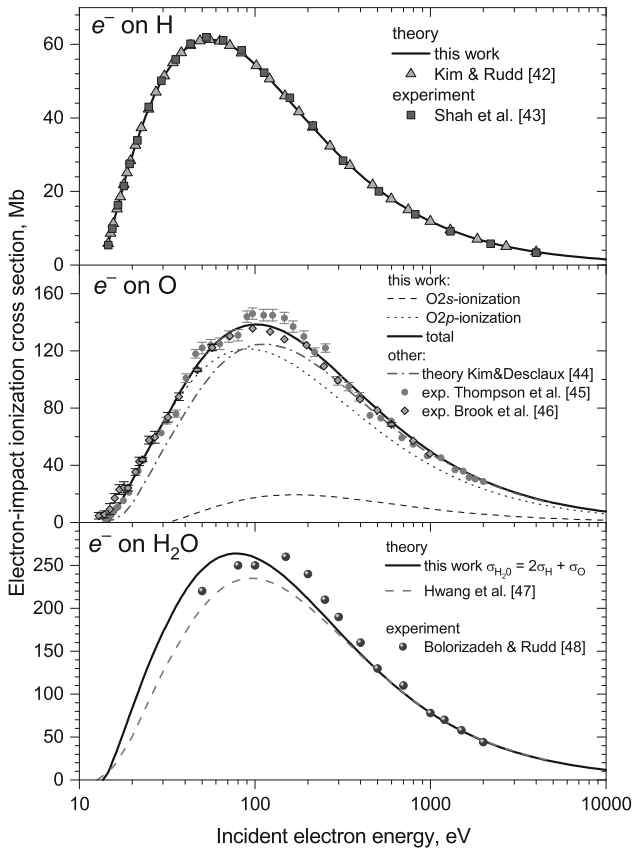


Рис. 3. (В цвете онлайн) Сечения ионизации электронным ударом атома H (верхняя панель), атома O (средняя панель) и молекулы воды (нижняя панель)

где df_{nl}/dw — плотность обобщенных сил осциллятора.

Парциальное сечение ионизации nl-подоболочки электронным ударом в BEB-приближении получается интегрированием (12) и равно

$$\begin{aligned}\sigma_{nl}(t) = \int\limits_0^{(t-1)/2} \frac{d\sigma_{nl}(w,t)}{dw}\, dw = \\ = \frac{S_{nl}}{t+u_{nl}+1}\left\{\frac{Q_{nl}}{2}\left(1-\frac{1}{t^2}\right)\ln t+\right. \\ \left.+(2-Q_{nl})\left[1-\frac{1}{t}-\frac{\ln t}{t+1}\right]\right\}.\end{aligned} \tag{15}$$

Рассчитанные в данной работе парциальные и полные сечения прямой ионизации атомов водорода и кислорода электронным ударом представлены на рис. 3 в сравнении с другими теоретическими и экспериментальными данными [42–46]. Для иллюстрации возможности применимости приближения невзаимодействующих атомов при моделировании ионизации воды электронным ударом на ниж-

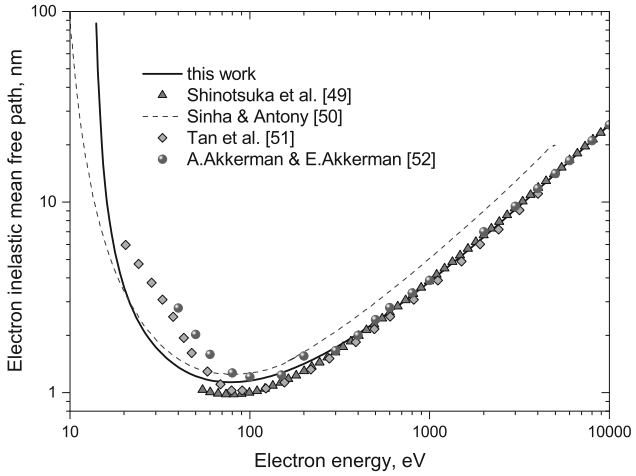


Рис. 4. (В цвете онлайн) Средняя неупругая длина свободного пробега электрона в жидкой воде. Сплошная линия — расчет данной работы; расчеты других авторов: треугольники — [49], штриховая линия — [50], ромбы — [51], кружки — [52]

ней панели рис. 3 показано сечение ионизации молекулы воды, рассчитанное как сумма сечений ионизации электронным ударом отдельных атомов водорода и кислорода, $\sigma_{\mathrm{H_2O}} = 2\sigma_{\mathrm{H}} + \sigma_{\mathrm{O}}$. Рассчитанное таким образом сечение ионизации молекулы воды находится в неплохом согласии с результатами работы Хвана и др. [47], в которой авторы применили BEB-приближение для расчета парциальных сечений ионизации электронным ударом молекулярных орбиталей молекулы H_2O. Оно находится также в хорошем соответствии с результатами измерений Болоризаде и Радда [48].

На рис. 4 представлена зависимость от энергии электрона его средней неупругой (обусловленной процессами ударной ионизации) длины свободного пробега в воде, рассчитанной на основе сечений ионизации электронным ударом атомов O и H в BEB-приближении:

$$\lambda_{el}^{inelast} = \frac{1}{\sum\limits_{a=\mathrm{O,H}} n_a \sigma_a^{ioniz}}. \qquad (16)$$

Как видно на рис. 4, она достаточно хорошо согласуется с результатами расчета других авторов [49–52].

Наряду со средней неупругой длиной свободного пробега еще одной важной характеристикой является величина эффективного торможения, называемая также линейной тормозной способностью (stopping power), равная средней энергии, теряемой электроном на единице его пути в веществе [53]. В приближении парных столкновений и невзаимодействующих атомов линейная тормозная способность электронов, обусловленная процессами ударной ионизации, определяется формулой

$$-\frac{dT}{dx} = \sum_{a,nl} n_a I_{a,nl} \int\limits_0^{(t-1)/2} (w+1)\frac{d\sigma_{a,nl}}{dw} dw, \qquad (17)$$

где суммирование проводится по типам атомов a, входящих в состав вещества, и их подоболочкам nl. Величина $w + 1 = t - t'$ в интеграле представляет собой потерянную рассеянным электроном энергию в результате ионизации nl-подоболочки атома a, отнесенную к ее потенциалу ионизации $I_{a,nl}$. Использвание BEB-приближения для дифференциального сечения ионизации атома электронным ударом (12) позволяет получить аналитическое выражения для интеграла в (17) (индекс a для краткости опущен)

$$\int\limits_0^{(t-1)/2} (w+1)\frac{d\sigma_{nl}}{dw} dw = \frac{S_{nl}}{t+u_{nl}+1}\left\{(Q_{nl}-2)\ln\frac{2t}{t+1} + (2-Q_{nl})\left(\ln\frac{(t+1)^2}{4t} + 1 - \frac{1}{t}\right) + Q_{nl}\ln(t)\frac{2t^3-t^2-1}{2t^2(t+1)}\right\}. \qquad (18)$$

Рассчитанная с помощью (17), (18) зависимость линейной тормозной способности электрона в жидкой воде от его энергии представлена на рис. 5 в сравнении с результатами моделирования методом Монте-Карло с помощью Geant4-DNA [54] и с данными базы NIST SRD 124 [55]. Тормозная способность достигает максимального значения 219 Мэв/см при энергии 125 эВ. При этом в качестве диапазона энергии распространяющегося в воде электрона, в котором он наиболее эффективно передает свою энергию воде, можно указать интервал от 30 до 860 эВ, в котором тормозная способность превышает половину своего максимального значения. На рис. 5 представлена также тормозная способность электрона в воде, обусловленная тормозным излучением [55]. В диапазоне от 1 до 10 кэВ она в среднем на 4 порядка меньше, чем тормозная способность за счет процессов ударной ионизации. Поскольку рассматриваемые в данной работе оже-электроны, испускаемые в результате каскадного распада вакансий, и фотоэлектроны имеют энергию, не превышающую 10 кэВ, основным источником потерь энергии электронами является ударная

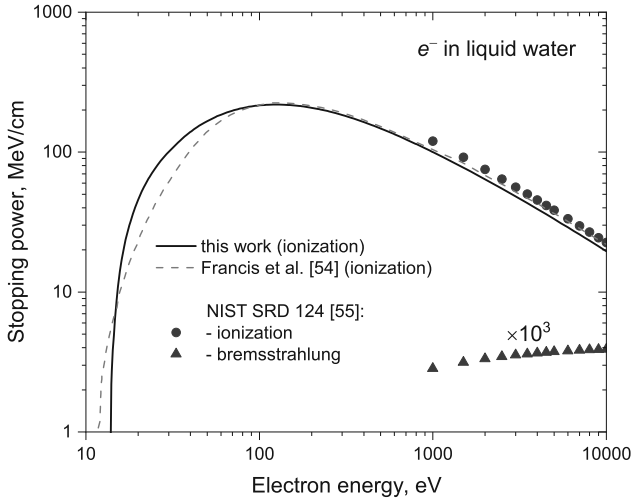


Рис. 5. (В цвете онлайн) Линейная тормозная способность электрона в жидкой воде. За счет процессов ударной ионизации: сплошная линия — аналитический расчет данной работы в BEB-приближении [42]; штриховая линия — результаты моделирования методом Монте-Карло с помощью Geant4-DNA [54]; кружки — данные базы NIST SRD 124 [55]. За счет тормозного излучения: треугольники — данные [55], умноженные на 10^3

ионизация. В связи с этим при проведении моделирования методом Монте-Карло тормозное излучение электронов нами не учитывалось. Однако оно будет играть заметную роль при энергиях электрона более 10 МэВ.

Если в результате моделирования электрон, совершая свободный пробег случайной длины (7), рассчитанной на основе полных $\sigma_a^{tot} = \sigma_a^{elast} + \sigma_a^{ioniz}$ сечений взаимодействия электрона с атомами H и O, остается внутри зоны взаимодействия, то проводится выбор случившегося события — с каким атомом произошло столкновение электрона, и какой именно произошел процесс (упругое рассеяние или ионизация какой-либо электронной подоболочки). В случае упругого взаимодействия изменяется направление движения электрона на основе дифференциальных сечений упругого рассеяния. Если же произошла ударная ионизация, то на основе дифференциальных по энергии выбитого электрона сечений (12) проводится деление энергии между рассеянным и выбитым электронами (выбитый электрон при этом пополняет список вторичных частиц внутри зоны), а затем моделирование углового распределения электронов. Возникшая в результате ионизации вакансия анализируется на возможность ее распада, и, если распад возможен, запускается процедура моделирования каскадного распада, описанная выше.

Моделирование распространения вторичных электронов внутри зоны взаимодействия продолжается до тех пока, пока каждый электрон не покинет зону или его энергия станет недостаточной для ионизации атомов H и O (минимальный порог $I_{\mathrm{H}1s} = 13.6$ эВ).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

С помощью описанного в разд. 2 метода Монте-Карло было проведено моделирование каскадного распада вакансий в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа и последующих вторичных процессов ионизации атомов окружающих ион железа воды, вызванных фотонами и электронами, испущенными в ходе каскадного распада. Каждое моделирование методом Монте-Карло состояло из 10^6 испытаний.

На рис. 6 представлены рассчитанные спектры электронов, испускаемых в ходе каскадного распада вакансий в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках Fe^+. Спектры электронов имеют сложную многокомпонентную структуру, обусловленную тем, что при распаде внутренней вакансии безрадиационные переходы n_1l_1–$n_2l_2n_3l_3$ могут происходить в различных многодырочных электронных конфигурациях, возникающих в ходе развития каскада.

Рассмотрим подробнее спектр электронов, испускаемых при распаде Fe$1s$-вакансии (верхняя панель рис. 6). В низкоэнергетической области спектра от 0 до 120 эВ в среднем на один распад Fe$1s^{-1}$ в результате костер-крониговских *LLM*, *LLN*, *MMN* и супер-костер-крониговских *MMM* переходов испускается 1.85 электронов, общая энергия которых составляет примерно 32 эВ (среди этих электронов энергией, достаточной для ионизации атомов H и O, обладают 0.76 электронов с общей энергией 26 эВ). В диапазоне от 355 до 830 эВ испускается в среднем 1.46 *LMM* и *LMN* оже-электронов с суммарной энергией 866 эВ. В диапазоне 5355–5630 эВ в результате *KLL* оже-эмиссии испускается 0.51 электронов с суммарной энергией 2835 эВ. Наконец, в высокоэнергетической области спектра, от 6140 до 6980 эВ, на один распад $1s$-вакансии приходится примерно 0.13 $KL\{M,N\}$ и $KM\{M,N\}$ оже-электронов с суммарной энергией 806 эВ. Таким образом, за один распад Fe$1s$-вакансии во всем диапазоне энергий в среднем испускается 2.86 электронов, способных ионизировать окружающие атомы водорода и кислорода. Их суммарная энергия составляет 4533 эВ.

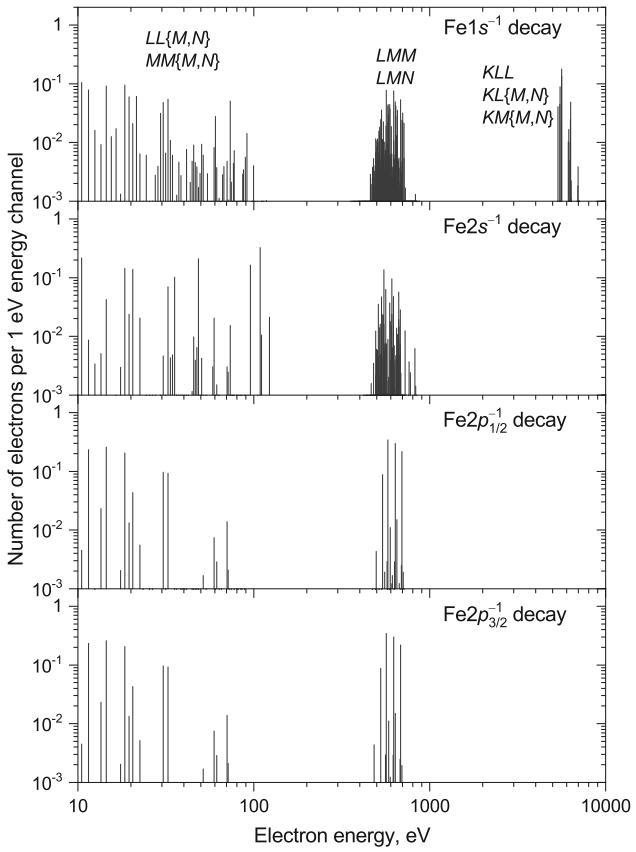


Рис. 6. Спектры электронов, испускаемых в результате каскадного распада вакансии в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа

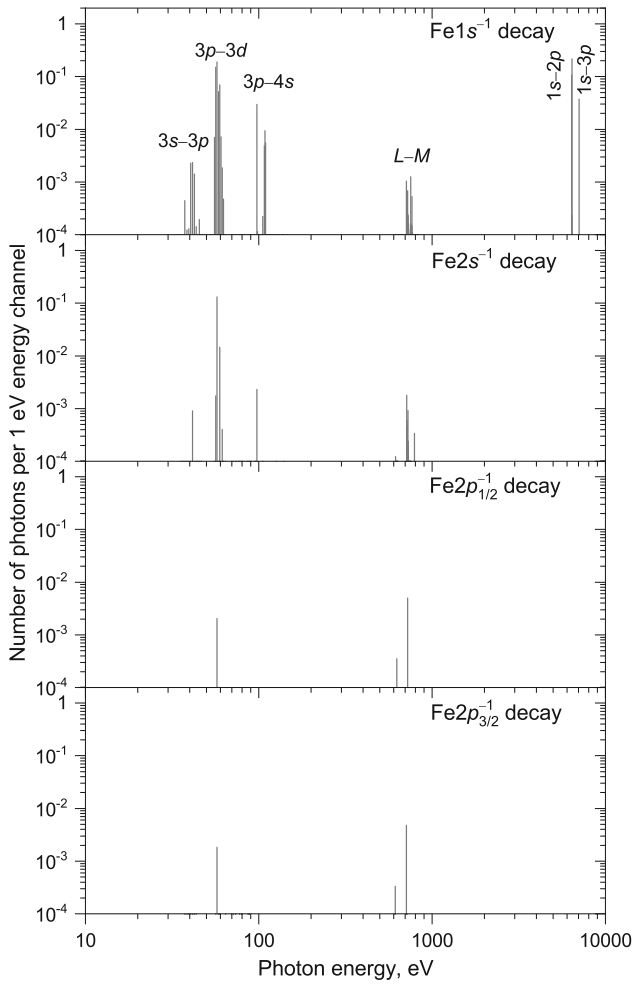


Рис. 7. Спектры фотонов, испускаемых в результате каскадного распада вакансии в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа

Спектры фотонов, испускаемых ионом Fe^+ при распаде вакансий в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках, представлены на рис. 7. При распаде Fe$1s^{-1}$ (верхняя панель рис. 7) в среднем испускается 0.326 $1s$–$2p$-фотонов с суммарной энергией 2087 эВ, 0.037 $1s$–$3p$-фотонов с общей энергией 264 эВ, 0.009 фотонов в результате L-эмиссии с суммарной энергией 6.3 эВ и примерно 0.536 фотонов, уносящих энергию 33 эВ в результате низкоэнергетических $3p$–$4s$-, $3p$–$3d$- и $3s$–$3p$-переходов. Отметим, что все фотоны, которые испускаются в результате распадов вакансий в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа, обладают энергией, достаточной для ионизации атомов H и O молекул воды.

При создании начальной nl_j-вакансии атом железа получает от ионизирующего его объекта (фотона или заряженной частицы) энергию, равную энергии ионизации nl_j-подоболочки, I_{nl_j}. В результате каскадного распада образовавшейся вакансии часть этой энергии переизлучается вместе с электронами и фотонами. В табл. 1 приведены рассчитанные средние числа электронов $N^{el}_{out}(nl_j)$ и фотонов $N^{phot}_{out}(nl_j)$, испускаемых при каскадном распаде вакансий в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома Fe и средние суммарные энергии, уносимые этими электронами $E^{el}_{out}(nl_j)$ и фотонами $E^{phot}_{out}(nl_j)$. Разность

$$E_{abs}(nl_j) = I_{nl_j} - E^{el}_{out}(nl_j) - E^{phot}_{out}(nl_j) \qquad (19)$$

представляет собой энергию, которая остается запасенной в атоме после полного завершения каскадной релаксации исходной nl_j-вакансии, т. е. энергию, поглощенную самим атомом. Из табл. 1 можно видеть, что большая часть энергии I_{nl_j}, затраченной на создание начальной внутренней вакансии в атоме железа (например, в результате фотоионизации), в ходе каскадной релаксации вакансии переизлучается вместе с каскадными электронами и фотонами. Так, в случае распада Fe$1s^{-1}$, средняя суммар-

Таблица 1. Средние числа электронов $N^{el}_{out}(nl_j)$ и фотонов $N^{phot}_{out}(nl_j)$, испускаемых ионом железа в результате каскадного распада одиночных вакансий в атоме Fe, средние энергии, уносимые каскадными электронами $E^{el}_{out}(nl_j)$ и фотонами $E^{phot}_{out}(nl_j)$, и энергия, поглощенная атомом $E_{abs}(nl_j)$ (в скобках указаны доли от энергии, полученной атомом Fe при ионизации, звездочкой отмечены величины для электронов, способных ионизировать атомы H и O молекул воды)

Начальная вакансия	N^{el}_{out}	N^{phot}_{out}	I_{nl_j}, эВ	E^{el}_{out}, эВ	E^{phot}_{out}, эВ	E_{abs}, эВ
$1s$	3.949 2.856*	0.908	7134	4539 (63.6%) 4533* (63.5%)	2390 (33.5%)	205 (2.9%)
$2s$	3.713 2.366*	0.156	862	678 (78.7%) 670* (77.7%)	12.7 (1.5%)	171 (19.8%)
$2p_{1/2}$	2.310 1.744*	0.008	736	637 (86.5%) 634* (86.1%)	4.1 (0.6%)	95 (12.9%)
$2p_{3/2}$	2.305 1.747*	0.007	723	625 (86.5%) 621* (85.9%)	3.8 (0.5%)	94 (13.0%)

Таблица 2. Радиусы сферических объемов R^{el}_{sat} и R^{phot}_{sat} вокруг атома железа, внутри которых количество актов вторичной ионизации электронным ударом N^{el}_{ioniz} и количество актов фотоионизации N^{phot}_{ioniz} атомов H и O достигает насыщения, числа актов ионизации $N^{el}_{ioniz}(R^{el}_{sat})$ и $N^{phot}_{ioniz}(R^{phot}_{sat})$, порожденных каскадными электронами и фотонами, испущенными при распаде вакансий в подоболочках атома Fe, и средние энергии $E^{el}_{abs}(R^{el}_{sat})$ и $E^{phot}_{abs}(R^{phot}_{sat})$, поглощенные в актах вторичной ионизации

nl_j	R^{el}_{sat}, нм	$N^{el}_{ioniz}(R^{el}_{sat})$	$E^{el}_{abs}(R^{el}_{sat})$, эВ	R^{phot}_{sat}, нм	$N^{phot}_{ioniz}(R^{phot}_{sat})$	$E^{phot}_{abs}(R^{phot}_{sat})$, эВ
$1s$	1405	231.5	3274	1435	18.0	256
$2s$	105	34.4	484	205	2.2	31
$2p_{1/2}$	95	32.3	456	125	2.0	29
$2p_{3/2}$	95	31.7	447	115	2.0	28

ная энергия всех испущенных электронов составляет $E^{el}_{out}(1s) = 0.64I_{1s}$, а энергия испущенных фотонов $E^{phot}_{out}(1s) = 0.33I_{1s}$, и только 3% энергии, полученной атомом при создании $1s$-вакансии, остается запасенной в атоме. В случае же распада вакансий в $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках энергия, поглощенная атомом железа, составляет 13–20% от потенциала ионизации, суммарная энергия испущенных в ходе распада фотонов мала (0.5–1.5%), и большую часть энергии (79–87%) уносят с собой каскадные электроны.

Для исследования пространственного распределения актов вторичной ионизации атомов H и O, производимых испущенными в результате каскадного распада вакансий ионов $Fe^+(nl_j^{-1})$ электронами и фотонами, сферическая зона взаимодействия радиуса $R_{zone} = 10^4$ нм была разбита на концентрические шаровые слои одинаковой толщины $\Delta r = 10$ нм с центром, совпадающим с центром зоны взаимодействия, в котором находится ион Fe^+ с заданной начальной вакансией в определенной nl_j-подоболочке. В результате моделирования методом Монте-Карло определялись среднее (приходящееся на один nl_j^{-1} каскадный распад) число актов вторичной ионизации атомов H и O электронным ударом, $\Delta N^{el}_{ioniz}(r_i)$, и среднее число актов вторичной фотоионизации, $\Delta N^{phot}_{ioniz}(r_i)$, происходящих внутри каждого i-го шарового слоя (между сферами радиусов $r_i - \Delta r/2$ и $r_i + \Delta r/2$).

Также в результате моделирования определялись средние энергии, поглощенные внутри каждого шарового слоя в результате актов ионизации атомов H и O электронным ударом, $\Delta E^{el}_{abs}(r_i)$ и актов фотоионизации, $\Delta E^{phot}_{abs}(r_i)$. Энергия, поглощенная внутри слоя, рассчитывалась как сумма энергий, поглощенных во всех актах вторичной ионизации, произо-

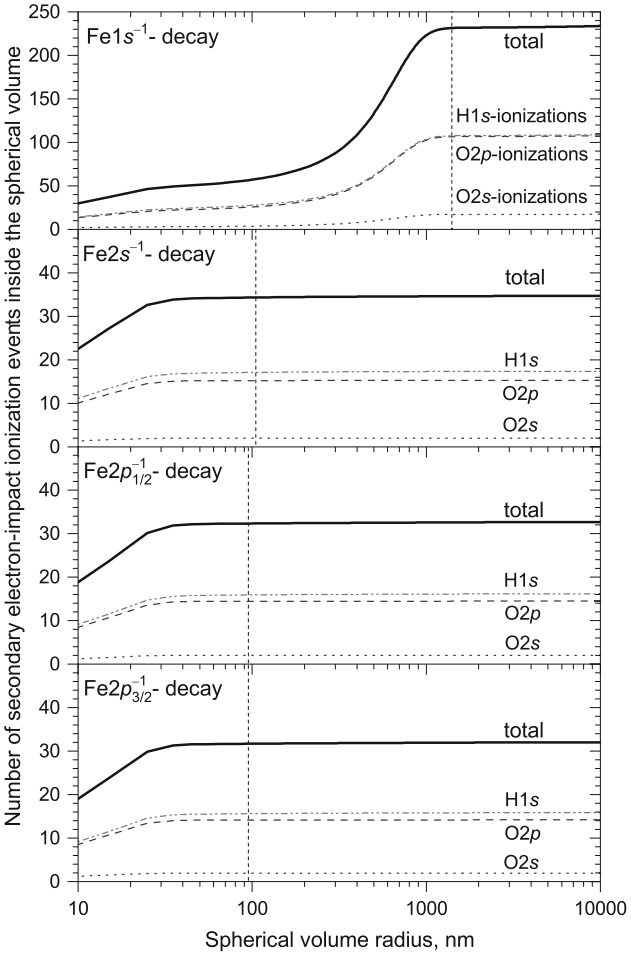


Рис. 8. Числа актов вторичной ионизации электронным ударом атомов H и O, происходящих внутри сферического объема вокруг атома Fe в результате каскадного распада вакансий в его $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках. Вертикальными штриховыми линиями отмечены радиусы сфер R_{sat}, при которых достигается насыщение

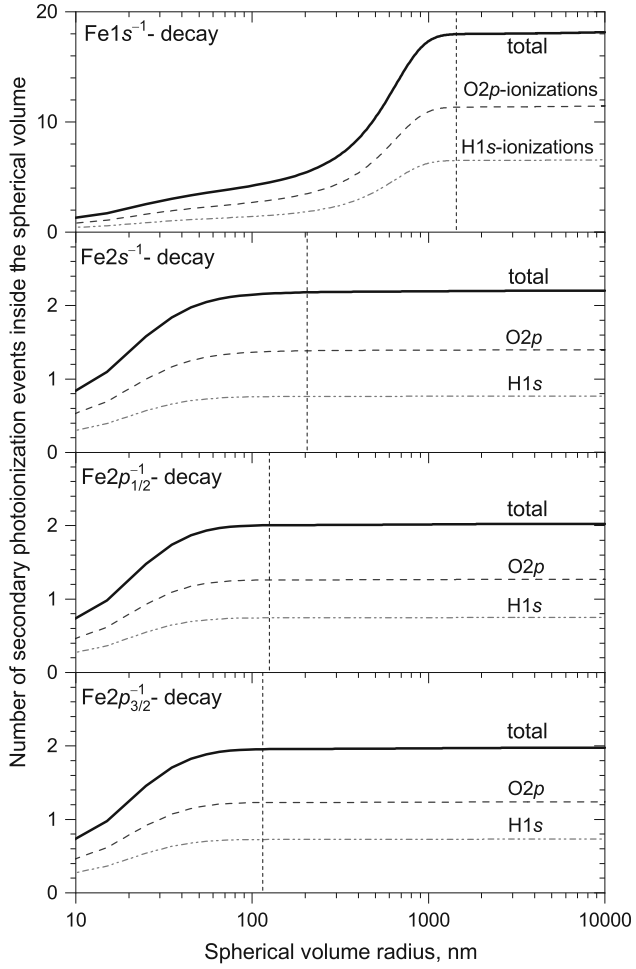


Рис. 9. Числа актов вторичной фотоионизации атомов H и O, происходящих внутри сферического объема вокруг атома Fe в результате каскадного распада вакансий в его $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках. Вертикальными штриховыми линиями отмечены радиусы сфер R_{sat}, при которых достигается насыщение

шедших внутри слоя. При этом энергия, поглощенная в отдельно взятом акте ионизации, рассчитывалась как разность полной энергии иона, образовавшегося в результате каскадной релаксации (т. е. после распада образовавшейся в результате ионизации вакансии) и полной энергии атома в основном состоянии до ионизации. Полные энергии атомов и ионов в различных электронных конфигурациях рассчитаны в приближении Паули – Фока [31].

Для иллюстрации того, сколько актов вторичной ионизации происходит в воде за счет электронов и фотонов, испускаемых в результате распада внутренней nl_j-вакансии в ионе железа, и какая при этом поглощается энергия, просуммируем $\Delta N^{el}_{ioniz}(r_i), \Delta E^{el}_{abs}(r_i)$ и $\Delta N^{phot}_{ioniz}(r_i), \Delta E^{phot}_{abs}(r_i)$ по шаровым слоям:

$$\begin{aligned} N^{el}_{ioniz}(r) &= \sum_{r_i \le r} \Delta N^{el}_{ioniz}(r_i), \\ E^{el}_{abs}(r) &= \sum_{r_i \le r} \Delta E^{el}_{abs}(r_i), \\ N^{phot}_{ioniz}(r) &= \sum_{r_i \le r} \Delta N^{phot}_{ioniz}(r_i), \\ E^{phot}_{abs}(r) &= \sum_{r_i \le r} \Delta E^{phot}_{abs}(r_i). \end{aligned} \tag{20}$$

В результате получим количества актов вторичной ионизации электронным ударом $N^{el}_{ioniz}(r)$ и актов

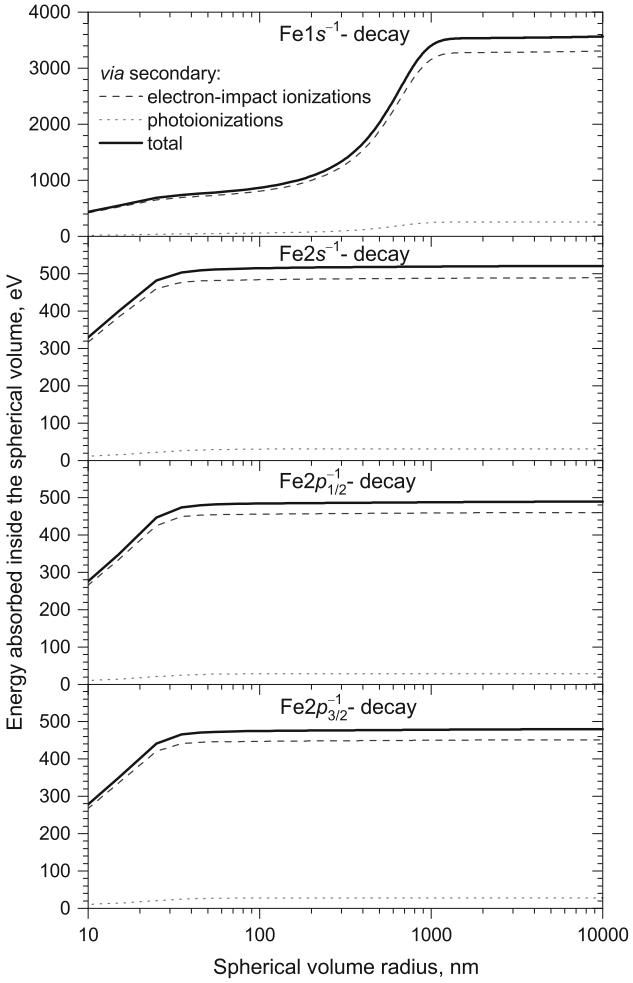


Рис. 10. Энергия, поглощенная в актах ионизации электронным ударом и фотоионизации атомами H и O, находящимися внутри сферического объема вокруг атома Fe, в результате каскадного распада вакансий в его $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках

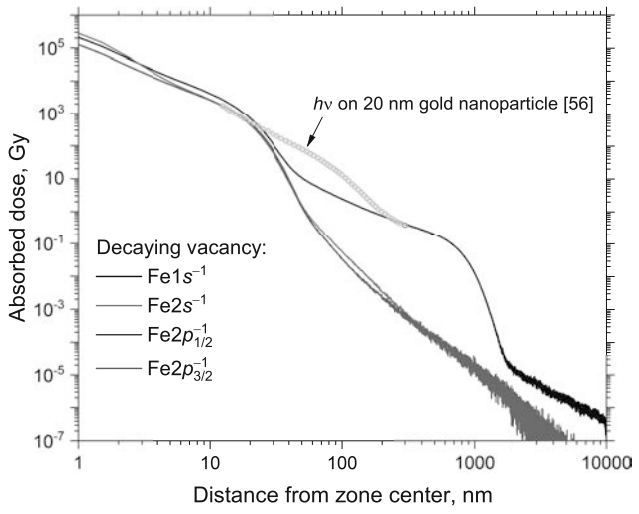


Рис. 11. (В цвете онлайн) Зависимости поглощенной дозы в воде за счет вторичных процессов ионизации электронным ударом и фотоионизации, инициированных каскадным распадом вакансий в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа, от расстояния от атома Fe. Кружки — поглощенная доза в зависимости от расстояния от центра наночастицы золота диаметром 20 нм при фотонном облучении (результат моделирования методом Монте-Карло [56])

фотоионизации N_{ioniz}^{phot}, происходящих внутри сферы радиуса r, а также поглощенные в результате этих процессов энергии $E_{abs}^{el}(r)$ и $E_{abs}^{phot}(r)$.

На рис. 8 представлены зависимости $N_{ioniz}^{el}(r)$ при распаде вакансии в $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа. В задачах оже-терапии представляет особый интерес знание радиуса сферы R_{sat}^{el} вокруг атома-источника оже-электронов, внутри которой количество актов вторичной ионизации электронным ударом достигает насыщения. Очевидно, R_{sat}^{el} задает границу области вокруг атома железа, в которой возможны процессы передачи энергии атомам окружения каскадными электронами, испущенными ионизированным атомом железа при каскадном распаде вакансий. Радиусы R_{sat}^{el} отмечены на рис. 8 вертикальными штриховыми линиями, а их числовые значения вместе с максимальным количеством актов ударной ионизации $N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el})$ приведены в табл. 2. Как видно из рис. 8 и табл. 2, в случае Fe$1s^{-1}$-распада $R_{sat}^{el} = 1405$ нм, а максимальное число актов вторичной ионизации атомов O и H равно $N_{ioniz}^{el}(R_{sat}^{el}) = 231.5$. Из них число актов O$2p$-ионизации — 106.5, O$2s$-ионизации — 17.2, O$1s$-ионизации — 0.16 (не показаны на рис. 8) и H$1s$-ионизации — 107.6.

На рис. 9 представлены зависимости числа актов вторичной фотоионизации $N_{ioniz}^{phot}(r)$. Обратим внимание, что числа актов вторичной фотоионизации внутри сфер большого радиуса превосходят число фотонов, испущенных ионом железа (см. табл. 2). Основным источником актов вторичной фотоионизации являются фотоны жесткого ультрафиолетового диапазона, испускаемые атомами кислорода, которые были ионизированы электронным ударом. Фотон, испускаемый в результате O$2s-2p$-перехода, имеет энергию 17.2 эВ, что достаточно для фотоионизации атома водорода и $2p$-подоболочки атома кислорода. Средняя длина свободного пробега фотона такой энергии в воде равна 16.6 нм (см. рис. 2). В связи с этим такие фотоны с большой вероятностью будут поглощены недалеко от испускающих

их атомов кислорода, а вызванное ими число актов вторичной фотоионизации будет равно числу актов O2s-ионизации электронным ударом.

Радиусы насыщения R_{sat}^{phot} и числа актов фотоионизации $N_{ioniz}^{phot}(R_{sat}^{phot})$ приведены в табл. 2. В случае распадов вакансий в 2s-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома Fe число актов вторичной фотоионизации достигает полного насыщения внутри зоны взаимодействия. В случае распада 1s-вакансии на первом шаге каскада ион железа с большой вероятность излучает 1s–$2p_{1/2}$- или 1s–$2p_{3/2}$-фотон с энергией 6399 или 6411 эВ соответственно. Средняя длина свободного пробега таких фотонов в воде составляет примерно 530 мкм (рис. 2), что в 53 раза больше радиуса зоны взаимодействия. Поэтому такие фотоны с наибольшей вероятностью будут поглощены за пределами рассматриваемой нами зоны. В связи с этим отметим, что насыщение числа актов вторичной фотоионизации N_{ioniz}^{phot}, наблюдаемое на рис. 9 для случая Fe1s^{-1}-распада, носит лишь локальный характер.

На рис. 10 представлены энергии $E_{abs}^{el}(r)$ и $E_{abs}^{phot}(r)$, поглощенные атомами кислорода и водорода внутри сферического объема радиуса r в результате процессов ионизации электронным ударом и фотоионизации. Определенные из этих зависимостей значения энергий $E_{abs}^{el}(R_{sat}^{el})$ и $E_{abs}^{phot}(R_{sat}^{phot})$, поглощенных внутри сфер, в которых достигают насыщения числа актов ионизации электронным ударом N_{ioniz}^{el} и фотоионизации N_{ioniz}^{phot}, приведены в табл. 2.

Во многих случаях представляет интерес пространственное распределение поглощенной дозы вблизи радиосенсибилизирующего агента на нанометровом масштабе. Определим локальную поглощенную дозу следующим образом:

$$D(r_i) = \frac{\Delta E_{abs}^{el+phot}(r_i)}{\rho \Delta V(r_i)}, \qquad (21)$$

где $E_{abs}^{el+phot}(r_i) = E_{abs}^{el}(r_i) + E_{abs}^{phot}(r_i)$ — энергия, поглощенная внутри i-го шарового слоя за счет вторичных процессов ионизации электронным ударом и фотоионизации, $\rho\Delta V(r_i)$ — масса i-го шарового слоя, заполненного водой. Отметим, что для расчета поглощенной дозы (21) зона взаимодействия была разбита на слои толщиной $\Delta r = 1$ нм.

Рассчитанные зависимости поглощенной дозы $D(r)$ при распадах вакансий в 1s-, 2s-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа представлены на рис. 11. В случае распада Fe1s-вакансии поглощенная доза (21) убывает от $2.1 \cdot 10^5$ Гр при $r = 1$ нм до 2.4 Гр при $r = 100$ нм. Также на рис. 11 для сравнения представлена зависимость поглощенной дозы от расстояния от центра наночастицы золота диаметром 20 нм (кружки), облучаемой рентгеновскими фотонами, полученная в результате моделирования методом Монте-Карло [56]. Как можно видеть, при r от 10 до 24 нм поглощенная доза в случае распада Fe1s-вакансии даже несколько превышает поглощенную дозу в случае облучения золотой наночастицы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом Монте-Карло проведено моделирование процессов вторичной ионизации воды, порожденных каскадными распадами внутренних вакансий в атоме железа, помещенном в воду. Рассчитаны спектры электронов и фотонов, испускаемых в ходе распада вакансий в 1s-, 2s-, $2p_{1/2}$- и $2p_{3/2}$-подоболочках атома железа. Рассчитаны зависимости числа актов вторичной ионизации электронным ударом и числа актов вторичной фотоионизации от радиуса сферы, внутри которой они происходят. Определены зависимости поглощенной дозы в воде от расстояния от атома железа. Результаты, полученные в работе, могут быть использованы в задачах оже-терапии при использовании в качестве источника оже-электронов соединений или наночастиц на основе железа.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда N 23-22-00222, https://rscf.ru/project/23-22-00222/.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Ku, V. J. Facca, Z. Cai, and R. M. Reilly, EJNMMI Radiopharm. Chem. **4**, 27 (2019); DOI: https://doi.org/10.1186/s41181-019-0075-2

2. Y. Liu, P. Zhang, F. Li, X. Jin, J. Li, W. Chen, and Q. Li, Theranostics **8**, 1824 (2018); DOI: https://doi.org/10.7150/thno.22172

3. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, I. D. Petrov, and V. A. Yavna, Phys. Scr. **98**, 025406 (2023); DOI: https://doi.org/10.1088/1402-4896/acb407

4. А. П. Чайников, А. Г. Кочур, А. И. Дуденко, В. А. Явна, Опт. и спектр. **131**, 563 (2023); DOI: https://doi.org/10.21883/OS.2023.04.55563.4560-22

5. T. A. Carlson and M. O. Krause, Phys. Rev. **137**, A1655 (1965); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.137.A1655

6. M. O. Krause, M. L. Vestal, W. H. Johnston, and T. A. Carlson, Phys. Rev. **133**, A385 (1964); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.133.A385

7. M. O. Krause and T. A. Carlson, Phys. Rev. **149**, 52 (1966); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.149.52

8. T. Mukoyama, T. Tonuma, A. Yagishita, H. Shibata, T. Koizumi, T. Matsuo, K. Shima, and H. Tawara, J. Phys. B At. Mol. Phys. **20**, 4453 (1987); DOI: https://doi.org/10.1088/0022-3700/20/17/023

9. M. N. Mirakhmedov and E. S. Parilis, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **21**, 795 (1988); DOI: https://doi.org/10.1088/0953-4075/21/5/010

10. A. El-Shemi, Y. Lofty, and G. Zschornack, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **30**, 237 (1997); DOI: https://doi.org/10.1088/0953-4075/30/2/017

11. V. L. Jacobs, J. Davis, B. F. Rozsnyai, and J. W. Cooper, Phys. Rev. A **21**, 1917 (1980); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.21.1917

12. A. G. Kochur, A. I. Dudenko, V. L. Sukhorukov, and I. D. Petrov, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **27**, 1709 (1994); DOI: https://doi.org/10.1088/0953-4075/27/9/011

13. A. G. Kochur, V. L. Sukhorukov, A. I. Dudenko, and P. V. Demekhin, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **28**, 387 (1995); DOI: https://doi.org/10.1088/0953-4075/28/3/010

14. G. Omar and Y. Hahn, Phys. Rev. A **44**, 483 (1991); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.483

15. G. Omar and Y. Hahn, Z. Phys. D Atoms, Mol. Clust. **25**, 31 (1992); DOI: https://doi.org/10.1007/BF01437517

16. G. Omar and Y. Hahn, Z. Phys. D Atoms, Mol. Clust. **25**, 41 (1992); DOI: https://doi.org/10.1007/BF01437518

17. V. Jonauskas, R. Karazija, and S. Kučas, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **107**, 147 (2000); DOI:https://doi.org/10.1016/S0368-2048(00)00096-7

18. V. Jonauskas, L. Partanen, S. Kučas, R. Karazija, M. Huttula, S. Aksela, and H. Aksela, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **36**, 4403 (2003); DOI: https://doi.org/10.1088/0953-4075/36/22/003

19. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **286**, 108200 (2022); DOI: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2022.108200

20. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, Eur. Phys. J. D **73**, 80 (2019); DOI: https://doi.org/10.1140/epjd/e2019-90185-2

21. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **238**, 146863 (2020); DOI: https://doi.org/10.1016/j.elspec.2019.05.012

22. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, and V. A. Yavna, Radiat. Eff. Defects Solids **177**, 814 (2022); DOI: https://doi.org/10.1080/10420150.2022.2082296

23. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, Eur. Phys. J. D **71**, 282 (2017); DOI: https://doi.org/10.1140/epjd/e2017-80194-6

24. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, Appl. Radiat. Isot. **160**, 109144 (2020); DOI: https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109144

25. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **252**, 147111 (2021); DOI: https://doi.org/10.1016/j.elspec.2021.147111

26. A. G. Kochur, A. P. Chaynikov, and V. A. Yavna, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **256**, 147171 (2022); DOI: https://doi.org/10.1016/j.elspec.2022.147171

27. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, and V. A. Yavna, Radiat. Eff. Defects Solids **178**, 820 (2023); DOI: https://doi.org/10.1080/10420150.2023.2185890

28. V. G. Yarzhemsky and A. Sgamellotti, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **125**, 13 (2002); DOI:https://doi.org/10.1016/S0368-2048(02)00042-7

29. A. G. Kochur, A. I. Dudenko, I. D. Petrov, and V. F. Demekhin, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **156**–**158**, 78 (2007); DOI: https://doi.org/10.1016/j.elspec.2006.11.033

30. А. Г. Кочур, *Процессы распада вакансий в глубоких электронных оболочках*, Дисс. докт. физ.-мат. наук, Ростов-на-Дону (1997).

31. R. Kau, I. D. Petrov, V. L. Sukhorukov, and H. Hotop, Z. Phys. D Atoms, Mol. Clust. **39**, 267 (1997); DOI: https://doi.org/10.1007/s004600050137

32. R. Karazija, *Sums of Atomic Quantities and Mean Characteristics of Spectra*, Mokslas, Vilnius (1991).

33. S. Kučas and R. Karazija, Phys. Scr. **47**, 754 (1993); DOI: https://doi.org/10.1088/0031-8949/47/6/012

34. A. P. Chaynikov, A. G. Kochur, A. I. Dudenko, and V. A. Yavna, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **302**, 108561 (2023); DOI: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108561

35. А. Ф. Аккерман, *Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе*, Энергоатомиздат, Москва (1991).

36. J. H. Scofield, *Theoretical Photoionization Cross Sections from 1 to 1500 keV*, Lawrence Livermore National Laboratory (1973).

37. M. B. Trzhaskovskaya and V. G. Yarzhemsky, At. Data Nucl. Data Tables **119**, 99 (2018); DOI: https://doi.org/10.1016/j.adt.2017.04.003

38. J. J. Yeh and I. Lindau, At. Data Nucl. Data Tables **32**, 1 (1985); DOI: https://doi.org/10.1016/0092-640X(85)90016-6

39. M. J. Berger, J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, J. Chang, J. S. Coursey, R. Sukumar, D. S. Zucker, and K. Olsen, *NIST Standard Reference Database 8 (XGAM)*, NIST, PML, Radiation Physics Division (2010); DOI: https://dx.doi.org/10.18434/T48G6X

40. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Наука, Москва (1977) [I. I. Sobelman, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Elsevier (1972); DOI: https://doi.org/10.1016/C2013-0-02394-8]

41. A. Jablonski, F. Salvat, C. J. Powell, *NIST Electron Elastic-Scattering Cross-Section Database - Version 3.2*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2010); DOI: https://dx.doi.org/10.18434/T4NK50

42. Y.-K. Kim and M. E. Rudd, Phys. Rev. A **50**, 3954 (1994); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.50.3954

43. M. B. Shah, D. S. Elliott, and H. B. Gilbody, J. Phys. B At. Mol. Phys. **20**, 3501 (1987); DOI: https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/20/14/022

44. Y.-K. Kim and J.-P. Desclaux, Phys. Rev. A **66**, 012708 (2002); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.012708

45. W. R. Thompson, M. B. Shah, and H. B. Gilbody, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **28**, 1321 (1995); DOI: https://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/28/7/023

46. E. Brook, M. F. A. Harrison, and A. C. H. Smith, J. Phys. B At. Mol. Phys. **11**, 3115 (1978); DOI: https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/11/17/021

47. W. Hwang, Y.-K. Kim, and M. E. Rudd, J. Chem. Phys. **104**, 2956 (1996); DOI: http://dx.doi.org/10.1063/1.471116

48. M. A. Bolorizadeh and M. E. Rudd, Phys. Rev. A **33**, 882 (1986); DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.33.882

49. H. Shinotsuka, S. Tanuma, and C. Powell, Surf. Interface Anal. **54**, 534 (2022); DOI: https://doi.org/10.1002/sia.7064

50. N. Sinha and B. Antony, J. Phys. Chem. B **125**, 5479 (2021); DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c10781

51. Z. Tan, Y. Xia, M. Zhao, and X. Liu, Radiat. Environ. Biophys. **45**, 135 (2006); DOI: https://doi.org/10.1007/s00411-006-0049-0

52. A. Akkerman and E. Akkerman, J. Appl. Phys. **86**, 5809 (1999); DOI: https://doi.org/10.1063/1.371597

53. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики. Том III. Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2004).

54. Z. Francis, S. Incerti, M. Karamitros, H. N. Tran, and C. Villagrasa, Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B **269**, 2307 (2011); DOI: https://doi.org/10.1016/j.nimb.2011.02.031

55. M. J. Berger, J. S. Coursey, M. A. Zucker, and J. Chang, *NIST SRD 124: ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2005); DOI: https://dx.doi.org/10.18434/T4NC7P

56. K. T. Butterworth, S. J. McMahon, F. J. Currell, and K. M. Prise, Nanoscale **4**, 4830 (2012); DOI: https://doi.org/10.1039/C2NR31227A

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 942–954 © 2023

УЛУЧШЕННЫЕ КОСМОЛОГИЧЕСКИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ ДЛЯ СЦЕНАРИЕВ СМЕШИВАНИЯ ТРЕХ ПОКОЛЕНИЙ СТЕРИЛЬНЫХ НЕЙТРИНО

М. Н. Дубинин [a*], ***Д. М. Казаркин*** [b**]

[a] *Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцина Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия*

[b] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Физический факультет 119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 сентября 2022 г.,
после переработки 19 июля 2023 г.
Принята к публикации 11 сентября 2023 г.

Рассматривается калибровочная $SU(2)_L \times U(1)$ модель с расширением лептонного сектора тремя правыми майорановскими стерильными нейтрино. Проведена диагонализация полной массовой матрицы 6×6 активных и стерильных нейтрино. Получены космологические ограничения, вытекающие из времени жизни стерильных нейтрино и доли энергии, переносимой стерильной нейтринной темной материей. Рассмотрены отклонения от сценария «тонкой настройки» смешивания, чувствительного к массе наиболее легкого стандартного (активного) нейтрино и выделены соответствующие этим отклонениям области пространства параметров модели.

DOI: 10.31857/S0044451023120088
EDN: MWZWGJ

1. ВВЕДЕНИЕ

Стандартная модель (СМ) физики элементарных частиц, подтвержденная с высокой точностью в экспериментах, не объясняет ряд наблюдаемых явлений, одним из которых являются нейтринные осцилляции, выявленные в многочисленных экспериментах [1] и свидетельствующие о существовании масс нейтрино и смешиваний между тремя поколениями нейтрино. Имеющиеся данные согласуются с осцилляциями между ν_e, ν_μ и ν_τ, расщепление значений масс которых зависит от иерархического спектра. В случае нормальной иерархии $m_1 \ll m_2 < m_3$, $m_2 \simeq \sqrt{\Delta m_{21}^2} \sim 8.6 \cdot 10^{-3}$ эВ, $m_3 \simeq \sqrt{\Delta m_{32}^2 + \Delta m_{21}^2} \sim 0.05$ эВ [2]. Наиболее простой и естественной возможностью добавления нейтринных масс является расширение СМ тремя правыми майорановскими фермионами, синглетами относительно калибровочной группы $SU(2)_L \times U(1)$, [3, 4]. Соответствующий лагранжиан расширения имеет вид

$$\mathcal{L} \supset i\overline{\nu_R}\gamma^\mu \partial_\mu \nu_R - \\ - \left(F\overline{L_l}\tilde{\Phi}\nu_R + \frac{1}{2}M_M \overline{\nu_R^c}\,\nu_R + \text{H.c.} \right), \quad (1)$$

где $L^T = (\nu_l, l)_L$, $l = e, \mu, \tau$ — левый дублет СМ, $\tilde{\Phi}$ — сопряженный дублет Хиггса, F — матрица $3{\times}3$ юкавских констант. где $M_D = vF$ — 3×3 матрица юкавских членов после спонтанного нарушения симметрии (или матрица дираковских массовых членов), M_M — 3×3 массовая матрица трех майорановских тяжелых нейтральных лептонов (HNL), $v = \sqrt{2}\langle\Phi\rangle$.

Активные нейтрино приобретают относительно небольшие массы, если собственные значения $M_M \gg M_D$, где массы ненаблюдаемых экспериментально HNL могут сильно варьироваться. Например, для констант Юкавы $F \sim 10^{-7} - 1$ для массы HNL $\sim 10^2 - 10^{15}$ ГэВ $m_\nu \sim 10^{-2}$ эВ. Методы

* E-mail: dubinin@theory.sinp.msu.ru
** E-mail: kazarkin.dm17@physics.msu.ru

экспериментального обнаружения HNL различаются в зависимости от масштаба их масс, например, ГэВ или кэВ. Сложности в выделении сигналов на коллайдерах могут быть преодолены в таких экспериментах, как SHiP [8].

Случай с параметром массы M_{HNL} порядка кэВ представляет интерес, так как такой наиболее легкий HNL может быть хорошим кандидатом на роль темной материи [9]. Прямые астрофизические ограничения на γ-излучение при радиационных распадах HNL согласуются с $M_{HNL} \sim$10 кэВ [10, 11]. Минимальное расширение лептонного сектора Стандартной модели, модель νMSM [12, 13], включает в себя три стерильных нейтрино, одно из которых является кандидатом на роль темной материи с массовым масштабом $\sim$кэВ, в то время как два более тяжелых HNL обеспечивают малые массы активных нейтрино за счет see-saw механизма. Значительные ограничения пространства параметров модели могут быть наложены космологическими наблюдениями, которые приводят к числу HNL не менее трех [12] и устанавливают строгий верхний предел массы самого легкого активного нейтрино. Эксперименты по нейтринным осцилляциям дают разности квадратов масс активных нейтрино, а не абсолютные значения их масс, поэтому для трех поколений лептонов имеется 18 очень слабо ограниченных параметров модели (3 параметра массового члена Дирака, 3 параметра массы Майораны, 6 углов смешивания и 6 фаз) для случая независимого смешивания в секторах активного нейтрино и HNL, 9 из которых (параметры PMNS и три массы m_i активных нейтрино) могут быть определены экспериментально. Массы активных нейтрино ограничены наблюдениями крупномасштабной структуры [14], которые дают верхний предел для суммы $\sum m_i$ и устанавливают верхнюю границу $\Omega_\nu h^2$ для доли энергии активных нейтрино во Вселенной $\Omega_{DM} h^2 = 0.1186 \pm 0.0020$ [2]

В дальнейшем рассматривается общий случай диагонализации [15, 16] лептонного сектора модели для трех поколений HNL. В этом смысле рассматриваемая модель является обобщением νMSM на случай произвольной недиагональной матрицы смешивания в секторе тяжелых нейтральных лептонов.

2. МАССОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СМЕШИВАНИЕ НЕЙТРИНО

Полная массовая матрица 6×6, описываемая лагранжианом (1) является комплексной симметричной матрицей и может быть представлена как $\mathcal{M} = \mathcal{U}\mathcal{D}\mathcal{U}^T$ (так называемая факторизация Такаги), где $\mathcal{M}$ — массовая матрица, $\mathcal{U}$ — унитарная матрица, $\mathcal{D}$ — диагональная неотрицательная матрица

$$\mathcal{U}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & M_D \\ M_D^T & M_M \end{pmatrix} \mathcal{U}^* = \begin{pmatrix} \hat{m} & 0 \\ 0 & \hat{M} \end{pmatrix},$$

где $M_M^T = M_M$, $\hat{m} = diag(m_1, m_2, m_3)$ — диагональная матрица масс активных нейтрино, $\hat{M} = diag(M_1, M_2, M_3)$ — диагональная матрица масс для HNL-состояний N_i. Выберем $\mathcal{U}$ в виде

$$\mathcal{U} = \mathcal{W} \begin{pmatrix} U_\nu & 0 \\ 0 & U_N^* \end{pmatrix}.$$

Из условия унитарности для $\mathcal{U}$ следует, что $\mathcal{W}, U_\nu$ и U_N — унитарные матрицы, вследствие чего

$$\mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & M_D \\ M_D^T & M_M \end{pmatrix} \mathcal{W}^* = \begin{pmatrix} U_\nu \hat{m} U_\nu^T & 0 \\ 0^T & U_N^* \hat{M} U_N^\dagger \end{pmatrix}.$$

Следуя [15], выберем $\mathcal{U}$ в виде экспоненты от некоторой антиэрмитовой (в силу унитарности $\mathcal{U}$) матрицы

$$\mathcal{W} = exp \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ -\theta^\dagger & 0 \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\theta\theta^\dagger & \theta \\ -\theta^\dagger & 1 - \frac{1}{2}\theta^\dagger\theta \end{pmatrix} + O(\theta^3), \quad (2)$$

где θ — комплексная матрица 3×3. Будем предполагать, что собственные значения θ малы. Матрица U_ν определена в секторе активных нейтрино, $U_\nu^* \hat{m} U_\nu^\dagger \equiv m_\nu$, а в секторе заряженных лептонов определен базис с каноническим упорядочением и аналогичная матрица $U_l = I$ (единичная) [1)]. В данной параметризации связь между калибровочным $(\nu_{\alpha_L},\ \nu_{I_R}^c)$ и массовым $(\nu_i,\ N_I)$ базисом $(\alpha = e, \mu, \tau,\ i, I = 1, 2, 3)$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} \nu_L \\ \nu_R^c \end{pmatrix} = P_L \mathcal{U} \begin{pmatrix} \nu \\ N \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где P_L — левокиральный проектор. Из выражений (2) и (3) следует связь U_ν с неунитарной матрицей PMNS $U_{\text{PMNS}} = \left(1 + \eta + O(\theta^4)\right) U_\nu$. Параметр $\eta = -\frac{1}{2}\theta\theta^\dagger$ характеризует отклонение PMNS матрицы от унитатрности. Заряженные и нейтральные токи активных нейтрино и HNL имеют вид

[1)] В случае неканонического упорядочения заряженных лептонов эта матрица должна быть взята как матрица перестановки $U_l = P_{3\times3}$, как, например, в работе [17].

$$\mathcal{L}^{\nu}_{CC} = -\frac{g}{\sqrt{2}}\bar{l}_L\gamma_\mu U_{\rm PMNS}\,\nu_{i_L}W^\mu + \text{H.}c., \tag{4a}$$

$$\mathcal{L}^{\nu}_{NC} = -\frac{g}{2c_W}\bar{\nu}_{i_L}\gamma_\mu U^\dagger_{\rm PMNS}U_{\rm PMNS}\nu_{j_L}Z^\mu + \text{H.}c., \tag{4b}$$

$$\mathcal{L}^{N}_{CC} = -\frac{g}{\sqrt{2}}\bar{l}\gamma_\mu\theta U^*_N N_{k_L}W^\mu + \text{H.}c., \tag{4c}$$

$$\mathcal{L}^{N}_{NC} = -\frac{g}{2c_W}\bar{N}_{i_L}\gamma_\mu U^T_N\theta^\dagger\theta U^*_N N_{j_L}Z^\mu + \tag{4d}$$
$$+\left(-\frac{g}{2c_W}\bar{\nu}_{i_L}\gamma_\mu U^\dagger_{\rm PMNS}\theta U^*_N N_{j_L}Z^\mu + \text{H.}c.,\right),$$

где $\nu_{i_L} \equiv P_L\nu_i$ и $N_{k_L} \equiv P_L N_k$, ν_i — массовые состояния активных нейтрино, N_k — массовые состояния HNL, W и Z — поля векторных бозонов СМ. Матричные индексы у матрицы смешивания мы явно не выписываем. Таким образом, смешивание HNL и левых активных нейтрино характеризуется матрицей $\Theta \equiv \theta U^*_N$. В дальнейшем предполагается, что N_i имеют достаточно большие массы, так что собственные значения M_M больше, чем M_D. Используя матричное разложение $\mathcal{U}$ до членов второго порядка по θ, можно явно записать набор уравнений для диагонализации массовой матрицы:

$$\begin{pmatrix} 1-\frac{1}{2}\theta\theta^\dagger & -\theta \\ \theta^\dagger & 1-\frac{1}{2}\theta^\dagger\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & M_D \\ M^T_D & M_M \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1-\frac{1}{2}\theta^*\theta^T & \theta^* \\ -\theta^T & 1-\frac{1}{2}\theta^T\theta^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_\nu\hat{m}U^T_\nu & 0 \\ 0^T & U^*_N\hat{M}U^\dagger_N \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$M_D - \theta M_M + O(\theta^2) \simeq 0, \tag{6a}$$

$$-M_D\theta^T - \theta M^T_D + \theta M_M\theta^T + O(\theta^3) \simeq U_\nu\hat{m}U^T_\nu \equiv m_\nu, \tag{6b}$$

$$M_M + \theta^\dagger M_D + M^T_D\theta^* + O(\theta^2) \simeq U^*_N\hat{M}U^\dagger_N \equiv M_N, \tag{6c}$$

откуда следует

$$\theta \simeq M_D M^{-1}_M, \tag{7}$$

$$m_\nu = -\theta M_M\theta^T, \tag{8}$$

$$M_N \simeq M_M, \tag{9}$$

что приводит к известной формуле

$$m_\nu = -M_D\,M^{-1}_M\,M^T_D. \tag{10}$$

Уравнения (8) и (9) могут быть использованы для получения ограничений на элементы матрицы $\Theta = \theta U^*_N$, если использовать экспериментальные ограничения на массы активных нейтрино:

$$\sum_k |\Theta_{l'k}M_k\Theta^T_{kl}| \le (m_\nu)_{l'l}, \quad l', l = e, \mu, \tau, \tag{11}$$

Переписывая (10) с учетом (9), получаем

$$U^*_N\hat{M}U^\dagger_N \simeq M_M = -M^T_D m^{-1}_\nu M_D \simeq$$
$$\simeq -M^T_D U^*_\nu\hat{m}^{-1}U^\dagger_\nu M_D. \tag{12}$$

Отсюда можно получить условие ортогональности

$$I = A^T A = [-i\sqrt{\hat{m}^{-1}}U^\dagger_\nu M_D U^*_N\sqrt{\hat{M}^{-1}}]^T \times$$
$$\times[-i\sqrt{\hat{m}^{-1}}U^\dagger_\nu M_D U^*_N\sqrt{\hat{M}^{-1}}], \tag{13}$$

в котором A обозначает произвольную ортогональную матрицу ($A \in O(3)$), которую можно представить как $A = P\Omega$, где $P = \text{diag}(\pm1, \pm1, \pm1)$ — матрица отражений, $\Omega \in SO(3)$ — матрица поворота.

Для параметризации матрицы Ω для 3 поколений HNL можно использовать 3 угла Эйлера, вообще говоря, комплексных. Для компонент матрицы смешивания Θ далее выписана форма (17), откуда видно, что смешивание для HNL I-го поколения определяется I-ым столбцом матрицы Ω. Поскольку любая матрица трехмерных вращений может быть представлена в виде произведения трех матриц последовательных вращений, выберем такую параметризацию, которая имеет наиболее простой вид для 1-го столбца, так как далее мы считаем HNL первого поколения (I=1) кандидатом на роль темной материи

$$\Omega = \mathbf{X}_1\mathbf{Z}_2\mathbf{X}_3 = \tag{14}$$
$$= \begin{pmatrix} c_2 & -c_3 s_2 & s_2 c_3 \\ c_1 s_2 & c_1 c_2 c_3 - s_1 s_3 & -c_3 s_1 - c_1 c_2 s_3 \\ s_1 s_2 & c_1 s_3 + c_2 c_3 s_1 & c_1 c_3 - c_2 s_1 s_3 \end{pmatrix}.$$

Здесь $\mathbf{X}_1$ — матрица вращения вокруг оси X на угол ω_1, аналогичным образом определяются и оставшиеся две матрицы вращения $\mathbf{Z}_2$ и $\mathbf{X}_3$, $c_j = \cos\omega_j$ и $s_j = \sin\omega_j$, а углы Эйлера, вообще говоря, комплексные $\omega_j = \alpha_j + i\beta_j$, $j = 1, 2, 3$. В дальнейшем будем считать, что $0 \le \text{Re}\,\omega < \pi$, а вся неопределенность знаков в матрице A связана с выбором матрицы отражений P. Тогда дираковская массовая матрица имеет вид

$$M_D = iU_\nu\sqrt{\hat{m}}P\Omega\sqrt{\hat{M}}U^\dagger_N. \tag{15}$$

При этом наблюдаемые величины, а именно, время жизни и доля энергии, рассмотренные далее в разд. 3, содержат компоненты матрицы $\Theta = \theta U_N^*$ и не зависят от выбора U_N, так как

$$\Theta = M_D M_M^{-1} U_N^* \simeq M_D M_N^{-1} U_N^* = \\ = iU_\nu \sqrt{\hat{m}}\Omega\sqrt{\hat{M}}U_N^\dagger \cdot U_N \hat{M}^{-1} U_N^T \cdot U_N^* = \\ = iU_\nu\sqrt{\hat{m}}\Omega\sqrt{\hat{M}^{-1}}. \quad (16)$$

Компоненты матрицы смешивания Θ имеют вид

$$\Theta_{\alpha I} = i\frac{\sum_k \sqrt{m_k}\,(U_\nu)_{\alpha k}\Omega_{kI}}{\sqrt{M_I}}, \quad (17)$$

где $\alpha = e, \mu, \tau$, $I = 1, 2, 3$ — номер поколения HNL.

Предполагая, что все углы матрицы Ω вещественны, из (17) получаем оценку сверху для физических наблюдаемых. Если все компоненты U_{PMNS} и Ω-матриц ограничены сверху, а именно $|U_{\alpha k}| \le 1$, $|\Omega_{kI}| \le 1$, тогда с учетом

$$\sqrt{m_i} < \sqrt{\sum_{k=1}^{3} m_k}$$

получаем

$$\sum_\alpha |\Theta_{\alpha I}|^2\Big|_{\Omega\text{-real}} < \sum_\alpha \left(\frac{\sum_k \sqrt{\Sigma_i m_i}}{\sqrt{M_I}}\right)^2 = \\ = 27\frac{\sum_i m_i}{M_I} < 27\cdot 10^{-3}\,\left(\frac{\overline{\Sigma m}}{1\text{ эВ}}\right)\left(\frac{M_I}{1\text{ кэВ}}\right)^{-1}, \quad (18)$$

Отметим, что элементы матрицы Ω_{kI} вместе с матрицей PMNS представляются «весами» вкладов от масс каждого из трех активных нейтрино в компоненты матрицы смешивания стерильных нейтрино, см. (17). Для стандартной параметризации матрицы PMNS будем использовать следующий набор, соответствующий средним значениям параметров матрицы смешивания [2] (η_1, η_2 — майорановские фазы):

Параметры	Значение
ϑ_{13}	48°
ϑ_{23}	8°
ϑ_{12}	34°
δ_{CP}	238°
η_1	0
η_2	0

В ряде случаев можно установить взаимосвязь между параметризующей матрицей Ω и упорядочением HNL-мультиплета. $N_I' = VN_I$. Тождественное преобразование выражения (15) дает

$$M_D = iU_\nu\sqrt{\hat{m}}\Omega\underbrace{U_N^\dagger U_N}_{=I}\sqrt{\hat{M}}U_N^\dagger = \\ = iU_\nu\sqrt{\hat{m}}\widetilde{\Omega}\widetilde{\sqrt{M}}, \quad (19)$$

где введены обозначения

$$\widetilde{\sqrt{M}} = U_N\sqrt{\hat{M}}U_N^\dagger, \quad \widetilde{\Omega} = \Omega U_N^\dagger.$$

В тех случаях, когда $\widetilde{\sqrt{M}}$ тоже является диагональной и не тождественной $\sqrt{\hat{M}}$, видно, что одной и той же матрице M_D соответствует различный набор упорядочений масс HNL и Ω матриц.

Обсуждение неоднозначности выбора матрицы Ω в случае суперсимметричных моделей можно найти в [16]. В СМ с безмассовым нейтрино матрица Юкавы в секторе заряженных лептонов и матрица калибровочных взаимодействий бозонов с фермионами диагональны, поэтому лептонный аромат сохраняется. Ненулевые массы нейтрино и смешивание нейтрино приводят к нарушению лептонного аромата (LFV) по аналогии со смешиванием CKM для кварков. Полностью ненаблюдаемый уровень LFV в СМ с расширенным лептонным сектором из-за малых масс нейтрино [18] может быть усилен членами мягкого нарушения суперсимметрии, обеспечивающими новые вклады в процессы LFV, такие как $\mu \to e\gamma$. Суперсимметричный механизм see-saw стабилен по отношению к радиационным поправкам из-за присутствия правых нейтрино, которые подавляют большие поправки HNL к массе бозона Хиггса, однако остается большая степень свободы для определения матриц Юкавы в секторах нейтрино и заряженных лептонов, которые позволили бы однозначно вычислить каналы распадов, идущих с нарушением лептонного аромата. Нет никаких оснований предполагать, что матрицы Юкавы для заряженных лептонов и M_D для сектора нейтрино одновременно диагональны. В базисе, где матрица Юкавы заряженных лептонов и калибровочные взаимодействия бозонов являются диагональными, можно использовать (15), зависящее от экспериментально измеряемых параметров для активных нейтрино, трех масс тяжелых нейтральных лептонов и трех параметров, определяющих Ω, вообще говоря, комплексных.

Наиболее простой выбор $\Omega = I$, не вносящий дополнительные параметры, подразумевает, что мы можем работать в базисе, где M_D и M_N одновре-

менно являются диагональными [19]. Можно заметить, глядя на (1) и (15), что такой базис может быть построен путем поворота левых заряженных лептонов матрицей U_{PMNS}, тогда LFV происходит в заряженном секторе. Альтернативный выбор Ω-матрицы, частный случай которого описан выше, использует форму $M_D = X\hat{N}$, где X — унитарная матрица, а $\hat{N}$ — диагональная [16]. В этом случае из (10) следует, что

$$\hat{M}_N = -\hat{N}X^T m_\nu^{-1} X\hat{N}.$$

Это позволяет одновременно диагонализировать секторы активных нейтрино и заряженных лептонов, когда базис N_i правых (стерильных) нейтрино повернут X-матрицей. Массовая матрица M_N стерильных нейтрино в этом случае недиагональна. Такой выбор Ω может описывать сценарии, в которых LFV происходит в секторе HNL. Упомянутые случаи не исчерпывают все возможные варианты выбора Ω.

Для контроля численной стабильности процедуры диагонализации удобно переписать модель в формате LanHEP [20]. Для заданных физических масс пакет LanHEP вычисляет массовые параметры в лагранжиана аналитически, а матрица масс диагонализуется ортогональным преобразованием с помощью численных методов [2)]. Например, для масс HNL $M_1 = 10$ кэВ, $M_2 = 400$ МэВ, $M_3 = 420$ МэВ с большим расщеплением, соответствующим контурам исключения для экспериментов на коллайдерах [21] недиагональные элементы матрицы масс меньше 10^{-6} МэВ, в то же время заданные массы и вычисленные численно совпадают с высокой точностью.

3. ОБЩИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ ДЛЯ ЛЕГКОГО HNL

В дальнейшем предполагаем, что тяжелые нейтральные лептоны $N_{1,2,3}$ упорядочены по массе, а N_1 — самый легкий из них. На масштабе M_1 порядка кэВ основной канал распада HNL–распад в три нейтрино $N_1 \to \nu\nu\nu$, ширина распада, соответствующая эффективной четырехфермионной амплитуде, определяемой (4), может быть записана как

$$\Gamma\Big(N_1 \to \sum_{\alpha,\beta} \nu_\alpha, \nu_\beta, \overline{\nu_\beta}\Big) = \frac{G_F^2 M_1^5}{192\pi^3} \sum_\alpha |\Theta_{\alpha 1}|^2, \quad (20)$$

где $\alpha, \beta = e, \mu, \tau$. С учетом того, что HNL — это фермион Майорана, нужно учесть вклад от сопряженной моды распада

$$\Gamma_{N_1\to\nu\nu\nu} = \Gamma\Big(N_1 \to \sum_{\alpha,\beta} \nu_\alpha, \nu_\beta, \overline{\nu_\beta}\Big) + \\ + \Gamma\Big(N_1 \to \sum_{\alpha,\beta} \overline{\nu_\alpha}, \overline{\nu_\beta}, \nu_\beta\Big). \quad (21)$$

Везде далее учитываем оценку 0.4 кэВ снизу на массу HNL, так как распределение HNL как фермионной темной материи в фазовом пространстве галактики ограничено распределением для вырожденного ферми-газа (ограничение Тремэйна–Ганна, [22]).

Очевидно, что стерильное нейтрино — кандидат на роль темной материи — не распадается на космологических временных масштабах порядка возраста Вселенной, что означает $\tau_{N_1} \geq 4 \cdot 10^{17}$ с. Ширина неосновного радиационного однопетлевого распада $N \to \gamma, \nu$, который может быть отличительным сигналом с энергией фотона $E_\gamma = M_1/2$, имеет вид

$$\Gamma\Big(N_1 \to \gamma, \nu\Big) = \frac{9\alpha_{EM} G_F^2 M_1^5}{256\pi^4} \sum_\alpha |\Theta_{\alpha 1}|^2. \quad (22)$$

Хотя

$$\Gamma_{N\to\nu\nu\nu}/\Gamma_{N\to\gamma\nu} \equiv k_{rad} = \frac{8\pi}{27\alpha_{EM}} \approx 128$$

и радиационный распад не вносит существенных поправок к времени жизни, при изменении его в $k_{rad}/(1 + k_{rad}) \sim 1$ раз ограничение на время жизни может усиливаться на 8 порядков за счет специфики данных гамма-астрономических наблюдений, см. [23–26]. В данной работе мы будем использовать оценку $\tau_{N_1} > 10^{25}$ с. Введем обозначение

$$(m_D)_{\alpha I} = \left| \sum_k \sqrt{m_k}\, U_{\alpha k} \Omega_{kI} \right|^2. \quad (23)$$

Тогда время жизни в секундах приобретает вид

$$\tau_{N_1} = 3 \cdot 10^{22} \left(\frac{M_1}{1\text{ кэВ}}\right)^{-4} \Big(\sum_\alpha \frac{(m_D)_{\alpha 1}}{1\text{ эВ}}\Big)^{-1} \text{ с}, \quad (24)$$

а гамма-астрономическое ограничение для величины (23), просуммированной по флэйворам дает

$$\overline{(m_D)}_{\text{X-ray}} \equiv 3 \cdot 10^{-3} \left(\frac{M_1}{1\text{ кэВ}}\right)^{-4} \text{ эВ}, \quad (25)$$

где взята универсальная оценка $\tau_X = 10^{25}$ с. Эта оценка изображена сплошной синей линией на рис. 1.

[2)] С использованием процедуры, содержащейся в CERNlib 202.

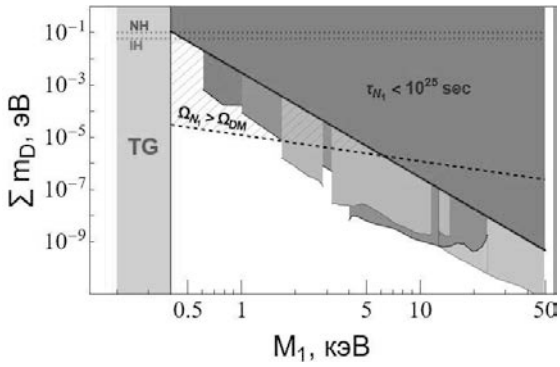


Рис. 1. Ограничения для параметра (23), просуммированного по флэйворам, в зависимости от массы HNL–частицы темной материи. Синяя область показывает универсальное ограничение из гамма астрономических наблюдений $\tau_N > 10^{25}$ с. Серые области показывают уточненные контуры из данных HEAO-1, XMM и Chandra и соответствуют работе [24]. Оранжевая область исключена ограничением Тремэйна–Ганна (TG). Красная и темно-красная горизонтальные пунктирные линии соответствуют значениям $\sum m_i$ из данных по нейтринным осцилляциям в случае прямой (NH) и обратной (IH) иерархии масс активных нейтрино. Пунктирная линия обозначает границу области $\Omega_{N_1} h^2 = 0.12$, в которой плотность темной материи реализуется механизмом Додельсона–Уидроу [27]. Заштрихованная исключенная область соответствует плотности стерильных нейтрино больше наблюдаемого значения для темной материи

Космологическое ограничение в секторе HNL для плотности темной материи во Вселенной появляется в рамках картины, где смешивание активных и стерильных нейтрино Θ достаточно мало, а стерильное нейтрино никогда не находилось в тепловом равновесии. Доминирующий механизм образования стерильных нейтрино (механизм Додельсона-Видроу [27], также [28]) возникает из-за осцилляций активных и стерильных нейтрино. Доля энергии во Вселенной в случае нерезонансного рождения [29,30] задается формулой

$$\Omega_N h^2 \simeq 0.1 \sum_{I=1}^{3} \sum_{\alpha=e,\nu,\tau} \left(\frac{|\Theta_{\alpha I}|^2}{10^{-8}} \right) \left(\frac{M_I}{1\ \text{кэВ}} \right)^2. \quad (26)$$

В частности, компонента плотности частиц N_1 с учетом (23) приобретает вид

$$\Omega_{N_1} h^2 \simeq \left(\frac{\sum_\alpha (m_D)_{\alpha 1}}{10^{-4}\ \text{эВ}} \right) \left(\frac{M_1}{1\,\text{кэВ}} \right). \quad (27)$$

Отсюда, в частности, можно получить еще одну оценку сверху на величину (23), просуммированную по флэйворам

$$\overline{(m_D)}_{\text{DM}} = 10^{-5} \left(\frac{M_1}{1\ \text{кэВ}} \right)^{-1}\ \text{эВ}. \quad (28)$$

На рис. 1 показана заштрихованная область, где $\Omega_N > \Omega_{DM}$. Объединяя полученные ограничения (25) и (28) получаем

$$\sum_\alpha (m_D)_{\alpha 1} < \overline{m_D} \equiv \min \left(\overline{(m_D)}_{\text{DM}}, \overline{(m_D)}_{\text{X-ray}} \right). \quad (29)$$

4. ОГРАНИЧЕНИЯ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ФОРМ СМЕШИВАНИЯ

4.1. Сценарий 1: тонкая настройка

В данном разделе рассматриваются матрицы Ω следующего блочного вида для прямой/обратной иерархии масс активных нейтрино

$$\Omega_{\text{NH}}^{(FT)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & & \Omega_{2\times 2} \end{pmatrix}, \quad (30)$$

$$\Omega_{\text{IH}}^{(FT)} = \begin{pmatrix} 0 & & \\ 0 & & \Omega_{2\times 2} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (31)$$

где $\Omega_{2\times 2}$ — некоторая ортогональная 2×2 матрица. В рассматриваемом сценарии смешивания ограничение накладывается непосредственно на массу самого легкого активного нейтрино m_{light} (m_1 для NH, m_3 для IH), поэтому в данной форме матрицы смешивания присутствует «тонкая настройка», выделяющая ненулевую массу самого легкого активного нейтрино, в отличии от сценариев, рассмотренных далее, где малое конечное численное значение этой массы не так существенно,

$$\sum_\alpha (m_D)_{\alpha 1} = \sum_{\alpha,k} |\sqrt{m_k} U_{\alpha 1} \delta_{k1(k3)}|^2 = m_{1(3)}. \quad (32)$$

Здесь мы использовали свойство унитарности матрицы PMNS, допуская, что $U_\nu \simeq U_{\text{PMNS}}$ с точностью до $\mathcal{O}(\theta^2)$. Данный случай включает в себя оценку, полученную в работе [12], где не используется формализм параметризующей матрицы Ω, но рассматривается модель с фиксированным базисом HNL ($U_N = I$). Детали приводятся в Приложении. Отметим, что малый масштаб массы m_1 (m_3) в случае нормальной (обратной) массовой иерархии не фиксируется данными нейтринных осцилляций.

4.2. Сценарий 2: Ω — вещественная матрица поворота

Будем полагать, что $\Omega \in SO(3,\mathbb{R})$ и параметризуется тремя вещественными углами Эйлера α_j, см. (14). Существенное отличие от сценария 1 возникает при ненулевых элементах Ω_{21} и Ω_{31}, так как в смешивании появляются вклады более массивных активных нейтрино. В этом случае анализируется наибольшее возможное отклонение матрицы от сценария 1, поэтому будем считать самое легкое активное нейтрино безмассовым. В качестве оценки для масс оставшихся активных нейтрино используем данные для разностей квадратов масс из экспериментов по нейтринным осцилляциям [2]:

	NH	IH
m_1	0	$\sqrt{\Delta m^2_{31}} \simeq 0.049$ эВ
m_2	$\sqrt{\lvert\Delta m^2_{21}\rvert} \simeq 0.009$ эВ	$\sqrt{\Delta m^2_{32}} \simeq 0.050$ эВ
m_3	$\sqrt{\Delta m^2_{31}} \simeq 0.049$ эВ	0

При этом

$$\sum_\alpha (m_D)^{\mathrm{NH}}_{\alpha 1} = |\Omega_{21}|^2|U_{\alpha 1}|^2 m_2 + |\Omega_{31}|^2|U_{\alpha 3}|^2 m_3 + 2\,\mathrm{Re}\{\Omega^*_{21}\Omega_{31}U^*_{\alpha 2}U_{\alpha 3}\}\sqrt{m_2 m_3}, \quad (33)$$

$$\sum_\alpha (m_D)^{\mathrm{IH}}_{\alpha 1} = |\Omega_{11}|^2|U_{\alpha 1}|^2 m_1 + |\Omega_{21}|^2|U_{\alpha 2}|^2 m_2 + 2\,\mathrm{Re}\{\Omega^*_{11}\Omega_{21}U^*_{\alpha 1}U_{\alpha 2}\}\sqrt{m_1 m_2}, \quad (34)$$

где элементы параметризующей матрицы Ω выбраны согласно параметризации (14)

$$\begin{aligned} \Omega_{11} &= \cos\alpha_2, \\ \Omega_{21} &= \cos\alpha_1 \sin\alpha_2 \\ \Omega_{31} &= \sin\alpha_1 \sin\alpha_2. \end{aligned} \quad (35)$$

Так как ограничение $\overline{m_D}$ не превосходит 10^{-5} эВ, то ненулевые вклады масс активных нейтрино $\sim 10^{-2}$ эВ должны быть подавлены малыми значениями соответствующих компонент параметризующей матрицы Ω. Для прямой иерархии масс активных нейтрино подавление реализуется при $\alpha_2 \simeq 0$, а для обратной иерархии при значения обоих углов $\alpha_1 \simeq \alpha_2 \simeq \pi/2$. Значения величины $\sum_\alpha (m_D)_{\alpha 1}$ в зависимости от вещественных параметров α_1, α_2 изображены в виде поверхности на рис. 2.

Контуры для малых отклонений углов $\alpha_{1,2}$ от вышеприведенных значений: для прямой иерархии $\alpha_2 = 0 + \delta_2$, для обратной иерархии $\alpha_1 = \pi/2 + \delta_1$ и $\alpha_2 = \pi/2 + \delta_2$ изображены на рис. 3.

Отметим, что данные ограничения затрагивают только два угла Эйлера и, вообще говоря, справедливы и для случая, когда третий угол ω_3 — комплексный параметр.

4.3. Сценарий 3: Ω — комплексная специальная ортогональная матрица

Для матриц $\Omega \in SO(3,\mathbb{C})$ справедлив вид параметризации (14), где аналогами углов Эйлера являются комплекснозначные параметры $\omega_j = \alpha_j + i\beta_j$. Тогда фактор смешивания в ширине распада N_1 будет функцией пяти вещественных переменных: 4 вещественных параметров для двух комплексных углов Эйлера ω_1 и ω_2 и массы M_1, что затрудняет полный анализ допустимых значений всех параметров.

Для обеспечения малости величины $\sum_\alpha (m_D)_{\alpha 1}$ вклады двух ненулевых (так как $m_{\mathrm{light}} = 0$ в рассматриваемом сценарии) масс нейтрино должны умножаться на малые компоненты матрицы Ω, что обеспечивается только факторами $\mathrm{sh}\,\beta_i$, где $i = 1$ или 2. ($\mathrm{ch}\,\beta_i > 1$ по определению). Выделим этот случай благодаря выбору вещественных частей углов Эйлера, а именно $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ для прямой иерархии, $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$ для обратной иерархии. Тогда вид рассматриваемых матриц сводится к

$$\Omega^{(III)}_{\mathrm{NH}} = \begin{pmatrix} C_2 & -iS_2 & 0 \\ iC_1S_2 & C_1C_2 & -iS_1 \\ -S_1S_2 & iS_1C_2 & C_1 \end{pmatrix} \Omega^{(FT)}_{\mathrm{NH}}, \quad (36)$$

$$\Omega^{(III)}_{\mathrm{IH}} = \begin{pmatrix} -iS_2 & -C_2 & 0 \\ -iS_1C_2 & -S_1S_2 & -C_1 \\ C_1C_2 & -iC_1S_2 & -iS_1 \end{pmatrix} \Omega^{(FT)}_{\mathrm{IH}}, \quad (37)$$

где $C_i = \mathrm{ch}\,\beta_i$, $S_i = \mathrm{sh}\,\beta_i$, $i = 1, 2$. При этом будем считать, что β_1 и β_2 отличны от нуля и положительны. При переходе к вещественному пределу ($\beta_{1,2} \to 0$) сценарий 3 переходит в сценарий 1 «тонкой настройки». Из ограничения (29) получаем контуры в пространстве параметров (β_1, β_2), изображенные на рис. 4.

4.4. Ограничения, полученные в экспериментах

В заключение настоящего раздела упомянем результаты экспериментов по поиску HNL второго и

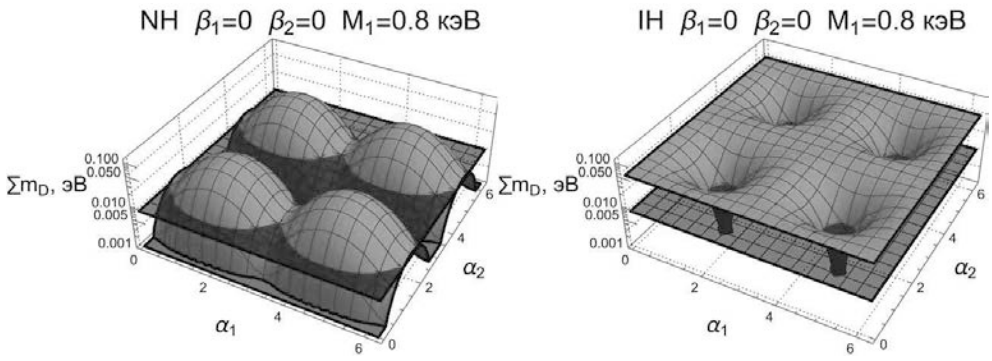


Рис. 2. Поверхности, иллюстрирующие масштаб величины $\sum_\alpha (m_D)_{\alpha 1}$ в зависимости от углов α_1 и α_2, параметризующих вещественную ортогональную матрицу Ω для случаев прямой иерархии масс активных нейтрино (левая панель) и обратной (правая панель). Синяя плоскость — верхняя граница $\overline{(m_D)}_{\mathrm{X-ray}}$ (см. (25)), полученная из ограничений на время жизни $\tau_{N_1} > 10^{25}$ с [24] и взятая при массе стерильного нейтрино темной материи $M_1 = 0.8$ кэВ

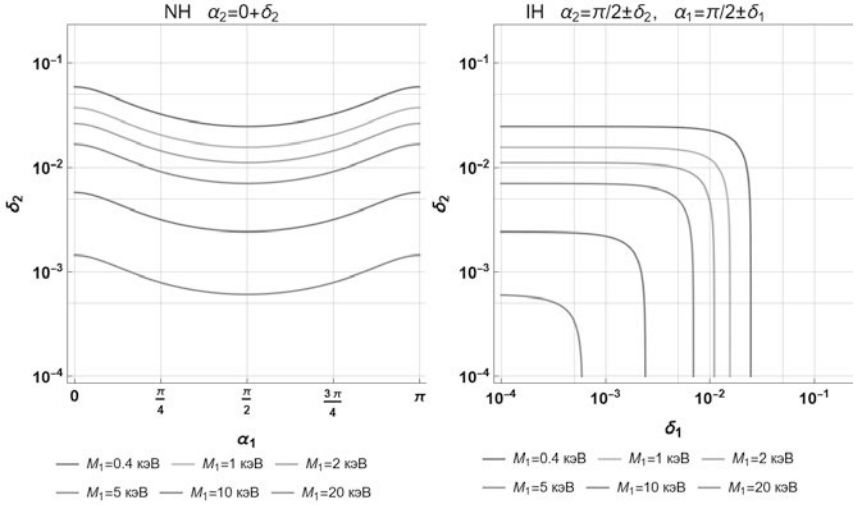


Рис. 3. Контуры исключения для углов Эйлера α_1 и α_2 вещественной ортогональной матрицы Ω (сценарий 2) при различных массах M_1 стерильного нейтрино темной материи для случаев прямой (левая панель) и обратной (правая панель) иерархии масс активных нейтрино, полученные на основе комбинированных ограничений на HNL темной материи

третьего поколения на выведенных пучках и коллайдерах, современные результаты которых содержатся в обзоре [32]. Основные результаты оформлены в виде контуров исключения на плоскости $|U_{lN}|^2$-m_N и имеют вид прямоугольников с разрешенными и запрещенными областями. Наиболее сильные ограничения получены для экспериментов на выведенных пучках с реконструкцией потерянной энергии (TRIUMPH [33], PIENU [34] (π decay), NA62 [35], E949 [36], KEK [37] (K decay)) и экспериментов по поиску смещенных вершин распада (DELPHI [38], PS-191 [39], CHARM [40], NuT эВ [41]) в области масс HNL меньше нескольких ГэВ, когда верхняя допустимая граница для квадрата смешивания достигает величин порядка 10^{-9} при m_N порядка 0.1 ГэВ (эксперименты PIENU и NA62). Ограничения при массах HNL порядка 10–100 ГэВ и более, полученные на коллайдерах LEP2 и LHC, существенно хуже с верхней границей порядка 10^{-2} для квадрата смешивания. Комбинированные ограничения демонстрируют довольно обширные разрешенные области, начиная со значений масс M_N порядка 10 МэВ. В литературе упоминается сильная зависимость ограничений от теоретико-полевой модели, в рамках которой они были получены, вследствие чего для комбинации результатов экспериментов используется так называемый «модельно-независимый подход» (см. [8], соответствующая модель известна как «феноменологическая type I seesaw model»), в рамках которой параметр сме-

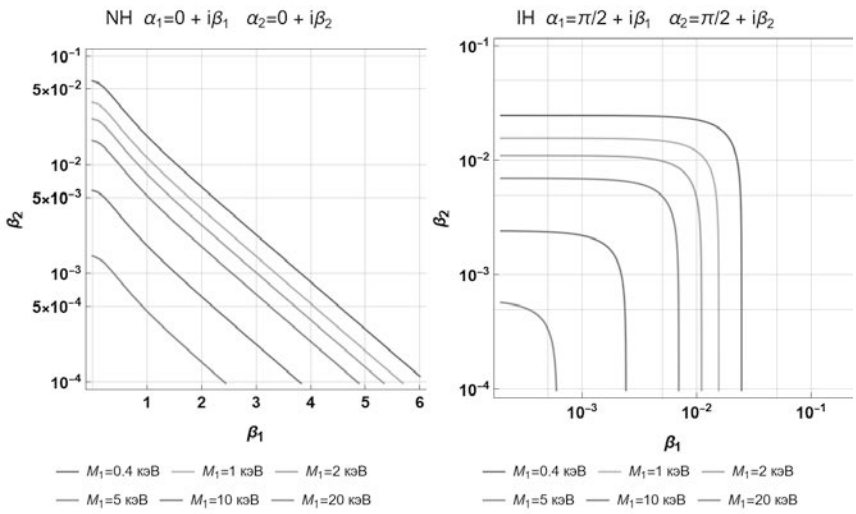


Рис. 4. Контуры исключения для мнимых частей β_1 и β_2 углов Эйлера ω_1 и ω_2 в параметризации (14) комплексной ортогональной матрицы Ω (сценарий 3) при зафиксированных вещественных частях α_1 и α_2 для случаев прямой (левая панель) и обратной (правая панель) иерархии масс активных нейтрино, полученные из комбинированных ограничений на HNL темной материи

шивания и масса HNL независимые переменные, а число поколений HNL n =1 (т. е. все прочие стерильные нейтрино «отщеплены» и не влияют на реконструкции [3)]). Имеются исключения из модельно-независимого анализа для случая двух поколений HNL и выделенного выше сценария 3, рассматриваемого на безальтернативной основе [42]. Результаты экспериментальных коллабораций, взятые в совокупности, сложно сопоставить однозначному выбору какого-либо массового базиса в лептонном секторе, что затрудняет их количественную интерпретацию в рамках теоретико-полевой схемы с тремя поколениями стерильных нейтрино. Сильное ограничение

$$\left|\sum_i U^2_{eN_i}/M(N_i)\right| \leq 1.8\cdot 10^{-8}\,\text{ГэВ}^{-1},$$

полученное из экспериментов по двойному безнейтринному бета-распаду [44], неоднозначно по отношению к выбору фаз матрицы PMNS [45]. Ограничения для теоретико-полевой модели с шестью майорановскими нейтрино были рассмотрены авторами в работе [46].

Таким образом, полученные на ускорителях ограничения относятся в основном к $\Omega_{2\times 2}$ (см. (30)) и требуют «перевода» с языка «модельно-независимого подхода» на язык определенного сценария смешивания трех поколений.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренный анализ трех сценариев смешивания в лептонном секторе СМ, расширенном тремя поколениями стерильных майорановских нейтрино, показывает допустимые области значений параметров смешивания, непротиворечивым образом реализующих механизм seesaw типа I в соответствии с имеющимися экспериментальными данными по осцилляциям активных нейтрино. Существует определенная свобода выбора параметров смешивания, вообще говоря, комплексных, которые заключены в ортогональной матрице Ω, возникающей при диагонализации массового члена лагранжиана, выбор вида которой фиксирует в рамках того или иного сценария неоднозначную связь между дираковской матрицей, матрицей смешивания PMNS, массовой матрицей сектора HNL и величинами масс активных и стерильных нейтрино.

Если самый легкий HNL N_1 является темной материей, то экспериментальные следствия осцилляций для разности квадратов масс активных нейтрино Δm^2_{ij} накладывают сильные ограничения на свободные параметры смешивания. Определенный выбор параметризующей матрицы Ω, который в данной работе назван «тонкой настрой-

[3)] Давно известно, см., например, [43], что для одного поколения стерильных нейтрино $U = \sqrt{m_\nu M_N}/(m_\nu + M_N)$, вследствие чего отображение m_ν, M_N на плоскость масса HNL-$|U|^2$ при малых m_ν является треугольником.

кой» (сценарий 1) позволяет «отвязать» ограничения, связанные с экспериментально полученными масштабами Δm^2_{ij} от смешивания стерильного нейтрино темной материи. В таком сценарии малость фактора смешивания зависит только от малости массы наиболее легкого активного нейтрино $m_{\rm light}$ и массы HNL темной материи. Имеющиеся космологические и гамма-астрономические ограничения дают в рамках такого сценария верхнюю границу для массы вида

$$\left(\frac{m_{\rm light}}{10^{-3}\,\text{эВ}}\right) < \\ < \min\left\{10^{-2}\left(\frac{M_1}{1\,\text{кэВ}}\right)^{-1}; \left(\frac{M_1}{1\,\text{кэВ}}\right)^{-4}\right\}. \quad (38)$$

В качестве альтернативных сценариев 2 и 3 рассмотрены отклонения матрицы Ω от вида «тонкой настройки» $\Omega^{(FT)}$. Удобно анализировать отклонения, используя факторизованную форму

$$\Omega = \Omega_\delta\ \Omega^{(FT)}_{\rm NH}, \quad (39)$$

где Ω_δ — матрица малых поворотов, меняющая смешивание для стерильного нейтрино темной материи (т. е. углы ω_1 и ω_2 в параметризации (14)). Сценарию 1 соответствуют матрицы $\Omega_{\delta\ NH} = I$ для нормальной иерархии и

$$\Omega_{\delta\ IH} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (40)$$

для обратной иерархии. Если реализуется сценарий 2, то матрица Ω_δ имеет следующий вид:

$$\Omega_{\delta\ \rm NH} \simeq \begin{pmatrix} \lesssim 1 & -\delta & 0 \\ \delta\cos\alpha_1 & \sim\cos\alpha_1 & -\sin\alpha_1 \\ \delta\sin\alpha_1 & \sim\sin\alpha_1 & \cos\alpha_1 \end{pmatrix}, \quad (41)$$

$$\Omega_{\delta\ \rm IH} \simeq \begin{pmatrix} -\delta & \gtrsim -1 & 0 \\ -\delta & \delta^2 & \gtrsim -1 \\ \lesssim 1 & -\delta & -\delta \end{pmatrix}, \quad (42)$$

где $\delta < 0.1$ и сильно зависит от массы стерильного нейтрино темной материи (см. рис. 3), где $\delta \equiv \delta_2$ для NH, а для IH можно взять $\delta = \sqrt{\delta_1^2 + \delta_2^2}$. Если реализуется сценарий 3, то матрица $\Omega_{\delta\ \rm IH}$ для обратной иерархии имеет вид (42), где нужно заменить $\delta \to i\delta$. В случае нормальной иерархии эта матрица имеет вид

$$\Omega_{\delta\ \rm NH} \simeq \begin{pmatrix} \mathrm{ch}(\beta_1) & -i\,\mathrm{sh}(\beta_1) & 0 \\ i\,\mathrm{sh}(\beta_1) & \mathrm{ch}(\beta_1) & -i\delta \\ -\delta\,\mathrm{sh}(\beta_1) & i\delta\,\mathrm{ch}(\beta_1) & \gtrsim 1 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

см. контуры на рис. 4.

Рассмотренный анализ основан на разложении матрицы $\mathcal{W}$, см. (2), диагонализующей массовый член лагранжиана, до членов второго порядка по матрице смешивания θ для активных нейтрино и HNL. Естественный вопрос о вкладах членов высшего порядка по θ рассмотрен в работе [47], где показано, что полученные результаты устойчивы к «неминимальному приближению» в рамках механизма see-saw трех поколений. Устойчивость рассматриваемого случая по отношению к радиационным поправкам, по всей видимости, достаточно высока для модели νMSM со слабым расщеплением масс на масштабе кэВ, когда ренормгрупповые поправки не критичны по сравнению с моделями, обладающими выраженной иерархией масс тяжелых нейтральных лептонов. В этой связи в литературе подробно рассматривался суперсимметричный see-saw механизм, обеспечивающий стабильность по отношению к радиационным поправкам для выраженной иерархии масс, но приводящий к большим парциальным вероятностям для распадов с нарушением лептонного числа (LFV), таким как $\mu \to e\gamma$ [16, 19, 48–52]. Наблюдение LFV или его отсутствие приводит к трем сценариям смешивания в расширениях лептонного сектора: (1) существует базис состояний лептонов, где матрица Юкавы активных нейтрино M_D и матрица майорановских нейтрино M_N одновременно диагональны, матрица сектора заряженных лептонов недиагональна, он и отвечает за процессы LFV, (2) одновременно диагональны матрица Юкавы заряженных лептонов и активных нейтрино, LFV происходит за счет сектора стерильных нейтрино (3) активные нейтрино не имеют выраженной иерархии масс, подавление процесса $\mu \to e\gamma$ и аналогичных ему достигается за счет механизма, аналогичного механизму Глэшоу – Илиопулоса – Майани (GIM). Случай (1) соответствует Ω =1 и может приводить к существенным сигналам $\mu \to e\gamma$, сравнимым с имеющимися экспериментальными ограничениями.

Благодарности. М.Д. выражает благодарность М. Шапошникову за полезное обсуждение. Работа М.Д. выполнена за счет гранта Российского научного фонда, грант № 22-12-00152.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В этом приложении мы воспроизводим в деталях ограничение на число HNL темной материи и ограничение на массу самого легкого нейтрино согласно работе [12]. Здесь используется предположение $M_N = \hat{M}$ ($U_N = I$), но явный вид матрицы Ω не конкретизируется. Можно записать диагональную seesaw матрицу в виде следующей суммы

$$\hat{m} = S_1 + S_2 + S_3, \tag{44}$$

где S_I параметризуются как

$$(S_I)_{ij} = X_{Ii}X_{Ij} = \begin{pmatrix} X_{11}^2 & X_{11}X_{12} & X_{11}X_{13} \\ X_{12}X_{11} & X_{12}^2 & X_{12}X_{13} \\ X_{13}X_{11} & X_{13}X_{12} & X_{13}^2 \end{pmatrix},$$

$$X_{Ii} = \frac{(M_D U)_{Ii}}{\sqrt{M_I}}. \tag{45}$$

Непосредственно из построения видно, что $\det S_I = 0$. Тогда в терминах X-матрицы условие (26) запишется как

$$\sum_{I,\alpha} \frac{M_I}{M_1}|X_{I\alpha}|^2 = \frac{m_0^2}{M_1} \equiv m_\nu^{dm}, \tag{46}$$

где $m_0 \sim 0.1$ эВ. Тогда, если M_1 порядка кэВ, то параметр темной материи $m_\nu^{dm} = \mathcal{O}(10^{-5}$ эВ). Эта граница не зависит от явного вида смешивания, но зависит от масштаба массы M_1. В случае $\mathcal{N} = 3$ тяжелых нейтральных лептона, взятие следа от (44) приводит к следующему выражению:

$$m_1 + m_2 + m_3 = \sum_{I=1}^{\mathcal{N}}\sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}[X_{Ii}X_{Ii}] \leq$$
$$\leq \sum_{I=1}^{\mathcal{N}}\sum_{i=1}^{3} |X_{Ii}|^2 \leq \sum_{I=1}^{\mathcal{N}}\sum_{i=1}^{3} \frac{M_I}{M_1}|X_{I\alpha}|^2 = m_\nu^{dm},$$

где мы учли, что $M_1 < M_2, M_3$, и очевидно, что для любого комплексного x

$$\mathrm{Re}[x^2] \leq |x|^2.$$

Отсюда следует, что в случае $\mathcal{N} = 3$ HNL

$$m_1 + m_2 + m_3 \leq m_\nu^{dm} = \mathcal{O}(10^{-5}\ \text{эВ}), \tag{47}$$

что очевидно исключается данными о разности квадратов масс нейтрино из осцилляций. В случае когда только N_1 и N_2 являются частицами темной материи, имеем

$$m_1 + m_2 + m_3 \leq m_\nu^{dm} + \sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}[X_{3i}]. \tag{48}$$

Отсюда можно показать, что

$$\sum_{i=1}^{3} \mathrm{Re}[X_{3i}] > m_3.$$

Используя

$$\det(S_1 + S_2) = \det(\hat{m} - S_3) = 0,$$

мы можем записать покомпонентно:

$$\det \begin{pmatrix} m_1 - X_{31}^2 & -X_{31}X_{32} & -X_{31}X_{33} \\ -X_{31}X_{32} & m_2 - X_{32}^2 & -X_{32}X_{33} \\ -X_{31}X_{33} & -X_{32}X_{33} & m_3 - X_{33}^2 \end{pmatrix} =$$
$$= m_1m_2m_3 - m_1m_2X_{33}^2 - m_1m_3X_{32}^2 - m_2m_3X_{31}^2 = 0.$$

Взяв действительную часть от правой и левой части, получаем

$$1 = \frac{\mathrm{Re}[X_{33}^2]}{m_3} + \frac{\mathrm{Re}[X_{32}^2]}{m_2} + \frac{\mathrm{Re}[X_{31}^2]}{m_1} > \frac{\sum X_{3i}^2}{m_3} > 1.$$

Таким образом случай двух HNL темной материи также не удовлетворяет (26). Остается только случай, когда один HNL N_1 из трех является частицей темной материи. Из $\det(\hat{m} - S_1) = 0$ следует что

$$m_1 = X_{11}^2 + \frac{m_1}{m_2}X_{12}^2 + \frac{m_1}{m_3}X_{13}^2 < \sum_i X_{1i}^2,$$

$$m_1 < \sum_i \mathrm{Re}(X_{1i}^2) < \sum_i |X_{1i}|^2 <$$
$$< \sum_i \frac{M_I}{M_1}|X_{1i}|^2 = m_\nu^{dm},$$

и, окончательно, мы получаем

$$m_1 < m_\nu^{dm} = \mathcal{O}(10^{-5}\ \text{эВ}). \tag{49}$$

.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Bellini, L. Ludhova, G. Ranucci, and F. Villante, *Neutrino Oscillations*, Adv. High Energy Phys. **2014**, 191960 (2014), arXiv:1310.7858.

2. P.A. Zyla et al., Particle Data Group, Prog. Theor. Exp. Phys., 083C01, 2020.

3. R. N. Mohapatra and G. Senjanovic, *Neutrino Mass and Spontaneous Parity Violation*, Phys. Rev. Lett. **44**, 912 (1980).

4. J. Schechter and J. W. F. Valle, *Neutrino Masses in SU(2) × U(1) Theories*, Phys. Rev. D **22**, 2227 (1980).

5. Z. Maki, M. Nakagawa, and S. Sakata, *Remarks on the Unified Model of Elementary Particles*, Prog. Theor. Phys. **28** , 870 (1962).

6. T. Yanagida, *Horizontal Symmetry and Masses of Neutrinos*, Prog. Theor. Phys. **64**, 1103 (1980).

7. R. Mohapatra, *Mechanism for Understanding Small Neutrino Mass in Superstring Theories*, Phys. Rev. Lett. **56**, 561 (1986).

8. S. Alekhin et al., *A facility to Search for Hidden Particles at the CERN SPS: the SHiP Physics Case*, Rep. Prog. Phys. **79**, 124201 (2016), arXiv: 1504.04855 [hep-ph].

9. R. Adhikari et al., *White Paper on КэВ Sterile Neutrino Dark Matter*, JCAP **01**, 025 (2017), arXiv:1602.04816 [hep-ph].

10. A. Boyarsky, O. Ruchayskiy, and M. Shaposhnikov, *The Role of Sterile Neutrinos in Cosmology and Astrophysics*, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **59**, 191 (2009), arXiv:0901.0011.

11. A. Merle, *KeV Neutrino Model Building*, Int. J. Mod. Phys. D **22**, 1330020 (2013), arXiv:1302.2625.

12. T. Asaka, S. Blanchet, and M. Shaposhnikov, *The nuMSM, Dark Matter and Neutrino Masses*, Phys. Lett. B **631**, 151 (2005), hep-ph/0503065.

13. M. Shaposhnikov, *A Possible Symmetry of the nuMSM*, Nucl. Phys. B **763**, 49 (2007), hep-ph/0605047.

14. U. Seljak et al., *Cosmological Parameter Analysis Including SDSS Ly-alpha Forest and Galaxy Bias: Constraints on the Primordial Spectrum of Fluctuations, Neutrino Mass, and Dark Energy 2004*, Phys. Rev. D **71**, 103515 (2005), astro-ph/0407372.

15. A. Ibarra, E. Molinaro, and S. Petcov, *TeV Scale See-Saw Mechanisms of Neutrino Mass Generation, the Majorana Nature of the Heavy Singlet Neutrinos and* $\beta\beta)_{0\nu}$ *Decay*, J. High Energ. Phys. **09**, 108 (2010), arXiv:1007.2378 [hep-ph].

16. J. Casas and A. Ibarra, *Oscillating Neutrinos and* $\mu \to e, \gamma$, Nucl.Phys. B **618**, 171 (2001), arXiv: hep-ph/0103065.

17. C. Hagedorn and E. Molinaro, *Flavor and CP ymmetries for Leptogenesis and 0* $\nu\beta\beta$ *Decay*, Nucl. Phys. B **919**, 404 (2017), arXiv:1602.04206 [hep-ph].

18. S. Bilenky, S. Petcov, and B. Pontecorvo, *Lepton Mixing,* $\mu \to e\gamma$ *Decay and Neutrino Oscillations*, Phys. Lett. B **67**, 309 (1977).

19. J. Hisano and D. Nomura, *Solar and Atmospheric Neutrino Oscillations and Lepton Flavor Violation in Supersymmetric Models with the Right-Handed Neutrinos*, Phys. Rev. D **53**, 116005 (1999), arXiv: hep-ph/9810479.

20. A. Semenov, *LanHEP — A Package for Automatic Generation of Feynman Rules from the Lagrangian. Version 3.2*, Comput. Phys. Commun.**201**, 167 (2016), arXiv: 1412.5016 [physics.comp-ph].

21. K. Bondarenko, A. Boyarsky D. Gorbunov, and O. Ruchayskiy, *Phenomenology of GeV-scale Heavy Neutral Leptons*, J. High Energy Phys. **11**, 032 (2018), arXiv:1805.08567 [hep-ph].

22. S. Tremaine and J. E. Gunn, *Dynamical Rof Light Neutral Leptons in Cosmology*, Phys. Rev. Lett. **42**, 407 (1979).

23. Т. М. Алиев, М. И. Высоцкий, *О возможности регистрации фотонов от распада реликтовых нейтрино во Вселенной*, УФН **135**, 709 (1981), https://ufn.ru/ru/articles/1981/12/f/.

24. A. Boyarsky and O. Ruchayskiy, *Bounds on Light Dark Matter*, arXiv:0811.2385 [astro-ph].

25. A. Boyarsky, A. Neronov, O. Ruchayskiy, and M. Shaposhnikov, *Constraints on Sterile Neutrino as a Dark Matter Candidate from the Diffuse X-Ray Background*, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **370**, 213 (2006), arXiv:astro-ph/0512509 [astro-ph].

26. A. Boyarsky, A. Neronov, O. Ruchayskiy, M. Shaposhnikov, and I. Tkachev, *Where to Find a Dark Matter Sterile Neutrino?*, Phys. Rev. Lett. **97**, 261302 (2006), arXiv:astro-ph/0603660 [astro-ph].

27. S. Dodelson and L. M. Widrow, *Sterile-Neutrinos as Nark Matter*, Phys. Rev. Lett. **72**, 17 (1994).

28. A. Dolgov and S. Hansen, *Massive Sterile Neutrinos as Warm Dark Matter*, Astropart. Phys. **16**, 339 (2002), arXiv: hep-ph/0009083.

29. K. Abazajian, G. M. Fuller, and M. Patel, *Sterile Neutrino Hot, Warm, and Cold Dark Matter*, Phys. Rev. D **64**, 023501 (2001), arXiv: astro-ph/0101524.

30. M. Viel, J. Lesgourgues, M. Haehnelt, S. Matarrese, and A. Riotto, Phys. Rev. D **71**, 063534 (2005), arXiv:astro-ph/0106108.

31. A. Boyarsky, O. Ruchayskiy, and D. Iakubovskyi, *A Lower Bound on the Mass of Dark Matter Particles*, JCAP **03**, 005 (2009).

32. A. Abdullahi et al., *The Present and Future Status of Heavy Neutral Leptons*, Proc. of Snowmass 2021, arXiv:2203.08039 [hep-ph].

33. D. Britton et al., *Improved Search for Massive Neutrinos in pi+ → e+ Neutrino Decay*, Phys. Rev. D **46**, 885 (1992).

34. A. Aguilar-Arevalo et al., *Improved Search for Heavy Neutrinos in the Decay $\pi \to e\nu$*, Phys. Rev. D **97**, 072012 (2018), arXiv:1712.03275[hep-ph].

35. E. Cortina Gil et al., *Search for Heavy Neutral Lepton Production in K+ Decays to Positrons*, Phys. Lett. B **807**, 135599 (2020), arXiv:2005.09575[hep-ph].

36. A. Artamonov et al., *Search for Heavy Neutrinos in $K \to \mu\nu$ Decays*, Phys. Rev. D **91**, 052001 (2015), arXiv:1411.3963[hep-ph], erratum: Phys. Rev. D **91**, 059903 (2015).

37. T. Yamazaki et al., *Search for Heavy Neutrinos in Kaon Decay*, Conf. Proc. C **840719**, 262 (1984).

38. P. Abreu et al., *Search for Neutral Heavy Leptons Produced in Z Decays*, Z. Phys. C **74**, 57 (1997), erratum: Z. Phys. C **75**, 580 (1997).

39. G. Bernardi et al., *Search for Neutrino Decay*, Phys. Lett. B **166**, 479 (1986); G. Bernardi et al., *Further Limits on Heavy Neutrino Couplings*, Phys. Lett. B **203**, 332 (1988).

40. F. Bergsma et al., *A Search for Decays of Heavy Neutrinos in the Mass Range 0.5 GeV to 2.8 GeV*, Phys. Lett. B **166**, 473 (1986).

41. A. Vaitaitis et al., *Search for Neutral Heavy Leptons in a Yigh-Energy Neutrino Beam*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4943 (1999), arXiv:hep-ex/9908011.

42. T. Asaka, S. Eijima, and K. Takeda, *Lepton Universality in the νMSM*, Phys. Lett.B **742**, 303 (2015), arXiv:1410.0432 [hep-ph].

43. M. Gronau, C. Leung, and J. Rosner, *Extending Limits on Neutral Heavy Leptons*, Phys. Rev. D **29**, 2539 (1984).

44. W. Rodejohann, *Neutrino-less Double Beta Decay and Particle Physics*, Int. J. Mod. Phys. E **20**, 1833 (2011), arXiv:1106.1334.

45. T. Asaka and T. Tsuyuki, *Seesaw Mechanism at Electron-Electron Colliders*, Phys. Rev. D **92**, 094012 (2015), arXiv:1508.04937 [hep-ph].

46. M.N. Dubinin and D.M. Kazarkin, arXiv:2212.11310 [hep-ph].

47. M.N. Dubinin and E.Yu. Fedotova, Symmetry **15**, 679 (2023), arXiv:2303.06680 [hep-ph].

48. J. Ellis, M. E. Gomez, G. K. Leontaris, S. Lola, and D. V. Nanopoulos, *Charged Lepton Fviolation in the Light of the Super-Kamiokande Data*, Eur. Phys. J. C **14**, 319 (2000), arXiv:hep-ph/9911459.

49. J. L. Feng, Y. Nir, and Y. Shadmi, *Neutrino Parameters, Abelian Flavor Symmetries, and Charged Lepton Flavor Violation*, Phys. Rev. D **61**, 113005 (2000), arXiv:hep-ph/9911370.

50. W. Buchmuller, D. Delepine, and L. T. Handoko, *Neutrino Mixing and Flavor Changing Processes*, Nucl. Phys. B **576**, 445 (2000), arXiv:hep-ph/9912317 .

51. S. F. King and M. Oliveira, *Lepton Flavor Violation in String Inspired Models*, Phys. Rev. D **60**, 035003 (1999), arXiv:hep-ph/9804283.

52. R. Barbieri, L. Hal,l and A. Strumia, *Violations of Lepton Flavor and CP in Supersymmetric Unified Theories*, Nucl. Phys. B **445**, 219 (1995), arXiv:hep-ph/9501334.

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 955–963 © 2023

ПОИСК НОВОГО МЕЖНУКЛОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОМОЩЬЮ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

В. В. Воронин [a,b], ***Д. Д. Шапиро*** [a,b*], ***С. Ю. Семенихин*** [a], ***Т. С. Хансен*** [c]

[a] *НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ*
188300, Гатчина, Россия

[b] *Санкт-Петербургский государственный университет*
199034, Санкт-Петербург, Россия

[c] *Институт Лауэ–Ланжевена*
38042, Гренобль, Франция

Поступила в редакцию 13 марта 2023 г.,
после переработки 23 августа 2023 г.
Принята к публикации 23 августа 2023 г.

Рассматривается применение метода порошковой дифракции нейтронов для поиска нового межнуклонного взаимодействия юкавского типа. Суть метода состоит в исследовании зависимости амплитуды нейтронного рассеяния от переданного импульса. Проанализированы возможные вклады в амплитуду рассеяния и в интегральную интенсивность дифракционных максимумов. Проведен эксперимент по дифракции нейтронов на порошке кремния на дифрактометре D20 реактора ILL (Гренобль, Франция). Из полученных данных определены ограничения на константу связи рассматриваемого взаимодействия. Показано, что в диапазоне радиусов взаимодействия $\lambda = 10^{-13}$–10^{-11} м они являются более строгими, чем уже существующие в литературе. Полученный результат ограничен несовершенством экспериментальной установки. Устранение инструментального вклада может позволить увеличить чувствительность метода как минимум на порядок.

DOI: 10.31857/S004445102312009X
EDN: MXDWBG

1. ВВЕДЕНИЕ

По современным представлениям в природе существуют четыре типа фундаментальных взаимодействий: сильное, осуществляемое глюонами, слабое, осуществляемое $W^{\pm}$- и Z^0-бозонами, электромагнитное, осуществляемое фотонами, и гравитационное с предполагаемыми переносчиками гравитонами. Первые три из них являются частью Стандартной Модели (СМ), которая вместе с общей теорией относительности (ОТО) описывает подавляющую часть результатов физических экспериментов. Однако существует ряд явлений, которые СМ и ОТО не способны объяснить. Среди фундаментальных проблем, возможные решения которых предполагают введение новых взаимодействий, можно выделить проблемы темной материи [1] и темной энергии [2], сохранения CP-инвариантности [3], барионной асимметрии Вселенной [4] и проблему калибровочной иерархии [5]. Кроме того, результаты ряда экспериментов могут являться указанием на проявление новых сил. Например, измеренный магнитный момент мюона отличается от рассчитанного в рамках СМ на 4.2σ [6]. Одно из возможных объяснений состоит в существовании массивных частиц за рамками СМ, неучтенные поправки от которых вызывают это различие. Расхождение величин зарядового радиуса протона, полученных из спектроскопии «мюонного» водорода, с одной стороны, и из упругого электрон-протонного рассеяния и спектроскопии атома водорода, с другой, составляют так называемую загадку протонного радиуса [7]. Одной из причин может являться существование новых взаимодействий, нарушающих лептонную универсальность. Другим возможным свидетельством наличия частиц за рамками СМ является аномальное увеличение числа электрон-позитронных пар, образующихся в результате переходов ядер ^{8}Be и ^{4}He из

* E-mail: shapirod@mail.ru

возбужденного состояния в основное с испусканием γ-кванта [8]. Авторы работы [8] связывают это с существованием новой частицы с массой ~ 17 МэВ, которая образуется в результате релаксации ядер и впоследствии распадается на электрон-позитронную пару. В литературе данный феномен получил название бериллиевой и гелиевой аномалий, а гипотетическая частица стала именоваться частицей X17 [8, 9]. Все описанные явления служат сильной мотивацией к проведению экспериментов по поиску новых взаимодействий различных типов в широком диапазоне радиусов взаимодействия λ (см., например, обзоры [10–12]).

2. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ

Методы поиска новых взаимодействий зависят от типа взаимодействия, а также от масштаба радиуса взаимодействия $\lambda = 1/M$, где M — масса частицы-переносчика (здесь и далее в формулах используется естественная система единиц $\hbar = c = 1$). В литературе обычно рассматриваются взаимодействия за счет обмена массивным или безмассовым бозоном со спином 0 или 1. Классификацию всех таких взаимодействий можно найти в работах [13, 14]. В настоящей статье обсуждается спин-независимое межнуклонное взаимодействие с юкава-подобным потенциалом

$$V(\mathbf{r}) = -g_{new}^2 \frac{e^{-r/\lambda}}{4\pi r}, \tag{1}$$

где g_{new} — константа связи, r — расстояние между частицами. Выражение (1) записано в общепринятом виде, содержащем минус. Отметим, однако, что для дальнейшего рассмотрения знак потенциала не имеет значения. Современные ограничения на данный тип взаимодействия из существующих экспериментальных данных приведены в работах [15–17].

Рассмотрим поведение тепловых неполяризованных нейтронов в эксперименте по порошковой дифракции на диамагнитном веществе в присутствии потенциала (1). Типичная схема такого эксперимента представлена на рис. 1. Сколлимированный пучок нейтронов с постоянной длиной волны λ_n, задаваемой монохроматором, падает на образец — поликристаллический порошок, рассеивается на нем и попадает на детектор. Если переданный импульс $\mathbf{q}$ отраженного нейтрона совпадает с вектором обратной решетки $\mathbf{g}$ кристаллита (условие Брэгга – Вульфа), то возникает конструктивная интерференция излучения, в результате чего на определенных углах рассеяния 2θ образуются дифракционные максимумы интенсивности — брэгговские пики. Угол

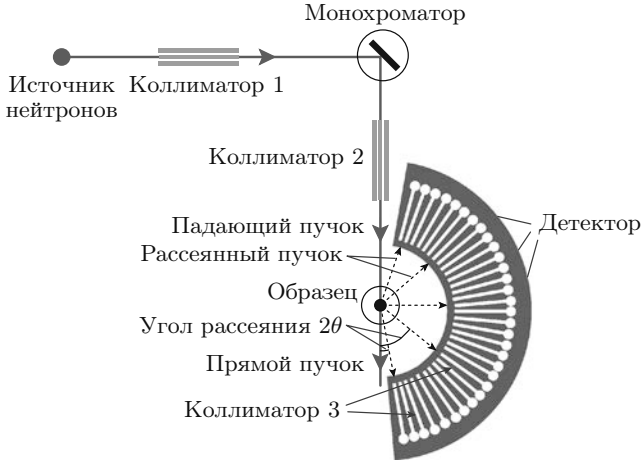


Рис. 1. Схема типичного эксперимента по порошковой дифракции нейтронов (вид сверху) [18]

рассеяния 2θ связан с переданным импульсом $\mathbf{q}$ как $q = 4\pi \sin\theta/\lambda_n$. Детекторы регистрируют отраженное под разными углами излучение, и таким образом получается дифрактограмма — зависимость интенсивности нейтронов от угла рассеяния 2θ.

Интегральная интенсивность I_g брэгговского пика дифрактограммы в кинематическом приближении пропорциональна квадрату модуля структурного фактора F_g [19]:

$$I_g \propto |F_g|^2, \tag{2}$$

который, в свою очередь, выражается через атомные амплитуды рассеяния $a_j(\mathbf{g})$:

$$F_g = \sum_j a_j(\mathbf{g}) \exp\left(-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}_j\right), \tag{3}$$

где $a_j(\mathbf{g})$ — амплитуда рассеяния нейтрона на j-м атоме, $\mathbf{g} = \mathbf{q}$ — вектор обратной решетки, равный переданному импульсу $\mathbf{q}$, $\mathbf{r}_j$ — вектор, обозначающий положение j-го атома в элементарной ячейке.

Амплитуду рассеяния неполяризованных нейтронов $a(\mathbf{g})$ можно представить в виде суммы нескольких вкладов. Первый и основной вклад возникает в результате сильного взаимодействия нейтрона с ядром. Соответствующая амплитуда определяется когерентной ядерной длиной рассеяния b_N, характеризующей сечение рассеяния [20]. Ее величина меньше длины волны тепловых нейтронов приблизительно на 5 порядков, поэтому b_N не зависит от переданного импульса $\mathbf{q}$:

$$a_N(\mathbf{g}) = -b_N. \tag{4}$$

Остальные вклады обусловлены электромагнитным взаимодействием нейтрона с веществом. В слу-

чае рассеяния неполяризованных нейтронов на диамагнетике их можно записать в виде [20]

$$a_{EM}(\mathbf{g}) \propto b_{ne}Z(1-f(\mathbf{q})) - b_P, \tag{5}$$

где $b_{ne} = b_F + b_E$ — длина рассеяния нейтрона на электроне, Z — заряд ядра, $f(\mathbf{q})$ — атомный форм-фактор, b_P — поляризационная длина рассеяния.

Первое слагаемое в выражении (5) представляет собой сумму двух вкладов. Один из них связан с взаимодействием магнитного момента нейтрона μ_n с зарядовой плотностью атома и определяется длиной рассеяния Фолди [20]

$$b_F = e\mu_n = -1.4679709(37)\cdot 10^{-3}\,\text{фм}, \tag{6}$$

где e — элементарный заряд.

Второй вклад возникает благодаря взаимодействию внутреннего зарядового распределения нейтрона с электростатическим потенциалом атома и также определяется соответствующей длиной рассеяния [20]

$$b_E = \frac{m_n r_n^2}{3m_e\alpha_0} \approx 10^{-4}\,\text{фм}, \tag{7}$$

где r_n^2 — среднеквадратичный радиус нейтрона, m_n и m_e — массы нейтрона и электрона соответственно, α_0 — боровский радиус.

Второе слагаемое суммы (5) связано с тем, что за счет ненулевой электрической поляризуемости α_n электрическое поле атома E вызывает у нейтрона наведенный электрический дипольный момент $\alpha_n E$. Взаимодействие такого момента с E приводит к возникновению длины рассеяния [20]

$$b_P = \sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{Z^2 m_n \alpha_n}{r_N m_e \alpha_0}, \tag{8}$$

где r_N — зарядовый радиус ядра. При этом нулевая поляризуемость соответствует нулевой длине рассеяния и, таким образом, нулевому сечению, поскольку оно пропорционально квадрату этой длины. Заметим, что поляризационное слагаемое, как и ядерная амплитуда рассеяния $a_N(\mathbf{g})$, не зависит от переданного импульса $\mathbf{q}$ и определяется характеристиками ядра Z и r_N.

Существование взаимодействия с потенциалом (1) приведет к возникновению дополнительного вклада $a_{new}(\mathbf{g})$ в амплитуду рассеяния $a(\mathbf{g})$. В борновском приближении этот вклад можно записать как

$$a_{new}(\mathbf{g}) = -\frac{m_n}{2\pi}\int V(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}d^3r. \tag{9}$$

После подстановки (1) в (9), а также учитывая, что в ядре содержится A нуклонов, получим

$$a_{new}(\mathbf{g}) = -A\frac{g_{new}^2}{4\pi}\frac{2m_n\lambda^2}{1+\lambda^2 q^2}. \tag{10}$$

Отметим, что для рассматриваемых нами длин волн нейтронов все нуклоны ядра являются точечными и рассеивают когерентно.

В присутствии новой силы амплитуда рассеяния принимает вид

$$\begin{aligned} a(\mathbf{g}) = a_N(\mathbf{g}) + a_{EM}(\mathbf{g}) + a_{new}(\mathbf{g}) = \\ = -b_N + b_{ne}Z(1-f(\mathbf{q})) - b_P - \\ - A\frac{g_{new}^2}{4\pi}\frac{2m_n\lambda^2}{1+\lambda^2 q^2}. \end{aligned} \tag{11}$$

Отметим, что в выражении (11) зависимость от переданного импульса $\mathbf{q}$ содержится в электромагнитном вкладе $b_{ne}Z(1-f(\mathbf{q}))$ и во вкладе от нового взаимодействия $a_{new}(\mathbf{g})$. В первом случае эта зависимость содержится в атомном форм-факторе $f(\mathbf{q})$, а во втором имеет характерный вид $\propto 1/(1+\lambda^2 q^2)$.

Помимо структурного фактора F_g, интегральная интенсивность I_g порошковой дифрактограммы определяется рядом других вкладов [19]:

$$I_g \propto m_g L_g A_g y_g \exp(-2W_g) p(2\theta) |F_g|^2. \tag{12}$$

Индекс повторяемости m_g равен числу плоскостей, эквивалентных, с точки зрения закона Брэгга, за счет тождественности их межплоскостных расстояний.

Фактор Лоренца L_g учитывает геометрию эксперимента с углом рассеяния 2θ, а также конечные размеры узлов обратной решетки и конечную толщину сферы Эвальда:

$$L_g = \frac{1}{\sin\theta\sin 2\theta}.$$

Поглощение нейтронов образцом объема V определяет соответствующий коэффициент

$$A_g = \frac{1}{2}\int\limits_V \exp(-\mu_A l)\,dV,$$

где μ_A — эффективный линейный коэффициент поглощения, l — расстояние, пройденное нейтроном в образце.

Коэффициент экстинкции y_g возникает из-за перерассеяния излучения от нижележащих плоскостей кристалла. В приближении сферических кристаллитов его можно записать в виде [21]

$$y_g = (1+x)^{1/2},$$

где $x = (0.75\,N_c\lambda_n D\,|F_g|)^2$, N_c — число элементарных ячеек в единице объема, D — диаметр сферы (размер кристаллита). Отметим, что y_g зависит от структурного фактора F_g.

Фактор Дебая – Валлера W_g связан с уменьшением интегральной интенсивности I_g за счет тепловых колебаний атомов. В случае кубической решетки его можно записать в виде

$$W_g = \frac{1}{3}\langle u^2\rangle q^2 = 2B\frac{\sin^2\theta}{\lambda_n^2},$$

где $\langle u^2\rangle$ — среднеквадратичная амплитуда смещения атомов, $B = 8\pi^2\langle u^2\rangle/3$ — тепловой параметр. Отметим, что соответствующий вклад в I_g имеет характерную зависимость от переданного импульса $\propto e^{-q^2}$.

Аппаратная функция $p(2\theta)$ учитывает несовершенство экспериментальной установки, в частности, различную способность элементов позиционно-чувствительной детекторной системы регистрировать рассеянное под разными углами излучение. Важной особенностью аппаратной функции $p(2\theta)$ является ее зависимость от угла рассеяния 2θ, а не от переданного импульса $\mathbf{q}$, что позволяет отделить ее от вклада за счет нового взаимодействия путем проведения измерений при двух длинах волн λ_n.

Отметим также, что дополнительной причиной систематического изменения дифракционной картины может являться смещение положения образца относительно центра окружности, образуемой детекторной системой, что приводит к сдвигу угла рассеяния 2θ. В случае геометрии Дебая – Шеррера, если образец смещен вдоль пучка, сдвиг составляет

$$\Delta 2\theta \approx \frac{s}{R}\sin 2\theta,$$

а если смещение перпендикулярно пучку —

$$\Delta 2\theta \approx \frac{s}{R}\cos 2\theta,$$

где s — величина смещения, R — радиус окружности, образуемой детекторной системой.

Обозначим через

$$\widetilde{I}_g = I_g/m_g L_g A_g y_g \exp(-2W_g)\,p(2\theta)$$

величину интегральной интенсивности I_g, нормированную на вклады, указанные в (12). Введем $\Delta\widetilde{I}_g \equiv \widetilde{I}_g - \overline{I}$ — отклонение $\widetilde{I}_g$ от среднего значения $\overline{I} \equiv \sum_g \widetilde{I}_g/N$, N — число пиков дифрактограммы. Существование взаимодействия с потенциалом (1) приводит к характерной зависимости относительного отклонения $\Delta\widetilde{I}_g/\overline{I}$ от переданного импульса $\mathbf{q}$:

$$\frac{\Delta\widetilde{I}_g}{\overline{I}} \sim \frac{1}{1+\lambda^2 q^2}, \tag{13}$$

где мы пренебрегли всеми квадратичными вкладами, кроме ядерного, ввиду их малости.

Учет вкладов для случая дифракции на кремнии описан в разд. 3.

3. ЭКСПЕРИМЕНТ ПО ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ НА КРЕМНИИ НА ИНСТРУМЕНТЕ D20

Нами был осуществлен эксперимент по дифракции нейтронов на порошке кремния на инструменте D20 реактора ILL (Гренобль, Франция). Образцом являлся кремниевый калибровочный стандарт NIST 640f массой 1.27 г. Держатель образца — ванадиевый цилиндр диаметром 6 мм и высотой 6.5 см. В эксперименте использовались две длины волны нейтронов, $\lambda_{n_1} = 1.3$ Å и $\lambda_{n_1} = 2.41$ Å, для каждой из которых проводилось по 4 измерения при температурах $T = 4, 6, 77, 300$ K. Время одного измерения $t = 122$ мин. Кроме того, были промерены пустые держатели образцов при обеих длинах волн при температуре $T = 300$ K в течение 20 мин. Эти измерения были нормированы на время $t = 122$ мин. Излучение регистрировалось позиционно-чувствительным детектором (ПЧД), заполненным ^{3}He и CF_4. Эксперимент проводился удаленно без участия пользователей в связи с пандемией COVID-19.

Выбор кремния в качестве образца обусловлен рядом его свойств. Кремний содержит в ячейке 8 атомов одного сорта, координаты которых известны. Поэтому в выражении (3) фазовый множитель считается точно, а амплитуда рассеяния может быть вынесена за знак суммирования:

$$F_g = \sum_j a_j(\mathbf{g})\exp(-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}_j) = a(\mathbf{g})K_g, \tag{14}$$

где

$$K_g \equiv \sum_{i=1}^{8}\exp(-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^{8}\exp(-2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i)), \tag{15}$$

h, k, l — индексы Миллера, x_i, y_i, z_i — координаты атома кремния в элементарной ячейке.

Вклады в амплитуду рассеяния $a(\mathbf{g})$ кремния измерены экспериментально. Длина когерентного рас-

сеяния по данным нейтронной интерферометрии составляет [22]

$$b_c = b_N + b_P = 4.1507(4)\,\text{фм}.$$

Заметим, что, исходя из (8), поляризационная длина рассеяния b_P определяется зарядовым радиусом ядра кремния, измеряемого с помощью рассеяния электронов [23],

$$r_N = 3.106(30)\,\text{фм},$$

а также поляризуемостью нейтрона, получаемой в экспериментах по фотопоглощению [20],

$$\alpha_n \sim 10^{-3}\,\text{фм},$$

что дает

$$b_P \approx -2 \cdot 10^{-3}\,\text{фм}.$$

Однако в экспериментах, измеряющих когерентную длину рассеяния, поляризационный вклад b_P не отличим от ядерного b_N [20]. Отметим, что абсолютная величина b_c не имеет большого значения, поскольку в настоящей работе исследуется зависимость от переданного импульса $\mathbf{q}$.

Длина рассеяния нейтрона на электроне измеряется различными методами и составляет [24]

$$b_{ne} \sim 10^{-3}\,\text{фм}.$$

Порядок величины форм-фактора кремния $f(\mathbf{q}) \sim \sim 10^{-1}$ [25], а $Z = 14$, поэтому

$$b_{ne} Z(1 - f(\mathbf{q})) \sim 10^{-3}\,\text{фм}.$$

Таким образом, в случае рассеяния на кремнии все электромагнитные вклады $a_{EM}(\mathbf{g})$ в выражении (11) меньше ядерного вклада $a_N(\mathbf{g})$ на 3 порядка:

$$\frac{a_{EM}(\mathbf{g})}{a_N(\mathbf{g})} \leqslant 10^{-3}.$$

Для оценки коэффициента поглощения A_g использовалось табличное значение сечения поглощения кремния для длины волны нейтронов $\lambda_{n_1} \approx 1.8\,\text{Å}$ [25]:

$$\sigma_A = 0.171(3)\,\text{бн},$$

что соответствует величине

$$A_g \approx 0.997.$$

Коэффициент экстинкции вычислялся с использованием известного для образца распределения кристаллитов по размерам со средним значением

$$D = 4.1 \cdot 10^{-6}\,\text{м}.$$

Для оценки вклада за счет тепловых колебаний использовались значения теплового параметра B, существующие в литературе. В работе [26] вычислена плотность фононных состояний кремния на основе данных по измерению дисперсионных кривых с помощью неупругого рассеяния нейтронов. Полученная величина B при температуре 293 K составляет

$$B = 0.4691(16)\,\text{Å}^2.$$

В работе [27] вычислены параметры B кремния в широком диапазоне температур с помощью теории возмущений функционала плотности. При низких температурах $T < 50\,\text{K}$ величина B практически не меняется и составляет

$$B \approx 0.2\,\text{Å}^2,$$

а при температуре $T \approx 75\,\text{K}$ —

$$B \approx 0.23\,\text{Å}^2.$$

Угловой сдвиг $\Delta 2\theta$ определяется расстоянием между образцом и детектором $R = 1.47\,\text{м}$, а также величиной смещения образца s. Поскольку максимальное значение синуса достигает единицы, при смещении образца, например, на 3 мм (при диаметре образца 6 мм) наибольший угловой сдвиг составит

$$\Delta 2\theta_{max} \approx 2 \cdot 10^{-3}\,\text{рад} \approx 0.1^\circ.$$

Такой сдвиг приведет к изменению фактора Лоренца L:

$$\frac{\Delta L}{L} \sim 10^{-3},$$

где ΔL — разница факторов Лоренца для смещенного и несмещенного образцов.

4. ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Для учета рассеяния на ванадии из дифрактограмм кремния были вычтены кривые, полученные при измерении пустого держателя образца (см. рис. 2). Здесь и далее на рисунках будут приводиться примеры для температуры $T = 4\,\text{K}$, данные для других температур обрабатывались аналогично.

Для учета инструментального вклада были вычислены аппаратные функции $p(2\theta)$. Поскольку рассеяние на пустом ванадиевом держателе образца вне дифракционных максимумов должно быть однородным и изотропным, функция $p(2\theta)$ считалась как отношение интенсивности дифрактограммы ванадия с исключенными брэгговскими пиками в диапазоне пяти полных ширин на полувысоте (FWHM) к среднеарифметическому значению интенсивностей всей

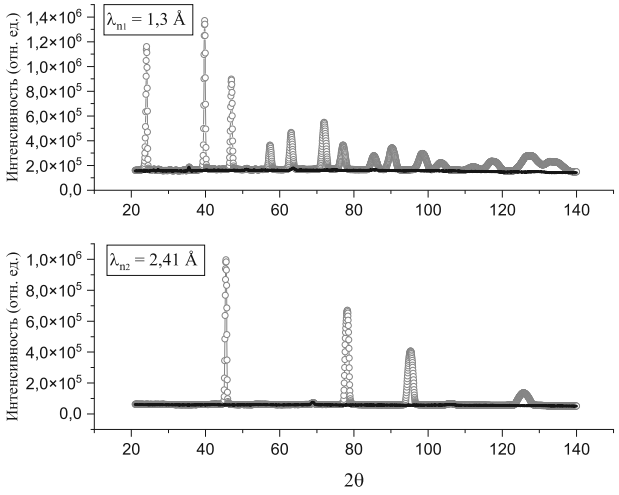


Рис. 2. Дифрактограммы кремния (серые кружки) и пустого держателя образца (черная линия), полученные при $T = 4\,\mathrm{K}$, $\lambda_{n_1} = 1.3\,\text{Å}$ (вверху) и $\lambda_{n_2} = 2.41\,\text{Å}$ (внизу). Размеры символов больше величин погрешностей

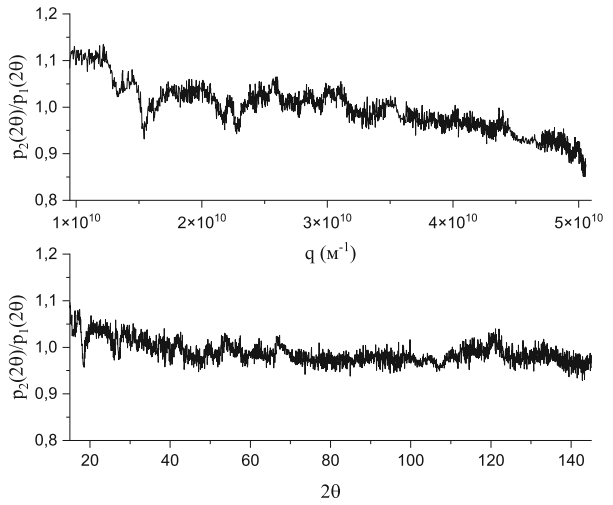


Рис. 3. Зависимости отношения аппаратных функций $p_2(2\theta)/p_1(2\theta)$, соответствующих длинам волн $\lambda_{n_2} = 2.41\,\text{Å}$ и $\lambda_{n_1} = 1.3\,\text{Å}$, от переданного импульса q (вверху) и от угла 2θ (внизу)

дифрактограммы с аналогично исключенными пиками. Для определения величины FWHM максимумы отражения аппроксимировались функцией Гаусса. В качестве демонстрации того, что $p(2\theta)$ учитывает именно инструментальный вклад, было построено отношение аппаратных функций $p_2(2\theta)/p_1(2\theta)$, соответствующих двум длинам волн, $\lambda_{n_2} = 2.41\,\text{Å}$ и $\lambda_{n_1} = 1.3\,\text{Å}$, в зависимости от переданного импульса q и от угла 2θ (рис. 3). Если причина существования максимумов функции $p(2\theta)$ заключается в дифракции на какой-либо структуре, то их положения по q должны совпадать, и соответствующее отношение $p_2(2\theta)/p_1(2\theta)$ будет близко к константе. Наоборот, если причиной является несовершенство регистрации излучения детектором, то к константе будет близко отношение $p_2(2\theta)/p_1(2\theta)$, построенное в зависимости от угла 2θ, что и наблюдается на графике. Отметим, что наш вывод качественный, количественный анализ функции $p(2\theta)$ выходит за рамки данной работы.

Дифрактограммы кремния за вычетом рассеяния от пустого держателя образца были нормированы на функции $p(2\theta)$, после чего был также вычтен остаточный фон, аппроксимированный полиномом шестой степени.

Интегральная интенсивность I_g вычислялась как сумма значений интенсивности результирующей дифрактограммы на ширине 5FWHM. Такое значение ширины обусловлено тем, что при его дальнейшем увеличении величина I_g не меняется в пределах погрешности. Выбранный способ получения интегральных интенсивностей связан

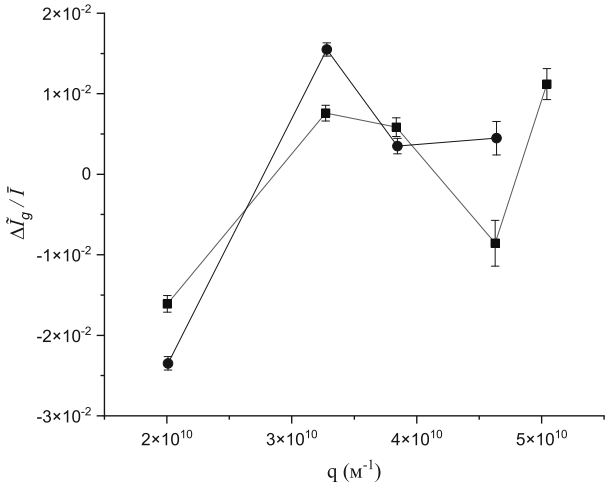


Рис. 4. Зависимости $\Delta\widetilde{I}_g/\overline{I}$ от переданного импульса q, полученные при $T = 4\,\mathrm{K}$, $\lambda_{n_1} = 1.3\,\text{Å}$ (квадраты) и $\lambda_{n_2} = 2.41\,\text{Å}$ (кружки)

с невозможностью описать дифракционные максимумы аналитическими выражениями (функции Гаусса, Лоренца, псевдо-Войта и т. п.) с достаточной точностью в силу асимметрии пиков. Полученные значения I_g нормировались на вклады, описанные в разд. 2, и строились кривые $\Delta\widetilde{I}_g/\overline{I}$ — относительные отклонения нормированных величин $\widetilde{I}_g$ от среднего значения $\overline{I}$ (рис. 4). Отметим, что на дифрактограммах, полученных при $\lambda_{n_1} = 1.3\,\text{Å}$, дифракционные максимумы, начиная с шестого, перекрываются (см. рис. 2), в результате чего их интегральные интенсивности не удается определить с точностью лучшей, чем 10^{-2}. Поэтому мы ограничиваемся рассмотрением только первых пяти отражений.

Полученный разброс значений $\Delta\widetilde{I}_g/\overline{I}$ находится на уровне $\sim 10^{-2}$, что существенно превосходит статистическую погрешность экспериментальных данных, приведенную на рисунке. Такой большой разброс, по-видимому, связан с высокой дифференциальной нелинейностью детекторной системы, отражающейся в том, что поправка на аппаратную функцию $p(2\theta)$ достигает 10–15%, и компенсировать ее лучше, чем до уровня 1% не удается. При таком разбросе экспериментальных значений можно пренебречь всеми вкладами в амплитуду рассеяния $a(\mathbf{g})$ в выражении (11), кроме ядерного вклада $a_N(\mathbf{g})$ и вклада за счет нового взаимодействия $a_{new}(\mathbf{g})$. Тогда, исходя из (12) и (14) и опустив квадратичный член в силу его малости, имеем

$$a_{exp}(\mathbf{g}) = \frac{b_N}{2}\frac{\Delta\widetilde{I}_g}{\overline{I}}, \tag{16}$$

где a_{exp} — экспериментально измеряемые значения амплитуды рассеяния, совпадающие с искомой амплитудой a_{new} с точностью до константы.

Зависимость (16) аппроксимировалась функцией вида

$$a_{fit}(\mathbf{g}) = S\frac{A}{4\pi}\frac{2m_n\lambda^2}{1+\lambda^2 q^2} + C, \tag{17}$$

где $S = g_{new}^2$, C — свободные параметры. Ограничения на g_{new}^2 с уровнем доверительного интервала 90% вычислялись как (рис. 5)

$$g_{new}^2 \leqslant S + 1.6\Delta S, \tag{18}$$

где ΔS — погрешность свободного параметра S.

5. ОЦЕНКА СИСТЕМАТИЧЕСКОЙ ПОГРЕШНОСТИ

Вклад в систематическую погрешность измеренной величины $a_{new}(\mathbf{g})$ возникает от неопределенности значений фактора Дебая – Валлера W_g, длины рассеяния b_{ne} и конечного размера кристаллитов D, определяющего величину коэффициента экстинкции y_g. Для оценки величин вкладов введем экспериментальную и теоретическую интегральные интенсивности, I_g^{exp} и I_g^{th}:

$$I_g^{exp} \propto a_{exp}^2(\mathbf{g})\exp(-2W_{exp})\,y_{exp}, \tag{19}$$

$$I_g^{th} \propto a_{th}^2(\mathbf{g})\exp(-2W_{th})\,y_{th}, \tag{20}$$

где величины с индексами «*exp*» соответствуют реальным (экспериментальным) значениям величин, которые проявляются в эксперименте, а величины с

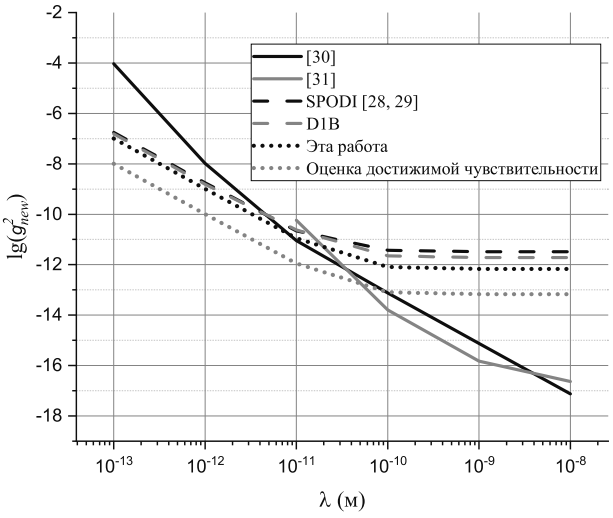


Рис. 5. Ограничения на константу связи g_{new} в зависимости от радиуса взаимодействия λ. Сплошные линии соответствуют ограничениям, полученным другими методами. Штриховые линии — ограничения из калибровочных данных дифрактометров SPODI (черный) и D1B (серый). Пунктирные линии — результаты настоящей работы: ограничения из данных дифрактометра D20 (черный) и оценка потенциально достижимой чувствительности (серый)

индексами «*th*» — значениям, полученным расчетным путем (теоретическим). Амплитуда $a_{th}(\mathbf{g})$ не содержит вклада от нового взаимодействия:

$$a_{th}(\mathbf{g}) = a_N^{th}(\mathbf{g}) + a_{EM}^{th}(\mathbf{g}), \tag{21}$$

в отличие от амплитуды $a_{exp}(\mathbf{g})$:

$$a_{exp}(\mathbf{g}) = a_N^{exp}(\mathbf{g}) + a_{EM}^{exp}(\mathbf{g}) + a_{new}(\mathbf{g}). \tag{22}$$

Пренебрегая всеми квадратичными вкладами, кроме ядерного, $a_{new}(\mathbf{g})$ можно представить в виде

$$a_{new}(\mathbf{g}) \approx \approx \frac{1}{2a_N^{exp}}\left(x^{th}\frac{I_g^{exp}}{I_g^{th}}\frac{e^{-2W_{th}}}{e^{-2W_{exp}}}\frac{y_{th}}{y_{exp}} - x^{exp}\right), \tag{23}$$

где

$$x^i \equiv \left((a_N^i(\mathbf{g}))^2 + 2a_N^i(\mathbf{g})a_{ne}^i(\mathbf{g})\right), \quad i = \{th, exp\},$$

$$a_{ne}^i(\mathbf{g}) = b_{ne}^i Z(1 - f^i(\mathbf{q})).$$

Здесь в амплитуде рассеяния мы оставили только интересующий нас электромагнитный вклад a_{ne}, а также вклад за счет сильного взаимодействия a_N, поскольку он является определяющим. Отметим, однако, что a_N не является источником систематической погрешности, поскольку не зависит от переданного импульса q.

Таблица. Вклады в величину амплитуды $a_{new}(\mathbf{g})$ и в ее систематическую погрешность

Вклад	Абсолютная величина вклада, фм	Величина вклада в систематическую погрешность, фм	Зависимость от переданного импульса q
Электромагнитное рассеяние	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-4}$	Зависит от атомного форм-фактора $f(\mathbf{q})$
Тепловые колебания (при $T = 293\,\text{K}$)	$\sim 10^{-2}$	$\sim 10^{-3}$	e^{-q^2}
Конечный размер кристаллитов (для размеров кристаллитов $D = 4.1 \cdot 10^{-6}$ м и неопределенности размеров $\Delta D = 10^{-6}$ м)	$\sim 10^{-2}$	$\sim 10^{-3}$	Зависит от структурного фактора F_g

Выражение (23) позволяет оценить систематическую погрешность, которую вносят неопределенности в значениях величин, учтенных расчетным путем. Для этого мы поочередно считаем, что все вклады, кроме соответствующего, учтены точно, экспериментальная интенсивность равна теоретической, $I_g^{exp} = I_g^{th}$, а неопределенностью значения величины является ее погрешность, приведенная в литературе. Результаты вычислений представлены в таблице.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ

Отметим, что до проведения основных измерений на дифрактометре D20 нами были проанализированы существующие калибровочные дифрактограммы кремния, полученные на порошковых дифрактометрах D1B (реактор ILL, Гренобль, Франция) и SPODI (реактор FRM II, Мюнхен, Германия). Данные любезно предоставлены ответственными за инструменты В. Нассиф (D1B) и А. Сенишиным (SPODI). Обработка проводилась аналогично описанной в разд. 4, за исключением учета аппаратной функции и вычитания кривой от пустого держателя образца ввиду отсутствия соответствующих измерений. Результаты представлены на рис. 5 и опубликованы в работах [28, 29]. Ограничения из калибровочных данных повторяют по форме ограничения из данных дифрактометра D20, но приблизительно в 2–4 раза хуже по величине, что связано с невозможностью учета аппаратной функции.

Полученные в настоящей работе ограничения на константу связи g_{new} (см. рис. 5) в диапазоне радиусов взаимодействия $\lambda = 10^{-13}$–10^{-11} м являются более строгими, чем уже существующие в литературе значения. Точность измерения амплитуды рассеяния $a_{new}(\mathbf{g})$ составила $\sim 10^{-2}$ фм, что превосходит величины вкладов в систематическую погрешность (см. таблицу). Эта точность ограничена несовершенством дифрактометра и может быть увеличена как минимум на порядок (см. рис. 5) за счет уменьшения инструментального вклада (например, путем использования лучшего детектора или за счет дополнительных калибровочных измерений) либо проведения эксперимента с более высоким разрешением.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Поиск возможных нарушений СМ, в частности, существования новых частиц и взаимодействий, является одной из наиболее актуальных задач современной физики. Нами был предложен, детально проанализирован и экспериментально реализован метод получения ограничений на параметры межнуклонного взаимодействия юкавского типа с помощью порошковой дифракции нейтронов. Основная идея метода заключается в изучении зависимости амплитуды рассеяния $a(\mathbf{g})$ от переданного импульса $\mathbf{q}$. Нами были вычислены вклады в амплитуду $a(\mathbf{g})$, в интегральную интенсивность I_g, а также вклады в систематическую погрешность. Экспериментально полученная точность измерения $a_{new}(\mathbf{g})$ составила $\sim 10^{-2}$ фм, что превосходит все указанные вклады. Возможное объяснение состоит в невозможности удовлетворительного учета нелинейности детекторной системы конкретного дифрактометра.

Ограничения, полученные в настоящей работе, находятся на уровне представленных в литературе значений, а в диапазоне радиусов взаимодействия $\lambda = 10^{-13}$–10^{-11} м даже являются более строгими. Уменьшение инструментального вклада и проведение более высокоразрешающего эксперимента могут позволить увеличить чувствительность метода как минимум на порядок.

Благодарности. Авторы выражают благодарность А. Сенишину и В. Нассиф за предоставленные калибровочные данные, В. В. Федорову за ценные замечания, а также Г. А. Вальковскому за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Bertone, D. Hooper, and J. Silk, Phys. Rep. **405**, 279 (2005).

2. J. A. Frieman, M. S. Turner, and D. Huterer, Annu. Rev. Astron. Astrophys. **46**, 385 (2008).

3. M. Shifman, A. Vainshtein, and V. Zakharov, Nucl. Phys. B **166**, 493 (1980).

4. А. Д. Сахаров, Письма в ЖЭТФ **5**, 32 (1967).

5. N. Arkani-Hamed, S. Dimopoulos, and G. Dvali, Phys. Lett. B **429**, 263 (1998).

6. B. Abi, T. Albahri, S. Al-Kilani et al., Phys. Rev. Lett. **126**, 141801 (2021).

7. C. E. Carlson, Prog. Part. Nucl. Phys. **82**, 59 (2015).

8. D. S. Firak, A. J. Krasznahorkay, M. Csatlós et al., EPJ Web Conf. **232**, 04005 (2020).

9. D. V. Kirpichnikov, V. E. Lyubovitskij, and A. S. Zhevlakov, Phys. Rev. D **102**, 095024 (2020).

10. J. Murata and S. Tanaka, Class. Quantum Grav. **32**, 033001 (2015).

11. M. S. Safronova, D. Budker, D. DeMille et al., Rev. Mod. Phys. **90**, 025008 (2018).

12. S. Sponar, R. Sedmik, M. Pitschmann et al., Nat. Rev. Phys. **3**, 309 (2021).

13. B. A. Dobrescu and I. Mocioiu, J. High Energy Phys. **11**, 005 (2006).

14. P. Fadeev, Y. V. Stadnik, F. Ficek et al., Phys. Rev. A **99**, 022113 (2019).

15. W. M. Snow, C. Haddock and B. Heacock, Symmetry **2022**, 14, 10 (2022).

16. Y. J. Chen, W. K. Tham, D. E. Krause et al., Phys. Rev. Lett. **116**, 221102 (2016).

17. C. Delaunay, C. Frugiuele, E. Fuchs et al., Phys. Rev. D **96**, 115002 (2017).

18. A. Fajar and H. Mugirahardjo, Atom Indonesia **36**, 1 (2010).

19. V. K. Pecharsky, *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, Springer Science+Business Media, Inc. (2003).

20. V. F. Sears, Phys. Rep. **141**, 281 (1986).

21. T. M. Sabine, Aust. J. Phys. **38**, 507 (1985).

22. A. Ioffe, D. L. Jacobson, M. Arif et al., Phys. Rev. A **58**, 1476 (1998).

23. G. C. Li, M. R. Yearian, and I. Sick, Phys. Rev. C **9**, 1861 (1974).

24. J.-M. Sparenberg and H. Leeb, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **129**, 315 (2003).

25. E. Prince, *International Tables for Crystallography*, Vol. C, Kluwer Acad. Publ. Dortrecht (2004).

26. C. Flensburg and R. F. Stewart, Phys. Rev. B **60**, 1 (1999).

27. C. Malica and A. Dal Corso, Acta Cryst. A **75**, 624 (2019).

28. В. В. Воронин, И. А. Кузнецов, Д. Д. Шапиро, Письма в ЖЭТФ **107**, 3 (2018).

29. V. V. Voronin, D. D. Shapiro, J. Surf. Investig. **14**, S198 (2020) https://link.springer.com/article/10.1134/S1027451020070502.

30. V. V. Nesvizhevsky, G. Pignol, K. V. Protasov, Phys. Rev. D **77**, 034020 (2008).

31. Y. Kamiya, K. Itagaki, M. Tani et al., Phys. Rev. Lett. **114**, 161101 (2015).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 964–976 © 2023

УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ НУКЛОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ЯДРАХ И КУМУЛЯТИВНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ ПИОНОВ

Ю. Т. Киселев*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» ККТЭФ
117218, Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 марта 2023 г.,
после переработки 18 августа 2023 г.
Принята к публикации 23 августа 2023 г.

Структура ядерной материи на малых межнуклонных расстояниях является одним из мало изученных аспектов физики ядра. На расстояниях порядка радиуса нуклона ядерная материя представлена возникающими на короткое время парами коррелированных нуклонов с относительными импульсами, превышающими импульсы Ферми. Такие структуры, локальная плотность которых соизмерима с плотностью нейтронных звезд, появляются в результате флуктуаций средней ядерной плотности. Одной из важных характеристик нуклонных корреляций является универсальность, означающая независимость их свойств от массовых чисел ядер. Поэтому особенности этих объектов структуры ядра отражают свойства ядерной материи, а не конкретных ядер. Информация о физике малых расстояний извлекается из анализа процессов с большими передачами энергии-импульса. До сих пор свойство универсальности наблюдалось в электрон-ядерных столкновениях только для процесса дезинтеграции нуклонных пар. В настоящей работе проведен анализ данных по кумулятивному образованию пионов протонами на наборе ядерных мишеней и впервые установлено существование универсальности двухнуклонных корреляций в процессе образования π^+- и π^--мезонов. Получены свидетельства участия трехнуклонных корреляций в рождении пионов за пределами кинематики их образования во взаимодействиях с двухнуклонными объектами.

DOI: 10.31857/S0044451023120106
EDN: MXFUEI

1. ВВЕДЕНИЕ

Ядерная материя является предметом активных теоретически и экспериментальных исследований в течение многих десятилетий. Тем не менее некоторые аспекты структуры ядер до сих пор остаются почти не изученными. Традиционная ядерная физика рассматривает ядро как коллекцию нуклонов (протонов и нейтронов), связанную мезонными обменами. Модели, основанные на мезон-нуклонной картине ядер, успешно описывают как статические свойства ядер, так и результаты взаимодействий лептонов и адронов с ядерными мишенями. В этих моделях, обычно называемых моделями среднего поля, ядерные нуклоны находятся на расстояниях 1.8–2.0 фм (1 фм $= 10^{-13}$ см) и движутся с нормальными ферми-импульсами $k_F = 200$–250 МэВ/с. Результатом исследований, выполненных в последнее десятилетие, стало понимание того, что традиционная мезон-нуклонная картина ядра должна быть дополнена важной частью, описывающей нейтроны и протоны, находящиеся на малых расстояниях, соизмеримых с размером нуклона ($R_N \sim 0.85$ фм), и имеющие импульсы $k > k_F$ [1–5]. Такие нуклоны появляются в результате флуктуаций ядерной плотности, когда два или большее количество нуклонов оказываются на расстояниях менее 1 фм. Плотность этих объектов, известных как короткодействующие нуклонные корреляции (short-range correlations, SRC) [6], в несколько раз больше средней ядерной плотности 0.16–0.17 фм$^{-3}$ и соизмерима с плотностью нейтронных звезд. Экспериментальная информация о свойствах ядерной материи на еще меньших межнуклонных расстояниях, $\leqslant 0.5$ фм, соответствующих так называемому ядерному «кору», крайне бедна [7]. На столь малых расстояниях ожидается переход адронной материи в состояние кварк-глюонной плазмы. Интерес к изучению динамики и свойств компактных нуклонных корреляций вызван не только необходимостью по-

* E-mail: yurikis@itep.ru

строения полной картины ядра и выяснения роли квантовой хромодинамики (КХД) в генерации ядерных сил. Понимание физики малых межнуклонных расстояний на количественном уровне также необходимо для корректной интерпретации результатов экспериментов по рассеянию электронов и нейтрино на ядрах, двойному безнейтринному β-распаду, описанию динамики слияния нейтронных звезд и ряда других астрофизических процессов [8].

2. МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ И ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА КОМПАКТНЫХ НУКЛОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

В нерелятивистском подходе информация о свойствах ядра содержится в его структурной функции $S(k, E_R)$ — комбинированной вероятности найти в ядре нуклон с импульсом k и энергией отделения E_R. В ряде случаев для описания свойств ядра используется функция $n(k)$ — импульсное распределение нуклонов в ядре, представляющее собой результат интегрирования $S(k, E_R)$ по E_R. Следует иметь в виду, что обе функции не являются непосредственно наблюдаемыми величинами и извлекаются из измеряемых сечений с использованием моделей. Но, несмотря на модельную зависимость результатов, благодаря усовершенствованию теоретических подходов и увеличению точности экспериментальных измерений, в последнее десятилетие достигнут существенный прогресс в понимании структуры ядер на малых межнуклонных расстояниях. Одним из важных достижений является установление подобия формы распределения $n(k)$ для легких и тяжелых ядер в области, содержащей нуклоны с импульсами $300 < k < 650$ МэВ/с.

Глубоко неупругое рассеяние лептонов на ядрах является эффективным методом исследования компактных нуклонных корреляций, благодаря комбинации точечно-подобной структуры лептонов и хорошо изученному взаимодействию лептонов с нуклонами через виртуальный фотон. Использование лептонов, не участвующих в сильных взаимодействиях, позволяет изучать результаты лептон-нуклонных столкновений во всем объеме ядра, оставляя ядро не возмущенным. Сечение инклюзивного рассеяния зависит от переменной Бьеркена $X_B = Q^2/2m\nu$, где Q^2 — квадрат четырехмерного импульса, переданного системе виртуальным фотоном, ν — переданная энергия, m — масса нуклона. Величина этой переменной может изменяться в диапазоне $0 \leqslant X_B \leqslant A$, а для корреляции, содержащей j нуклонов, находится в пределах $0 \leqslant X_B \leqslant j$. Информация о свойствах корреляций извлекается из данных как инклюзивных, так и полуинклюзивных реакций. В последних одновременно с рассеянным лептоном регистрируется один, два или три нуклона. Эксперименты по изучению свойств компактных ядерных объектов были выполнены в кинематических областях доминирования двухнуклонных корреляций: на электронных пучках при $X_B > 1.3$ и $Q^2 > 1.3\,(\text{ГэВ/с})^2$ [9,10] и на протонных пучках при переданных 4-импульсах $|u| \approx |-t| \gtrsim (1\text{–}2)\,(\text{ГэВ/с})^2$ [11,12]. Отбирались события, в которых нуклоны с импульсами более 300 МэВ/с регистрировались в направлении, близком к направлению виртуального фотона. Анализ результатов показал, что в каждый момент времени около 20% нуклонов входят в состав двухнуклонных корреляций. Эти нуклоны имеют большие, по сравнению с ферми-импульсом k_F, относительные импульсы $k_N > k_F$, тогда как импульс их центра масс $k_{cm} < k_F$. Измеренные импульсные и угловые характеристики реакций в области 300–650 МэВ/с соответствуют ожидаемым характеристикам процесса дезинтеграции (breakup) виртуальным фотоном компактных двухнуклонных корреляций [10]. Изучение изотопической структуры двухнуклонных корреляций показало, что количество протон-нейтронных пар с нулевым изоспином в 20 раз превышает количество протон-протонных и нейтрон-нейтронных пар [11]. Такая асимметрия является следствием доминирования тензорного взаимодействия между нуклонами на расстояниях около 1 фм [13]. Почти идентичные результаты, полученные в электрон-ядерных и протон-ядерных экспериментах в области больших передач энергии-импульса частицам конечного состояния, свидетельствуют о том, что оба класса реакций являются равноценными источниками информации о свойствах ядерной материи на малых расстояниях.

Почти 40 лет назад Европейская мюонная коллаборация (EMC) обнаружила неожиданное поведение отношения сечения глубоко неупругого рассеяния мюонов на ядре ^{56}Fe к сечению на дейтерии ^{2}D [14]. В области $0.35 \leqslant X_B \leqslant 0.7$ отношение, нормированное на число нуклонов в ядрах железа и дейтерия $R = (\sigma^{\text{Fe}}/56)/(\sigma^{\text{D}}/2)$, оказалось значительно меньше ожидаемого значения 1, уменьшалось с увеличением X_B и почти не зависело от величины Q^2. Такое поведение отношения, получившее название «эффект EMC», было многократно подтверждено данными других измерений, выполненных на разных ядерных мишенях от гелия до свинца, и продемонстрировавших усиление эффекта с

ростом массового числа ядра A. Эти эксперименты, явно указывающие на различие структурных функций свободных и связанных ядерных нуклонов, вызвали продолжительную и широкую дискуссию о причине эффекта EMC, однако однозначного ответа не было найдено.

Новую волну интереса к проблеме модификации кварковой структуры ядерных нуклонов инициировали недавние работы, выполненные экспериментаторами и теоретиками в лаборатории им. Джефферсона (JLab, США). Во-первых, анализ прецизионных данных по отношениям сечений на легких ядрах бериллия и бора к сечению на дейтроне [15] показал, что в области доминирования двухнуклонных корреляций величина эффекта EMC связана не со средней, а с локальной плотностью ядер. Во-вторых, была обнаружена линейная зависимость между величиной эффекта EMC, определяемой как значение наклона dR/dX_B отношения сечений на ядре A и ядре дейтерия в области $0.35 \leqslant X_B \leqslant 0.7$, и величиной отношения вероятностей существования двухнуклонных корреляций в этих ядрах [16, 17]. Эта удивительная эмпирическая зависимость позже была получена в двух различных теоретических подходах: импульсном приближении теории рассеяния и эффективной теории поля (EFT) [18]. Наличие такой связи указывает на существенное изменение структуры не всех нуклонов ядра, а только высокоимпульсных нуклонов, входящих в состав компактных нуклонных корреляций. Следует отметить, что эти нуклоны не находятся на массовой поверхности и характеризуются большими значениями виртуальности $v = K^2 - m^2$, где K и m — 4-импульс связанного нуклона и масса свободного нуклона соответственно [5, 19]. Установленные ранее и новые свойства этих объектов ядерной структуры свидетельствуют, что оба явления — эффект EMC и существование короткодействующих корреляций в ядрах — определяются не свойствами конкретных ядер, а свойствами «холодной» и плотной ядерной материи.

Описание взаимодействия с корреляциями в кинематической области больших передач энергии-импульса требует релятивистского подхода, в котором наиболее адекватными переменными являются переменная светового фронта α и Q^2 для лептон-ядерных столкновений или α и квадрат поперечного импульса P_T^2 для адрон-ядерных [19, 20]. Величина α_i определяет долю продольной компоненты импульса конституента i составного релятивистского объекта на световом конусе по отношению к такой же величине для всего объекта. Следуя работе [6], в области доминирующего вклада многонуклонных корреляций представим сечение реакции на ядре A в виде суммы сечений на конфигурациях, содержащих j нуклонов:

$$\sigma^A = \Sigma_{j=2}^A A(1/j) a_j(\alpha_j) \sigma_j(\alpha, P_T^2). \quad (1)$$

Здесь $\alpha_j(A)$ — нормированная на число нуклонов вероятность того, что j нуклонов ядра A входят в состав корреляции, $(A/j)\alpha_j(A) = n_j(A)$ — число таких корреляций, $\sigma_j(\alpha, P_T^2)$ — сечение взаимодействия с j-нуклонной корреляцией. Поскольку средняя плотность ядер невелика, в любых реалистических расчетах (см., например, [21]) вероятность α_{j+1} при всех A существенно меньше, чем α_j. Поэтому вклад в сечение области $j+1$ мал. Отбор событий с нуклонами, импульсы которых превышают максимальную величину импульса при их образовании на $(j-1)$-нуклонной корреляции, исключает вклад в сечение области $j-1$. Вследствие этого главный вклад в сечение вносит область $j-1 < \alpha < j$. Для случая $j = 2$ доминирующим является вклад двухнуклонных корреляций. В отношении сечений образования частиц, определенных уравнением (1), на тяжелом ядре A к соответствующему сечению на легком ядре B сечения на j-нуклонной корреляции $\sigma_j(\alpha, P_T^2)$ сокращаются. Поэтому в простой модели [6], не включающей поглощение вторичных частиц, отношения сечений, нормированные на числа нуклонов в ядрах,

$$r(A, B, j) = (B/A)[\sigma_j^A(\alpha, P_T^2)/\sigma_j^B(\alpha, P_T^2)] = \\ = n_j^A/n_j^B, \quad (2)$$

равны дискретным значениям при каждом j, а именно, отношениям чисел j-нуклонных корреляций в ядрах A и B. Это означает, что хотя абсолютная величина отношения r зависит от массовых чисел ядер A и B, формы высокоимпульсных компонент распределения нуклонов $n_j(k)$ универсальны для всех ядер. Экспериментальным проявлением универсальности компактных j-нуклонных конфигураций является независимость в некоторой области j отношения r от переменных α и P_T^2 (или X_B и Q^2) для любой пары ядер. Впервые такие плато в отношении сечений образования электронами высокоимпульсных протонов на серии ядер к сечению на дейтроне для $j = 2$ были наблюдены в экспериментах, проведенных на электронных пучках SLAC (США), и интерпретированы в работе [6]. Позже эти результаты были подтверждены рядом измерений, выполненных в JLab [22, 23].

Модели, претендующие на описание процессов с участием компактных нуклонных конфигураций

в ядрах, можно разделить на две основные группы. В моделях первой группы [1–3, 19] используются адронные степени свободы, и нуклоны, входящие в состав конфигураций, даже при экстремально малых межнуклонных расстояниях не теряют своей индивидуальности. Альтернативный подход базируется на предположении, что плотность корреляций и виртуальность входящих в них нуклонов достаточно велики, чтобы изменить структуру их нуклонных составляющих. В таких моделях на малых расстояниях нуклоны корреляции теряют свою индивидуальность и сливаются в многокварковые объекты [24–27]. Выяснение природы компактных и плотных объектов ядерной структуры является одной из самых актуальных задач современной ядерной физики. Для ее решения необходимо дальнейшее изучение их свойств, одним из которых является универсальность, означающая способность независимо от массового числа ядер A одинаковым образом участвовать в рождении частиц разных сортов, отражая свойства ядерной материи, а не конкретных ядер, в которых они образовались.

На языке кварковых моделей проверка справедливости равенства (2) в процессах глубоко неупругого рождения адронов, содержащих разные кварки, сводится к изучению зависимости универсальности корреляций от ароматов кварков. В настоящее время наличие универсальности установлено только в обсуждаемых выше реакциях дезинтеграции протон-нейтронных (uud–udd) пар, т. е. в процессах с участием легких u- и d-кварков. В настоящей работе изучен вопрос об универсальности корреляций в процессах рождения $\pi^+(u\bar{d})$- и $\pi^-(d\bar{u})$-мезонов, имеющих в своем составе другие комбинации легких кварков. Дальнейшая программа изучения универсальности включает принципиально важную проверку поведения корреляций при образовании частиц, имеющих в своем составе кварки, не входящие в состав нуклонов. Возможность расширения исследований на сектор странных и очарованных кварков в глубоко неупругих полуинклюзивных реакциях рождения каонов и J/ψ-мезонов лептонами на ядрах обсуждалась в работе [28]. В работе [29] предложено расширение изучения универсальности на сектор тяжелых кваркониумов $J/\Psi(\bar{c}c)$ и $\Upsilon(\bar{b}b)$ в процессах их глубоко подпорогового фотообразования на ядрах.

3. АНАЛИЗ КУМУЛЯТИВНЫХ РЕАКЦИЙ И ЕГО РЕЗУЛЬТАТЫ

Дополнительная информация о свойствах компактных нуклонных конфигураций может быть получена из анализа данных по образованию на ядрах высокоэнергичных кумулятивных адронов разных сортов. Кумулятивное образование адронов — процесс рождения частиц за пределами кинематики столкновений налетающей частицы с ядерными нуклонами, несущими нормальные ферми-импульсы, — так же, как и описанные выше реакции дезинтеграции протон-нейтронных пар, является процессом с большими передачами энергии-импульса. Для получения новых сведений об универсальности корреляций был проведен повторный анализ полученных нами ранее на ускорителе ИТЭФ данных о рождении протонами с энергией 10 ГэВ заряженных пионов двух знаков на наборе ядерных мишеней ^{9}Be, ^{27}Al, ^{63}Cu, ^{181}Ta [30, 31]. Было установлено, что при любом выборе переменных для описания поведения сечений, спектры π-мезонов на легких ярах ($A \leqslant 12$) уменьшаются быстрее с ростом импульса кумулятивных адронов, чем на средних и тяжелых ядрах, где они демонстрируют независимость от A[1)]. Вероятной причиной этого является кинематический эффект отдачи ядра-остатка при столкновении массивной сильно взаимодействующей частицы с нуклонной конфигурацией в ядре-мишени. В отсутствие спиновых эффектов сечение образования кумулятивных частиц зависит от трех переменных, в качестве которых мы выберем энергию столкновения $S^{1/2}$, продольную переменную α и квадрат поперечного импульса P_T^2. Измерение сечений образования π-мезонов было проведено при фиксированной энергии протонного пучка и, следовательно, при одинаковой величине $S^{1/2}$ для всех ядер. Из-за релятивистской природы конфигураций в настоящей работе для анализа данных в качестве продольной переменной используется модифицированная переменная светового фронта α, которая в случае взаимодействия с участием двухнуклонной конфигурации в реакции $Ab \to cX$ при конечной скорости движущегося ядра A имеет вид

$$\alpha_c^A = \frac{\alpha_c - m_c/m\gamma}{1 - 1/\gamma - m_b/(m(A-2)}. \qquad (3)$$

Здесь $\alpha_c = (E_c - P_c^l)/m$ — переменная светового фронта регистрируемой частицы c; m — масса нуклона; E_c и P_c^l обозначают полную энергию регистрируемой частицы c и продольную компоненту ее импульса в лабораторной системе соответственно; $\gamma = E_b/m_b$ — лоренц-фактор частицы b. Переменная α_c^A определена в системе быстро движуще-

[1)] Этим же свойством обладают спектры кумулятивных протонов и каонов.

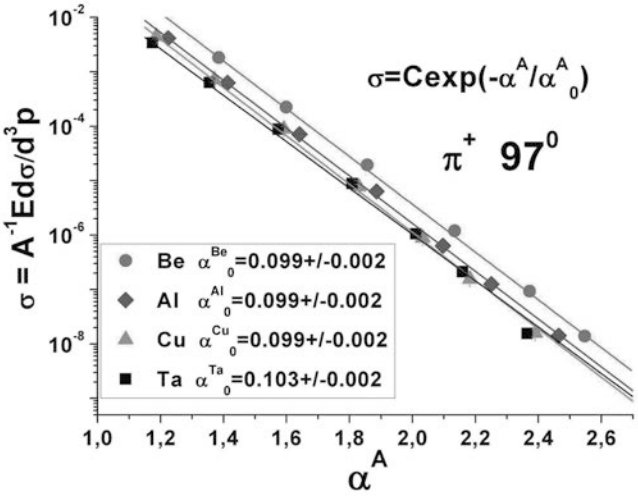


Рис. 1. Инвариантные сечения образования π^+-мезонов под углом 97° в единицах мб $\cdot$ ГэВ$^{-2}\cdot$ с$^3\cdot$ ср$^{-1}\cdot$ нуклон$^{-1}$ под действием протонов с энергией 10.14 ГэВ как функция переменной α^A. На рисунке указаны величины параметров наклона спектров с погрешностями, включающими статистические и систематические ошибки

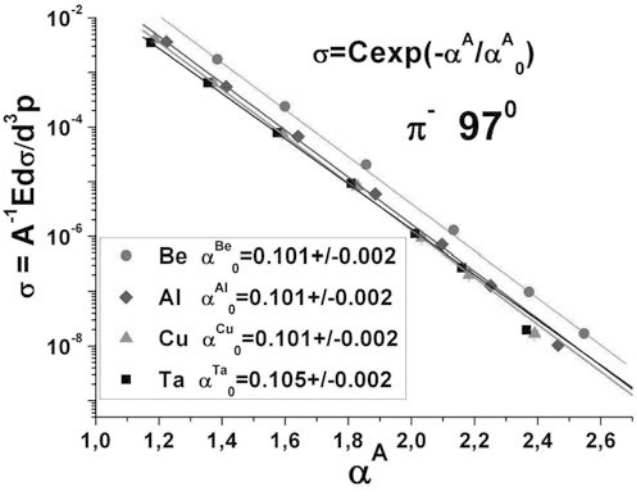


Рис. 2. Инвариантные сечения образования π^--мезонов под углом 97° в единицах мб $\cdot$ ГэВ$^{-2}\cdot$ с$^3\cdot$ ср$^{-1}\cdot$ нуклон$^{-1}$ под действием протонов с энергией 10.14 ГэВ как функция переменной α^A. На рисунке указаны величины параметров наклона спектров с погрешностями, включающими статистические и систематические ошибки

гося ядра A и учитывает как эффект отдачи ядра-остатка $A-2$ при столкновении двухнуклонной корреляции с частицей b, так и конечную скорость взаимодействующих объектов, γ. При анализе реакций под действием фотонов, электронов и нейтрино эффектом отдачи ядра можно пренебречь по причине малости величин $1/\gamma$ и m_b. При этом переменная α_c^A стремится к не зависящей от A переменной светового фронта α_c[2)]. Аналогичная переменная использовалась нами в работе [32] при анализе данных о рождении протонами кумулятивных каонов.

Представленные на рис. 1, 2 инвариантные сечения образования кумулятивных пионов, $A^{-1}Ed\sigma/d^3p$, изменяющиеся на 5 порядков величины в измеренном интервале α^A, могут быть описаны простой экспоненциальной зависимостью

$$A^{-1}Ed\sigma/d^3p = \text{const}\cdot\exp(-\alpha^A/\alpha_0^A).$$

Три набора точек на рис. 3 демонстрируют влияние эффекта отдачи ядра $A-2$ и энергетической поправки на форму спектра π^+-мезонов из легкого ядра ^{9}Be. Квадратами показан спектр как функция переменной α, не включающей никаких поправок. Треугольниками представлен спектр в зависимости от переменной α^{Be}, включающей только поправку на эффект отдачи ядра $A-2$. Согласно уравнению (3), величина этой поправки уменьшается с

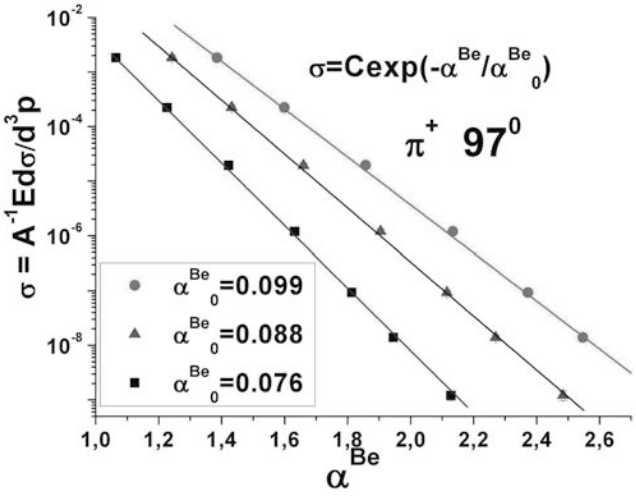


Рис. 3. Влияние поправок на форму спектра π^+-мезонов

увеличением A и становится не существенной для средних и тяжелых ядер, как это видно на рис. 1, 2. Кружками показан результат введения обеих поправок. На вставке рис. 3 приведены параметры наклонов спектров.

Спектры регистрируемых кумулятивных π-мезонов как функция переменной α^A имеют одинаковую форму для всех ядер. Количественной мерой подобия спектров частиц, рожденных под фиксированным углом, может служить разброс параметров наклона спектров α_0^A, величина которого, как видно из данных табл. 1, не превышает 2.5%. Причина различия параметров для углов регистрации 97° и 119° будет обсуждена ниже.

[2)] Поскольку в настоящей статье будет проведен анализ данных, относящихся только к рождению π-мезонов, далее индекс c мы будем опускать.

Таблица 1. Параметры наклона α_0^A спектров кумулятивных пионов, рожденных под углом θ в лабораторной системе, при их аппроксимации зависимостью $A^{-1}\,Ed\sigma/d^3p = \text{const}\cdot\exp(-\alpha^A/\alpha_0^A)$. В последнем столбце приведены усредненные по четырем ядрам значения χ^2/ndf, характеризующие качество аппроксимаций. Указанные ошибки — статистические. Систематическая ошибка, связанная в основном с диапазоном импульсов, включенным в параметризацию, составляет ± 0.0014

	Be	Al	Cu	Ta	θ, град.	χ^2/ndf
π^+-	0.099±0.001	0.099±0.001	0.099±0.001	0.103±0.001	97	1.4
π^+-	0.109±0.001	0.109±0.001	0.110±0.001	0.111±0.001	119	1.1
π^--	0.101±0.001	0.101±0.001	0.101±0.001	0.105±0.002	97	1.0
π^--	0.108±0.001	0.109±0.002	0.109±0.002	0.110±0.002	119	0.4

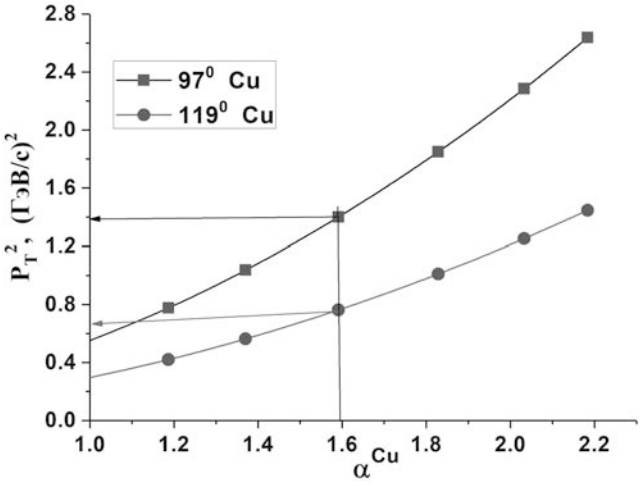


Рис. 4. Иллюстрация связи между переменными α^A и P_T^2 при фиксированных значениях α^{Cu}

Анализ данных, полученных под двумя углами 97° и 119°, позволяет получить более детальную информацию о поведении сечений, а именно, проследить зависимость сечения от продольной переменной при фиксированных значениях поперечной переменной и зависимость от поперечной переменной при фиксированных значениях продольной. Формула, определяющая значение переменной светового фронта регистрируемого π-мезона при фиксированном угле вылета θ в лабораторной системе, $\alpha = (E - p\cos\theta)/m$, связывает величину его импульса p с переменной α и, следовательно, величину поперечного импульса $p\sin\theta$ с переменной α^A, вычисленной с помощью равенства (3). На рис. 4 эта связь для ядра меди показана двумя линиями[3)]. Видно, что при любом выбранном α^{Cu} существуют два сечения, соответствующие двум разным углам и, следовательно, разным величинам P_T^2. Квадраты на верхней линии соответствуют импульсам π-мезонов в диапазоне 0.715–1.79 ГэВ/с, сечение рождения которых под углом 97° на ядре меди измерены и представлены в табл. 1 работы [30]. Кружки на нижней линии соответствуют мезонам с теми же значениями α^{Cu}, регистрируемыми под углом 119°. Сечения в этих точках как функция α^{Cu} вычислены с помощью параметризации спектров пионов, измеренных под углом 119° на ядре меди и представленных в табл. 2 работы [31]. Знание измеренных сечений образования пионов дает возможность оценить их изменение с увеличением P_T^2 при фиксированных значениях α^A, предполагая типичное для адронных процессов экспоненциальное уменьшение сечений с ростом поперечного импульса вида

$$Ed\sigma/d^3p \sim \exp(-P_T^2/\delta^2), \tag{4}$$

где величина показателя экспоненты вычисляется по формуле

$$\delta^2 = \frac{{}_{97}P_T^2 - {}_{119}P_T^2}{\ln[\sigma(\alpha,{}_{119}P_T^2)/\sigma(\alpha,{}_{97}P_T^2)]}. \tag{5}$$

Представленное на рис. 5 поведение показателя δ^2 означает, что с увеличением α^A эффект уменьшения сечений с ростом поперечного импульса становится более слабым. Тем не менее величина поперечного импульса продолжает увеличиваться, что свидетельствует об образовании кумулятивных π-мезонов на малых и уменьшающихся с ростом α^A расстояниях. Следствием этого является увеличение ядерной плотности в зоне пространственного перекрытия нуклонов корреляции, поскольку расстояние между нуклонами $r \sim \hbar c/P_T$ ($\hbar c = 0.196\,\text{ГэВ}\cdot\text{фм}$).

Как видно на рис. 6, при любой выбранной величине P_T^2 существуют два сечения, соответствующие двум разным углам и, следовательно, разным величинам α^{Cu}. Ромбы на нижней линии рис. 6 соответствуют изменению $0.504 < P_T^2 < 2.63\,(\text{ГэВ/с})^2$ для π^--мезонов, сечение рождения которых под углом 97° измерены и представлены в табл. 1 работы [30]. Треугольники на верхней линии соответствуют мезонам с теми же P_T^2, регистрируемыми под

[3)] $\alpha^{\text{Cu}} = 1.121(\alpha - 0.015)$.

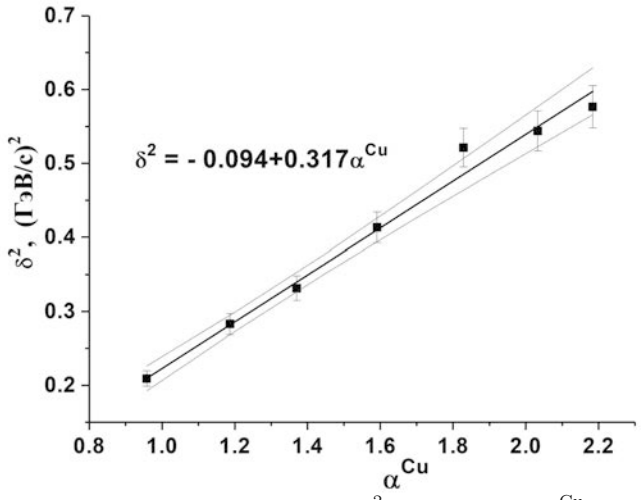


Рис. 5. Показатель экспоненты δ^2 как функция α^{Cu}. Коридор ошибок соответствует одному стандартному отклонению

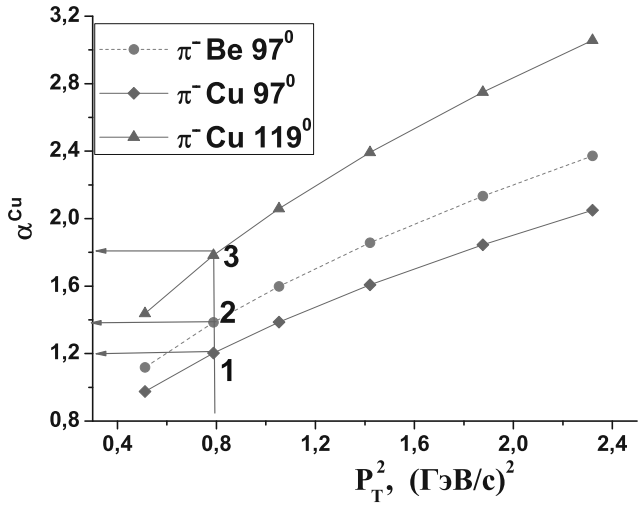


Рис. 6. Иллюстрация связи между переменными α^A и P_T^2 при фиксированных значениях P_T^2

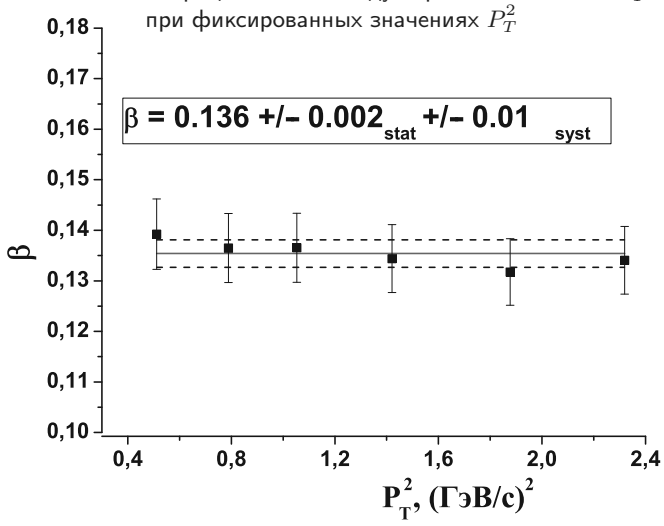


Рис. 7. Параметр наклона спектров β как функция P_T^2. Также указана средняя величина β и погрешность ее определения

углом 119°. Сечения в этих точках вычислены с помощью параметризации спектров, измеренных под углом 119° и представленных в табл. 2 работы [31]. Знание сечений и разностей α^A дает возможность оценить изменение сечений с ростом α^A при фиксированных значениях поперечного импульса, предполагая типичное для кумулятивных процессов экспоненциальное уменьшение сечения с ростом продольной переменной,

$$Ed\sigma/d^3p \sim \exp(-\alpha^A/\beta), \tag{6}$$

где величина показателя экспоненты вычисляется по формуле

$$\beta = \frac{\alpha^A_{119} - \alpha^A_{97}}{\ln[\sigma(\alpha, P_{T97})/\sigma(\alpha, P_{T119})]}. \tag{7}$$

Величины β одинаковы для всех ядер и постоянны во всем диапазоне P_T^2. Пример для ядра меди показан на рис. 7. Поскольку величины β больше приведенных в табл. 1 величин α_0^A для углов 97° и 119°, сечение образования кумулятивных пионов при фиксированных значениях P_T^2 уменьшается с ростом α^A медленнее, чем в случае измерения под фиксированным углом, где уменьшение сечения определяется не только увеличением α^A, но и одновременным увеличением поперечного импульса. Сравнение рис. 5 и рис. 7 показывает, что зависимости сечения образования кумулятивных пионов от продольной и поперечной переменных совершенно различны.

Сильная чувствительность сечений к изменению поперечного импульса приводит к более быстрому уменьшению сечений, измеренных под углом 97°, по сравнению с сечениями под углом 119°.

4. ПРОВЕРКА СООТНОШЕНИЯ УНИВЕРСАЛЬНОСТИ КОРРЕЛЯЦИЙ

Необходимое для проверки универсальности корреляций вычисление отношений сечений (уравнение (2)) при одинаковых значениях аргументов α^A и P_T^2 основано на результатах, полученных в разд. 3. Измерение сечений на всех ядерных мишенях при выбранных значениях импульсов проводилось под фиксированным углом, что автоматически обеспечивало равенство поперечных импульсов. Однако из-за зависимости переменной α^A от массового числа ядра (уравнение (3)) значения α^A оказываются разными для ядер с разными A. Процедура вычисления отношения сечений $R(\mathrm{Cu/Be})$ для реакции образования π^--мезонов протонами на ядрах меди и

бериллия при одинаковых α^A и P_T^2 иллюстрируется данными, приведенными на рис. 6 и 8.

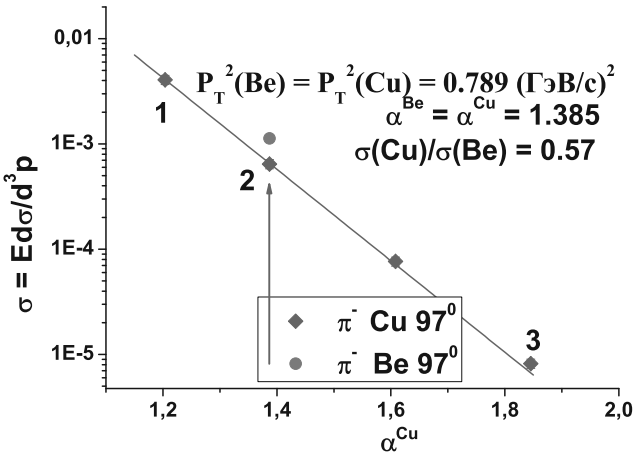


Рис. 8. Иллюстрация процедуры вычисления отношения сечений при одинаковых значениях α и P_T^2

Поскольку поведение сечения между точками *1* и *3* на рис. 6 определяется формулами (6), (7), значение сечения на ядре меди в точке *2* при равных для обоих ядер величинах P_T^2 и $\alpha^{\mathrm{Cu}} = \alpha^{\mathrm{Be}}$ может быть вычислено путем интерполяции по формуле

$$E\frac{d\sigma_2}{d^3p} = E\frac{d\sigma_1}{d^3p}\exp\left(-\frac{\alpha_2-\alpha_1}{\beta}\right). \qquad (8)$$

Инклюзивные сечения при $\alpha^A = 1.385$ и $P_T^2 = 0.789\,(\text{ГэВ/с})^2$ на ядрах бериллия и меди показаны на рис. 8 кружком и ромбом соответственно. Сечение на ядре ^{9}Be взято из табл. 1 работы [30]. Видно, что отношение сечений $R(\mathrm{Cu/Be}) < 1$. Аналогичным образом вычисляются отношения $R(\mathrm{Cu/Be})$ при одинаковых значениях α^A и P_T^2 для всех измеренных точек. Эта же процедура используется для определения отношений $R(\mathrm{Al/Be})$ и $R(\mathrm{Ta/Be})$.

На рис. 9 приведены отношения сечений образования протонами с энергией 10.14 ГэВ кумулятивных π^+- и π^--мезонов на ядрах с массовым числом A к соответствующему сечению на ядре бериллия. Величины сечений разделены на числа нуклонов в ядрах. Сплошные горизонтальные прямые — результат фитирования с одним параметром (константой)[4)]. Диапазоны фитирования выбраны по данным для π^--мезонов.

В области $1.2 < \alpha^A < 1.7$, где доминирующий вклад в сечения вносят взаимодействия с двухнуклонными корреляциями, отношения сечений не зависят ни от α^A, ни от P_T^2, тогда как абсолютные значения сечений, соответствующие разным точкам, различаются на 5 порядков величины, а поперечные импульсы изменяются от 0.7 до 1.8 ГэВ/с. Такое поведение сечений является сигналом универсальности корреляций. Универсальность двухнуклонных корреляций в процессах рождения пионов двух знаков наблюдена впервые. Как для π^+-, так и для π^--мезонов при $\alpha^A > 2$ величина отношений на всех ядрах заметно увеличивается, что может быть интерпретировано как проявление участия трехнуклонных корреляций в процессе образования пионов с большими импульсами. Согласно равенству (2) отношения сечений $r_{j=2}(A/\mathrm{Be})$ и $r_{j=3}(A/\mathrm{Be})$, измеренные в соответствующих диапазонах α^A, связаны с отношениями вероятностей существования корреляций $j = 2$ и $j = 3$ в этих ядрах. Это позволяет провести сравнение величин отношений сечений рождения π^+- и π^--мезонов на $2N$- и $3N$-корреляциях в разных ядрах как с соответствующими величинами, извлеченными из анализа данных по рождению протонов в электрон-ядерных реакциях, так и с результатами модельных расчетов. Необходимые для сравнения данные собраны в табл. 2. Самой легкой мишенью в наших экспериментах было ядро ^{9}Be, в то время как во многих работах измерены отношения сечений на разных ядрах к сечениям на дейтерии или гелии-3. Тем не менее эти данные могут быть использованы для сравнения необходимых нам отношений. Так, например, отношение сечения на меди к сечению на бериллии в области доминирования j-нуклонной корреляции вычисляется как

$$r_j(\mathrm{Cu/Be}) = r_j(\mathrm{Cu/D})/r_j(\mathrm{Be/D}),$$

поскольку сечения на дейтроне (или гелии-3) сокращаются в отношениях.

Более детальное рассмотрение процесса получения информации о свойствах нуклонных корреляций требует выхода за рамки простой модели образования адронов, предсказывающей, согласно уравнению (2), равенство отношений сечений r_j, измеренных в инклюзивных реакциях, и отношений чисел j-нуклонных корреляций в ядрах. Экспериментальные результаты полуинклюзивных реакций по дезинтеграции нейтронно-протонных пар также находятся в согласии с этим предсказанием, в то время как наблюдаемые абсолютные величины отношений сечений образования пионов в полуинклюзивных процессах существенно меньше. Одной из возможных причин этого является разное поглощение адронов при их распространении по ядру. Влияние

[4)] Фитирование линейной функцией с двумя параметрами дает величину параметра наклона с ошибкой порядка величины параметра и не содержит новой информации.

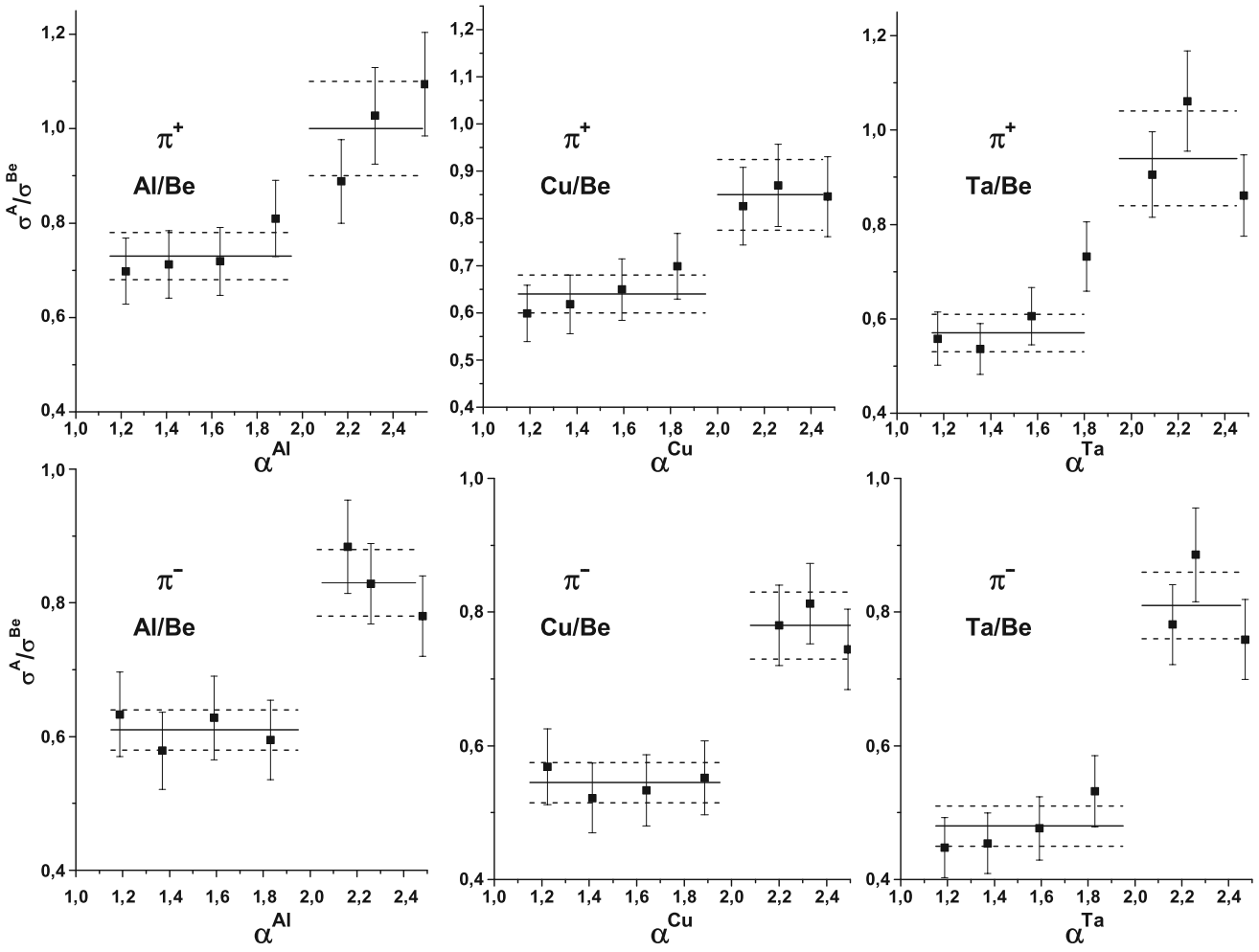


Рис. 9. Зависимости от α^A отношений сечений образования протонами кумулятивных π^+-мезонов (верхний ряд) и π^--мезонов (нижний ряд) на ядрах с массовым числом A к соответствующим сечениям на ядре Be

этого эффекта может быть учтено введением в равенство (2) факторов поглощения [33]:

$$R = r(f^A/f^B). \tag{9}$$

Здесь r определено равенством (2), f^A и f^B — факторы поглощения вторичных частиц в тяжелом ядре A и легком ядре B соответственно. Очевидно, что отношение $(f^A/f^B) \leqslant 1$, поэтому ожидаемые величины R, извлеченные из полуинклюзивных реакций, не могут превышать соответствующие величины для инклюзивных реакций, равные отношениям чисел j-нуклонных корреляций n_j^A/n_j^B. Для вычисления отношений, приведенных во второй и третьей колонках табл. 2, использовались данные, представленные на рис. 9. Отношения в четвертой колонке вычислены из данных колонок 3 и 4 табл. I работы [34], в которой собрана вся информация об отношениях сечений в области доминирования двухнуклонных корреляций и довольно бедные сведения о рождении протонов, возникающих при дезинтеграции нуклонных троек в электрон-ядерных реакциях[5)]. В последней колонке табл. 2 приведены отношения вероятностей существования кварковых кластеров, содержащих 6 и 9 кварков в ядрах с массовым числом A к соответствующей величине в яд-

Таблица 2. Отношение сечений образования π^+- и π^--мезонов $R(3/2) = R_{j=3}(A/\mathrm{Be})/R_{j=2}(A/\mathrm{Be})$ на ядрах с массовым числом A к соответствующим сечениям на ядрах бериллия

R	π^+	π^-	P [34]	[21]
Al/Be	1.37 ± 0.17	1.35 ± 0.16	1.32 ± 0.15	1.71
Cu/Be	1.33 ± 0.16	1.42 ± 0.17	1.38 ± 0.17	1.89
Ta/Be	1.65 ± 0.22	1.72 ± 0.23	1.45 ± 0.22	1.96

[5)] Отношение для ядра алюминия получено путем интерполяции данных [34] для углерода и меди.

ре бериллия, вычисленные по данным табл. IV работы [21]. Величины $R_{j=2}(A/\mathrm{Be})$, отражающие относительные вероятности существования двухнуклонных конфигураций в произвольном ядре A и выбранном легком ядре, выражаются через отношения измеренных сечений и могут быть определены из компиляции всех имеющихся данных с точностью 5–8%. Точность экспериментальных данных по отношениям $R_{j=3}(A/\mathrm{Be})$ составляет около 15% [34].

В работе [34] рассмотрены три экспериментальных критерия существования трехнуклонных корреляций. Первый — это наблюдение плато в отношении сечений на ядрах в области, где $3N$-корреляция вносит основной вклад в сечение. В этой области отношение $R_{j=3}(A/\mathrm{Be})$ не зависит от α и Q^2 или от α и P_T^2. Второй связан с переходом от области корреляции $j=2$ к области корреляции $j=3$. В проведенном анализе данных по поиску малонуклонных корреляций в эксперименте по рождению высокоэнергичных протонов пороговое значение α, при котором вклад в сечение корреляции $j=3$ становится заметным, оценено как $\alpha \approx 1.6$ [19]. Третьим критерием, основанным на предложенном в [34] механизме образования трехнуклонных корреляций, является квадратичное соотношение между вероятностями существования в ядре A корреляций с $j=3$ и $j=2$ и, следовательно, между отношениями соответствующих сечений

$$R_{j=3}(A) \approx R_{j=2}^2(A). \tag{10}$$

Точность этого предсказания оценивается авторами как 10%. Учет поглощения вторичных адронов, необходимый для извлечении информации о свойствах корреляций из анализа полуинклюзивных реакций, сильнее изменяет абсолютные значения сечений, чем из отношения. Поэтому при сравнении полуинклюзивных данных, полученных на электронных и протонных пучках, представим предсказание (10) в виде отношения

$$R(3/2) \approx R_{j=3}(A)/R_{j=2}(A) = R_{j=2}(A). \tag{11}$$

Теперь сопоставим приведенные выше критерии существования $3N$-корреляций и экспериментальные результаты, представленные на рис. 9. В анализируемых данных по рождению π-мезонов протонами в кумулятивных реакциях с большими передачами энергии-импульса так же, как в электрон-ядерных реакциях [34], наблюдаются плато, соответствующие $2N$- и $3N$-корреляциям. Переход между областями доминирования корреляций также начинается при $\alpha^A \approx 1.6$. Данные табл. 2 показывают, что критерий (11) выполняется и в реакции, индуцированной протонами. Отношения сечений $R(3/2)$ в области превалирования соответствующих корреляций для π^+- и π^--мезонов, полученные в реакциях под действием протонов, совпадают в пределах ошибок с отношениями для протонов, измеренными в реакциях под действием электронов. Отношения, вычисленные в модели кварковых кластеров [21] без учета поглощения регистрируемых частиц и приведенные в последней колонке табл. 2, также находятся в разумном соответствии с экспериментальными данными[6)]. Равенство величин $R(3/2)$ для разных комбинаций ядер свидетельствует, что отношение характеризует ядерную материю и не зависит ни от свойств конкретных ядер, ни от способов его измерения. Таким образом, результаты сравнения являются первыми значимыми свидетельствами в пользу наблюдения трехнуклонной конфигурации в протон-ядерных реакциях.

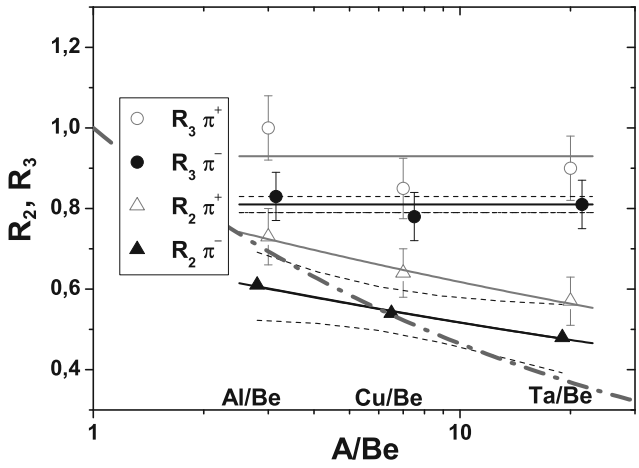


Рис. 10. A-зависимость отношений $R_j = (9/A)(\sigma_j^A/\sigma_j^{\mathrm{Be}})$ сечений образования π^+-мезонов (светлые символы) и π^--мезонов (темные символы) в области доминирования $2N$-корреляций (треугольники) и $3N$-корреляций (кружки). Для удобства восприятия символы немного сдвинуты вдоль оси A/Be, а коридоры неопределенностей, соответствующие одному стандартному отклонению от аппроксимирующих кривых, показаны пунктирными линиями только для π^--мезонов.

Как видно на рис. 9, 10, отношения сечений $R_{j=3}(A/\mathrm{Be})$ заметно больше, чем $R_{j=2}(A/\mathrm{Be})$, что означает более сильную A-зависимость процесса образования мезонов в области доминирования $3N$-корреляций и еще раз свидетельствует о том, что величина сечений связана с локальной, а не средней ядерной плотностью. Отношение $R_{j=2}(A/\mathrm{Be})$ с ростом размеров ядер следует степенной зависимо-

[6)] Заметим, что в этой модели соотношение (10) выполняется с точностью около 5%.

сти $(A/\mathrm{Be})^n$ с $n = -0.131 \pm 0.013$ для π^+-мезонов и $n = -0.125 \pm 0.011$ для π^--мезонов. Эти величины значительно больше, чем $n = -0.34 \pm 0.02$ [35] или $n = -0.289 \pm 0.007$ [36], соответствующие образованию протонов на поверхности ядер в процессе дезинтеграции нуклонных пар в электрон-ядерных реакциях[7)]. В области преобладающего вклада в сечение двухнуклонных корреляций уменьшение отношений сечений с увеличением A, наблюдаемое в работах [35, 36], хорошо воспроизводится расчетами в глауберовском приближении с известными пион-нуклонными сечениями в свободном пространстве. В области доминирования трехнуклонных корреляций увеличение до 0.8–0.9 отношений $R_{j=3}(A/\mathrm{Be})$, практически не зависящих от массового числа A и аппроксимированных на рис. 10 константами, указывает на изменение поверхностного характера рождения пионов. Результат выполненного нами расчета в глауберовском приближении с величиной пион-нуклонного сечения $\sigma = 30mb$ для π^+-мезонов показан на рис. 10 штрихпунктирной кривой. Как и в цитированных выше работах, значение $n = -0.30 \pm 0.02$, однако не только величина, но и форма кривой не соответствует экспериментальным данным, демонстрирующим гораздо более слабое поглощение π-мезонов в ядрах по сравнению с предсказанным адронными моделями.

Отметим также, что обсуждаемые данные с регистрацией протонов или пионов получены в разных кинематических областях. Данные по дезинтеграции нуклонных пар измерены в квазиупругой кинематике при относительно небольших значениях $Q^2 \approx 1.3$–$1.5(\,\mathrm{ГэВ/с})^2$. Значения переменной Бьеркена $X_B = Q^2/2m\nu \geqslant 1$ достигаются за счет отбора событий с малыми передачами энергии ν конечному состоянию реакции. Легко оценить, что, например, в области перехода от $2N$- к $3N$-корреляции при $X \approx 1.6$, величина

$$\nu = Q^2/2mX \leqslant 1.4/(2 \cdot 1 \cdot 1.6) \approx 0.4\,\mathrm{ГэВ}.$$

В целом ряде работ (см., например, [1,2,19]) показано, что при малых передачах энергии вклад неупругих процессов подавлен и преобладающим становится взаимодействие нуклонов корреляции друг с другом, а не с нуклонами ядра-остатка $A-2$. В этих специфических условиях эффект поглощения мал, не зависит от A и сокращается в отношении сечений, не нарушая равенства (2). Показанные на рис. 9 отношения получены в кинематической области значительных передач энергии частицам конечного состояния, которые не могут быть меньше, чем энергии детектируемых пионов, находящиеся в диапазоне 0.6–1.8 ГэВ. Это область существенного вклада в сечение неупругих процессов, для которой применимость аргументов в пользу локализации взаимодействий в конечном состоянии в области корреляций вызывает серьезные сомнения. Рост величины $|-t|$ с увеличением импульсов пионов, играющий ту же роль, что и рост Q^2 в электрон-ядерных реакциях, сдвигает кинематическую область образования π-мезонов к области глубокой неупругости, для описания которой необходимо использование кварковых степеней свободы. В адронных моделях для описания уменьшения потока рожденных частиц общепринятым является глауберовский подход, в котором величина эффекта поглощения определяется сечением взаимодействия в свободном пространстве вторичных адронов с нуклонами ядра-остатка $A-2$. Кварковые модели рождения и распространения частиц в ядерной среде (см., например, [37,38]) предсказывают меньшую величину эффекта поглощения по сравнению с адронными моделями. Поэтому наблюдаемые абсолютные величины отношений сечений и характер их A-зависимости, измеренные в разных кинематических областях, могут быть различными. Для понимания процесса распространения в ядрах вторичных частиц, образованных в реакциях с большими передачами энергии-импульса, необходимы дальнейшие совместные усилия экспериментаторов и теоретиков.

Сравнение с данными отсутствующих сегодня расчетов поглощения адронов, рожденных в существенно неупругих взаимодействиях и содержащих разные комбинации кварков, могли бы дать ценную информацию о таких недостаточно изученных непертурбативных процессах КХД, как адронизация и конфайнмент. Характерные для этих процессов расстояния составляют несколько ферми, что соизмеримо с размерами ядер, которые исполняют роль «анализаторов» взаимодействий рожденных частиц с барионным окружением. В частности, использование ядер разных размеров для изучения распространения адронов, содержащих в своем составе кварки разных ароматов, предоставляет возможность определить время жизни адронов в цветном состоянии (color lifetime) [33,39] . Такая информация не может быть получена в нуклон-нуклонных взаимодействиях, что является демонстрацией важной роли ядра в решении проблем КХД.

[7)] Сечения, не нормированные на число нуклонов в ядре A, следуют зависимости $A^n A^1$ с величиной показателя $-1/3+1 = 2/3$, что принято интерпретировать как следствие образования регистрируемых частиц на поверхности ядра.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Ядерная материя на малых расстояниях представлена компактными объектами, возникающими в результате флуктуаций ядерной плотности, при которых два или большее число нуклонов в течение короткого временного промежутка оказываются на расстояниях порядка радиуса нуклона. Барионная плотность таких флуктуаций в несколько раз превышает нормальную ядерную плотность. Ответ на вопрос, являются ли эти объекты структуры ядер на малых расстояниях компактными корреляциями нуклонов или многокварковыми конфигурациями, сегодня отсутствует, поэтому выяснение их природы — одна из актуальных задач современной ядерной физики и астрофизики. Для получения ответа необходимо расширение экспериментальной информации о свойствах этих объектов, источником которой являются процессы с большими передачами энергии-импульса. Выполненный выше анализ продемонстрировал, что данные по кумулятивному образованию пионов в протон-ядерных столкновениях могут быть использованы для получения новых сведений о структуре ядерной материи на малых межнуклонных расстояниях наравне с результатами экспериментов по глубоко неупругому рассеянию лептонов на ядрах. Одним из важных свойств локально плотных ядерных объектов является их универсальность, означающая способность независимо от массового числа ядер A одинаковым образом участвовать в рождении частиц разных сортов, отражая свойства ядерной материи, а не конкретных ядер, в которых они образовались.

В настоящей работе впервые установлено, что рождение кумулятивных π^+- и π^--мезонов в области доминирующего вклада в сечение взаимодействий с двухнуклонными объектами обладает свойством универсальности. Таким образом, получено новое свидетельство универсальности свойств компактных барионных объектов в секторе легких кварков, наблюдаемое ранее только для протонов, возникающих в процессе дезинтеграции протон-нейтронных пар. Отличие абсолютных величин отношений сечений от наблюдаемых в электрон-ядерных реакциях, по-видимому, связано с тем, что данные о рождении π-мезонов получены в неизученной кинематической области передач энергии, значительно превосходящих передачи, характерные для реакции дезинтеграции нуклонных пар. Расчеты поглощения вторичных адронов для этой кинематической области сегодня отсутствуют. Наблюдаемая независимость от A формы спектров π^+- и π^--мезонов и их слабое, по сравнению с ожидаемым в адронных моделях, поглощение указывают на необходимость использования для их описания кварковых степеней свободы и являются аргументами в пользу кварковой природы компактных барионных флуктуаций ядерной материи.

Впервые получены свидетельства вклада $3N$-корреляций в сечение рождения высокоэнергичных π-мезонов в адрон-ядерных реакциях. Такие компактные флуктуации холодной ядерной материи являются самыми плотными объектами, изучение которых возможно сегодня в наземных экспериментах. При полном пространственном перекрытии родительских нуклонов барионная плотность этих образований в 7 раз превышает плотность нормальных ядер, что соизмеримо с плотностью нейтронных звезд. Надежное наблюдение и изучение свойств таких компактных внутриядерных объектов в экспериментах, планируемых в JLab12 [40] и на строящихся электрон-ионных коллайдерах [41, 42], являются важными шагами на пути исследования сверхплотной холодной барионной материи и существенным продвижением вдоль оси плотности фазовой диаграммы КХД при малой температуре.

Благодарности. Автор благодарен В. А. Шейнкману за внимательное прочтение рукописи и критические замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Ciofi degli Atti, Phys. Rep. **591**, 99 1 (2015).

2. O. Hen et al., Rev. Mod. Phys. **89**, 045002 (2017).

3. J. Arrington et al., Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **72**, 307 (2022); arXiv: 2203. 02608 [nucl-ex].

4. B. Schmookler et al., Nature **566**, 354 (2019).

5. J. Cloet et al., J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **46,** 093001 (2019).

6. L. L. Frankfurt, M. I. Strikman, D. B. Day et al., Phys. Rev. C **48**, 2451 (1993).

7. A. Schmidt et al., Nature **578**, 540 (2020).

8. T. Fischer, N. U. F. Bastain, M. R. Wu et al., Nat. Astron. **2**, 980 (2018); E. R. Most, L. J. Papenpost, V. Dexheimer et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 061101 (2019); M. Duer et al., Nature **560**, 617 (2018); H. Gallagher, G. Garvey, and G. P. Zeller, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **61**, 355 (2011); Hao Lu, Zhoungzhou Ren, and Dong Bai, Nucl. Phys. A **1021**, 122408 (2022).

9. R. Shneor et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 072501 (2007).

10. R. Subedy et al., Science **320**, 1476 (2008).

11. E. Piasetzky, M. Sargsian, and L. Frankfurt, Phys. Rev. Lett. **97**, 162504 (2006).

12. A. Tang, J. W. Watson, J. Aclander et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 042301 (2003).

13. R. Schiavilla et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 132501 (2007).

14. J. Aubert et al., Phys. Lett. B **123**, 275 (1983).

15. J. Seely et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 202301 (2009); A. Karki et al., arXiv: 2207.03850 [nucl-ex].

16. L. B. Weinstein et al., Phys. Rev. Lett. **106**, 052301 (2011).

17. O. Hen et al., Int. J. Mod. Phys. E **22**, 1330017 (2013).

18. J.-W. Chen et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 262502 (2017).

19. L. L. Frankfurt and M. I. Strikman, Phys. Rep. **76**, 215 (1981); Phys. Rep. **160**, 235 (1988).

20. O. Artiles and M. M. Sargsian, Phys. Rev. C **94**, 064318 (2016).

21. M. Sato, S. A. Coon, H. J. Pirner, and J. P. Vary, Phys. Rev. C **33**, 1062 (1986).

22. K. S. Egiyan et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 082501 (2006).

23. N. Fomin et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 092502 (2012).

24. A. V. Efremov, A. B. Kaidalov, G. I. Lykasov, and N. V. Slavin, Phys. Atom. Nucl. **57**, 874 (1994).

25. M. A. Braun and V. V. Vechernin, Nucl. Phys. B **427**, 614 (1994).

26. H. J. Pirner and J. P. Vary, Nucl. Phys. A **358**, 413c (1981); Phys. Rev. C **84**, 015201 (2011).

27. J. R. West, S. J. Brodsky, G. F. de Teramond et al., Nucl. Phys. A **1007**, 122134 (2021).

28. Yu. T. Kiselev, Chinese Phys. C **46**, 014004 (2022).

29. Yoshitaka Hatta, Mark Strikman, Ji Hu, and Feng Yuan, arXiv: 1911.11706 [hep-ph].

30. S. V. Boyarinov et al., Phys. Atom. Nucl. **57**, 1379 (1994).

31. S. V. Boyarinov et al., ЯФ (J. Nucl. Phys.) **46**, 1472 (1987).

32. S. V. Boyarinov et al., ЯФ (J. Nucl. Phys.) **50**, 1605 (1989).

33. Yu. T. Kiselev, V. A. Sheinkman, A. V. Akindinov et al., Phys. Rev. C **85**, 054904 (2012).

34. M. M. Sargsian, D. B. Day, L. L. Frankfurt, and M. I. Strikman, Phys. Rev. C **100**, 044320 (2019); arXiv:1803.07629 [nucl-th].

35. O. Hen, H. Hakobyan, R. Shneor et al., Phys. Lett. B **722**, 63 (2013); arXiv: 1212.05543 v3 [nucl-ex].

36. M. Duer, O. Hen, E. Piasetzky et al., Phys. Lett. B (2023); arXiv: 1811.01823 [nucl-ex].

37. B. Z. Kopeliovich et al., Nucl. Phys. A **782**, 224c (2007).

38. D. Domday et al., Nucl. Phys. A **825**, 200 (2009).

39. W. K. Brooks and J. V. Lopez, Phys. Lett. B **816**, 136171 (2021).

40. N. Fomin, J. Arrington, and S. Li, LOI12-21-001 (2021); https://www.jlab.org/physics/3N Short-Range Correlations.

41. J. Arrington et al., arXiv: 2112.00060 [nucl-ex].

42. K. Devereau et al., arXiv: 2303.08143 [hep-ph].

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 977–979 © 2023

QUANTUM SUPERMEMBRANES AND ADS/CFT DUALITY

A. A. Tseytlin [a,b,c*]

[a] *Blackett Laboratory, Imperial College*
SW7 2AZ, London, UK

[b] *Institute for Theoretical and Mathematical Physics, Moscow State University*
119991, Moscow, Russia

[c] *Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences*
119991, Moscow, Russia

Received September 5, 2023,
revised version September 5, 2023
Accepted for publication September 7, 2023

Extended Abstract. The full text of this paper is published in the English version of JETP.

DOI: 10.31857/S0044451023120118

EDN: MXMLBW

Dedicated to the memory of Valery Rubakov

Testing AdS/CFT duality [1, 2] is an important direction of research leading to novel non-trivial results on both gauge theory and dual string theory sides. Most of the work so far was done for duality of 4d super Yang-Mills theory and type IIB 10d string theory in $AdS_5 \times S^5$ background. The aim of this paper is to review and extend some recent work [3, 4] on testing AdS/CFT correspondence between supersymmetric $U(N)_k \times U(N)_{-k}$ Chern-Simons-matter 3d gauge theory and M-theory in $\mathrm{AdS}_4 \times S^7/\mathbf{Z}_k$ background [5, 6] (ABJM theory).

Membrane theory with the bosonic action dating back to Dirac [7] remains an enigma. While the existence of a consistent quantum theory of bosonic membranes may be in doubt, it may happen to be well defined for the 11d supermembrane or M2 brane theory [8]. The large amount of supersymmetry and possibly some unknown hidden symmetries may lead to its UV finiteness despite formal power-counting nonrenormalizability. This may be true, in particular, for the supermembrane in the maximally supersymmetric $\mathrm{AdS}_4 \times S^7$ or $\mathrm{AdS}_7 \times S^4$ backgrounds [9, 10].

While the M2 brane action is highly non-linear, expanded near a classical solution with non-degenerate induced 3d metric it can be quantized in a static gauge. Then the leading 1-loop result for its partition function is UV finite and thus unambiguous [3, 4, 11, 12].

The M2 brane action in 11d background is related to the type IIA string in the corresponding 10d background by a double dimensional reduction [13]. Considering M2 brane world volume of topology $\Sigma^2 \times S^1$ and expanding 3d fields in Fourier modes in S^1 coordinate one gets an effective 2d string action on Σ^2 coupled to an infinite tower of massive 2d fields. Choosing a static gauge in the M2 brane action one gets a static gauge Nambu-Goto action for the massless transverse string modes coupled to a tower of the massive "Kaluza-Klein" 2d modes. This "effective string" 2d action is essentially equivalent to the original M2 brane action and thus may inherit some of its hidden symmetries.

The work described below provides a remarkable evidence that direct semiclassical quantization of the M2 brane in $\mathrm{AdS}_4 \times S^7/\mathbf{Z}_k$ background reproduces the results of large N localization computations [14–16] of the 1/2-BPS Wilson loop and the instanton contributions to free energy in the ABJM gauge theory.

Our first example is the 1/2-BPS Wilson loop. For fixed k, the large N expansion of the Wilson loop operator in the ABJM theory corresponds to the expansion in the large effective M2 brane tension $R^3 T_2 \sim \sqrt{Nk}$, where R is the curvature radius of $\mathrm{AdS}_4 \times S^7/\mathbf{Z}_k$ and $T_2 = 1/((2\pi)^2 \ell_P^3)$. The analytic expression for the expectation value of the 1/2-BPS circular Wilson loop in the ABJM theory was derived

* E-mail: atseytlin@gmail.com

using supersymmetric localization in [15]. In order to compare to the semiclassical expansion in the M2 brane world-volume theory, one is to expand this expression at large N with fixed k, which gives

$$\langle W_{\frac{1}{2}}\rangle = \frac{1}{2\sin(\frac{2\pi}{k})} e^{\pi\sqrt{\frac{2N}{k}}} \times \\ \times \Big[1 - \frac{\pi\left(k^2+32\right)}{24\sqrt{2}\,k^{3/2}}\frac{1}{\sqrt{N}} + O(\frac{1}{N})\Big]. \quad (1)$$

The Wilson loop has a dual description in terms of an M2 brane wrapped on $\mathrm{AdS}_2 \times S^1$ [17] in the M-theory background $\mathrm{AdS}_4 \times S^7/\mathbf{Z}_k$. One finds [3] that the exponential factor in (1) is reproduced by the classical action of the M2 brane with $\mathrm{AdS}_2 \times S^1$ world-volume, while the k-dependent prefactor $(2\sin(2\pi k))^{-1}$ is matched precisely by the 1-loop correction coming from the functional determinants of the quantum fluctuations around this M2 brane solution.

The non-perturbative part of the ABJM theory free energy found from localization is [16]

$$F^{\rm np}(N,k) = F_1^{\rm inst}(N,k)\times \\ \times \Big[1 + \frac{\pi}{\sqrt{2k}}\frac{k^2-40}{12k}\frac{1}{\sqrt{N}} + ...\Big], \\ F_1^{\rm inst}(N,k) = -\frac{1}{\sin^2(\frac{2\pi}{k})}\, e^{-2\pi\sqrt{\frac{2N}{k}}}\,. \quad (2)$$

Here $F_1^{\rm inst}$ is the leading large N term in the 1-instanton contribution. In the type IIA string theory regime (i.e., for large N and k with $\lambda = N/k$=fixed) it may be interpreted as the contribution of the string world-sheet instanton (wrapping CP^1 in CP^3 [18]). In the M-theory regime (i.e. for large N with fixed k), the world-sheet instantons correspond to the M2 brane instantons wrapping the 11d circle and a CP^1 in CP^3, i.e., $S^3/\mathbb{Z}_k \subset S^7/\mathbf{Z}_k$. Computing the corresponding classical M2 brane action and 1-loop fluctuation determinants [4] one matches precisely the exponential and its prefactor in (2).

As another example of the quantum M2 brane computation in $\mathrm{AdS}_4 \times S^7/\mathbf{Z}_k$ one may consider the 1-loop correction to the partition function expanded near the classical M2 brane solution generalizing infinitely long rotating folded string [19, 20] in AdS_4. It determines leading large λ corrections at each order in $1/N$ to the cusp anomaly function in ABJM theory [21]. The predicted generalization of the planar cusp anomaly in ABJM theory [22–24] to include leading at large terms at each order in $1/N$ reads

$$\hat{f}(k) = c_0 + f(k) = -\frac{5}{2\pi}\log 2 + \frac{2\pi}{3k^2} + \frac{2\pi^3}{45k^4} + \ldots = \\ = -\frac{5}{2\pi}\log 2 + \frac{2\pi\lambda^2}{3N^2} + \frac{2\pi^3\lambda^4}{45N^4} + \ldots$$

From the point of view of the 't Hooft limit of large N and large $k = N/\lambda$ these corrections are non-planar corrections to the cusp anomaly. This result is a non-trivial strong-coupling prediction about non-planar correction to the anomalous dimension of a high-spin operator in the ABJM theory. Being non-planar it is unlikely to be captured by integrability methods. Also, as the cusp anomaly corresponds to a non-supersymmetric observable (anomalous dimension of a non-BPS operator) it is unlikely to be captured by a localization computation.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. J. M. Maldacena, *The Large N Limit of Superconformal Field Theories and Supergravity*, Adv. Theor. Math. Phys. **2**, 231 (1998), https://doi.org/10.4310/ATMP.1998.v2.n2.a1, https://arxiv.org/abs/hep-th/9711200.

2. O. Aharony, S. S. Gubser, J. M. Maldacena, H. Ooguri, and Y. Oz, *Large N Field Theories, String Theory and Gravity*, Phys. Rept. **323**, 183 (2000), https://doi.org/10.1016/S0370-1573(99)00083-6, https://arxiv.org/abs/hep-th/9905111.

3. S. Giombi and A. A. Tseytlin, *Wilson Loops at Large N and the Quantum M2-Brane*, Phys. Rev. Lett. **130**, 201601 (2023), https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.201601, https://arxiv.org/abs/2303.15207.

4. M. Beccaria, S. Giombi, and A. A. Tseytlin, *Instanton Contributions to the ABJM Free Energy from Quantum M2 Branes*, https://arxiv.org/abs/2307.14112.

5. O. Aharony, O. Bergman, D. L. Jafferis, and J. Maldacena, $N = 6$ *Superconformal Chern–Simons-Matter Theories, M2-branes and their Gravity Duals*, JHEP **10**, 091 (2008), doi.org/10.1088/1126-6708/2008/10/091, https://arxiv.org/abs/0806.1218.

6. J. Bagger, N. Lambert, S. Mukhi, and C. Papageorgakis, *Multiple Membranes in M-theory*, Phys. Rept. **527**, 1 (2013), https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.01.006, https://arxiv.org/abs/1203.3546.

7. P. A. M. Dirac, *An Extensible Model of the Electron*, Proc. Roy. Soc. Lond. A **268**, 57 (1962), https://doi.org/10.1098/rspa.1962.0124.

8. E. Bergshoeff, E. Sezgin, and P. K. Townsend, *Supermembranes and Eleven-Dimensional Supergravity*, Phys. Lett. B **189**, 75 (1987), https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)91272-X.

9. E. Bergshoeff, M. J. Duff, C. N. Pope, and E. Sezgin, *Compactifications of the Eleven-Dimensional Supermembrane*, Phys. Lett. B **224**, 71 (1989), https://doi.org/10.1016/0370-2693(89)91053-8.

10. B. de Wit, K. Peeters, J. Plefka, and A. Sevrin, *The M Theory Two-Brane in $AdS_4 \times S^7$ and $AdS_7 \times S^4$*, Phys. Lett. B **443**, 153 (1998), https://doi.org/10.1016/S0370-2693(98)01340-9, ArXiV hep-th/9808052.

11. M. J. Duff, T. Inami, C. N. Pope, E. Sezgin, and K. S. Stelle, *Semiclassical Quantization of the Supermembrane*, Nucl. Phys. B **297**, 515 (1988), https://doi.org/10.1016/0550-3213(88)90316-1.

12. N. Drukker, S. Giombi, A. A. Tseytlin, and X. Zhou, *Defect CFT in the 6d* $(2,0)$ *Theory from M2 Brane Dynamics in $AdS_7 \times S^4$*, JHEP **07**, 101 (2020), https://doi.org/10.1007/JHEP07(2020)101, https://arxiv.org/abs/ 2004.04562.

13. M. J. Duff, P. S. Howe, T. Inami, and K. S. Stelle, *Superstrings in D=10 from Supermembranes in $D = 11$*, Phys. Lett. B **191**, 70 (1987), https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)91323-2.

14. N. Drukker, M. Marino, and P. Putrov, *From Weak to Strong Coupling in ABJM Theory*, Commun. Math. Phys. **306**, 511 (2011), https://doi.org/10.1007/s00220-011-1253-6, https://arxiv.org/abs/ 1007.3837.

15. A. Klemm, M. Marino, M. Schiereck, and M. Soroush, *Aharony–Bergman–Jafferis–Maldacena Wilson Loops in the Fermi Gas Approach*, Z. Naturforsch. A **68**, 178 (2013), https://doi.org/10.5560/ZNA.2012-0118, https://arxiv.org/abs/ 1207.0611.

16. Y. Hatsuda, S. Moriyama, and K. Okuyama, *Instanton Effects in ABJM Theory from Fermi Gas Approach*, JHEP **01**, 158 (2013), https://doi.org/10.1007/JHEP01(2013)158, https://arxiv.org/abs/1211.1251.

17. M. Sakaguchi, H. Shin, and K. Yoshida, *Semiclassical Analysis of M2-brane in $AdS_4 \times S^7/Z_k$*, JHEP **12**, 012 (2010), https://doi.org/10.1007/JHEP12(2010)012, https://arxiv.org/abs/1007.3354.

18. A. Cagnazzo, D. Sorokin, and L. Wulff, *String Instanton in AdS(4) × CP3*, JHEP **05**, 009 (2010), https://doi.org/10.1007/JHEP05(2010)009, https://arxiv.org/abs/0911.5228.

19. S. S. Gubser, I. R. Klebanov, and A. M. Polyakov, *A Semiclassical Limit of the Gauge/String Correspondence*, Nucl. Phys. B **636**, 99 (2002), https://doi.org/10.1016/S0550-3213(02)00373-5, https://arxiv.org/abs/hep-th/0204051.

20. S. Frolov and A. A. Tseytlin, *Semiclassical Quantization of Rotating Superstring in AdS(5) × S5*, JHEP **06**, 007 (2002), https://doi.org/10.1088/1126-6708/2002/06/007,https://arxiv.org/abs/hep-th/0204226.

21. S. Giombi and A. Tseytlin, Unpublished.

22. T. McLoughlin and R. Roiban, *Spinning Strings at One-Loop in AdS(4) × P3*, JHEP **12**, 101 (2008), https://doi.org/10.1088/1126-6708/2008/12/101, https://arxiv.org/abs/0807.3965.

23. L. F. Alday, G. Arutyunov, and D. Bykov, *Semiclassical Quantization of Spinning Strings in AdS(4)× CP3*, JHEP **11**, 089 (2008), https://doi.org/10.1088/1126-6708/2008/11/089, https://arxiv.org/abs/0807.4400.

24. T. McLoughlin, R. Roiban, and A. A. Tseytlin, *Quantum Spinning Strings in AdS(4) × CP3: Testing the Bethe Ansatz Proposal*, JHEP **11**, 069 (2008), https://doi.org/10.1088/1126-6708/2008/11/069, https://arxiv.org/abs/0809.4038.

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 980–995 © 2023

ТОЧНОСТЬ, ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ И ПЕРЕНОСИМОСТЬ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ СПЛАВОВ Al–Cu: СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ПОГРУЖЕННОГО АТОМА И ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Е. О. Хазиева [a,b*], ***Н. М. Щелкачев*** [a,c], ***А. О. Типеев*** [a,d], ***Р. Е. Рыльцев*** [a,b]

[a] *Институт металлургии Уральского отделелния Российской академии наук*
620016, Екатеринбург, Россия

[b] *Уральский Федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина*
620002, Екатеринбург, Россия

[c] *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук*
142190, Троицк, Москва, Россия

[d] *Department of Materials Engineering, Federal University of São Carlos*
13565-905 São Carlos, SP, Brazil

Поступила в редакцию 10 мая 2023 г.,
после переработки 4 июля 2023 г.
Принята к публикации 6 июля 2023 г.

В последние несколько лет достигнут существенный прогресс в атомистическом моделировании материалов, связанный с применением методов машинного обучения для построения классических межатомных потенциалов взаимодействия. Такие потенциалы представляют собой многочастичные функции с большим количеством варьируемых параметров, значения которых оптимизируются с использованием энергий и сил, вычисленных для различных атомных конфигураций с помощью *ab initio*-методов. В данной работе мы разработали потенциал машинного обучения на основе глубоких нейронных сетей (DP) для сплавов Al–Cu и сравнили его точность и производительность с потенциалом погруженного атома (2NN-MEAM). Анализ полученных результатов позволяет заключить, что разработанный DP обеспечивает достаточно высокую точность расчета структурных, термодинамических, транспортных свойств сплавов Al–Cu как в твердом, так и в жидком состояниях во всем диапазоне составов и широком интервале температур. При этом точность MEAM при расчете тех же свойств в целом заметно ниже. Было показано, что использование потенциалов на основе нейронных сетей при моделировании на современных графических процессорах позволяет добиться производительности расчетов одного порядка с MEAM-вычислениями, что, как минимум, на 4 порядка выше вычислительной эффективности *ab initio*-расчетов. Важнейшим результатом явился вывод о возможности применения DP, параметризованных с использованием конфигураций, соответствующих расплавам и идеальным кристаллам, для моделирования структурных дефектов в кристаллах и межфазных поверхностей.

DOI: 10.31857/S004445102312012X
EDN: MXUUBH

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из трендов современной физики конденсированного состояния и материаловедения является широкое использование атомистического моделирования для прогнозирования и расчета свойств материалов. Атомистическое моделирование является незаменимым инструментом для описания свойств на атомарных пространственно-временных масштабах, а также при термодинамических или кинетических условиях, пока недоступных эксперименту. В данной работе мы будем говорить о методе молекулярной динамики (МД) как наиболее универсальном и широко используемом методе атомисти-

* E-mail: cat.hazieva@yandex.ru

ческого моделирования. Ключевым объектом МД-моделирования является поверхность потенциальной энергии (Potential Energy Surface, PES) — зависимость потенциальной энергии системы от координат частиц. Если PES известна, то дальнейшее МД-исследование сводится к вычислению межчастичных сил (градиентов PES), численному решению уравнений движения и вычислению наблюдаемых свойств путем усреднения по динамическим траекториям частиц. Существуют два основных метода оценки PES в МД: первопринципная (*ab initio*) молекулярная динамика (AIMD) и классическая МД. В рамках AIMD явно рассматривается электронная подсистема и решается уравнение Шредингера (как правило, в рамках приближения функционала электронной плотности — DFT), что позволяет напрямую вычислять потенциальную энергию системы при текущем положении атомов и получать значения PES в каждой точке МД-траектории. Помимо высокой точности (обычно несколько мэВ/атом) и фундаментального обоснования, AIMD может применяться как к элементарным, так и к многокомпонентным системам. Основное ограничение AIMD состоит в большой ресурсоемкости. В настоящее время AIMD-симуляции могут быть выполнены только для систем, содержащих несколько сотен атомов, и для временных интервалов порядка сотен пикосекунд [1]. Таких пространственно-временных масштабов недостаточно для решения многих важных задач физики конденсированного состояния и материаловедения: расчет транспортных свойств жидкостей (особенно вязкости), моделирование фазовых превращений и расчет диаграмм состояния, моделирование переохлажденных жидкостей и стекол и т.п.

В рамках классической МД электронная подсистема не рассматривается и поэтому PES аппроксимируется с использованием некоторых модельных функций (потенциалов), которые, как правило, имеют достаточно простую аналитическую форму. Для атомистического моделирования металлов и сплавов, «золотым стандартом» является модель погруженного атома (Embedded Atom Model, EAM) и ее модификации. Энергия системы в данной модели представляется в виде суммы энергии парных взаимодействий атомов и энергии взаимодействия каждого атома с электронной плотностью других атомов. Метод может давать хорошие результаты для металлов, особенно с ГЦК-структурой. Для ОЦК- и ГПУ-металлов, а также сплавов на их основе точность EAM может быть гораздо ниже. Данную проблему удалось частично решить в рамках модифицированного метода погруженного атома (Modified Embedded Atom Model, MEAM). В данный метод были включены различия между ковалентными и металлическими связями за счет явного учета угловых взаимодействий как функции электронной плотности. Это позволило описывать не только чистые кристаллы с разными структурами, но также полупроводники, сплавы, оксиды металлов и двухатомные газообразные элементы. В настоящее время MEAM является универсальным и широко распространенным методом для моделирования металлических сплавов.

Использование классических (в частности, EAM/MEAM) межатомных потенциалов сильно ускоряет вычисление PES, что позволяет моделировать системы из $10^6 - 10^9$ атомов на временах вплоть до микросекунд. Однако платой за это является относительно низкая точность; такие потенциалы могут хорошо применяться для простых систем, таких как одно,- двухкомпонентные металлические сплавы [2–6], но обычно показывают низкую точность в более сложных случаях (многокомпонентные и/или многофазные системы, системы со сложными взаимодействиями). Таким образом, в области применения МД-моделирования для количественного расчета свойств материалов существует глобальная проблема соотношения точности и вычислительной эффективности (производительности). С одной стороны, мы имеем точные, но крайне затратные *ab initio*-методы, с другой — классические методы, которые позволяют проводить масштабные вычисления, но обладающие низкой точностью.

В последние несколько лет достигнут существенный прогресс в атомистическом моделировании материалов, связанный с применением методов машинного обучения для построения классических межатомных потенциалов взаимодействия [7–14]. Основная идея такого подхода — аппроксимировать PES-системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, многослойной нейронной сети), используя эталонные значения энергий и межчастичных сил, полученные с помощью *ab initio*-расчетов. Классическая молекулярная динамика с такими потенциалами позволяет достичь точности, сравнимой по точностью с *ab initio*-методами, при меньших на 3–5 порядков вычислительных затратах. Такой подход в настоящее время эффективно применяется для моделирования различных свойств материалов и протекающих в них процессов, которые чрезвычайно трудно или даже невозможно моделировать с помощью традицион-

ных методов [7–14].

Несмотря на перспективность и привлекательность потенциалов машинного обучения, методы их эффективной разработки и использования находятся еще на стадии активного становления, как и само активное обучение. Основными методическими вопросами являются проблемы точности (предсказательной способности), производительности (вычислительной эффективности) и переносимости. Под переносимостью здесь понимается возможность использования межчастичных потенциалов для описания конфигураций и термодинамических состояний, которые явным образом не использовались в процессе параметризации потенциала. Примерами открытых вопросов переносимости являются, например, вопрос о применимости потенциалов, параметризованных с использованием только неупорядоченных (жидких) конфигураций, для моделирования кристаллов (см., например [15–17]) или вопрос о необходимости явного включения в тренировочный датасет структурных дефектов или границ фаз при моделировании механических свойств или фазовых превращений.

В настоящее время при изучении каждого конкретного материала исследователь оказывается перед дилеммой: использовать проверенные и вычислительно эффективные традиционные потенциалы или тратить существенные ресурсы на создание потенциалов машинного обучения. Универсального ответа на вопрос, какой из подходов более оправдан не существует. В данной работе мы рассматриваем этот вопрос на примере сплавов Al–Cu, которые являются удобными модельными системами для отработки методических аспектов создания потенциалов машинного обучения. Во-первых, они представляют собой смеси металлов с различными электронными конфигурациями: p-металл (Al) и благородный s-металл (Cu), и потому демонстрируют сложное химическое взаимодействие между компонентами, которое вызывает нетривиальное поведение. Например, в данной системе образуется ряд сложных интерметаллических фаз и наблюдается немонотонное поведение физико-химических свойств расплавов при изменении состава [18]. Во-вторых, как сами бинарные сплавы Al–Cu, так и соответствующие чистые компоненты Al, Cu представляют самостоятельный фундаментальный интерес (как модельные системы) и большое практическое значение. В-третьих, для данной системы имеется большое количество экспериментальных и расчетных данных, которые можно использовать для сравнения.

2. МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ И ИХ ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ

2.1. MEAM-потенциал

В данной работе мы использовали наиболее современный и точный вариант модели погруженного атома — так называемый 2NN-MEAM (second nearest neighbor modified embedded-atom method) [19]. В рамках любой модели погруженного атома энергия системы представляется в виде суммы вкладов парных взаимодействий и функции погружения, моделирующей взаимодействие выделенного атома с электронной плотностью соседних атомов. По сравнению с более простым и распространенным EAM-подходом, в 2NN-MEAM-версии вводятся два существенных улучшения: во-первых, в выражениях для электронной плотности учитываются угловые зависимости межчастичных взаимодействий, во-вторых, параметризация потенциала проводится с учетом взаимодействий как в первой, так и во второй координационных сферах. В результате 2NN-MEAM-потенциалы могут более корректно описывать системы с направленными связями, такие как ковалентные материалы или некоторые (например, ОЦК) металлы. Рассматриваемый 2NN-MEAM-потенциал для сплавов Al–Cu был предложен недавно в работе [20]. Параметризация потенциала осуществлялась путем минимизации ошибок вычисления набора наблюдаемых свойств в сравнении с экспериментальными данными и данными *ab initio*-расчетов. Авторами был рассмотрен следующий набор свойств: энергии сублимации, расстояние между ближайшими соседями, объемные модули и их производные, энергии образования вакансий, поверхностные энергии и энергии дефектов упаковки для ГЦК-кристаллов Al и Cu, разности между ГЦК- и ОЦК-структурами для Al и Cu, температура плавления Cu, а также теплоты образования для твердых растворов сплавов $Al_{1-x}Cu_x$. Процедура параметризации и верификации модели более подробно описана в работах [20–22].

2.2. Потенциал глубокого машинного обучения

При разработке потенциала машинного обучения для сплавов Al–Cu мы использовали модель DeePMD [23], в которой поверхность потенциальной энергии системы аппроксимируется с помощью двух полносвязных многослойных искусственных нейронных сетей прямого распространения (перцептронов). Одна из них используется для преобра-

зования координат локального окружения атомов в наборы так называемых дескрипторов — чисел, инвариантных относительно операций трансляции, вращения и пермутации; вторая аппроксимирующая сеть преобразует дескрипторы всех атомов системы в потенциальную энергию. Полное математическое описание структуры модели подробно изложено в работе [23]. Данный подход очень хорошо зарекомендовал себя при моделировании систем различной природы [24–31]. В дальнейшем потенциал, построенный в модели DeePMD, мы будем обозначать как DP (Deep Potential).

Параметризация DP осуществляется путем минимизации функции потерь, представляющей собой взвешенную сумму вкладов от среднеквадратичных ошибок в вычислении энергий, сил и вириалов в сравнении с результатами *ab initio*-расчетов. Ключевую роль при таком способе параметризации играет выбор так называемого тренировочного датасета (ТД) — набора атомных конфигураций и соответствующих им данных *ab initio*-расчетов. Качество ТД определяющим образом влияет на точность потенциала, а его создание является самым трудоемким этапом разработки потенциалов машинного обучения.

Эффективным способом построения ТД является так называемых активное обучение — алгоритмы, позволяющие автоматически отбирать релевантные и статистически независимые обучающие конфигурации в широкой области конфигурационного пространства [23, 32]. В данной работе использовался один из вариантов активного обучения, реализованный в программном пакете DPGEN [33]. В основе алгоритма лежит итеративное повторение следующих трех этапов. На первом этапе с помощью текущего ТД параметризуется ансамбль DP-моделей (как правило 4–5) с одинаковой архитектурой, но различными инициализациями (случайными начальными распределениями параметров). На втором этапе данные модели используются для проведения классического МД-моделирования при различных термодинамических параметрах (температуры, давления, концентрации). Для каждой из таких МД-траекторий происходит контроль точности потенциала путем оценки величины

$$\epsilon_t = \max_i \sqrt{\langle |F_{w,i}(\mathcal{R}_t) - \langle F_{w,i}(\mathcal{R}_t)\rangle|^2\rangle},$$

где $F_{w,i}(\mathcal{R}_t)$ — сила, действующая в момент времени t в DP-модели с параметрами w на i-й атом в конфигурации $\mathcal{R}_t$; усреднение проводится по ансамблю моделей. Конфигурации, для которых выполняется неравенство $\epsilon_l < \epsilon_t < \epsilon_h$, отбираются в список кандидатов на пополнение ТД. Конфигурации, для которых $\epsilon_t < \epsilon_l$, классифицируются как аккуратно описываемые с заданной точностью, а конфигурации с $\epsilon_t > \epsilon_h$ считаются неудачными. Затем, на третьем этапе для некоторого заданного числа конфигураций из списка кандидатов проводятся *ab initio*-расчеты энергии, межатомных сил и тензоров напряжений. Описанная процедура повторяется, пока не наступает насыщение ТД, т. е. новые конфигурации практически перестают отбираться на этапе МД-моделирования, при этом максимизируется число аккуратных и минимизируется число неудачных конфигураций. Данный алгоритм позволяет сформировать компактный и репрезентативный ТД, содержащий статистически независимые конфигурации для исследуемых термодинамических состояний.

Для запуска процедуры активного обучения с использованием программ DeePMD и DPGEN необходим первичный ТД. Для системы Al–Cu такой ТД был сформирован с использованием моделирования в рамках *ab initio* МД (пакет VASP) для систем Al, $Al_{50}Cu_{50}$, Cu при температурах 900, 1100, 1400 K, соответствующих равновесным расплавам вблизи линии плавления (ликвидуса). Число молекулярно-динамических шагов для каждой системы составило порядка тысячи.

Молекулярно-динамические симуляции в рамках процедуры активного обучения осуществлялись для расплавов систем Al, $Al_{75}Cu_{25}$, $Al_{50}Cu_{50}$, $Al_{25}Cu_{75}$, и Cu при давлениях (−10, 0, 10) кбар и температурах (800, 1000, ..., 2000) K и для кристаллических конфигураций Al (ГЦК), Al_2Cu (θ-фаза, $I4/mcm$), $Al_{50}Cu_{50}$ ($C12/m1$), $AlCu_3$ (β-фаза, $Pm3m$), Cu (ГЦК) (см. точки на диаграмме состояния на рис. 1). Число частиц для каждой из систем оставляло 512; длина МД-траекторий для отбора конфигураций $t_{max} = 25$ пс. Интервал (ϵ_l, ϵ_h) для отбора конфигураций варьировался от (0.2, 0.4) на начальных этапах обучения, до (0.05, 0.15) на конечных. Результатом описанной процедуры явился обучающий *ab initio*-датасет, содержащий 9680 атомных конфигураций и соответствующих им энергий, сил и вириалов. Данные конфигурации репрезентативно отражают поведение расплавов, переохлажденных жидкостей и кристаллов Al–Cu во всем интервале составов для заданных значений температур и давлений. Данные конфигурации были разделены на тренировочный и валидационный датасеты в соотношении 4:1, т. е. 7760 конфигураций использовались для параметризации потенциала (обучения), а 1920 — для

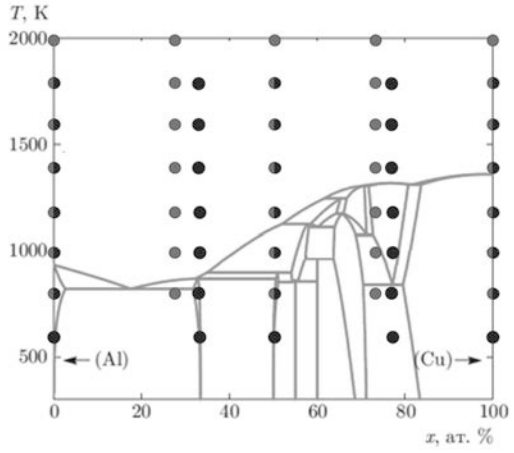


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы Al–Cu с указанием температур и составов, используемых для параметризации DP. Красные и синие точки обозначают состояния, рассмотренные для жидких и кристаллических конфигураций соответственно. Фазовая диаграмма адаптирована из работы [4] с данными из [34, 35]

контроля процесса обучения и первичного контроля точности модели (см. ниже).

Расчеты *ab initio* осуществлялись в рамках теории функционала электронной плотности (DFT), реализованной в пакете VASP [36]. Применялись проекционные PAW-псевдопотенциалы и градиентное приближение Пердью – Бурке – Эрнцергофа (PBE) [37, 38] для обменно-корреляционного функционала [39]. Для дискретизации зоны Бриллюэна использовалась только Г-точка. Энергия обрезки плоских волн составляла $E_{cut} = 320$ эВ.

С помощью ТД, полученного в рамках описанной выше процедуры, был параметризован DP. Оптимальные гиперпараметры нейросетей и схема обучения были заимствованы из работы [40].

Для полученной модели проводилась первичная оценка точности путем вычисления для конфигураций из валидационного датасета вектора $(\delta\varepsilon, \delta f, \delta v)$ средних отклонений, предсказанных моделью значений энергии, сил и вириалов от значений, полученных методом DFT. Единицы измерения $\delta\varepsilon$ и δv — мэВ/атом и мэВ/Å для δf. Как следует из опыта разработчиков пакета DeePMD, удовлетворительным показателем является значение $\delta f < 100$ мэВ /Å. В нашем случае $\delta f \approx 60$ мэВ/Å, $\delta\varepsilon \approx 1.8$ мэВ/атом, т. е. полученные потенциалы достаточно точно воспроизводят силы взаимодействия в сравнении с *ab initio*-расчетами. Важно отметить, что разработанные модели демонстрируют хорошую линейную корреляцию между предсказанными значениями энергий, сил и вириалов, и значениями, вычисленными в рамках DFT (рис. 2). Добиться подобной корреляции при использовании традиционных потенциалов, как правило, очень трудно.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Структура и термодинамические свойства сплавов Al–Cu

Следующим этапом тестирования полученного DP является проверка воспроизводимости наблюдаемых свойств сплавов Al–Cu в сравнении с экспериментальными данными, результатами *ab initio*-моделирования и моделированием посредством описанного выше MEAM-потенциала из работы [20]. Одним из простых базовых свойств для такого тестирования является плотность. Была рассчитана зависимость плотности расплавов Al–Cu от концентрации при температуре $T = 1020$ K. Можно заключить, что DP очень хорошо воспроизводит экспериментальные данные из работы [18, 41] (рис. 3). Среднее отклонение от эксперимента составляет 2-3 %, что сопоставимо с точностью, которую обычно дают *ab initio*-расчеты. При этом точность MEAM-потенциала заметно ниже; среднее отклонение от экспериментальных данных около 5 %.

Также были рассчитаны температурные зависимости плотности для расплавов $Al_{30wt\%}Cu$. Сравнение с экспериментальными данными из работы [18] демонстрирует хорошее согласие для DP со средней ошибкой в 3%; средняя ошибка для MEAM в два раза больше и составляет около 6% (рис. 4). Максимальные погрешности составляют 5.1% и 6.8% соответственно для DP- и MEAM-потенциалов. Кроме того, мы рассчитали зависимости плотности от температуры для чистых Al и Cu (рис. 5) в кристаллическом и жидком состояниях. Для алюминия результаты моделирования сравнивались с результатами работы [42] для плотности кристалла и с работами [43, 44] для расплавов. DP достаточно хорошо описывает плотность алюминия как в жидком, так и в кристаллических состояниях; средние ошибки равны 1.4% и 2% соответственно. MEAM-потенциал точно воспроизводит плотность кристаллического алюминия (ошибка составляет 0.82%), однако дает заметную погрешность для расплавов (3.4%). Сравнение результатов моделирования плотности меди проводилось с работами [41, 45] для жидкости и кристалла соответственно. Результаты моделирования в рамках обеих моделей дают хорошее согласие с экспериментом, однако в данном случае MEAM да-

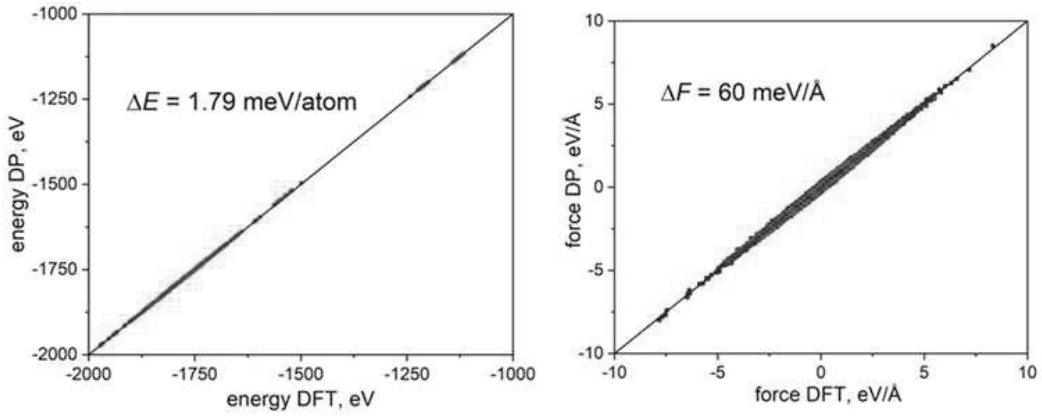


Рис. 2. Корреляционные зависимости энергий и сил, вычисленных *ab initio*-методом (DFT) и с помощью нейросетевого потенциала (DP)

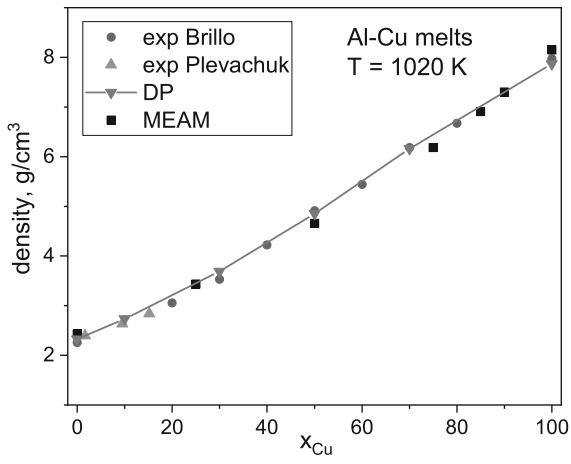


Рис. 3. Зависимость плотности расплавов Al–Cu от концентрации при температуре $T = 1020$ K. Экспериментальные данные заимствованы из работ [18, 41]. Красная кривая приведена для наглядности и представляет собой сплайн-интерполяцию расчетных данных DP

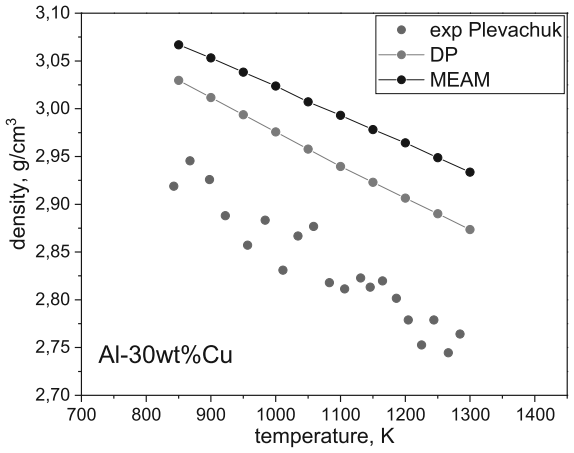


Рис. 4. Температурная зависимость плотности расплава $Al_{30wt\%}Cu$. Синие точки — экспериментальные данные из работы [18]

ет немного более высокую точность: средние ошибки для кристалла составляют 3.5% и 1.2% для DP- и MEAM-потенциалов, а для расплава 3.7% и 0.7% соответственно.

Следующим шагом явилось изучение структуры расплавов в сравнении с экспериментальными данными. Основным источником экспериментальной информации о структуре расплавов является статический структурный фактор $S(q)$, определяемый из экспериментов по рассеянию. Мы рассчитали $S(q)$ для расплава $Al_{60}Cu_{40}$ при температуре $T = 973$ K. Сравнение расчетных кривых и экспериментальных данных из работы [46] демонстрирует очень хорошее согласие для DP; MEAM же демонстрирует заметное смещение положения и высоты основного пика $S(q)$, что, в частности, свидетельствует о завышенных значениях среднего межатомного состояния и координационного числа (рис. 6).

Еще одной важной характеристикой многокомпонентных расплавов является энтальпия смешения, знак и величина которой определяют характер и интенсивность химического взаимодействия между компонентами. Мы рассчитали концентрационные зависимости энтальпии смешения при температуре $T = 1423$ K, соответствующей жидкому состоянию для всех составов. Во всем диапазоне концентраций наблюдаются отрицательные значения энтальпий. Кривая $\Delta H_{mix}(x)$ асимметрична, ее минимум приходится на область $x_{Cu} \approx 0.75$ ат %, где наблюдается образование самого тугоплавкого интерметаллида $AlCu_3$. Сравнение DP-моделирования

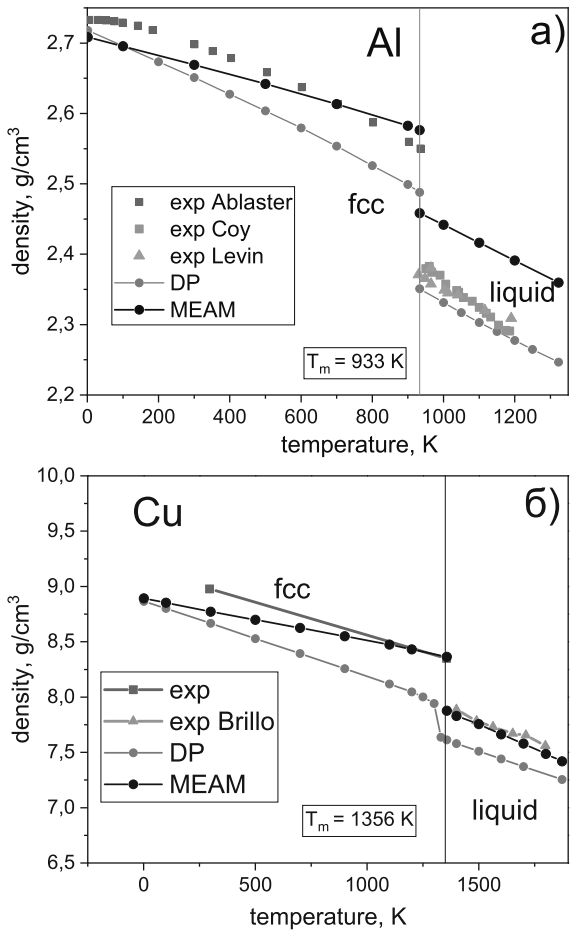


Рис. 5. Температурные зависимости плотности алюминия ($а$) и меди ($б$) в кристаллическом и жидком состояниях. Экспериментальные данные для алюминия и меди заимствованы из работ [42–44] и [41, 45] соответственно

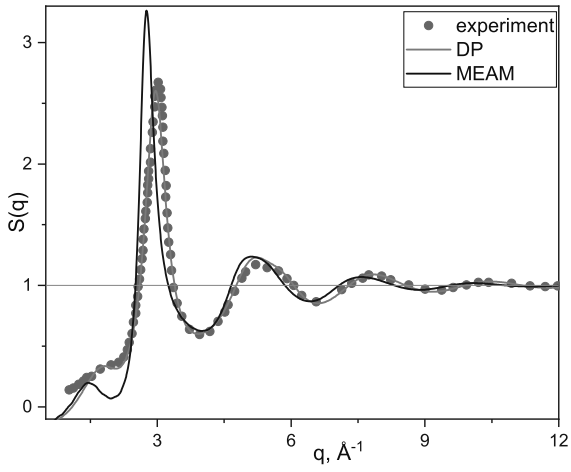


Рис. 6. Структурный фактор расплава $Al_{60}Cu_{40}$ при температуре $T = 973$ K. Синие точки – экспериментальные результаты из работы [46], красная кривая – расчет с помощью DP, черная кривая — MEAM

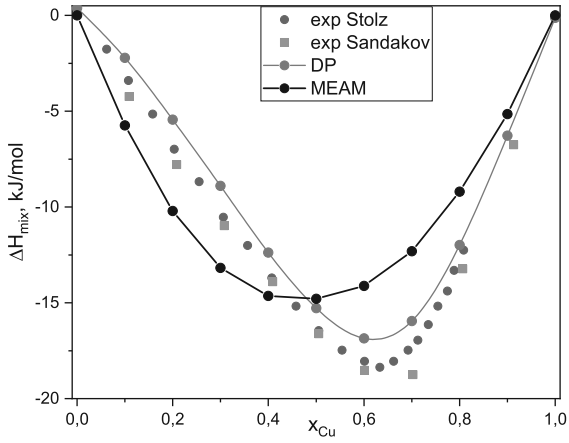


Рис. 7. Расчетные и экспериментальные концентрационные зависимости энтальпий смешения для расплавов Al–Cu при температуре $T = 1423$ K. Экспериментальные данные заимствованы из работ [47, 48]

с экспериментальными данными из работ [47,48] демонстрируют хорошее согласие (рис. 7). Заметное отклонение от экспериментальных данных наблюдается в области $x_{\mathrm{Cu}} \approx 0.5$-$0.8$ ат %., где имеет место наиболее интенсивное химическое взаимодействие между компонентами, что выражается, в частности, в образовании большого числа интерметаллических соединений (рис. 7). При этом максимальное отклонение между теорией и экспериментом составляет 35%, а средняя ошибка 12.6%. Кривая $\Delta H_{mix}(x)$, полученная с помощью MEAM-потенциала, демонстрирует качественно иное поведение: кривая почти симметрична, а ее минимум наблюдается при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 0.45$ ат %; среднее отклонение от эксперимента составляет 21%, а максимальное отклонение — 51.4%.

Одним из свойств, часто используемых для верификации и параметризации межчастичных потенциалов, является уравнение состояния твердых фаз, например, зависимости $E(V)$ энергии кристалла от его объема. Такие уравнения сравнительно легко могут быть рассчитаны в рамках теории функционала плотности. На рис. 8 и 9 представлено сравнение кривых $E(V)$, рассчитанных с помощью DP, MEAM и DFT. На рисунках видно, что DP-потенциал хорошо воспроизводит *ab initio*-кривые для обоих соединений. Хорошее согласие равновесной энергии E_0 для DFT и DP связано с тем, что DFT-расчеты проводились с использованием тех же параметров, что и при параметризации DP. Для MEAM сравнение данного параметра не имеет смысла, поскольку абсолютное значение энергии существенно зависит от метода расче-

Таблица 1. Параметры уравнения состояния Берча–Мурнагана для Al_2Cu и $AlCu_3$

	Al_2Cu			$AlCu_3$		
	MEAM	DP	AIMD	MEAM	DP	AIMD
E_0, eV	−3.48	−3.92	−3.91	–	−3.93	−3.94
V_0, Å^3	15.8	14.9	15.02	–	12.5	12.6
B_p	−1.27	−1.3	0.18	–	−0.85	−0.5
B_0, GPa	78.5	125.01	102.3	–	144.4	138.5

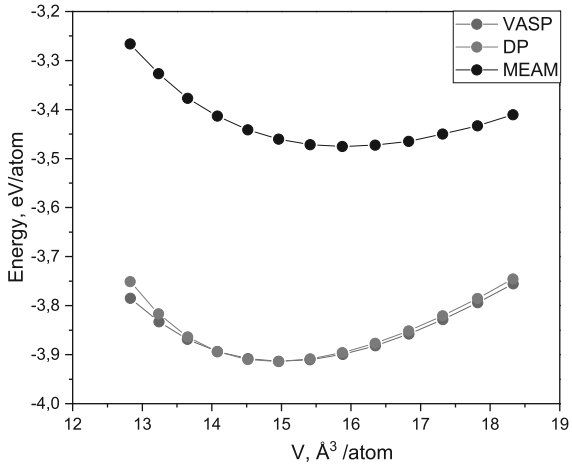


Рис. 8. Уравнение состояния $E(V)$ для соединения Al_2Cu

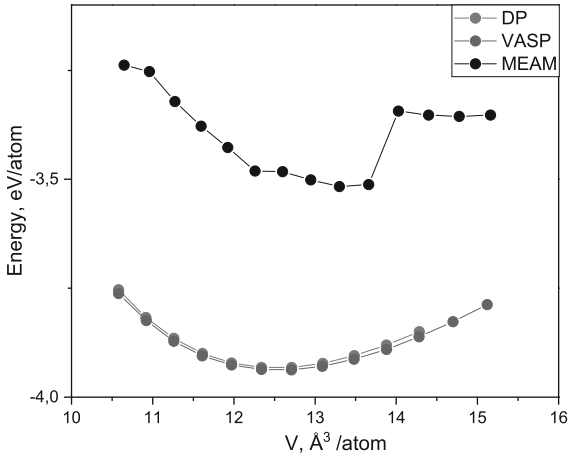


Рис. 9. Уравнение состояния $E(V)$ для соединения $AlCu_3$

та. Среднее отклонение от результатов DFT для DP-потенциала составляет 0.2% для обоих соединений. MEAM-потенциал хуже описывает *ab initio*-данные. В частности для $AlCu_3$ кривая имеет скачкообразный характер, который связан с нестабильностью данной структуры в ходе релаксации, которая выражается в образовании двойников и других дефектов, а также изменении симметрии исходной структуры. Приведенные на рис. 8 и 9 расчетные кривые были аппроксимированы уравнением Берча–Мурнагана [49], параметры которого соответствуют равновесной энергии E_0, равновесному объему V_0, объемному модулю B_0 и его производной по давлению B_p (см. табл. 1).

3.2. Транспортные свойства расплавов Al–Cu

Расчет количественных характеристик атомного транспорта в жидкостях, таких как вязкость и коэффициенты диффузии, является одной из важнейших задачей теории конденсированного состояния. Зависимости значений транспортных свойств от температуры, давления, концентрации и других термодинамических параметров позволяют извлечь ценную информацию об эволюции структуры и атомарной динамики расплавов, необходимую для изучения таких фундаментальных процессов, как стеклообразование и нуклеация, а также для построения и верификации модельных теорий. Расчет транспортных коэффициентов имеет важное значение для верификации межчастичных потенциалов, поскольку их значения вязкости и коэффициентов диффузии очень чувствительны к точности описания межатомного взаимодействия. В рамках такой верификации были проведены расчеты вязкости и коэффициентов диффузии расплавов Al–Cu с использованием DP- и MEAM-потенциалов.

Коэффициент диффузии D рассчитывался с помощью формулы Стокса–Эйнштейна, согласно которой $D = \mathrm{MSD}/6t$ при $t \to \infty$, где t — время, MSD — среднеквадратичное смещение. На практике расчеты по данной формуле сводятся к определению тангенса угла наклона прямой $\mathrm{MSD}(t)$ при достаточно больших временах, где реализуется диффузионный режим атомной динамики. С вычислительной точки зрения, расчет коэффициентов диффузии требует относительно немного ресурсов, поскольку в MSD это одночастичное свойство и усреднение дан-

ной корреляционной функции осуществляется как по числу частиц, так и по временному окну. Это в принципе позволяет получить достаточную статистику даже в случае использования AIMD. С другой стороны, одночастичные свойства подвержены влиянию гидродинамических флуктуаций, следствием которых являются длинно-временные 'хвосты' временных автокорреляционных функций [50–52], а также зависимость коэффициентов диффузии от размера системы [53,54]. Данным методом были рассчитаны температурные зависимости коэффициента самодиффузии расплавов $Al_{80}Cu_{20}$. Для данного сплава имеются экспериментальные данные из двух независимых источников [55, 56], а также данные компьютерного моделирования в рамках AIMD [57]. На рис. 10 приводится сравнение расчетных и экспериментальных политерм коэффициента самодиффузии. Видно, что результаты, рассчитанные с помощью DP и MEAM, хорошо коррелируют друг с другом и близки к среднему значению, рассчитанному по двум независимым экспериментальным кривым. В то же время, результаты AIMD дают заметно более низкие значения D, которые при этом очень близки к экспериментальным данным из работы [56]. Отметим, однако, что такая корреляция может быть и случайностью, поскольку точность AIMD-расчетов коэффициента самодиффузии может быть сильно ограничена малыми размерами моделируемой системы и малыми расчетными интервалами. Действительно, авторы работы [57] моделировали систему, состоящую из 200 частиц, а временной интервал расчета MSD составлял всего 2 пс. Учитывая упоминаемую выше проблему зависимости D от размера системы и эффекты гидродинамических флуктуаций, это могло значительно сказаться на точности расчетов.

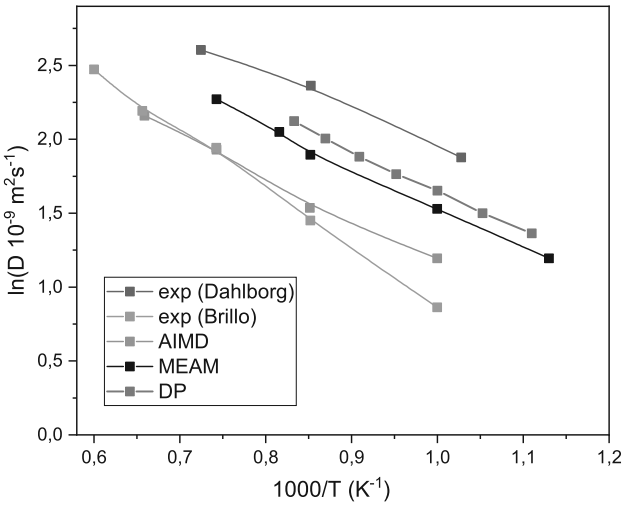


Рис. 10. Температурные зависимости коэффициента самодиффузии расплава $Al_{80}Cu_{20}$. Экспериментальные данные заимствованы из работ [55, 56], а данные AIMD из работы [57]

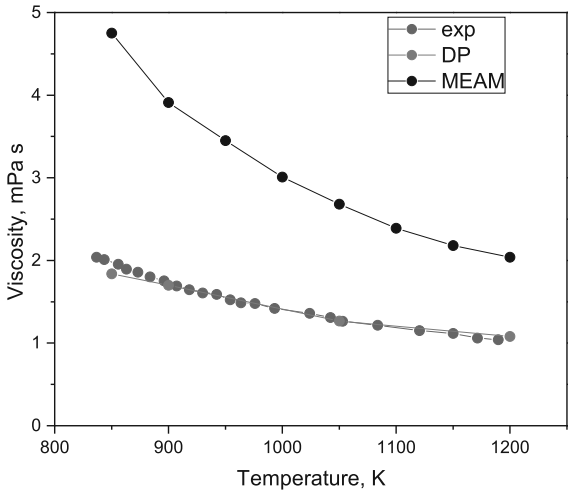


Рис. 11. Температурные зависимости вязкости расплава $Al_{85}Cu_{15}$. Синие точки – экспериментальные результаты из работы [18], красные точки – результаты молекулярно-динамического расчета с использованием нейросетевого потенциала, черные точки – расчеты с помощью MEAM-потенциала

Вязкость расплава вычислялась посредством формулы Грина–Кубо как интеграл от автокорреляционной функции недиагональных элементов тензора вязких напряжений. Тензор напряжений является многочастичным свойством, т. е. для заданной конфигурации системы из N частиц мы имеем только одно значение (а не N значений, как в случае одночастичных свойств типа MSD). По этой причине накопление статистических данных, достаточных для точного вычисления вязкости, является гораздо более сложной задачей. Для решения указанной проблемы мы использовали метод TDM (time decomposition method), предложенный в работе [58]. Суть метода заключается в расчете интегралов Грина–Кубо для десятков независимых траекторий, вычисления среднего и среднеквадратичного отклонения σ по ансамблю траекторий и аппроксимации усредненного интеграла двойной экспоненциальной функцией с весом $1/\sqrt{\sigma}$. Данный метод позволяет достичь достаточно высокой точности расчета при меньших вычислительных затратах. Методом TDM с использованием потенциалов DP и MEAM была рассчитана температурная зависимость вязкости расплава $Al_{85}Cu_{15}$. Результаты, полученные с помощью потенциала машинного

обучения, идеально согласуются с экспериментом из работы [18], средняя ошибка всего 0.4%. В то же время результаты MEAM отличаются от экспериментальных примерно в два раза (рис. 11).

Также были рассчитаны концентрационные зависимости вязкости при температуре $T = 1500$ K (рис. 12). Для этой температуры имеются экспериментальные данные из работ [59, 60]. Результаты обеих экспериментальных работ обнаруживают немонотонную зависимость вязкости с максимумом при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 75$ ат.%. При этом наблюдается существенное количественное отличие, особенно в области составов $x_{\mathrm{Cu}} = 50$–80 ат.%.; разница в абсолютном значении вязкости достигает 50%. Результаты расчетов с помощью DP демонстрируют отличное согласие с экспериментом [60] в области составов, богатых алюминием ($x_{\mathrm{Cu}} < 40$ ат.%.) со средней ошибкой 7.8%, для эксперимента [59] ошибка составляет 23.6%. При увеличении содержания меди отклонение от экспериментальных данных увеличивается и достигает максимума в 30% при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 75$ ат.% для данных из [60]; для экспериментальных данных из [59] максимальное отклонение в 58% достигается при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 60$ ат.%. В области богатой медью расхождение между экспериментом и расчетом затем начинает спадать и для чистой меди составляет 8% и 17% для [60] и [59] соответственно. При этом на расчетной кривой не наблюдается четкого максимума при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 75$ ат.%.; имеется лишь перегиб в окрестности при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 75$ ат.%. Указанные свойства расчетной кривой устойчивы относительно изменения параметров моделирования и параметров процедуры расчета вязкости. Возможные причины обнаруженного расхождения с экспериментальными данными анализируются в разд. 4.

Концентрационная зависимость вязкости, полученная в моделировании с MEAM-потенциалом, демонстрирует линейный рост вязкости с увеличением концентрации меди при $x_{\mathrm{Cu}} < 65$ ат.%., который сменяется слабым максимумом при $x_{\mathrm{Cu}} \approx 75$ ат.%. При этом MEAM демонстрирует существенное расхождение с экспериментом в области, богатой алюминием, со средней ошибкой 19.5% по сравнению с экспериментом [60] и ошибкой 47.8% — с экспериментом [59]. В области увеличения концентрации меди ошибка увеличивается для первого эксперимента и составляет 26%, но значительно уменьшается для второго эксперимента и равна 7.8%. Для чистой меди средние отклонения составляют 19% и 10% для первого и второго экспериментов соответственно.

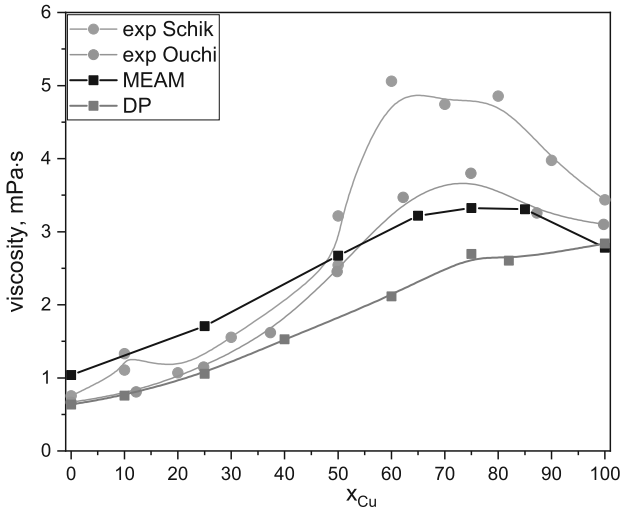


Рис. 12. Концентрационная зависимость динамической вязкости расплавов Al–Cu при $T = 1500$ K. Экспериментальные данные заимствованы из работ [59, 60]

Таблица 2. Температуры плавления Al, Cu и интерметаллида $AlCu_3$, полученные в эксперименте и рассчитанные методом движения межфазной границы с помощью DP и MEAM

	Al	Cu	$AlCu_3$
experiment, K	933	1356	1322
DP, K	875	1050	1220
MEAM, K	1055	1345	1052
Δ DP, %	6%	22.5%	8%
Δ MEAM, %	13%	0.8%	20.4%

3.3. Температуры плавления

Практически важной задачей является оценка температур плавления металлов и их соединений. Данную задачу можно решить, например, моделируя движение двухфазной границы жидкость–кристалл при различных температурах (см. рис. 13). Температура плавления при этом определяется как температура, при которой скорость движения границы близка к нулю. Данным методом были оценены температуры плавления чистых алюминия и меди, а также единственного конгруэнтно плавящегося интерметаллида $AlCu_3$. Сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных представлены в табл. 2. Видно, что для алюминия и $AlCu_3$ наблюдается хорошее согласие эксперимента и DP-моделирования. Отклонения от эксперимен-

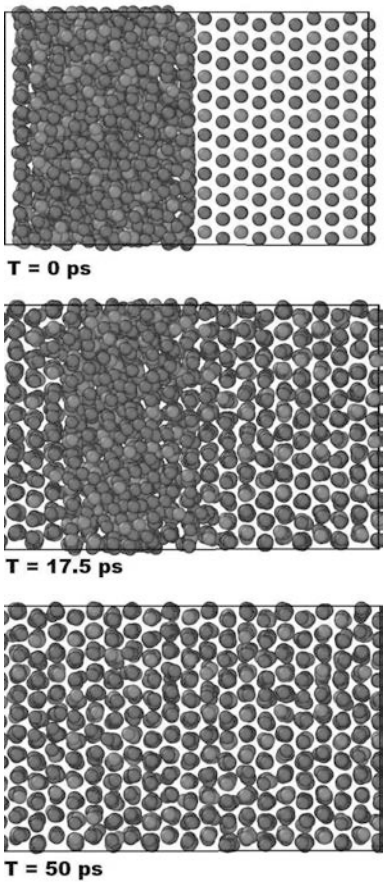


Рис. 13. Движение межфазной границы жидкость–кристалл для соединения $AlCu_3$

та составляет 6% для алюминия и 8% для интерметаллида $AlCu_3$. Согласие для чистой меди заметно хуже: ошибка здесь составляет около 22%. Такая ошибка, вероятно, вызвана неточностью расчетов в рамках теории функционала электронной плотности, на основе которых был построен потенциал. MEAM-потенциал демонстрирует почти идеальное согласие эксперимента с теорией для чистой меди, отклонение составляет лишь 0.8%. Это неудивительно, поскольку температура плавления меди являлась одной из величин, используемых при параметризации MEAM-потенциала. Для чистого алюминия и интерметаллида $AlCu_3$ MEAM-расчеты заметно менее точные, отклонение от эксперимента здесь составляет 13% и 20.4% соответственно.

3.4. Дефекты упаковки и динамика дислокаций

Одной из сложнейших задач является моделирование свойств и процессов, происходящих при

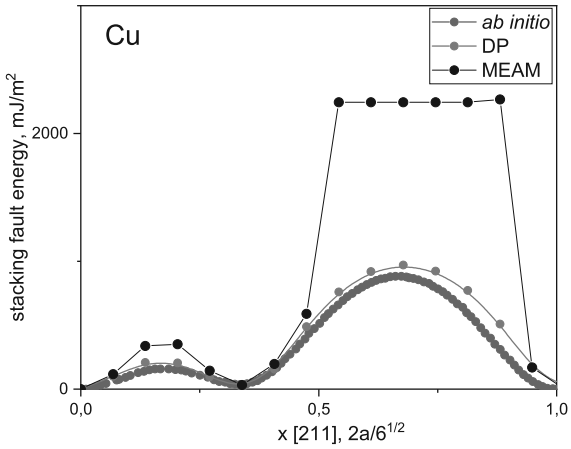


Рис. 14. Энергетика дефектов упаковки для ГЦК-решетки Cu вдоль плоскости легкого скольжения в [111] в направлении [211]

пластических деформациях. Атомистическое моделирование таких процессов с помощью потенциалов машинного обучения является настоящим вызовом. Основная проблема такого моделирования – вычислительные ресурсы. Действительно, для реалистичного описания механических свойств необходимо рассматривать системы, состоящие из десятков и сотен миллионов частиц [61–63]. Только такие размеры позволяют задать реалистичные плотности структурных дефектов и получать разумные значения прочности, пределов текучести и других характеристик. Другой важной проблемой является большое количество дефектов, энергетику которых необходимо правильно описывать: дислокации, границы зерен, межфазные границы и т.п. Явное введение таких дефектов в тренировочные конфигурации затруднительно, а иногда и вовсе невозможно, хотя определенные попытки в этом направлении предпринимаются [64, 65].

В связи с этим возникает важный вопрос о переносимости потенциалов машинного обучения, параметризованных на конфигурациях идеального кристалла и жидкости, на моделирование систем со структурными дефектами. Детальное исследование данного вопроса является предметом отдельного исследования, поэтому ниже мы приводим результаты нескольких предварительных тестов.

Первый тест — моделирование энергетики дефектов упаковки, которые являются важнейшими структурными дефектами при пластических деформациях. В качестве объекта была рассмотрена чистая медь, для которой проведено моделирование смещения слоев ГЦК-кристаллов вдоль плоскости

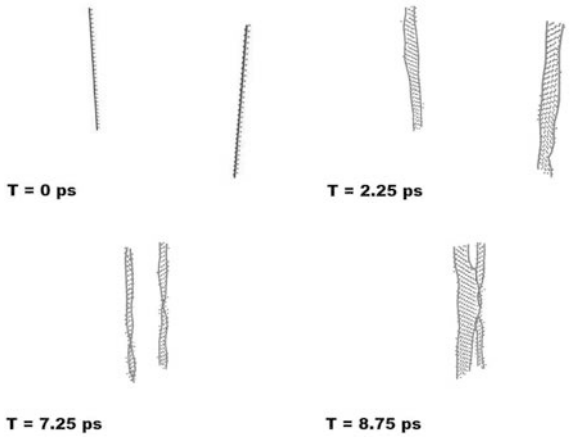


Рис. 15. Релаксация и динамика диполя винтовых дислокаций в ГЦК-решетке Al при моделировании с помощью DP. Синие прямые обозначают линии полных дислокаций, зеленые линии — частичных дислокаций Шокли. Красным цветом обозначены дефектные частицы с ГПУ-подобным локальным окружением, ГЦК-подобные частицы удалены для наглядности

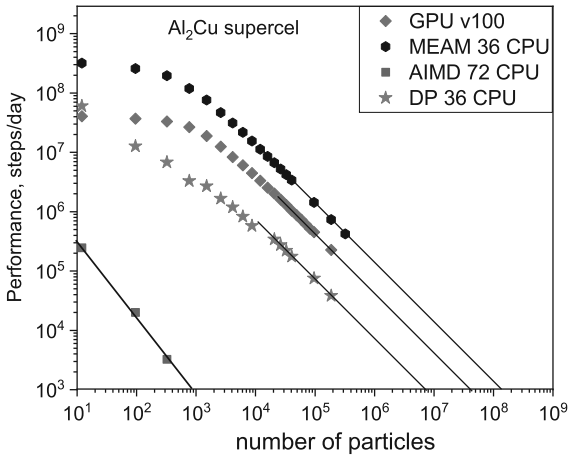


Рис. 16. Вычислительная производительность (МД-шагов/ сутки) для DP-, MEAM- и AIMD-вычислений на примере МД-моделирования сверхъячеек кристалла Al_2Cu

легкого скольжения в [111] в направлении [211]. Полученные энергии дефектов упаковки как функции смещения изображены на рис. 14 в сравнении с результатом *ab initio*-расчетов. Видно, что разработанный потенциал позволяет количественно описывать энергетику данных дефектов даже при условии, что соответствующие им конфигурации не вводились явным образом в тренировочный датасет. Аналогичный расчет для MEAM-потенциала дает качественно аналогичную зависимость при относительных смещениях $x < 0.5$ и $x > 0.95$, однако в широкой промежуточной области смещений демонстрирует нефизические значения, связанные с некорректной релаксацией структуры, приводящей к образованию структурных дефектов.

В качестве второго теста была рассмотрена релаксация и динамика движения дислокаций в чистом алюминии. В идеальную ГЦК-решетку, состоящую из 216000 частиц алюминия (20x20x8 нм^3), была введена пара винтовых дислокаций на расстоянии 10 нм друг от друга. В процессе релаксации такой конфигурации каждая из полных дислокаций распадается на пару частичных дислокаций Шокли, которые начинают сближаться в силу взаимного притяжения и впоследствии аннигилируют (рис. 15). Расщепление полных дислокаций на частичные является типичным для алюминия и других ГЦК-металлов. Притяжение и аннигиляция дислокаций с противоположными векторами Бюргерса, находящихся в одной плоскости скольжения, также соответствует общим представлениям теории структурных дефектов [66]. Аналогичный расчет для MEAM-потенциала дает похожую картину сближения и аннигиляции дислокаций с той существенной разницей, что наблюдается лишь частичное расщепление полных дислокаций на дислокации Шокли.

3.5. Тестирование производительности потенциалов

Производительность (вычислительная эффективность) межчастичных потенциалов является важнейшей характеристикой, в некоторых случаях даже более важной, чем точность. Например, при моделировании механических свойств реальных кристаллов ошибка, обусловленная рассмотрением слишком малых размеров системы (и, следовательно, нефизичной плотности дефектов и размеров зерен) вследствие недостаточной производительности может быть гораздо выше, чем неточности в описании межчастичных энергий и сил. В связи с этим оптимизация вычислительной эффективности потенциалов машинного обучения является одной из основных задач, стоящих перед разработчиками новых алгоритмов и программных кодов. В последние годы в данном направлении достигнут значительный прогресс. В частности, использование процедуры сжатия DeePMD-потенциалов и разработка эффективных алгоритмов для графических процессоров позволила, как минимум, на порядок повысить вычислительную эффективность [23, 67].

Мы провели сравнение производительности DP-, MEAM- и AIMD-вычислений на примере MD-моделирования кристалла Al_2Cu. Для данного соединения генерировались сверхъячейки $n \times n \times n$ для $n \in (1...30)$, что соответствует системам с числом частиц $n \in (12...324000)$. Для каждой сверхъячейки осуществлялось МД-моделирование в течение 1000 шагов. В качестве меры производительности было выбрано число МД-шагов в сутки (steps/day). AIMD- и MEAM-расчеты осуществлялись только на CPU, а для DP также и на GPU (карты V100). Результаты тестирования приведены на рис. 16. Видно, что для размеров системы $N \sim 10^2 - 10^3$, когда можно непосредственно осуществить все три подхода, производительность DP и MEAM при использовании CPU превышает производительность AIMD на три и четыре порядка соответственно. При больших размерах системы провести AIMD-расчеты становится практически невозможным и можно сравнивать только экстраполированные значения. Производительность DP и MEAM при $N > 10^4$ уменьшается с ростом числа частиц по степенному закону $N^{-\alpha}$, где $\alpha \approx 1$. При этом при использовании CPU MEAM-потенциал оказывается примерно в 20 раз более производительным. Однако использование GPU позволяет существенно повысить производительность DP и даже при использовании одной карты класса V100 добиться отставания от MEAM всего в 2-3 раза.

Важным вопросом, связанным с производительностью, является максимальное число частиц, которое можно моделировать за разумное время с использованием доступных пользователю вычислительных ресурсов. Если условно принять минимально допустимую рабочую производительность в 10^3 шагов в сутки (что сравнимо с типичной производительностью AIMD), то использование 1 карты GPU V100 позволяет моделировать системы, состоящие из порядка 10^7 частиц. Использование же нескольких десятков карт может позволить изучать системы с $N \sim 10^8$, что достаточно, например, для реалистичного моделирования пластических деформаций.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сопоставление полученных вычислительных результатов с экспериментальными данными позволяет заключить, что разработанный DP обеспечивает достаточно высокую точность расчета структурных, термодинамических, транспортных свойств сплавов Al–Cu как в твердом, так и в жидком состояниях во всем диапазоне составов и широких интервалах температур. При этом точность MEAM при расчете тех же свойств в целом заметно ниже, хотя в некоторых случаях (например, при расчете плотности) удается достичь хорошего согласия с экспериментальными данными. Это отражает общую проблему модельных (в частности EAM и MEAM) потенциалов, в которых небольшое число настраиваемых параметров не позволяет описать широкий спектр различных свойств.

Несмотря на хорошее описание совокупности наблюдаемых свойств, обнаружено, что вычисленные с помощью DP значения температур плавления и вязкости заметно отличаются от эксперимента в области составов богатых медью. Учитывая, что DP очень хорошо воспроизводит *ab initio*-энергии и силы во всем диапазоне составов, можно предположить, что проблемы данных расчетов связаны с недостаточно точным описанием межчастичных взаимодействий в рамках теории функционала электронной плотности. Действительно, для задачи расчета температуры плавления проблема неточности стандартных *ab initio*-методов хорошо известна [68]. Для проверки высказанной гипотезы требуется параметризация DP с использованием других вариантов псевдопотенциала для Cu и/или более точных методов *ab initio*-расчетов. Из множества доступных вариантов наиболее реалистичный с точки зрения соотношения точности и вычислительной затратности, является использование приближения meta-GGA для функционала электронной плотности (например, в варианте r2-SCAN). В целом следует отметить, что разработка потенциалов машинного обучения на основе *ab initio*-методов, выходящих за рамки стандартного GGA DFT-подхода, является актуальной задачей.

Важнейшим результатом является вывод о возможности применения DP-потенциалов, параметризованных с использованием конфигураций, соответствующих расплавам и идеальным кристаллам, для моделирования структурных дефектов в кристаллах и границ раздела фаз (см. результаты в разд. 3.3, 3.4). Как следствие, потенциалы, параметризованные по такой схеме, могут использоваться для моделирования механических свойств реальных кристаллов, процессов, происходящих при их пластических деформациях, а также фазовых превращениях. Природа такой переносимости до конца не понятна, но вероятней всего она связана с определенной структурной схожестью между конфигурациями, возникающими в расплавах

и перегретых кристаллах, и конфигурациями, возникающими на границах раздела фаз жидкость–кристалл и в окрестности структурных дефектов кристаллической решетки. Вопрос об универсальности и границах применимости такой переносимости также остается пока открытым. В целом вопрос о переносимости потенциалов машинного обучения является крайне интересным и малоизученным, хотя в последнее время его исследованию уделяется все больше внимания [15–17].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы провели сравнительный анализ межчастичных потенциалов для атомистического моделирования сплавов Al–Cu. Рассмотрены два типа потенциалов: широко используемая модель погруженного атома (в наиболее современном варианте 2NN-MEAM) и нейросетевой потенциал DeePMD, принадлежащий к перспективному классу потенциалов машинного обучения. В ходе анализа мы сравнивали точность, производительность и переносимость указанных моделей. Точность моделей определялась точностью расчета наблюдаемых свойств сплавов Al–Cu в сравнении с имеющимися экспериментальными данными. Под переносимостью в данном случае понималась способность потенциала моделировать конфигурации, существенно отличающиеся от тех, которые были использованы в ходе его параметризации.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы.

1. Потенциалы глубокого машинного обучения позволяют с достаточно высокой точностью моделировать широкий спектр свойств металлических сплавов в различных термодинамических состояниях, а также количественно описывать фазовые превращения. В то же время, потенциалы погруженного атома, в силу простой функциональной формы и небольшого числа варьируемых параметров, способны адекватно описывать лишь ограниченный набор свойств и состояний.

2. Точность межчастичных потенциалов, параметризуемых с использованием *ab initio*-расчетов, ограничивается используемыми квантовомеханическими приближениями. При этом оказывается, что разные наблюдаемые свойства в различной степени чувствительны к точности описания межчастичных взаимодействий. Так, для сплавов Al–Cu оказалось, что в области богатой медью, температуры плавления и вязкость заметно хуже описываются нейросетевым потенциалом, параметризованным с помощью стандартных DFT-расчетов с использованием GGA PBE-функционалов и PAW-псевдопотенциалов. Поиск оптимальных *ab initio*-приближений для лучшего описания данных свойств является актуальной задачей.

3. Потенциал машинного обучения, параметризованный с использованием только конфигураций, соответствующих жидкости и идеальным кристаллам, способен правильно описывать энергетику структурных дефектов и межфазных поверхностей в сплавах Al–Cu. Такая переносимость потенциалов является важным свойством в контексте их применения для моделирования пластических деформаций и фазовых превращений.

4. Использование потенциалов на основе нейронных сетей при моделировании на современных графических процессорах позволяет добиться увеличения производительности расчетов на, как минимум, 4 порядка по сравнению с *ab initio*-вычислениями (а при размерах системы более 10^3 частиц — гораздо больше). Важно, что достигаемая при этом производительность практически одного порядка с производительностью MEAM.

5. Можно заключить, что использование потенциалов машинного обучения является гораздо более эффективным по сравнению с моделями семейства EAM как с точки зрения соотношения точности и производительности, так и в контексте возможности моделирования широкого спектра свойств и термодинамических состояний.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-22-00506, https://rscf.ru/project/22-22-00506/. Молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере «Уран» на базе ИММ УрО РАН и суперкомпьютере Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Mishin, Acta Mater. **214**, 116980 (2021).

2. Г. Э. Норман, С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, ЖЭТФ **141**, 910 (2012).

3. E. M. Kirova, G. E. Norman, and V. V. Pisarev, Comput. Mater. Sci. **172**, 109367 (2020).

4. Р. М. Хуснутдинов, А. В. Мокшин, С. Г. Меньшикова, А. Л. Бельтюков, В. И. Ладьянов, ЖЭТФ **149**, 9941004 (2016).

5. R. M. Khusnutdinoff, R. R. Khairullina, A. L. Beltyukov, V. I. Lad'yanov, and A. V. Mokshin, J. Phys.: Cond. Matt. **33**, 104006 (2021).

6. B. N. Galimzyanov and A. V. Mokshin, Int. J. Sol. Struct. **224**, 111047 (2021).

7. M. Ceriotti Michele, C. Clementi, and O. A. von Lilienfeld, J. Chem. Phys. **154**, 160401 (2021).

8. Y. Mishin, Acta Materialia **214**, 116980 (2021).

9. J. A. von Lilienfeld and K. Burke, Nature Communications **11**, 4895 (2020).

10. J. Behler and G. Csányi, Eur. Phys. J. B **94**, 142 (2021).

11. V. L. Deringer, J. Phys.: Energy **2**, 041003 (2020).

12. N. Mueller, A. Hernandez, and Wang Chuhong, J. Chem. Phys. **152**, 050902 (2020).

13. V. L. Deringer, M. A. Caro, and G. Csányi, Advanced Materials **31**, 1902765 (2019).

14. J. Behler, J. Chem. Phys. **145**, 170901 (2016).

15. И. А. Балякин, Р. Е. Рыльцев, Н. М. Щелкачев, Письма в ЖЭТФ **117**, 377384 (2023).

16. M. Benoit, J. Amodeo, S. Combettes, I. Khaled, A. Roux, and J. Lam, Mach. Learn.: Sci. Technol **2** 025003 (2021).

17. B. Monserrat, J. G. Brandenburg, E. A. Engel, and Bingqing Cheng, Nat Commun **11**, 5757 (2020).

18. Y. Plevachuk, V. Sklyarchuk, A. Yakymovych, S. Eckert, B. Willers, and K. Eigenfeld., Metall. Mater. Trans. A **39**, 3040 (2008).

19. B.-J. Lee and M. I. Baskes, Phys. Rev. B **62**, 8564 (2000).

20. A. Mahata, T. Mukhopadhyay, and Mohsen Asle Zaeem, Comput. Mater. Sci. **201**, 110902 (2022).

21. E. Asadi, M. Asle Zaeem, S. Nouranian, and M. I. Baskes, Acta Materialia **86**, 169181 (2015).

22. B.-J. Lee, J.-H. Shim, and M. I. Baskes, Phys. Rev. B **68**, 144112 (2003).

23. T. Wen, L. Zhang, H. Wang, E. Weinan, and D. J. Srolovitz, Materials Futures **1**, 022601 (2022).

24. Niu Haiyang, L. Bonati, P. M. Piaggi, and M. Parrinello, Nature Commun. **11**, 2654 (2020).

25. G. M. Sommers, A. M. F. Calegari, Zhang Linfeng, Wang Han, and R. Car, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 10592 (2020).

26. T. E. Gartner, Zhang Linfeng, P. M. Piaggi, R. Car, A. Z. Panagiotopoulos, and P. G. Debenedetti, PNAS **117**, 26040 (2020).

27. I. A. Balyakin, S. V. Rempel, R . E. Ryltsev, and A. A. Rempel, Phys. Rev. E. **102**, 052125 (2020).

28. T. Wen, Wang Cai-Zhuang, M. J. Kramer, Sun Yang, Ye Beilin, Wang Haidi, Liu Xueyuan, Zhang Chao, Zhang Feng, Ho Kai-Ming, and Wang Nan, Phys. Rev. B **100**, 174101 (2019).

29. L. Tang, Z. J. Yang, T. Q. Wen, K. M. Ho, M. J. Kramer, C. Z. Wang, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 18467 (2020).

30. Zhang Linfeng, Wang Han, R. Car, and E. Weinan, J. Chem. Phys. **152**, 154701 (2021).

31. C. M. Andolina, P. Williamson, and W. A. Saidi, J. Chem. Phys. **126**, 236001 (2020).

32. E. V. Podryabinkin, A. V. Shapeev, Comput. Mater. Sci. **140**, 171 (2017).

33. Y. Zhang et al., Comput. Phys. Commun. **253**, 107206 (2020).

34. V. T. Witusiewicz, U. Hecht, S. G. Fries, and S. Rex, J. Alloys Comp. **385**, 133 (2004).

35. C. W. Bale, P. Chartrand, S. A. Degterov et al., Calphad **26**, 189 (2002).

36. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

37. J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B **46**, 6671 (1992).

38. J. P. Perdew and Wang Yue, Phys. Rev. B **46**, 6671 (1992).

39. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).

40. R. E. Ryltsev and N. M. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. **349**, 118181 (2022).

41. J. Brillo and I. Engry, Z. Metallkd. **95**, 691 (2004).

42. J. W. Arblaster, ASM International Materials Park **684**, (2018).

43. E. S. Levin, G. D. Ayushina, and P. V. Gel'd, High Temperature **6**, 416418 (1968).

44. W. J. Coy and R. S. Mateer, Trans. Amer. Soc. Metals **58**, 99 (1955).

45. A. A. Aleksashkina, M. M. Demin, V. I. Mazhukin, Keldysh Institute preprints **066**, (2018).

46. S. Y. Wang, M. J. Kramer, M. Xu, S. Wu, S. G. Hao, D. J. Sordelet, K. M. Ho, and C. Z. Wang, Phys. Rev. B **79**, 144205 (2009).

47. U. K. Stolz, I. Arpshofen, F. Sommer and B. Predel, J. Phase Equilibria **14**, 473 (1993).

48. V. M. Sandakov, Esin Yu. O., P. V Gel'd, V. D. Shantarin, Russ. J. Phys. Chem. **45**, 1150 (1971).

49. F. Birch, Phys. Rev. **71**, 809 (1947).

50. R. E. Ryltsev and N. M. Chtchelkatchev. J. Chem. Phy. **141**, 124509 (2014).

51. A. McDonough, S. P. Russo, and I. K. Snook, Phys. Rev. E **63**, 026109 (2001).

52. M. H. Ernst, Phys. Rev. E **71**, 030101 (2005).

53. In-Chul Yeh and G. Hummer, J. Phys. Chem. B **108**, 15873 (2004).

54. V. I. Deshchenya, N. D. Kondratyuk, A. V. Lankin, and G. E. Norman, Russ. J. Phys. Chem. A **96**, 556 (2022).

55. U. Dahlborg, M. Besser, M. J. Kramer, J. R. Morris, and M. Calvo-Dahlborg, Physica B **412**, 50 (2013).

56. J. Brillo, S. M. Chathoth, M. M. Koza, and A. Meyer, Appl. Phys. Lett. **93**, 121905 (2008).

57. W. Y. Wang, J. J. Han, H. Z. Fang, J. Wang, Y. F. Liang, S. L. Shang, Y. Wang, X. J. Liu, L. J. Kecskes, S. N. Mathaudhu, X. Hui, and Z. K. Liu, Acta Materialia **97**, 75 (2015).

58. C. Rey-Castro and L. F. Vega, J. Phys. Chem. B **110**, 14426 (2006).

59. M. Schick, J. Brillo, I. Egry, and B. Hallstedt, J. Mater. Sci. **47**, 8145 (2012).

60. N. Ouchi et al., Proc. 9th Asian Thermophysical Properties Conference, Beijing, China, 109301 (2010).

61. A. V. Karavaev, V. V. Dremov, and F. A. Sapozhnikov, J. Nuclear Materials **524**, 149 (2019).

62. V. V. Dremov, P. V. Chirkov, and A. V. Karavaev, Sci. Rep. **11**, 934 (2021).

63. V. V. Dremov and A. V. Karavaev, Procedia Manufacturing **37**, 599 (2019).

64. D. Marchand, A. Jain, A. Glensk, and W. A. Curtin, Phys. Rev. Materials **4**, 103601 (2020).

65. D. Marchand and W. A. Curtin, Phys. Rev. Materials **6**, 053803 (2022).

66. К. Ю. Окишев, *Кристаллохимия и дефекты кристаллического строения: учебное пособие*, Изд-во ЮУрГУ (2007).

67. Guo Zhuoqiang et al., Proc. 27th ACM SIGPLAN Symp. on Principles and Practice of Parallel Programming (2022).

68. F. Dorner, Z. Sukurma, C. Dellago, and G. Kresse, Phys. Rev. Lett. **121**, 195701 (2018).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 996–1007 © 2023

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ Al–TiC

В. В. Решетняк [a,b,c*], ***А. В. Аборкин*** [c], ***А. В. Филиппов*** [a,b]

[a] *ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований 108840, Троицк, Москва, Россия*

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

[c] *Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых 600000, Владимир, Россия*

Поступила в редакцию 27 июля 2023 г.,
после переработки 18 августа 2023 г.
Принята к публикации 18 августа 2023 г.

В рамках теории функционала плотности выполнено исследование взаимодействия наночастицы карбида титана с подложками алюминия (100), (110) и (111). Определены энергии взаимодействия наночастицы с подложкой, проведен анализ распределения электронной плотности и функции локализации электронов между атомами алюминия, титана и углерода. Установлено, что атомы верхних слоев подложек алюминия (100) и (110) в результате взаимодействия с наночастицей существенно смещаются относительно своих исходных позиций, в то время как для подложки (111) характерно незначительное смещение атомов. Взаимодействие между атомами алюминия и углерода на межфазной границе Al–TiC обусловлено образованием ковалентных химических связей Al–C. Образующие карбидные связи атомы алюминия не формируют химических связей с атомами титана. Атомы алюминия, расположенные по соседству с атомами титана и не участвующие в формировании карбидных связей, образуют связи Al–Ti металлического типа.

DOI: 10.31857/S0044451023120131
EDN: MXVJUP

1. ВВЕДЕНИЕ

Разработка конструкционных материалов на основе алюминия с повышенными механическими характеристиками представляет интерес для различных приложений. Перспективным для данной задачи представляется создание композитов, роль упрочняющей фазы в которых играют наноразмерные высокомодульные частицы. В качестве таких добавок часто используются углеродные, керамические или гибридные наночастицы [1–4]. Из экспериментальных работ известна возможность повышения модулей упругости, предела текучести, твердости и других характеристик таких композитов [1, 2, 5]. Согласно результатам недавно опубликованных исследований [3], использование в качестве добавки углеродных нанотрубок, покрытых слоем TiC, позволяет также повысить жаропрочность алюмоматричных композитов.

Из-за развитой поверхности межфазных границ доля поверхностных атомов в нанокомпозитах существенна, и энергия межфазного взаимодействия не мала. Наличие межфазных границ оказывает значительное влияние на упругие характеристики композитов, а напряжения, возникающие на поверхностях, – на динамику структурных дефектов и прочностные характеристики. Модель, учитывающая вклад энергии интерфейса в рамках теории упругой деформации межфазной границы, была предложена в [6, 7], а затем развита в [8]. В качестве параметров модели используются объем наночастицы, ее модули упругости, удельная свободная энергия и модули упругости межфазной границы. В работе [9] отмечена проблема переходной зоны для среды с наноразмерной неоднородностью — области вблизи межфазной границы, объем которой не мо-

* E-mail: viktor.reshetnyak84@gmail.com

жет считаться малым в сравнении с объемом наночастицы. Упругие характеристики вещества в переходной зоне определяются характером взаимодействия наночастицы с матрицей, а также состоянием вещества матрицы и наночастицы вблизи межфазной границы. Для учета влияния переходной области на механику нанокомпозита авторы [9] применили модель, в которой предполагается, что упругие свойства вещества в этой области изменяются плавно и при удалении от межфазной границы достигают значений, характерных для объемного вещества матрицы или неоднородности.

Учет конечной толщины переходной зоны значительно усложняет термодинамику поверхности по сравнению с подходом Гиббса, в котором межфазная поверхность считается бесконечно тонкой, а ее термодинамические характеристики полностью определяются площадью. Рассмотрение переходной зоны конечной толщины требует независимого определения механических свойств и толщины «поверхностной фазы», изучение которой затруднительно [10]. Однако, поскольку для нанокомпозитов объем переходной зоны соизмерим с объемом упрочняющих частиц, правомерность пренебрежения толщиной межфазной области вызывает вопросы. Теоретический анализ, выполненный в работе [11], свидетельствует о том, что пренебрежение толщиной межфазной области при оценке упругих свойств неоднородных сред с наночастицами может приводить к качественно неверным результатам. Свойства же межфазных границ могут быть исследованы численно, с привлечением методов атомистического моделирования. Возможно также построение аналитических моделей [11], приближенно учитывающих взаимодействие наночастицы с окружающим веществом. Обозначенные модели используют представление о парном взаимодействии атомов посредством псевдопотенциалов — аналитических функций, вид которых зависит от типа межатомного взаимодействия, а параметры могут быть рассчитаны по данным *ab initio* вычислений или экспериментов.

Наночастицы TiC ранее успешно применялись для создания алюмоматричных композитов [3, 4, 12, 13]. Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию взаимодействия стехиометрических наночастиц TiC с поверхностями алюминия различной ориентации. Расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT). Форма частиц определялась по правилу Кюри–Вульфа [14] по алгоритму, реализованному в программе ASE [15] с использованием предварительно рассчитанных значений поверхностных энергий TiC. Рассчитана энергия взаимодействия наночастицы с подложками алюминия (100), (110) и (111), выполнен анализ функции локализации электронов и электронной плотности, определены типы межатомных взаимодействий для пар атомов Al–Ti и Al–C на межфазных границах Al–TiC.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Вычисления выполнялись с использованием программы CP2K [16]. Обмен и корреляция электронов были учтены в обобщенном градиентном приближении с использованием функционала Пердью–Бурке–Эрнцерхофа (PBE) [17]. Взаимодействие валентных электронов и ионных остовов учитывалось с использованием сохраняющего норму псевдопотенциала Гоэдеккера–Теттера–Хуттера (GTH) [18]. При расчете состояний валентных электронов был выбран двухэкспоненциальный валентно-расщепленный базисный набор с поляризационными функциями DZVP (Double-Zeta Valence with Polarization) [19]. Для электронной плотности в программе CP2K используется переразложение по вспомогательному базису плоских волн [20,21]. Преобразование Фурье электронной плотности и матричных элементов операторов выполняется численно методом сеток, детализация которых определяется условием обрезки кинетической энергии: $\mathbf{k}^2/2 \leq E_{cut}$, где $\mathbf{k}$ — волновой вектор, E_{cut} — энергия обрезки. Использование реализованного в программе CP2K многосеточного метода позволяет существенно ускорить вычисления [21]. По умолчанию количество сеток равно четырем, и их детализация определяется двумя параметрами обрезки для наиболее мелкой и грубой сеток. Значения параметров обрезки вычисляются путем исследования сходимости. В настоящей работе для всех кристаллов и поверхностей Al и TiC значения указанных параметров обрезки задавались равными 400 Ry и 60 Ry. Перед выполнением основных вычислений было проведено тестирование модели путем расчета характеристик кристаллов алюминия и карбида титана, энергий поверхностей с малыми индексами Миллера (100), (110) и (111) и сравнения полученных результатов с известными литературными данными.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В ходе предварительного тестирования модели были рассчитаны значения параметров решетки и констант упругой податливости s_{ij} кристалличе-

ских алюминия и TiC. Для численного интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась сетка Монхорста–Пака размером $8 \times 8 \times 8$. Исходные позиции атомов и параметры кристаллической решетки были взяты из базы данных МИНКРИСТ [22]. Сначала выполнялась оптимизация позиций атомов и параметров кристаллической решетки кристаллов без приложенной внешней нагрузки, а затем под действием напряжений σ_i, где $i = 1, 4$, вычислялись зависимости $\varepsilon_1(\sigma_1)$, $\varepsilon_2(\sigma_1)$ и $\varepsilon_4(\sigma_4)$. Значения s_{11}, s_{12} и s_{44} определялись путем линейной аппроксимации полученных зависимостей деформаций от напряжений по методу наименьших квадратов. В силу симметрии, для кубических кристаллов только эти три компоненты тензора податливости являются независимыми и полностью характеризуют упругость кристаллов [23]. Константы жесткости рассчитывались по формулам [23]

$$c_{11} = \frac{s_{11} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})},$$
$$c_{12} = \frac{-s_{12} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})}, \qquad (1)$$
$$c_{44} = \frac{1}{s_{44}}.$$

Результаты вычисления в сравнении с известными справочными данными [22, 24] представлены в табл. 1.

Таблица 1. Сравнение рассчитанных параметров кристаллов с экспериментальными данными

Параметр	Расчет		Эксперимент*	
	Al	TiC	Al	TiC
a, Å	4.029	4.328	4.050	4.328
c_{11}, ГПа	132.7	505.0	107.3	524.5
c_{12}, ГПа	61.6	130.3	60.8	98.0
c_{44}, ГПа	31.1	190.6	28.3	180.9

** Примечание.* Параметры решетки кристаллов взяты из базы данных [22], значения констант жесткости — из справочника [24].

Из табл. 1 видно неплохое согласие результатов вычислений и справочных данных. Имеющиеся расхождения можно объяснить как выбором приближенной квантовомеханической модели кристаллов, так и различием температур в модели и эксперименте. Справочные данные, представленные в табл. 1, соответствуют измерениям при температуре 300 K, в то время как в расчете тепловое движение атомов не учитывалось.

Расчеты поверхностных энергий алюминия и карбида титана выполнялись для пленок, вырезанных из кристаллов плоскостями (100), (110) и (111). Удельная энергия, приходящаяся на единицу площади поверхности, рассчитывалась по формуле

$$\gamma = \frac{E_s - N_s \epsilon_b}{2S}, \qquad (2)$$

где E_s — энергия пленки, содержащей N_s атомов, ϵ_b — средняя энергия, приходящаяся на один атом в кристалле, S — площадь одной из поверхностей пленки. Поскольку для TiC возможны различные варианты построения пленок с поверхностями (111), заметим, что в настоящей работе были рассмотрены только стехиометрические пленки.

Для дальнейшего исследования нами было выполнено предварительное тестирование зависимостей поверхностных энергий от толщины пленок. Для пленок из алюминия тестирование показало, что для всех рассмотренных направлений значения γ слабо (в пределах $0.03\,\text{Дж}/\text{м}^2$) меняются при выборе толщины пленки от четырех атомных слоев и более. Однако расчеты, выполненные при взаимодействии с наночастицами TiC, указывают на значительное влияние нижней границы на поверхностную энергию и структуру пленок Al(110) толщиной менее 7 атомных слоев. Поэтому в настоящей работе для всех пленок из алюминия представлены данные, полученные для пленок толщиной 7 атомных слоев.

При расчете поверхностных энергий пленок TiC толщиной не менее 6 атомных слоев результат практически не зависел от толщины пленки. Разность значений γ, рассчитанных для пленок в 6 и 8 слоев, не превышает $0.02\,\text{Дж}/\text{м}^2$ для всех рассмотренных поверхностей. Поэтому в работе анализировались значения, рассчитанные для пленок TiC толщиной в 6 атомных слоев.

При расчете энергии и структуры пленок интегралы по зоне Бриллюэна вычислялись с использованием сетки Монхорста–Пака размером 8×8. Кроме того, поверхностные энергии алюминия также вычислялись с использованием суперъячеек, размеры которых задавались равными 8×8 для Al(100) и Al(111) и 6×8 для Al(110). Расчеты для суперъячеек осуществлялись только в точке Г зоны Бриллюэна. Рассчитанные поверхностные энергии алюминия и карбида титана представлены в табл. 2 в сравнении с литературными данными.

Анализ данных, приведенных в табл. 2, позволяет сделать вывод о хорошем согласии результатов

Таблица 2. Сравнение рассчитанных значений γ, Дж/м^2, с данными других авторов

	(100)	(110)	(111)
Al^a	0.93	1.02	0.82
Al^b	0.96	1.04	0.83
Al [25–27]	$0.86 - 1.08$	$0.93 - 1.14$	$0.67 - 0.94$
TiC^a	1.65	3.65	5.58
TiC [28–31]	$1.58 - 1.80$	3.53, 4.77	5.65

Примечание. ^{a} — элементарная ячейка, сетка Монхорста–Пака 8×8; ^{b} — суперъячейка.

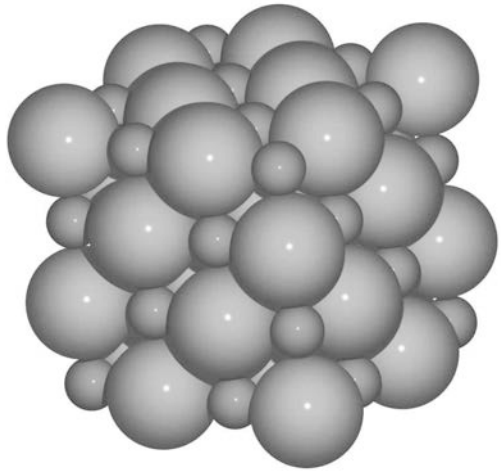


Рис. 1. Наночастица TiC кубической формы, включающая 64 атома. Грани наночастицы образованы поверхностями {100}

наших вычислений и расчетов других авторов. Следует заметить при этом, что значение поверхностной энергии TiC(110) из работы [30] 4.77 Дж/м^2 заметно отличается как от наших данных, так и от результатов [31], которые в свою очередь совпадают с нашими с хорошей точностью.

Поверхностная энергия TiC(100) оказывается существенно ниже, чем энергии поверхностей (110) и (111). Построение наночастиц по правилу Кюри–Вульфа [14] в программе ASE [15] дает кубическую форму стехиометрических наночастиц TiC, ограненных плоскостями {100}. Заметим при этом, что форма и структура наночастиц во многом определяются условиями роста (в частности, при синтезе наночастиц на подложке, ее структурой и химическим составом). В настоящей работе, однако, данный вопрос не был исследован, и все вычисления проводились для стехиометрической наночастицы TiC кубической формы, содержащей 64 атома. Начальные позиции атомов алюминия и углерода наночастицы задавались в соответствии со структурой идеального кристалла (рис. 1).

В кристалле TiC каждый атом титана или углерода расположен по соседству с шестью атомами противоположного сорта. Наночастица, представленная на рис. 1, содержит 8 атомов, число соседей для которых равно 6. Эти атомы могут считаться внутренними, а остальные 56 атомов, имеющие от 3 до 5 соседей, — атомами поверхности. При этом 24 атома поверхности имеют по 5 соседей и относятся к граням наночастицы, еще 24 атома, которые относятся к ребрам, имеют по 4 соседа, а для 8 атомов, расположенных в вершинах, количество соседей минимально и равно трем.

Средняя избыточная энергия наночастицы, приходящаяся на один атом, вычислялась до и после оптимизации по формуле

$$\epsilon_{ex} = E_{np}/N_{np} - \epsilon_b, \tag{3}$$

где E_{np} — энергия наночастицы, а N_{np} — число атомов в ней.

В ходе оптимизации позиций атомов величина ϵ_{ex} незначительно уменьшилась от 0.90 до 0.87 эВ. В результате оптимизации средние расстояния между внутренними атомами наночастицы и их ближайшими соседями уменьшаются от исходного значения 2.164 Å до 2.133 Å. Атомы, относящиеся к граням наночастицы, отстоят от своих ближайших соседей примерно на 2.111 Å, атомы ребер — на 2.073 Å, а вершинные атомы — на 1.990 Å. Расстояние между противоположными гранями также уменьшилось от исходного значения 6.492 Å до 6.126 Å. При этом противоположные грани считались параллельными, а расстояние между ними оценивалось как разность усредненных нормальных компонент координат атомов, образующих эти грани.

Оптимизация позиций атомов в системе Al–TiC свидетельствует о том, что в результате взаимодействия наночастиц с поверхностями атомы алюминия верхних слоев смещаются относительно своих исходных позиций согласно рис. 2. Для поверхностей Al(100) и Al(110) изменение структуры верхнего слоя связано с образованием вакансий, адатомов и междоузельных атомов. При этом атомы алюминия располагаются рядом с атомами углерода, образуя с ними химические связи длиной около 2.0 Å.

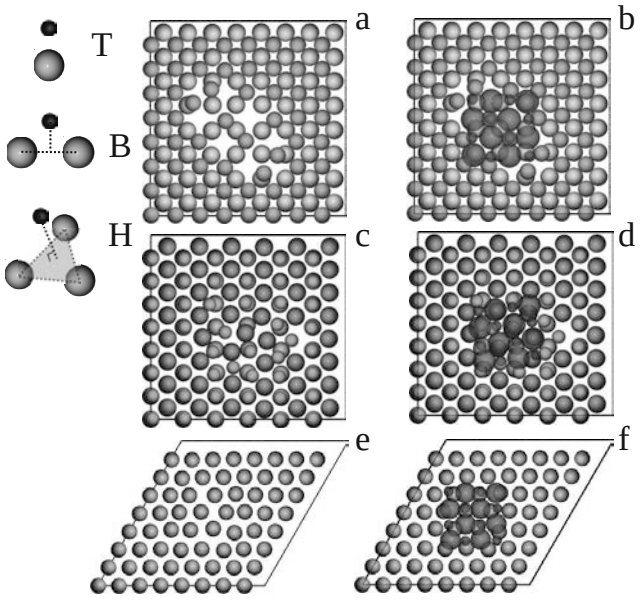


Рис. 2. Реконструкция поверхностей алюминия при взаимодействии с наночастицей TiC: *a, c, e* — верхние атомные слои поверхностей Al(100), Al(110) и Al(111), *b, d, f* — добавлены атомы нижнего слоя наночастицы TiC. Атомы титана и углерода окрашены черным цветом, причем атомы титана имеют больший радиус. Если релаксация позиций атомов сопровождалась нарушением локального порядка в этих слоях, атомы алюминия, относящиеся к поверхностному слою, окрашивались зеленым цветом, а к подповерхностному — фиолетовым. Если нарушения порядка в слое атомов алюминия не наблюдалось, атомы этого слоя окрашивались коричневым цветом. В левом верхнем углу рисунка схематически представлены различные конфигурации взаимного расположения атомов алюминия и углерода

Возможна реализация трех различных конфигураций относительного расположения атомов Al и C. Конфигурация T (top) соответствует расположению атома углерода над атомом алюминия. При этом атом углерода связан с одним атомом алюминия, а линия связи образует с нормалью к поверхности алюминия малый угол. Конфигурация B (brige) соответствует взаимодействию атома углерода с двумя атомами алюминия, расположенными примерно на одинаковом расстоянии от него. Возможна также реализация конфигурации H (hollow), в которой атом углерода соседствует с тремя атомами алюминия и расположен над плоскостью треугольника, составленного тремя атомами алюминия. Анализ структур, полученных в ходе оптимизации, указывает также на то, что атомы титана всегда располагаются над центрами колец из трех или более атомов алюминия, принадлежащих верхнему атомному слою пленки.

Из рис. 2 видно, что в ходе оптимизации атомы верхнего слоя поверхности Al(100) существенно сдвинулись относительно своих исходных позиций. Смещение атомов сопровождалось образованием вакансий и двух адатомов, расположенных вблизи вершинных атомов углерода наночастицы TiC.

При анализе локального окружения атомов углерода связанными с ними считались те атомы алюминия, расстояние до которых не превышало 2.3 Å. Таким образом, полное число связей Al–C для пленки Al(100) оказалось равным 10. Из 8 атомов углерода на поверхности наночастицы 6 имеют один соседний атом алюминия. Углы, образованные линиями связей Al–C и нормалью к поверхности алюминия, составляют от 3° до 30°, а их расположение над поверхностью примерно соответствует T-конфигурации. Длины связей составляют около 2.00 Å и практически не зависят от выбора пары атомов. Оставшиеся 2 атома углерода располагаются в вершинах кубического кластера TiC и имеют по 2 соседних атома алюминия. Взаимное расположение вершинных атомов углерода и связанных с ними атомов алюминия соответствует B-конфигурации, а длины связей составляют 1.99 и 2.02 Å.

Пары атомов титана и алюминия считались соседними в том случае, если расстояние между ними не превышало 3.3 Å. Атомы титана имеют 45 соседних атомов алюминия, от 4 до 7 атомов каждый. Расстояния между атомами титана и алюминия различны и принимают значения в диапазоне от 2.58 Å до 3.27 Å, причем среднее расстояние составляет 2.97 Å. Энергия связи наночастицы с подложкой рассчитывалась по формуле

$$E_b = E_s + E_p - E_0, \tag{4}$$

где энергия E_0 вычислялась для системы взаимодействующих наночастицы и подложки после релаксации позиций атомов, а энергии E_s и E_p — в отсутствие взаимодействия для подложки и наночастицы соответственно.

Полученное для Al(100) значение энергии связи $E_b = 14.25$ эВ соответствует средней энергии 0.89 эВ/атом для каждого из восьми связанных с подложкой атомов C и Ti. Предполагая, что поверхностная плотность атомов для наночастицы мало отличается от значения $0.214\,\text{Å}^{-2}$, соответствующего поверхности (100), получим оценочное значение удельной энергии взаимодействия $\gamma = 3.0\,\text{Дж/м}^2$. Это значение несколько выше полученной в работе [32] величины $2.63\,\text{Дж/м}^2$ для двух пленок Al(100) и TiC(100). Расхождение можно объяснить зависимостью энергии взаимодействия пар атомов от их ло-

кального окружения. В частности, каждый из атомов Ti или C на ребрах и в вершинах наночастицы связан с меньшим числом атомов противоположного сорта, чем атомы, относящиеся к грани (100). Это может оказаться причиной более сильного парного взаимодействия этих атомов с атомами алюминия или привести к увеличению числа химических связей и повысить таким образом энергию связи наночастицы с подложкой. Дополнительным источником погрешности при расчете энергии интерфейса, образованного двумя периодическими пленками, является несоответствие параметров решеток Al и TiC. Ввиду малости расчетной области, напряжения, которые возникают из-за структурного несоответствия, не могут быть уменьшены за счет образования дислокаций, вспучивания поверхностей пленок или формирования других крупномасштабных дефектов поверхности, которые могут реализовываться на практике. Реконструкция поверхности алюминия согласно рис. 2*a,b* также способствует снижению энергии E_0 и увеличению энергии связи E_b. Использование же периодических граничных условий при моделировании контакта двух пленок ограничивает смещение атомов поверхности и может приводить к занижению E_b.

Возможно также сравнение полученных результатов с экспериментальными данными работ [33–35], где были проведены измерения краевых углов для алюминиевых сплавов различных составов (расплавленная капля) на поверхности TiC. Заметим, что анализ обозначенных экспериментов затруднен зависимостью контактного угла от химического состава сплава, выбора состава и термодинамических параметров атмосферы, возможностью протекания неравновесных процессов и другими факторами. Тем не менее анализ результатов измерений, проведенных в работах [33–35] в различных условиях, позволяет предположить, что значение контактного угла θ в близких к идеальным условиях эксперимента может составлять 55°–60°. При этом энергию взаимодействия расплава с подложкой можно рассчитать, используя уравнения Юнга–Дюпре [10]:

$$\gamma = \gamma_{\mathrm{TiC}} - \gamma_{\mathrm{Al}} \cos\theta. \qquad (5)$$

Подставляя данные из табл. 2 в формулу (5), получим $\gamma \approx 2.1\,\text{Дж}/\text{м}^2$, что несколько меньше рассчитанной нами величины $3.0\,\text{Дж}/\text{м}^2$, а также значения $2.63\,\text{Дж}/\text{м}^2$ из [32]. Имеющееся расхождение находится в допустимых пределах и может быть объяснено обозначенными выше сложностями, связанными с интерпретацией экспериментальных данных, либо приближениями теории функционала плотности. Кроме того, теоретические вычисления проводились для кристаллической пленки алюминия, без учета теплового движения атомов, в то время как экспериментальные данные были получены для расплава при различных температурах около 1000 K.

При оптимизации системы TiC–Al(110) структура двух верхних слоев алюминиевой пленки искажается. Изменение структуры второго по счету сверху слоя (фиолетовые атомы на рис. 2*c,d*) связано с образованием двух вакансий в этом слое, а также двух междоузельных атомов во втором и первом верхнем слоях (зеленые атомы на рис. 2*c,d*). Начиная с третьего слоя и далее смещение атомов в ходе оптимизации было менее существенным и не приводило к формированию структурных дефектов.

Анализ локального окружения показал, что по соседству с каждым из атомов углерода наночастицы расположено не более одного атома алюминия, а число пар соседних атомов Al–C равно 8. Для 5 атомов углерода из 8 линии связи C–Al образует с нормалью углы менее 30°, а для остальных атомов углы оказываются больше и достигают 50°. Длины связей Al–C изменяются от 1.93 до 2.08 Å и в среднем составляют 1.99 Å, причем корреляция между длинами связей и углами отсутствует.

Восемь атомов Ti расположены по соседству с 41 атомом алюминия и имеют от 4 до 8 соседей каждый. Межатомные расстояния соседних атомов Ti–Al принимают значения от 2.7 до 3.1 Å и в среднем составляют 2.96 Å.

Энергия связи наночастицы с подложкой Al(110) составила 13.62 эВ, что несколько ниже значения, полученного для пленки Al(100). Среднее значение энергии связи, приходящееся на один атом Ti или C, расположенный вблизи алюминиевой подложки, составляет 0.85 эВ/атом, а оценка удельной энергии адгезии дает значение $\gamma = 2.9\,\text{Дж}/\text{м}^2$.

В ходе оптимизации системы TiC–Al(111) атомы верхних слоев поверхности алюминия незначительно смещались относительно исходных позиций, что позволяет пренебречь нарушением трансляционной симметрии атомов поверхности алюминия (рис. 2*e,f*). Сохранение структуры поверхностного слоя алюминия в этом случае можно объяснить, принимая во внимание более плотную упаковку атомов поверхности Al(111) ($0.142\,\text{Å}^{-2}$) по сравнению с Al(100) и Al(110) (0.123 и $0.087\,\text{Å}^{-2}$ соответственно). Можно предположить, что при увеличении плотности упаковки подвижность поверхностных атомов уменьшается из-за более сильного взаимодействия с соседними атомами, что препятству-

ет их смещению относительно исходных позиций в условиях взаимодействия с наночастицей.

Четыре атома углерода, относящиеся к нижней грани наночастицы, оказались связаны с одним атомом алюминия каждый (T-конфигурация). Два атома углерода, которые условно могут быть отнесены к ребрам нижней грани, образуют связи с двумя атомами алюминия каждый, что соответствует B-конфигурации, и два вершинных атома образуют по три Al–C связи, как это показано на схеме рис. 2 для H-конфигурации. Таким образом, суммарное количество связей Al–C равно 14. Длины связей Al–C принимают значения в диапазоне от 2.00 до 2.24 Å и в среднем составляют 2.08 Å.

Атомы Ti нижнего атомного слоя наночастицы располагаются вблизи 46 атомов Al и имеют от 4 до 7 соседей каждый. Значения межатомных расстояний для пар соседних атомов Ti–Al изменяются в диапазоне от 2.58 до 3.27 Å, а среднее значение составляет 2.97 Å.

Энергия связи наночастицы с подложкой Al(111) составила 11.04 эВ, или в среднем 0.69 эВ/атом на каждый из связанных с подложкой атомов Ti или C. Оценка удельной энергии адгезии дает величину $\gamma \approx 2.4\,\text{Дж}/\text{м}^2$, что заметно меньше значений 3.0 и $2.9\,\text{Дж}/\text{м}^2$, полученных нами для пленок Al(100) и Al(110) соответственно, а также значения $2.63\,\text{Дж}/\text{м}^2$, рассчитанного в [32] для контакта пленок Al(100) и TiC(100). Полученные данные указывают на сильную зависимость энергии межфазной границы от структуры и взаимной ориентации поверхностей взаимодействующих Al и TiC. При этом энергетически предпочтительными оказываются границы, образованные поверхностями Al(100) и TiC(100), в то время как образование границ Al(110)–TiC(100) или Al(111)–TiC(100) менее вероятно.

Анализ заселенностей атомных орбиталей по Малликену указывает на химический характер взаимодействия между атомами Al–C и Al–Ti. Взаимодействие между частицей и подложкой сопровождается перекрыванием валентных орбиталей соседних атомов Al–C и Al–Ti и переносом заряда от алюминия к TiC. Расчет зарядов атомов титана и углерода в кристалле дает значения $+0.185e$ и $-0.185e$ соответственно. В результате нарушения симметрии кристалла и образования поверхностей заряды атомов в наночастице оказываются отличными от значений в кристалле. Заряды атомов титана, расположенных на поверхности наночастицы, составляют от $+0.15e$ до $+0.20e$. Атомы углерода имеют отрицательные заряды в диапазоне от $-0.21e$ до $-0.10e$.

При взаимодействии наночастиц с подложками Al(100), Al(110) и Al(111) суммарные заряды атомов углерода и титана становятся равными $-1.73e$, $-1.52e$ и $-2.28e$ соответственно. Отрицательные заряды атомов углерода в результате взаимодействия увеличиваются: значение, полученное усреднением по всем атомам углерода для всех трех ориентаций подложки составило $-0.27e$. Положительные заряды атомов титана уменьшаются и в среднем составляют $+0.03e$.

Дополнительную информацию, необходимую для классификации межатомных взаимодействий в молекулах и твердых телах, можно получить, анализируя пространственное распределение электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ [36] и других скалярных функций координат, построенных с использованием $\rho(\mathbf{r})$ и ее производных [37, 38]. При анализе распределения электронной плотности согласно квантовой теории атомов в молекулах Бейдера [36] особое внимание уделяется поверхностям с нулевыми потоками градиента электронной плотности, которые ассоциируются с пространственными границами атомов, а также линиям максимальной электронной плотности, соединяющим пары ядер, которые ставятся в соответствие химическим связям между атомами. Следует заметить, что применимость теории атомов в молекуле к анализу результатов, полученных с использованием метода псевдопотенциала, ограничена [38]. Поэтому в настоящей работе анализ распределения электронной плотности выполнялся в ограниченном объеме: не были рассчитаны заряды атомов, не анализировались потоки градиентов электронной плотности, не были определены критические точки связей. Анализ распределения электронной плотности ограничивался вычислением значений величин электронной плотности, ее градиента и гессиана в критических точках функции локализации электронов $\eta(\mathbf{r})$, которая определяется согласно выражению [39, 40]

$$\eta(\mathbf{r}) = \frac{1}{1 + \left[D(\mathbf{r})/D_0(\mathbf{r})\right]^2}, \tag{6}$$

где $D_0 = (3/10)(3\pi^2)^{2/3}\rho(\mathbf{r})^{5/3}$ — плотность распределения кинетической энергии в модели Томаса–Ферми, а величина

$$D(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_i \left|\nabla\varphi_i(\mathbf{r})\right|^2 - \frac{1}{8}\frac{\left|\nabla\rho(\mathbf{r})\right|^2}{\rho(\mathbf{r})} \tag{7}$$

характеризует степень локализации электронных пар [39]. Функция $\eta(\mathbf{r})$ может принимать значения от 0 до 1, причем значение 0.5 соответствует делока-

лизованным электронам (величина D равна соответствующей величине D_0 в электронном газе), а значение $\eta(\mathbf{r}) = 1$ — полной локализации электронной пары в точке $\mathbf{r}$. Значения $\eta < 0.5$ возникают в областях пространства между локализованными электронами.

Как и $\rho(\mathbf{r})$, функция локализации электронов имеет сложную топологию и характеризуется наличием локальных максимумов, минимумов и седловых точек. В отличие от электронной плотности, локальные максимумы η соответствуют локализованной в данной точке пространства электронной паре и могут быть обнаружены как вблизи ядер атомов, так и в областях межатомного пространства на линиях связей. Последний случай указывает на локализацию пар валентных электронов соседних атомов и представляет особенный интерес при анализе химической связи.

На рис. 3*a* представлены зависимости функции $\eta(\mathbf{r})$, построенные вдоль линий связей Al–C для системы TiC–Al(100). Здесь и далее $\mathbf{r}$ — векторный аргумент функции, построенной в пространстве трех переменных, r — скалярный аргумент функции, построенной вдоль линии связи. Из рис. 3*a* видно, что $\eta(r)$ имеет максимум и слабо зависит от выбора пары атомов. Вблизи ядер атомов величина η обращается в нуль, что обусловлено рассмотрением только валентных электронов в модели с псевдопотенциалом. Анализ градиентов и матрицы Гессе функции $\eta(\mathbf{r})$ свидетельствует о том, что в данной точке функция достигает локального максимума и принимает значение $\eta \approx 0.83$. Сильная локализация электронной пары на линиях связи ($\eta \geq 0.8$) характерна для ковалентно связанных атомов, что позволяет объяснить направленный характер взаимодействия и реконструкцию поверхности алюминия с преимущественным образованием T-конфигураций пар атомов Al–C. Расположение точки максимума на линии связи соответствует значению $r/l \approx 0.60$, что говорит о полярности ковалентной связи Al–C.

Значение электронной плотности в этой точке составляет примерно 0.11 ат. ед. Величина лапласиана электронной плотности в этой точке отрицательна, $\Delta\rho = -0.09$ ат. ед. Сравнительно высокое значение электронной плотности в критической точке, а также отрицательное значение $\Delta\rho$ являются характерными для ковалентных связей.

Деформационная электронная плотность $\delta\rho$ характеризует изменение распределения электронной плотности совокупности невзаимодействующих фрагментов (промолекулы) при их соединении в молекулу и определяется формулой [36, 41]

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - [\rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r})]. \qquad (8)$$

Промолекула может быть выбрана различными способами и чаще всего ее представляют в виде совокупности невзаимодействующих атомов. В настоящей работе в качестве промолекулы выбирались наночастица TiC и подложка, значения электронных плотностей которых ρ_1 и ρ_2 были рассчитаны в геометрии связанной системы.

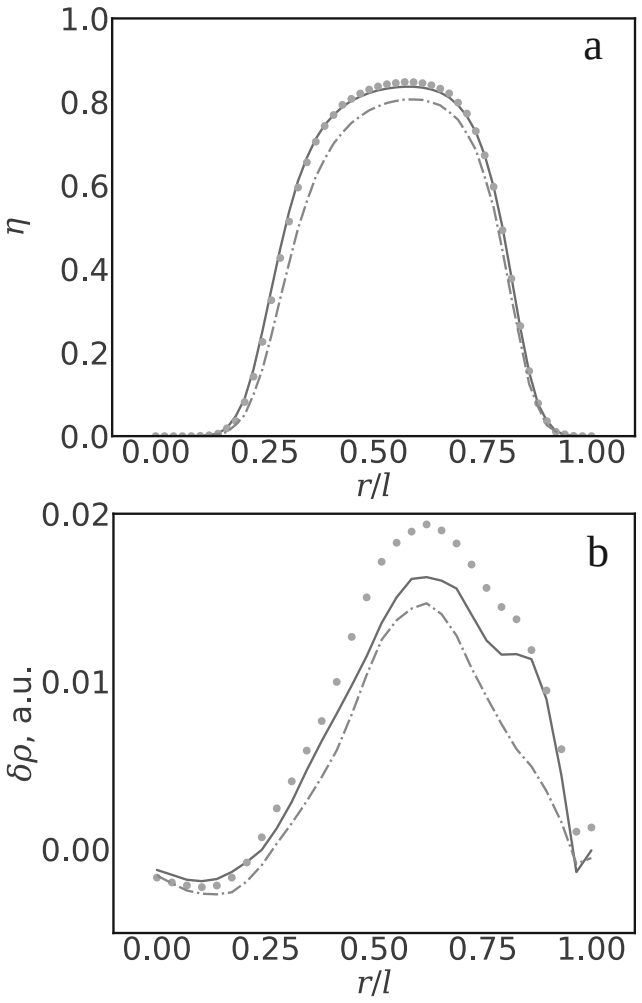


Рис. 3. Зависимости функции локализации электронов (a) и деформационной электронной плотности (b) от расстояния r до атомов алюминия на линиях связей Al–C, построенные для TiC–Al(100). Кривые соответствуют следующим вариантам выбора пар атомов: сплошная линия — вершинный атом углерода и один из двух соседних с ним атомов алюминия; точки — атом углерода расположен на ребре наночастицы; штрихпунктирная — атом углерода принадлежит грани наночастицы. Расстояния отнесены к значениям длин связей l

Значение деформационной плотности в заданной точке может быть положительным или отрицательным, ее знак указывает на накопление или уменьшение электронной плотности и противоположен знаку функции пространственного распределения плотности энергии электронов в точке.

Зависимости $\delta\rho(r)$, построенные вдоль линии связи Al–C и представленные на рис. 3*b*, знакопеременны и имеют выраженные локальные максимумы, положения которых примерно соответствуют положению максимума функции локализации электронов. Вблизи атомов алюминия кривые $\delta\rho(r)$ имеют локальные минимумы, а значения деформационной электронной плотности отрицательны, что указывает на полярный характер межатомного взаимодействия. Немонотонный характер зависимости $\delta\rho(r)$ вблизи атома углерода ($r/l \geq 0.8$) может быть обусловлен погрешностью сеточного представления и интерполяции электронной плотности.

Интегрирование деформационной плотности вдоль линии связи для любой из выбранных пар атомов дает положительную величину, что указывает на накопление электронной плотности в межатомном пространстве. Максимальные значения $\delta\rho$ составляют от 0.014 до 0.02 ат. ед., что ненамного меньше средней плотности валентных электронов в кристаллическом алюминии 0.0267 ат. ед.

Обобщая изложенные выше результаты анализа распределения электронной плотности на линии связи Al–C можно выделить следующие признаки, указывающие на ковалентный характер межатомного взаимодействия.

1) Наличие единственной критической точки типа $(3,-3)$ функции $\eta(\mathbf{r})$ на линии связи, в которой $\eta = 0.83$.

2) Большая величина электронной плотности в этой точке $\rho = 0.11$ ат. ед.

3) Положительная и сравнительно большая величина деформационной плотности в критической точке функции $\eta(\mathbf{r})$.

4) Отрицательный знак лапласиана электронной плотности, $\Delta\rho = -0.09$ ат. ед.

Представленные данные соответствуют T-конфигурации связи Al–C в системе TiC–Al(100). Сравнение с аналогичными данными, полученными для T-, B- и H-конфигураций связей, наблюдаемых в системах с пленками различной ориентации, указывает на незначительные различия в характере зависимости $\eta(r)$: во всех случаях максимальное значение функции оказывается смещено в сторону атома углерода на 58–62%, в точке максимума значения $\eta(\mathbf{r})$ составляют от 0.79 до 0.85, значения $\rho(\mathbf{r})$ близки к 0.1 ат. ед., а величина $\Delta\rho < 0$. Интегрирование деформационной электронной плотности вдоль линии связи также дает отрицательные значения для любой ориентации подложки, независимо от выбора пары атомов Al–C.

Зависимости $\eta(r)$ и $\delta\rho(r)$, построенные вдоль линий, соединяющих атомы алюминия и титана, представлены на рис. 4. Функции $\eta(r)$ имеют два локальных максимума, смещенных к ядрам атомов, и один минимум между ними. Выбор атома алюминия оказывает существенное влияние на функцию $\eta(r)$, в то время как различное расположение атомов титана незначительно влияет на характер зависимости и значения функции в критических точках. Точкам максимумов на линии связи соответствуют позиции неподеленных пар валентных электронов атомов Ti и Al. Функция распределения электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ также принимает максимальные значения в этих точках. В то же время точки максимума $\eta(r)$ оказываются смещены относительно экстремумов деформационной электронной плотности $\delta\rho(r)$. Появление максимумов электронной плотности в позициях, не соответствующих позициям ядер атомов, может быть связано с применением метода псевдопотенциала в настоящей работе. Известно также, что при металлическом характере связи в кристаллах и кластерах возможно появление неядерных аттракторов электронной плотности — локальных максимумов, координаты которых не соответствуют координатам ядер атомов [42,43]. Однако окончательный вывод о причине появления обозначенных максимумов требует полноэлектронного квантовохимического расчета, который в настоящей работе не выполнялся.

Между двумя максимумами функции локализации электронов расположена точка минимума, которая на гиперповерхности $\eta(\mathbf{r})$ является критической точкой типа $(3,-1)$. Величина η в этой точке для различных пар атомов принимает значения от 0.09 до 0.22. При этом для атомов алюминия, образующих также карбидную связь, значения η в критической точке примерно в 2 раза меньше, чем для атомов алюминия, не связанных с атомами углерода. Для всех рассмотренных пар атомов Ti–Al данная точка является также критической точкой на гиперповерхности $\rho(\mathbf{r})$ — точкой типа $(3,-1)$ или $(3,1)$. Заметим при этом, что отрицательные собственные значения гессиана в данной точке близки к нулю,

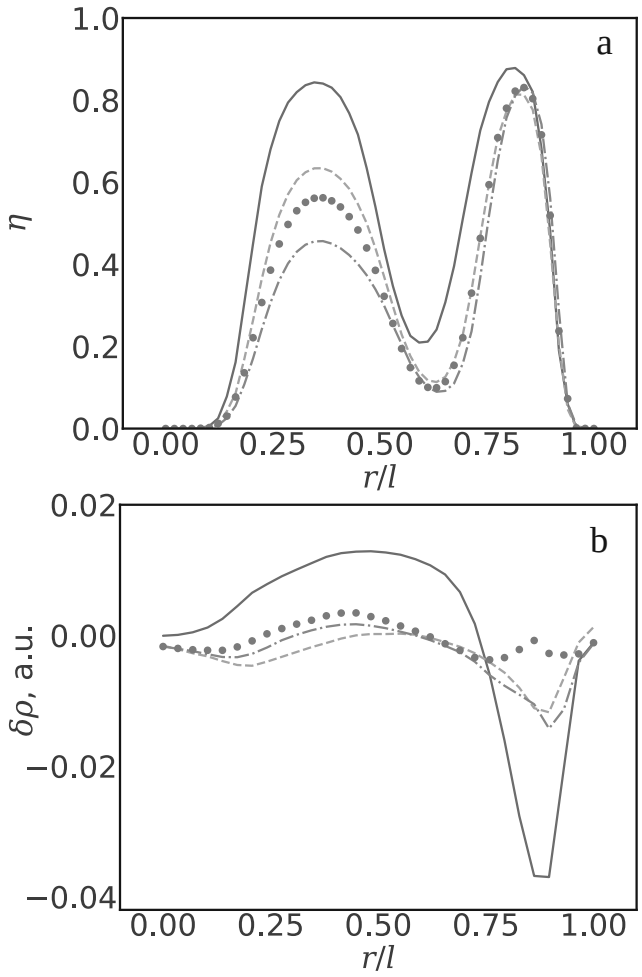


Рис. 4. Зависимости функции локализации электронов (a) и деформационной электронной плотности (b) от расстояния r до атомов алюминия на линиях связей Al–C, построенные для TiC–Al(100). Кривые соответствуют следующим вариантам выбора пар атомов: сплошная линия — атом алюминия располагается по соседству с атомом титана и не образует связей с атомами углерода; штриховая — атом алюминия, расположенный по соседству с атомом титана, связан с атомом углерода на ребре наночастицы; штрихпунктирная — атом алюминия, расположенный по соседству с атомом титана, связан с атомом углерода на грани наночастицы; точки — соседний с атомом титана атом алюминия связан с атомом углерода в вершине наночастицы. Расстояния отнесены к значениям межатомных расстояний l

а лапласиан электронной плотности положителен и принимает значения в диапазоне от 0.03 до 0.3 ат. ед. Электронная плотность в этой точке сравнительно низка, от 0.032 до 0.048 ат. ед. При этом, если атом алюминия образует также связь Al–C, значение лапласиана электронной плотности в точке оказывается намного выше, а значения функций ρ и η — ниже, чем в случаях с атомами алюминия, не связанными с атомами углерода.

Величина $\delta\rho$, построенная вдоль линий связей, знакопеременна и может принимать в критической точке функции $\eta(\mathbf{r})$ как положительные, так и отрицательные значения. Интегрирование деформационной электронной плотности вдоль линии связи дает положительные значения для пар атомов Al–Ti, в которых атом алюминия не образует карбидных связей, и отрицательные — для пар, в которых атом алюминия связан с атомом углерода. Накопление электронной плотности в межъядерном пространстве указывает на наличие притяжения между атомами титана и алюминия, а снижение — на отсутствие связи между атомами. Поэтому можно предположить, что атомы алюминия могут образовать химическую связь с атомами титана в том случае, если они не участвуют во взаимодействии Al–C, а атомы алюминия, связанные с атомами углерода, не образуют химических связей Al–Ti. При этом количество связей Al–Ti существенно сокращается и для подложек Al(100), Al(110) и Al(111) оказывается равным 6, 7 и 5. В то же время малость значений ρ, η, $\delta\rho$, а также положительное значение лапласиана электронной плотности позволяют сделать качественный вывод о более слабом взаимодействии атомов Al–Ti по сравнению с Al–C.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование поверхностных энергий алюминия и карбида титана, а также взаимодействия наночастиц TiC с алюминиевой подложкой. Результаты исследования поверхностей TiC показали значительные различия их энергий в зависимости от ориентации, причем наиболее низкой энергией обладает поверхность (100). Использование полученных энергий при моделировании структуры наночастиц по методу Кюри–Вульфа позволяет предположить кубическую форму стехиометрических наночастиц TiC, грани которой соответствуют плоскостям {100}.

В результате исследования взаимодействия стехиометрических наночастиц TiC малого размера (64 атома) с поверхностями алюминия установлено, что на поверхностях Al(100) и (110) при взаимодействии с наночастицей атомы алюминия смещаются относительно своих исходных позиций и располагаются под атомами углерода. При этом в пленке Al(100) нарушается структура одного атомного слоя, ближайшего к наночастице, а в пленке Al(110) — двух

ближайших слоев. Структура пленки Al(111) слабо меняется в ходе взаимодействия, что может быть связано как с более плотной упаковкой поверхностных атомов, так и с использованием в работе упрощенной модели, не учитывающей теплового движения атомов и предполагающей периодичность подложки. Средняя энергия связи, приходящаяся на один атом титана или углерода, составляет 0.89, 0.85 и 0.69 эВ/атом для пленок Al(100), (110) и (111) соответственно. В первых двух случаях значение энергии мало отличается от величины избыточной энергии, приходящейся на один атом поверхности TiC(100).

Взаимодействие между атомами алюминия, титана и углерода имеет химическую природу. Длины связей Al–C составляют около 2 Å и незначительно различаются для разных пар взаимодействующих атомов. Количество связей, приходящихся на один атом углерода, меняется от одной (в большинстве случаев) до двух или трех для атомов углерода, расположенных в вершинах кубической наночастицы. Взаимное расположение атомов углерода и алюминия свидетельствует о направленности связей Al–C, а анализ функции локализации электронов и электронной плотности вдоль линии связи указывает на наличие локализованной электронной пары, смещенной в сторону атома углерода. Таким образом, можно сделать вывод о полярном ковалентном характере межатомного взаимодействия Al–C.

Для связей Al–Ti нехарактерна строгая направленность, а их длина составляет около 3 Å. Рядом с каждым атомом Ti располагается не менее четырех атомов алюминия, некоторые из которых образуют также связи с атомами углерода. Вид функции локализации электронов, построенной вдоль линий, соединяющих атомы, указывает на образование неподеленных локализованных электронных пар и делокализацию электронной плотности между ними. Накопление электронной плотности в межъядерном пространстве при этом наблюдается только для тех пар атомов Al–Ti, в которых атом алюминия не образует карбидных связей. Характер распределения электронной плотности и функции локализации электронов позволяет сделать вывод о металлическом типе связи таких пар. Если атом алюминия взаимодействует с атомом углерода и располагается по соседству с атомом титана, накопление электронной плотности между ядрами атомов титана и алюминия не происходит. Следовательно, такие атомы алюминия не образуют химических связей с соседними атомами титана.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-79-10227).

ЛИТЕРАТУРА

1. I.A. Evdokimov, T.A. Chernyshova, G.I. Pivovarov, P.A. Bykov, L.A. Ivanov, and V.E. Vaganov, Inorg. Mater. Appl. Res. **5**, 255 (2014).

2. R. Casati and M. Vedani, Metals **4**, 65 (2014).

3. A.V. Aborkin, D.V. Bokaryov, S.A. Pankratov, and A.I. Elkin, Ceramics **6**, 231 (2023).

4. A.V. Aborkin, A.I. Elkin, V.V. Reshetniak, A.M. Obédkov, A.E. Sytschev, V.G. Leontiev, D.D. Titov, and M.I. Alymov, J. Alloys. Comp. **872**, 159593 (2021).

5. S.L. Pramod, S.R. Bakshi, and B.S. Murty, J. Mater. Eng. Perform. **24**, 2185 (2015).

6. P. Sharma and S. Ganti, Phys. Stat. Sol. B **234**, R10 (2002).

7. P. Sharma, S. Ganti, and N. Bhate, Appl. Phys. Lett. **82**, 535 (2003).

8. H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, and B.L. Karihaloo, J. Mech. Phys. Sol. **53**, 1574 (2005).

9. В.Е. Панин, Е.Е. Дерюгин, С.Н. Кульков, Прикл. мех. техн. физ. **51**(4), 127 (2010).

10. Дж. Роулинсон, Б. Уидом, *Молекулярная теория капиллярности*, Мир, Москва (1986).

11. V. Reshetniak, O. Reshetniak, A. Aborkin, V. Nederkin, and A. Filippov, Nanomaterials **12**, 2045 (2022).

12. W.J. Kim and Y.J. Yu, Scripta Mater. **72**–**73**, 25 (2014).

13. W. Liu, C. Cao, J. Xu, X. Wang, and X. Li, Mater. Lett. **185**, 392 (2016).

14. В. И. Ролдугин, *Физикохимия поверхности*, Изд. дом «Интеллект», Долгопрудный (2011).

15. A.H. Larsen, J.J. Mortensen, J. Blomqvist et al., J. Phys. Condens. Matter **29**, 273002 (2017).

16. T.D. Kühne, M. Iannuzzi, M. Del Ben et al., J. Chem. Phys. **152**, 194103 (2020).

17. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

18. S. Goedecker, M. Teter, and J. Hutter, Phys. Rev. B **54**, 1703 (1996).

19. J. VandeVondele and J. Hutter, J. Chem. Phys. **127**, 114105 (2007).

20. G. Lippert, J. Hutter, and M. Parrinello, Mol. Phys. **92**, 477 (1997).

21. G. Lippert, J. Hutter, and M. Parrinello, Theor. Chem. Acc. **103**, 124 (1999).

22. A. V. Chichagov, V. A. Varlamov, R. A. Dilanyan, T. N. Dokina, N. A. Drozhzhina, O. L. Samokhvalova, and T. V. Ushakovskaya, Crystallogr. Rep. **46**, 876 (2001).

23. Дж. Най, *Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц*, Мир, Москва (1967).

24. И. Н. Францевич, *Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов*, Наук. думка, Киев (1982).

25. J. Schöchlin, K. P. Bohnen, and K. M. Ho, Surf. Sci. **324**, 113 (1995).

26. N. E. Singh-Miller and N. Marzari, Phys. Rev. B **80**, 235407 (2009).

27. W. Tyson and W. Miller, Surf. Sci. **62**, 267 (1977).

28. L. H. Fang, L. Wang, J. H. Gong, H. S. Dai, and D. Zh. Miao, Transactions of Nonferrous Metals Society of China **20**, 857 (2010).

29. A. Vojvodic, C. Ruberto, and B. I. Lundqvist, J. Phys. Condens. Matter **22**, 375504 (2010).

30. M. G. Quesne, A. Roldan, N. H. de Leeuw, and C. R. A. Catlow, Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 6905 (2018).

31. L. Wang, L. H. Fang, and J. H. Gong, Transactions of Nonferrous Metals Society of China **22**, 170 (2012).

32. L. M. Liu, S. Q. Wang, and H. Q. Ye, J. Phys. Condens. Matter **15**, 8103 (2003).

33. E. A. Aguilar, C. A. Leon, A. Contreras, V. H. Lopez, R. A. L. Drew, and E. Bedolla, Composites, Part A **33**, 1425 (2002).

34. C. A. Leon, V. H. Lopez, E. Bedolla, and R. A. L. Drew, J. Mater. Sci. **37**, 3509 (2002).

35. A. Contreras, J. Colloid Interface Sci. **311**, 159 (2007).

36. Р. Бейдер, *Атомы в молекулах: квантовая теория*, Мир, Москва (2001).

37. B. Silvi, I. Fourré, and M. E. Alikhani, Monatshefte für Chemie **136**, 855 (2005).

38. Е. В. Барташевич, В. Г. Цирельсон, Успехи химии **83**, 1181 (2014).

39. A. D. Becke and K. E. Edgecombe, J. Chem. Phys. **92**, 5397 (1990).

40. B. Silvi and A. Savin, Nature **371**, 683 (1994).

41. В. Г. Цирельсон, *Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела*, БИНОМ, Лаборатория знаний, Москва (2010).

42. D. Stalke, *Electron Density and Chemical Bonding I: Experimental Charge Density Studies*, Springer, Berlin (2012).

43. B. Silvi and C. Gatti, J. Phys. Chem. A **104**, 947 (2000).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1008–1021 © 2023

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТОТИПА СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СИГМА-НЕЙРОНА ДЛЯ АДИАБАТИЧЕСКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

А. С. Ионин [a,b], ***Н. С. Шуравин*** [a], ***Л. Н. Карелина*** [a], ***А. Н. Россоленко*** [a], ***М. С. Сидельников*** [a], ***С. В. Егоров*** [a], ***В. И. Чичков*** [c], ***М. В. Чичков*** [c], ***М. В. Жданова*** [c], ***А. Е. Щеголев*** [d], ***В. В. Больгинов*** [a*]

[a] *Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук*
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

[b] *Московский физико-технический институт*
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

[c] *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»*
119049, Москва, Россия

[d] *Научно-исследовательский институт им. Д. В. Скобельцына*
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 мая 2023 г.,
после переработки 31 июля 2023 г.
Принята к публикации 3 августа 2023 г.

Рассмотрен эксперимент по реализации искусственного нейрона, предложенного ранее для использования в сверхпроводящих нейронных сетях. Изготовленный образец представляет собой одноконтактный интерферометр, часть контура которого шунтирована дополнительной индуктивностью, используемой также для генерации выходного сигнала. Был разработан и опробован технологический процесс, позволяющий изготовить нейрон в виде многослойной тонкопленочной структуры над толстым сверхпроводящим экраном. Экспериментально измерена передаточная функция изготовленного образца, содержащая сигмоидальную и линейную компоненты. Сформулирована теоретическая модель, описывающая связь входного и выходного сигналов в практическом сверхпроводящем нейроне. Продемонстрировано, что полученные уравнения позволяют аппроксимировать экспериментальные кривые с высоким уровнем точности. Показано, что линейная компонента передаточной функции связана с непосредственной передачей входного сигнала в измерительную цепь. Рассмотрены возможные направления совершенствования конструкции сигма-нейрона.

DOI: 10.31857/S0044451023120143
EDN: MZIWYZ

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большой интерес исследователей вызывают технологии и алгоритмы нейроморфных вычислений (см., например, [1–13]). Последние активно применяются в задачах компьютерных технологий, биологии, нейрофизиологии, физики, химии и т. д., связанных с оперативной обработкой больших неоднородных объемов данных [14–22]. При использовании традиционных устройств, основанных на полупроводниковых технологиях, большие рабочие напряжения вызывают трудности, связанные со значительным энерговыделением и проблемами отвода тепла (см. [23, 24]). Данные обстоятельства влияют на количество нейронов и синапсов, которое способны обеспечить полупроводниковые технологии для современных нейроморфных процессоров [24]. Кроме того, процесс масштабирования процессоров, ранее подчинявшийся экспоненциальному (эмпирическому) закону Мура [25, 26],

* E-mail: bolg@issp.ac.ru

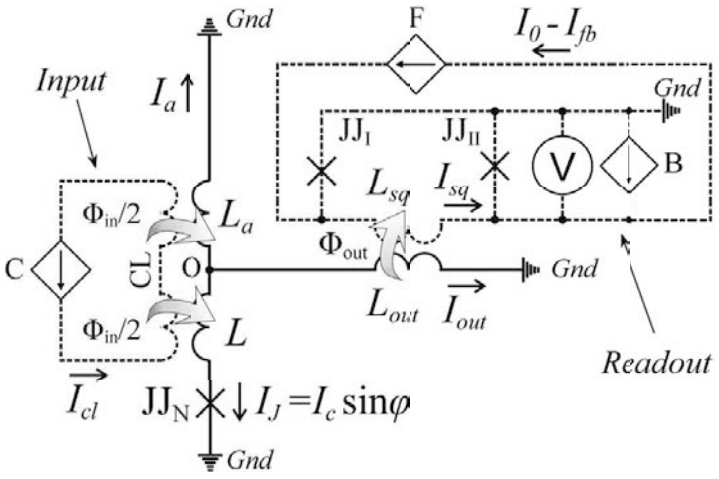


Рис. 1. Принципиальная схема проведенного эксперимента. Сигма-нейрон показан сплошными линиями. Штриховыми линиями показаны задающая (Input) и считывающая (Readout) схемы. Фигурными стрелками показаны входной и выходной магнитные потоки; черными — токи, протекающие в образце. Крестами обозначены контакты Джозефсона. Буквами обозначены точка соединения индуктивных элементов нейрона (O), а также источники тока (B, C, F)

неотвратимо подходит к границе характерных размеров базовых элементов, преодолеть которую привычными средствами не представляется возможным [27–30]. В связи с этим ведутся активные исследования альтернативных путей создания более производительной и эффективной элементной базы.

Перспективным методом является переход к сверхпроводниковым технологиям, уже продемонстрировавшим высокую энергоэффективность и быстродействие. Практические устройства цифровой сверхпроводящей электроники разрабатываются на основе концепции быстрой одноквантовой логики (БОК или RSFQ, Rapid Single Flux Quantum), предложенной К. К. Лихаревым в 1987 году [31]. Носителем информации в RSFQ-логике являются пикосекундные импульсы напряжения, поступающие на логические элементы с частотой в десятки ГГц. Развитием этой концепции стало создание семейства энергоэффективной RSFQ (ERSFQ) [32–36], отличающейся отсутствием статического потребления энергии, связанного с необходимостью питания логических элементов. Логические устройства на базе ERSFQ-логики [37–40] были выбраны в качестве одной из ключевых технологий по реализации сверхпроводниковых процессоров в проектах [41, 42].

Начиная с 2013 года, разрабатывается семейство адиабатических логических элементов [43], характеризующихся еще большей энергоэффективностью по сравнению с ERSFQ (см. также [44, 45]). Под адиабатичностью здесь понимается отсутствие обмена теплом или зарядом с окружающей средой в пределе бесконечной длительности логической операции [46]. Экспериментально было продемонстрировано, что схемы на основе квантового параметрона [43], являющегося базовым элементом адиабатического семейства, более чем на 7 порядков превышают свои полупроводниковые аналоги по уровню энергоэффективности [43–48]. В цикле работ [49–58] была предложена концепция базовых нейроморфных элементов на основе сверхпроводящих интерферометров. В частности, в работе [49] была предложена сверхпроводниковая ячейка на основе квантрона, реализующая сигмоидальную передаточную функцию (Под сигмоидальной понимается класс гладких, монотонно-возрастающих нелинейных функций, вид которых может описываться логистической функцией (вида $1/[1-\exp(-kx)]$), функцией гиперболического тангенса, функцией ошибок и др. Такие ячейки могут быть использованы в качестве нейронов (сигма-нейронов) сверхпроводящего персептрона, который является наиболее распространенным и разработанным типом нейронных сетей [59]. В данной работе представлена первая практическая реализация сверхпроводящего сигма-нейрона: описаны устройство и способ изготовления образца; методы измерения и анализа передаточной функции; а также пути совершенствования конструкции для достижения целевой (логистической) передаточной функции.

2. ИЗГОТОВЛЕНИЕ ОБРАЗЦА

Сверхпроводящий сигма-нейрон, схематически изображенный на рис. 1, может быть представлен как совокупность трех плеч (джозефсоновского, ин-

дуктивного и выходного), имеющих общую точку соединения O, а другим концом — подключенных к общему электроду Gnd (Ground). При этом джозефсоновское плечо состоит из контакта Джозефсона JJ_N с критическим током I_C и геометрической индуктивности L, а два других образованы элементами L_a (индуктивное плечо) и L_{out} (выходное плечо). Джозефсоновское и индуктивное плечи можно называть приемными, поскольку они содержат элементы (L и L_a), имеющие индуктивную связь с контрольной линией (CL). Выходное плечо имеет индуктивную связь со вспомогательным двухконтактным интерферометром (СКВИДом), предназначенным для измерения выходного сигнала. В сигма-нейроне можно выделить три замкнутых сверхпроводящих контура. Совокупность джозефсоновского и индуктивного плеч дает внешний (или приемный) контур интерферометра, содержащий оба приемных элемента. Заметим, что индуктивность L_{out} на рис. 1, фактически, шунтирует часть приемного контура интерферометра (индуктивность L_a), образуя два частных подконтура. Первый (джозефсоновский) состоит из джозефсоновского и выходного плеч, а второй (шунтирующий) — из выходного и индуктивного. При обходе по каждому контуру должно выполняться условие баланса фаз (см. разд. 5), однако только два из них являются линейно-независимыми.

Входным сигналом нейрона является магнитный поток Φ_{in}, задаваемый симметрично в оба контура при помощи контрольной линии. Выходным сигналом сигма-нейрона считается магнитный поток Φ_{out}, создаваемый током I_{out}, протекающим через выходную индуктивность. Задание и измерение магнитного потока, создаваемого элементами схемы по отдельности, определяет реализацию сигма-нейрона в виде многослойной тонкопленочной структуры, расположенной над сверхпроводящим экраном. В этом случае магнитное поле локализуется в зазоре между экраном и сверхпроводящим проводником с током (см., например, [60], § 9.4), не влияя, на первый взгляд, на остальные индуктивные элементы.

Процесс изготовления образца состоял из 8 этапов. Первый из них состоял в формировании трехслойной заготовки Nb–AlO_x–Nb на подложке из оксидированного кремния размером 10×10 мм^2. Напыление ниобия проводилось при давлении аргона 12 мкбар со скоростью 7 нм/с при мощности разряда 930 Вт. Базовый вакуум был не хуже 10^{-3} мкбар. Первый сверхпроводящий слой заготовки имел толщину 300 нм и выполнял одновременно функции сверхпроводящего экрана и нижнего электрода туннельного контакта Джозефсона (КД). Согласно нашим данным выбранная толщина составляла около 4 лондоновских длин в сверхпроводящем ниобии. После осаждения нижнего слоя ниобия в том же вакуумном цикле осаждался слой алюминия толщиной 10 нм со скоростью 1.7 нм/с при том же давлении аргона (12 мкбар) и мощности разряда 190 Вт. Затем проводилось окисление алюминиевого слоя в течение 30 мин в атмосфере кислорода при давлении 200 мбар. Этап завершался осаждением верхнего слоя ниобия толщиной 150 нм.

Следующие 7 технологических этапов были связаны с обработкой трехслойной заготовки. Сначала при помощи фотолитографии и плазмохимического травления ниобия формировались мезы туннельных джозефсоновских контактов размером 14×14 мкм^2. С учетом измерительной схемы (см. рис. 1) образец содержал три идентичных контакта Джозефсона (JJ) с туннельным барьером. Травление проводилось в атмосфере SF_6 с добавлением аргона в соотношении 2 : 1 в индуктивно связанном плазменном разряде мощностью 300 Вт и скоростью травления около 2.5 нм/с. Удаление слоя алюминия проводилось путем травления в 5-процентном растворе KOH. Следующим этапом (третьим) было формирование сверхпроводящего экрана при помощи фотолитографии и плазмохимического травления ниобия. Далее (четвертый этап) изготавливался первый слой изоляции путем термического осаждения 330 нм монооксиси кремния SiO на фоторезистивную маску с последующей взрывной фотолитографией. Перед напылением проводилась ионная очистка подложки (травление) в течение 60 с в ВЧ-разряде аргоново-кислородной плазмы с содержданием кислорода 10% при напряжении смещения 1 кВ и давлении 12 мкбар.

Целью пятого этапа является формирование (по большей части) индуктивных элементов сверхпроводящих контуров, включая линии для приема-передачи магнитного потока. Процесс начинался с осаждения слоев алюминия (толщиной 10 нм) и ниобия (толщиной 100 нм) в едином вакуумном цикле. Затем формировалась геометрия слоя ниобия при помощи фотолитографии и последующего плазмохимического травления. Подслой алюминия защищал первый слой изоляции от повреждения в процессе плазмохимического травления. Удаление подслоя осуществлялось аналогично второму этапу (травлением в 5-процентном растворе KOH). Изоляция индуктивного слоя (шестой этап) проводилась аналогично четвертому этапу. На седьмом этапе изготавливались тонкопленочные резисторы для шун-

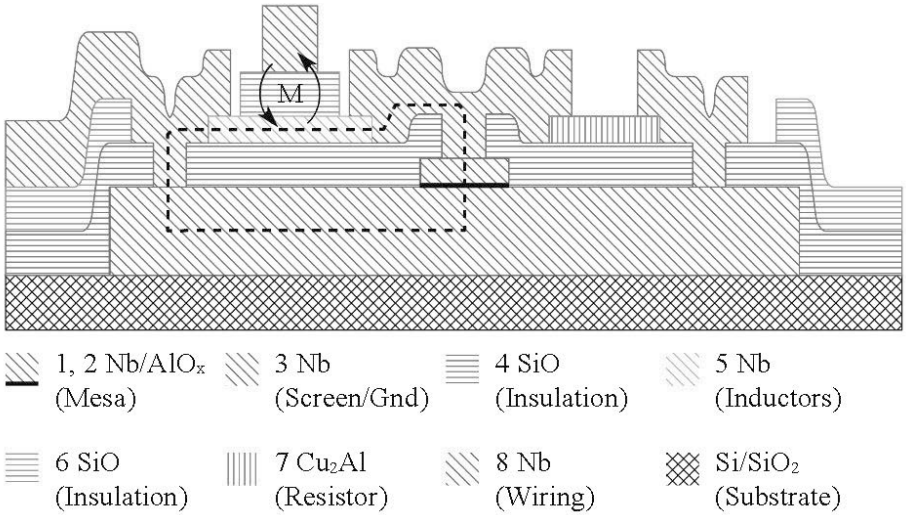


Рис. 2. Схематичное поперечное сечение изготовленных образцов (не в масштабе). Нумерация соответствует этапам технологического процесса; в скобках указано назначение каждого слоя. Одинаковым материалам соответствует одинаковый тип штриховки. Черная полоса слоя Mesa илюстрирует наличие джозефсоновского барьера из слоя AlO_x. Штриховая линия иллюстрирует контур сверхпроводящего интерферометра; стрелки — наличие индуктивной связи (M) между элементами, изготовленными на 5-м и 8-м этапах

тирования туннельных контактов JJ_I и JJ_{II} (см. рис. 1). Для этого проводилось магнетронное осаждение слоя Cu_2Al толщиной 50 нм на фоторезистивную маску с последующей взрывной фотолитографией (lift-off). Осаждение происходило в атмосфере аргона при давлении 12 мкбар со скоростью 4.7 нм/с при мощности разряда 275 Вт. Завершалось изготовление образца формированием сверхпроводящего замыкания (wiring) из ниобия толщиной 450 нм. На этом этапе достраивались сверхпроводящие контуры, формировалась контрольная линия и подключались резисторы. Перед напылением ниобия проводилась ионная очистка подложки (травление) при давлении 12 мкбар, напряжении смещения 1 кВ (60 с) и 0.6 кВ (120 с) для обеспечения сверхпроводящего контакта к ранее осажденным сверхпроводящим слоям (см. этапы 1, 3, 5 на рис. 2). Согласно проведенным оценкам, общая толщина слоя удаленного ниобия в зонах подключения сверхпроводящего замыкания («окна» в слоях изоляции 4, 6 на рис. 2) составляла около 10 нм.

Схематическое поперечное сечение изготовленных образцов приведено на рис. 2. Сверхроводящие контуры интерферометров замыкались в вертикальной плоскости (показано пунктиром) и были чувствительны к магнитному полю, параллельному плоскости образца. Индуктивная связь между элементами нейрона обеспечивалась путем наложения полосковых линий, изготовленных на пятом и восьмом этапах процесса (см. элемент «M»). Изоляция края сверхпроводящего экрана (толщиной 300 нм) достигалась двойным слоем SiO, изготовленным на четвертом и шестом этапах при суммарной толщине 660 нм. Пересечение границ слоев изоляции индуктивными линиями происходило по отдельности, как показано на рис. 2 слева. Это позволяло индуктивным линиям, изготовленным на последнем этапе, пересекать край экрана без разрывов и замыкания на экран. Общая толщина структуры доходила до 1.5 мкм, однако разрушение тонкопленочных слоев из-за большой толщины не наблюдалось (см. рис. 3).

3. ПРОСТЕЙШАЯ КОНСТРУКЦИЯ СИГМА-НЕЙРОНА

На рис. 3 приведена микрофотография изготовленного образца. Благодаря использованному технологическому процессу расположение индуктивных элементов практически копирует схему на рис. 1. Действительно, сигма-нейрон содержит 3 индуктивных элемента, соединенных в точке O (см. рис. 1), которая преобразуется на рис. 3 в общую зону размером 20×30 мкм^2. Джозефсоновское плечо (L) ответвляется в нижнем направлении и замыкается на экран через контакт Джозефсона JJ_N. Индуктивное плечо (L_a) ответвляется вверх и имеет форму меандра. Выходная индуктивность (L_{out}) имеет прямоугольную форму и ответвляется вправо. Элементы L_a и L_{out} замыкаются на экран через окно размером 5×5 мкм^2 в первом слое изоляции (этап 4). Зона O и начальные участки индуктивных элементов сформированы на пятом эта-

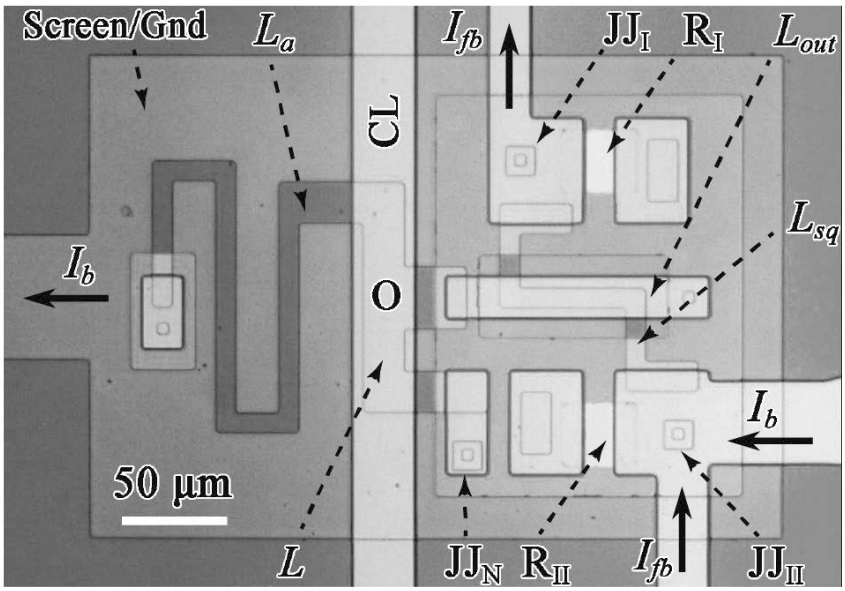


Рис. 3. Микрофотография изготовленного образца. Обозначения соответствуют рис. 1

пе и покрыты слоем изоляции (этап 6, имеют зеленый цвет на рис. 3). Замыкающие участки с шириной линии 20 мкм формируются на восьмом этапе, поскольку для пересечения границы окна требуется большая толщина слоя ниобия. Под замыкающим участком индуктивности L_{out} расположена петля двухконтактного СКВИДа L_{sq} (изготовлена на пятом этапе), замкнутая на экран через контакты Джозефсона JJ_I, JJ_{II}. Каждый из контактов JJ_I, JJ_{II} был шунтирован сопротивлением из слоя Cu_2Al толщиной 50 нм номиналом 2.4 Ом с целью подавления гистерезиса на вольт-амперных характеристиках, возникающего из-за емкостных эффектов и щели в спектре квазичастичных состояний сверхпроводника. (Свойства шунтированных контактов Джозефсона подробно рассмотрены в монографиях [61,62], а также в последующих публикациях (см., например, [63–67].) Элементы L_{out} и L_{sq} также были разделены слоем изоляции SiO (этап 6) с целью обеспечения чисто индуктивной связи. Элементы L и L_a содержат участки наложения с контрольной линией (CL), одинаковые по размеру. Это позволяет рассчитывать на симметричное задание входного сигнала (магнитного потока) в каждый из контуров образца. Сама контрольная линия (этап 8) имеет ширину 30 мкм и пересекает сверхпроводящий экран (этап 3) целиком.

Индуктивность сверхпроводящей полосы, расположенной над толстым сверхпроводящим экраном, может быть оценена из простых соображений. Например, джозефсоновское плечо L состоит из 6 квадратов, изготовленных на пятом и восьмом этапах технологического процесса, три из которых являются прямыми и три поворотными. Индуктивность прямых квадратов можно оценить по формуле (см. [60], § 10)

$$L_{\square}^{(5)} = \mu_0 d_m^{(5)} = \mu_0(2\lambda + d_{\mathrm{SiO}}), \qquad (1)$$

где $d_m^{(5)}$ — магнитная длина «индуктивного» слоя (в основном, изготовленного на пятом этапе), состоящая из двух лондоновских длин для ниобия и толщины первого слоя изоляции (четвертый этап). Подставляя значение лондоновской длины $\lambda_L = 80$ нм (см., например, [68]) и толщину $d_{\mathrm{SiO}} = 330$ нм, получаем $L_{\square}^{(5)} = 0.6$ пГн. В рамках простейших оценок индуктивность поворотных квадратов можно принять за $L_{\square}/2$. Таким образом, индуктивность джозефсоновского плеча составляет $L = 2.7$ пГн. Индуктивное плечо L_a содержит 39 квадратов, из которых 32 являются прямыми и 7 поворотными. Его индуктивность можно оценить как $L_a = 21.3$ пГн.

Выходная индуктивность L_{out} поворотных квадратов не содержит. Она состоит из 2 квадратов с индуктивностью $L_{\square}^{(5)}$ (оранжевые элементы на рис. 2) и 4.5 квадратов с индуктивностью

$$L_{\square}^{(8)} = \mu_0 d_m^{(8)} = \mu_0(2\lambda + 2d_{\mathrm{SiO}}), \qquad (2)$$

изготовленных на восьмом этапе технологического процесса (красные элементы на рис. 2). Квадраты второго типа лежат на двойном слое изоляции, что обеспечивает увеличенную оценку их индуктивности. Оценка дает $L_{\square}^{(8)} = 1$ пГн и $L_{out} = 5.7$ пГн. Второй слой изоляции (этап 6), в свою очередь, необ-

ходим для наложения индуктивных линий, изготовленных на пятом и восьмом этапах технологического процесса (см. оранжевые и красные элементы в зоне наложения «M» на рис. 2), с целью обеспечения индуктивной связи элементов схемы. В частности, такая связь присутствует между контрольной линией и приемным контуром (с коэффициентом M_{in}), а также между индуктивностями L_{out} и L_{sq} (с коэффициентом M_{out}). Взаимную индуктивность красной линии с прямым квадратом оранжевого слоя можно оценить как

$$M_{\square}^{(58)} = L_{\square}^{(5)} \frac{w^{(5)}}{w^{(8)}}, \tag{3}$$

где $w^{(5,8)}$ — ширины линий. Характерные значения составляют 0.4 пГн для входного сигнала и 0.3 пГн для выходного. Взаимную индуктивность к поворотному квадрату можно принять за половину от прямого (как было предложено выше). Суммирование оранжевых квадратов дает значения $M_{in} = 1.6$ пГн и $M_{out} = 1.8$ пГн.

Ранее было показано (см. [51]), что наилучшее совпадение реальной передаточной функции сигма-нейрона с целевой сигмоидальной (логистической) зависимостью достигается при выполнении следующего условия:

$$l_a = l + 1, \tag{4}$$

где l и l_a обозначают величины L и L_a, измеренные в единицах джозефсоновской индуктивности $L_J = \Phi_0/2\pi I_c$. В абсолютных единицах это условие сводится к равенству индуктивностей приемных плеч с учетом эффективной индуктивности контакта Джозефсона:

$$L_a = L + L_J. \tag{5}$$

Подстановка значений L и L_a дает целевое значение $L_J = 18.6$ пГн, которое достигается при $I_c = 17.7$ мкА. Однако такое целевое значение в данной работе не достигалось. При использованных параметрах окисления прозрачность туннельного барьера для сверхпроводящего тока составляла около 25 А/см^2 при гелиевой температуре, а критический ток джозефсоновских контактов — около $I_c = 45$ мкА. Выбор размера мезы был обусловлен технологическими ограничениями, имевшимися на момент проведения эксперимента. Уменьшение критического тока контакта за счет уменьшения его площади является очевидным направлением работ по совершенствованию конструкции сигма-нейрона.

4. ЭКСПЕРИМЕНТ

Принципиальная схема проведенного эксперимента представлена на рис. 1. Входной магнитный поток Φ_{in} создается током I_{cl}, протекающим по контрольной линии CL и создающимся током источника C. Выходной магнитный поток измеряется при помощи двухконтактного СКВИДа, состоящего из джозефсоновских переходов JJ_I и JJ_{II}, соединенных индуктивностью L_{sq}. Предполагается наличие общего сверхпроводящего электрода Gnd, замыкающего контуры как сигма-нейрона, так и СКВИДа. Для управления измерительной схемой используются два источника тока и вольтметр. Ток смещения I_b вольт-амперной характеристики СКВИДа (ток питания) $I_b \geqslant 2I_c$ задается источником B, включенным параллельно контакту JJ_{II}. Ток I_b распределяется между контактами JJ_I и JJ_{II} в зависимости от магнитного потока через СКВИД Φ_{sq}. Поскольку ток питания измерительного СКВИДа превышал критическое значение, измерение среднего напряжения U на dc-СКВИДе позволяет контролировать значение Φ_{sq}. Источник F включен параллельно индуктивности L_{sq} (т. е. петле СКВИДа) и не подключен к общему электроду Gnd. При измерении передаточной функции ток этого источника I_F состоял из двух компонент. Постоянная компонента I_0 использовалась для задания начального состояния СКВИДа (т. е. для смещения вольт-потоковой характеристики), а переменная I_{fb} (зависящая от входного сигнала) — для стабилизации напряжения при изменении входного магнитного потока Φ_{in}.

Каждый эксперимент начинался с изучения характеристик измерительного СКВИДа (см. вставки на рис. 4). При изучении вольт-амперной характеристики (ВАХ) мы изменяли ток источника «B» и измеряли напряжение U при помощи вольтметра постоянного тока по 4-точечной схеме. Вольт-амперные характеристики были однозначными, благодаря наличию шунтирующих сопротивлений (см. разд. 3). Измерение серии ВАХ при разных значениях I_F позволяло построить зависимость критического тока измерительного СКВИДа, фактически, от приложенного магнитного поля (полевая характеристика). Каждое измерение ВАХ в этом эксперименте проводилось в автоматическом режиме, а значение критического тока определялось при превышении напряжением заранее выбранного порогового напряжения менее 1 мкВ. Подключение источника B к измерительному СКВИДу было несимметричным, чтобы исказить полевые характеристики последнего и обеспечить чувствительность к знаку измеряемого магнитного потока. Этот эффект наиболее заметен на полевой зависимости критического тока (см. верхнюю вставку к рис. 4). При измерении вольт-потоковой характеристики (см. нижнюю

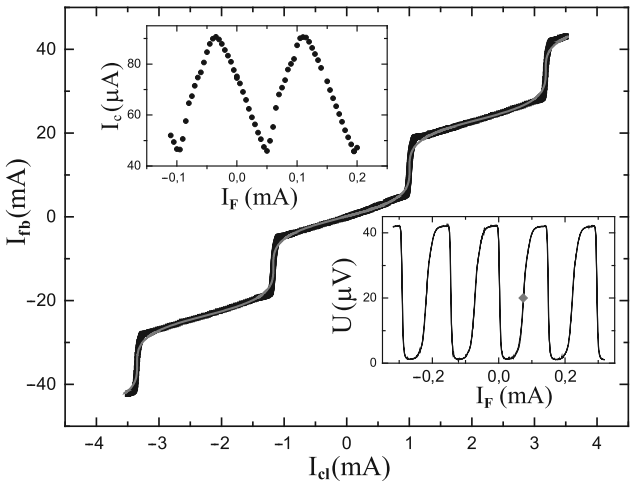


Рис. 4. Типичная передаточная функция исследованного образца. Красной линией показана аппроксимация параметрической зависимостью (7), (8). На вставках приведены примеры полевой зависимости критического тока измерительного СКВИДа (верхняя вставка) и его вольт-потоковая характеристика при токе смещения 80 мкА. Красная точка на нижней вставке иллюстрирует возможный выбор стабилизируемого напряжения. Температура эксперимента 4.2 K

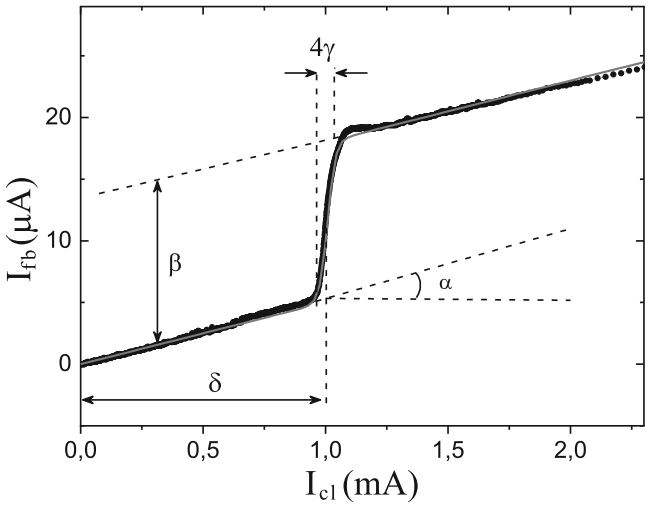


Рис. 5. Отдельно взятый период передаточной функции (черные точки), аппроксимированный сигмоидальной зависимостью (6) (красная кривая). Штриховые линии и стрелки иллюстрируют графический смысл параметров аппроксимации

вставку на рис. 4) ток I_b поддерживался чуть большим максимального критического, а разворачивался ток I_F, изменяя таким образом величину Φ_{sq}. Период этой зависимости составлял 145 мкА, что позволяет оценить эффективную индуктивность измерительной схемы $L_{sq} = 14.3$ пГн. Предварительные эксперименты позволяли выбрать комфортную рабочую точку, которая определялась величиной напряжения U, стабилизируемого в окрестности начального тока I_0.

В ходе основного эксперимента мы изменяли ток в контрольную линию (управляющий ток) от источника C, поддерживая постоянным напряжение на датчике СКВИДа с помощью источника F (см. рис. 1). На графике откладывалась разность (обозначаемая I_{fb}) начального и текущего значений тока источника F (далее — компенсирующий ток или ток обратной связи). Таким образом, при измерении передаточной функции мы поддерживали постоянным критический ток измерительного СКВИДа, а следовательно, магнитный поток Φ_{sq} через него. Фактически, ток I_{fb} использовался для компенсации магнитного потока Φ_{out} и служил выходным сигналом при проведении эксперимента. Разработанный нами алгоритм подбирал компенсирующий ток с шагом дискретизации 0.1 мкА, поддерживая постоянным напряжение на измерительном СКВИДе с точностью около 0.5 мкВ. Точность стабилизации магнитного потока составляла примерно 1/128 кванта. График зависимости компенсирующего тока от управляющего $I_{fb}(I_{cl})$ является передаточной функцией исследуемого образца.

Пример экспериментальной кривой приведен на рис. 4. Она является квазипериодической с периодом $T_{cl} = 2.18$ мА вдоль горизонтальной оси и $T_{fb} = 23.4$ мкА вдоль вертикальной. Отдельный период этой зависимости (см. рис. 5) можно представить как сумму линейной части и сигмоидальной зависимости вида

$$I_{fb} = \alpha I_{cl} + \beta/[1 + \exp(-(I_{cl} - \delta)/\gamma)], \qquad (6)$$

где α, β, γ, δ — параметры аппроксимации. Параметр $\alpha = 0.5\%$ характеризует линейную передачу сигнала на выход измерительной схемы; $\beta = 13$ мкА определяет амплитуду сигмоиды; $\gamma = 16$ мкА — определяет скорость нарастания выходного сигнала в нелинейной области; $\delta = 1$ мА — сдвиговое слагаемое, близкое к $T_{cl}/2$. Графический смысл параметров аппроксимации проиллюстрирован на рис. 5. Среднеквадратичное отклонение кривых составляет около 2.3% амплитуды сигмоиды (параметр β).

Аппроксимация всей экспериментальной кривой на рис. 4 может быть проведена при помощи параметрической зависимости вида

$$I_{cl} = k_1 I_c \big(t + k_2 \sin t - \varepsilon\big), \qquad (7)$$

$$I_{fb} = k_3 I_c \big(k_4 i_{cl} - \sin t + \zeta\big), \qquad (8)$$

где t — параметрическая переменная, $i_{cl} = I_{cl}/I_c$ — нормированное значение управляющего тока, ко-

эффициенты k_i определяют форму кривой и выражаются через индуктивности элементов сигма-нейрона, а сдвиговые слагаемые ε и ζ определяются начальным состоянием образца. Критический ток джозефсоновского контакта нейрона $I_c \approx 45$ мкА может быть оценен как половина максимального критического тока измерительного СКВИДа (см. верхнюю вставку на рис. 4). Ниже будет показано, что использованный вид аппроксимирующей функции следует из результатов статьи [51], поскольку входной и выходной потоки линейно выражаются через I_{cl} и I_{fb}. Слагаемые ε и ζ определяют, фактически, сдвиг начальной точки передаточной функции, возникающий из-за взаимодействия сигма-нейрона с измерительной схемой. Условие $I_{fb}(I_{cl} = 0) = 0$ дает связь коэффициентов ε и ζ:

$$\zeta = \sin(\varepsilon - k_2\zeta). \tag{9}$$

Поэтому при аппроксимации параметр ε считался свободным, а параметр ζ вычислялся из уравнения (9). На рис. 4 видно, что уравнения (7), (8) хорошо описывают экспериментальные данные в пределах нескольких периодов передаточной функции: среднеквадратичное отклонение экспериментальной и расчетной кривых на рис. 4 составляет около 7% амплитуды сигмоиды.

5. МОДЕЛЬ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ ПРАКТИЧЕСКОГО СИГМА-НЕЙРОНА

Важным отличием исследованного здесь («практического») сигма-нейрона от рассмотренного теоретически в [49, 51] является наличие двухконтактного СКВИДа, измеряющего выходной магнитный поток. В силу индуктивной связи между элементами L_{out} и L_{sq} сам процесс измерения будет оказывать влияние на состояние изучаемого объекта (сигма-нейрона). Поэтому модель [49, 51] нуждается в дополнении. Следуя использованному в [51] правилу, будем обозначать строчными буквами m_{in} и m_{out} величины M_{in} и M_{out}, нормированные на джозефсоновскую индуктивность $L_J = \Phi_0/2\pi I_c = 7.32$ пГн, где Φ_0 — квант магнитного потока. Такое же соглашение далее применяется для остальных индуктивностей. Связь контрольной линии с элементами L, L_a будем считать одинаковой ($M_{in}/2$) из-за одинаковой длины участков наложения упомянутых элементов. Магнитные потоки, обозначаемые строчными буквами, предполагаются нормированными на величину $\Phi_0/2\pi$, а сверхтоки — на величину критического тока контактов Джозефсона. Обозначим как I_{sq} ток, протекающий по петле измерительного СКВИДа, а i_{sq} — нормированное значение этого тока. Аналогично, величины i_{cl}, i_{fb} представляют собой токи I_{cl}, I_{fb}, измеренные в единицах I_c.

При измерении передаточной функции изменение тока I_{cl} происходило скачкообразным образом на величину около $0.2\%T_{cl}$ с периодом более 1 с, что на много порядков больше характерных времен джозефсоновских процессов. Поэтому в данном разделе динамика изменения состояния сигма-нейрона рассматриваться не будет (динамические свойства сигма-нейрона были подробно изучены в работах [56, 58]). В стационарном режиме свойства сигма-нейрона определяются условиями баланса фаз в замкнутых сверхпроводящих контурах и законом Кирхгофа в точке соединения O. В сигма-нейроне можно выделить три сверхпроводящих контура, которые дают два линейно-независимых условия баланса фаз. Выбирая в качестве независимых джозефсоновский контур Gnd–JJ_N–O–L_{out}–Gnd и приемный контур Gnd–JJ_N–O–L_a–Gnd (см. рис. 1), получаем условия баланса фаз в виде

$$\phi_{in}/2 + \phi_{out} - \varphi - l\sin\varphi = 0, \tag{10}$$

$$\phi_{in} + l_a i_a - \varphi - l\sin\varphi = 0. \tag{11}$$

Здесь φ — разность фаз на контакте Джозефсона, а $\sin\varphi$ — нормированный ток через него. Закон Кирхгофа в точке соединения имеет вид

$$i_a + i_{out} + \sin\varphi = 0. \tag{12}$$

Уравнения (10)–(12) соответствуют использованным в исходной работе [51]. Изменения вызваны другим видом связи между величинами i_{out} и ϕ_{out}. Действительно, в практическом сигма-нейроне выходной магнитный поток не просто пропорционален i_{out}, а состоит из двух компонент:

$$\phi_{out} = l_{out} i_{out} + m_{out} i_{sq}. \tag{13}$$

При этом обе компоненты (точнее, токи i_{out} и i_{sq}) связаны условием постоянства магнитного потока ϕ_{sq} через измерительную систему:

$$\phi_{sq} = m_{out} i_{out} + l_{sq} i_{sq} = \text{const}. \tag{14}$$

Исключая ток i_{sq} из уравнения (13) с помощью (14), получаем

$$\phi_{out} = l_{out}\left(1 - \frac{m_{out}^2}{l_{sq} l_{out}}\right) i_{out} + \frac{m_{out}}{l_{sq}}\phi_{sq}. \tag{15}$$

Таким образом, воздействие процесса измерения выходного сигнала на состояние образца сводится к незначительной перенормировке выходной индуктивности (поскольку в нашем случае $m_{out}^2 \ll l_{sq} l_{out}$), а также к появлению сдвигового слагаемого, пропорционального ϕ_{sq}. Поэтому параметрическая запись передаточной функции в представлении $\phi_{out}(\phi_{in})$ является почти такой же, как в работах [49, 51]. Ее можно записать в виде

$$\phi_{in} = 2\left(\frac{l_a + l_{out}}{2l_{out} + l_a}\right)\left(\varphi + l_t \sin\varphi - \frac{l_{sh} m_{out}}{l_{out}} \frac{\phi_{sq}}{l_{sq}}\right), \quad (16)$$

$$\phi_{out} = l_{sh}\left(\frac{\phi_{in}}{2l_a} - \sin\varphi + \frac{m_{out}}{l_{out}} \frac{\phi_{sq}}{l_{sq}}\right), \quad (17)$$

где для краткости введены следующие обозначения:

$$l_{sh} = \frac{l_a l_{out}}{l_a + l_{out}}, \quad (18)$$

$$l_t = l + l_{sh}. \quad (19)$$

Величина l_{sh} есть эффективная индуктивность элемента l_a, шунтированного элементом l_{out}, а l_t есть полная индуктивностью нейрона как одноконтактного интерферометра. Поэтому можно сразу сказать, что передаточная функция сигма-нейрона будет однозначной (безгистерезисной), если

$$l_t < 1. \quad (20)$$

При выполнении условия (4) уравнение (20) сводится к уравнению

$$l < \sqrt{l_{out}^2 + 1} - l_{out},$$

полученному ранее в [56].

Выразим теперь передаточную функцию через токовые переменные. Уравнение (16) преобразуется к форме (7) посредством определения $\phi_{in} = m_{in} i_{cl}$. Для преобразования (17) выразим ток i_{out} из уравнения (14) и подставим в (13):

$$\phi_{out} = \frac{l_{out}}{m_{out}}\left(\phi_{sq} - l_{sq} i_{sq}\right) + m_{out} i_{sq}. \quad (21)$$

Вид зависимости $\phi_{out}(i_{sq})$ не зависит от конструкции изучаемого интерферометра, но определяется методом измерения передаточной функции. Далее заметим, что ток i_{sq} складывается из нескольких компонент, только одна из которых (i_{fb}) изменяется в ходе эксперимента. Другими компонентами являются ток питания измерительного СКВИДа (частично) и ток смещения его вольт-потоковой характеристики. Учитывая, что

$$i_{sq}(\phi_{in}) \equiv i_{sq}^{(0)} - i_{fb}, \quad (22)$$

где $i_{sq}^{(0)}$ есть (по определению) ток в петле СКВИДа при нулевом входном сигнале (в начальный момент времени), получаем запись передаточной функции в форме (7), (8) с точностью до нормировки обоих уравнений на критический ток контакта Джозефсона I_c. Коэффициенты k_i определяются как

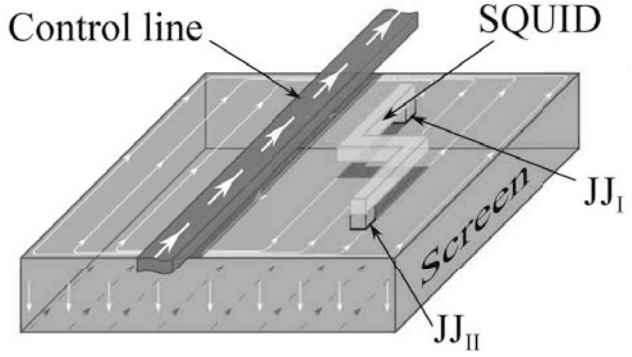


Рис. 6. Схематичное изображение распределения сверхпроводящих токов в системе «тонкая пленка над сверхпроводящим экраном», получаемое с использованием метода замыкания

$$k_1 = \frac{2}{m_{in}} \frac{l_a + l_{out}}{l_a + 2l_{out}}, \quad (23)$$

$$k_2 = l + \frac{l_a l_{out}}{l_a + l_{out}} = l_t, \quad (24)$$

$$k_3 = \frac{l_{sh}}{l_{sq}} \frac{m_{out}}{l_{out}}, \quad (25)$$

$$k_4 = \frac{m_{in}}{2l_a}, \quad (26)$$

а сдвиговые слагаемые определяются начальным состоянием образца:

$$\varepsilon = m_{out} \frac{\phi_{sq}}{l_{sq}} \frac{l_{sh}}{l_{out}}, \quad (27)$$

$$\zeta = i_{sq}^{(0)}\left(\frac{l_{out} l_{sq}}{l_{sh} m_{out}} - \frac{m_{out}}{l_a}\right) - \phi_{sq} \frac{l_{out}}{l_{sh} m_{out}}. \quad (28)$$

Таким образом, форма экспериментальных кривых на рис. 4, описываемая уравнениями (7), (8), качественно соответствует ожидаемой, а параметрическая переменная t представляет собой разность фаз φ на контакте JJ_N. Используя физический смысл параметрической переменной, можно выразить сдвиговые слагаемые через значение начальной джозефсоновской фазы φ_0 с помощью выражений (7), (8):

$$\varepsilon = \varphi_0 + l_t \sin\varphi_0, \quad (29)$$

$$\zeta = \sin\varphi_0. \quad (30)$$

Из уравнений (29), (30) следует, что ζ — начальный ток через контакт JJ_N, а ε — эффективный

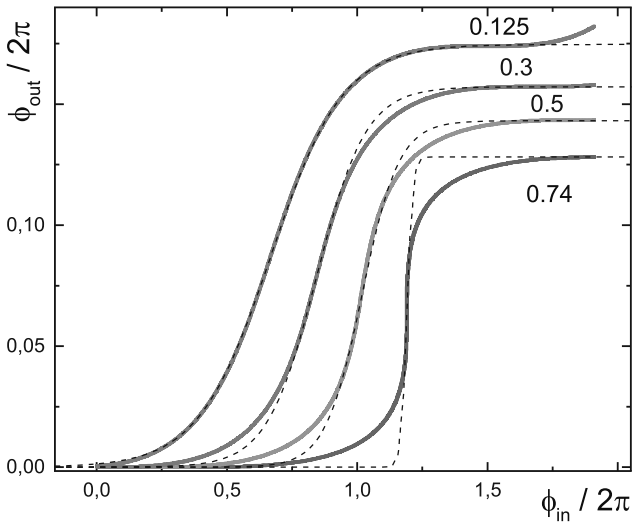


Рис. 7. Расчетные передаточные функции сигма-нейрона при разных значениях индуктивности джозефсоновского плеча (указаны на рисунке). Выходная индуктивность $l_{out} = 0.3$, а величина l_a определяется согласно уравнению (4). Штриховые линии показывают наилучшую аппроксимацию сигмоидальной зависимостью вида (6). Все кривые сдвинуты относительно горизонтальной оси на произвольную величину для наглядности. Расчет проводился на основе выражений (16), (17)

начальный поток через нейрон. Последнее вытекает из аналогии между (29) и условием баланса фаз для одноконтактного интерферометра (см., например, формулу (3) в [51]). Уравнения (27)–(30) позволяют получить связь величин $i_{sq}^{(0)}$, ϕ_{sq}, и φ_0, точнее, выразить любые два параметра через третий.

6. АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

В табл. 1 приведены значения коэффициентов k_i, вычисленных по формулам (23)–(26) с использованием оценок из разд. 2, а также полученных при аппроксимации экспериментальных данных по уравнениям (7), (8) в разд. 4. Обращает на себя внимание неожиданно хорошее (с расхождением порядка 5%) совпадение значений коэффициентов k_{1-3}, определяющих период передаточной функции по входному сигналу, эффективную индуктивность нейрона и амплитуду изменения передаточной функции соответственно. Однако экспериментальное значение коэффициента k_4, описывающее линейную передачу входного сигнала на выход нейрона, превышает оценочное почти в три раза. Это свидетельствует о непосредственной передаче части входного потока в измерительную цепь. В рамках развитого выше подхода учет взаимной индуктивности M_{sq} измерительного СКВИДа и контрольной линии может быть сделан путем добавления в выражение (14) слагаемого $m_{sq}i_{cl}$, где m_{sq} — значение M_{sq}, нормированное на джозефсоновскую индуктивность. При этом для сохранения условия $\Phi_{SQ} = \text{const}$ потребуется дополнительный компенсирующий ток $M_{sq}I_{cl}/L_{sq}$, а для разницы экспериментального и теоретического коэффициентов k_4 (Δk_4) имеем согласно (8)

$$\Delta k_4 = M_{sq}/k_3 L_{sq}. \tag{31}$$

Подставляя значения из табл. 1 и экспериментальную величину L_{sq}, имеем оценку $M_{sq}^{(exp)} \simeq 0.1\,\text{пГн}$.

Механизм линейной передачи входного сигнала в измерительную цепь выглядит следующим образом. Используя принцип замыкания (см. [60], § 9.5) можно показать, что по сверхпроводящему экрану вне контрольной линии течет поверхностный ток с линейной плотностью (в среднем) $I_{cl}/2w_{scr}$, где $w_{scr} = 330\,\text{мкм}$ — ширина экрана, а множитель 2 учитывает протекание сверхтока по обеим поверхностям экрана. Под контрольной линией течет ток, равный и противоположный контрольному в соответствии с методом изображений. Магнитный поток, передаваемый в петлю измерительного СКВИДа, может быть записан с учетом формул (1)–(3) в виде

$$\Phi_m = \left(L_{\square}^{(5)} \sum \frac{w_{sq}}{2w_{scr}} N\right) I_{cl}, \tag{32}$$

где w_{sq} — ширина участка петли СКВИДа, параллельного контрольной линии, N — число квадратов на нем, а суммирование проводится по участкам постоянной ширины. Подстановка размеров исследованного образца дает $M_{sq}^{(theor)} = 0.12\,\text{пГн}$, что совпадает по порядку величины с экспериментальным значением. Несмотря на малость величины M_{sq}, передаваемый за счет этого эффекта магнитный поток довольно заметен: порядка 0.2 кванта на период передаточной функции. Очевидно, что это связано с малой взаимной индуктивностью образца с контрольной линией M_{in}, приводящей к большой величине T_{cl}.

Таблица 1. Коэффициенты передаточной функции (7), (8), рассчитанные на основе выражений (23)–(26) (строка «Теория») и полученные при аппроксимации экспериментальных данных (строка «Эксперимент»)

	k_1	k_2	k_3	k_4
Теория	7.56	0.98	0.099	0.038
Эксперимент	7.69	0.99	0.105	0.103

В свою очередь, малость величины M_{in} в рассматриваемой конструкции сигма-нейрона связана с необходимостью выполнить требования индуктивной связи контрольной линии с образцом, и сигмоидальной формы передаточной функции. Первое условие предполагает расположение контакта Джозефсона и участка джозефсоновского плеча нейрона вне контрольной линии. Следствием является ограничение снизу на длину и, следовательно, на минимальную индуктивность джозефсоновского плеча. Однако выполнение второго условия требует малости величины l. На рис. 7 приведены расчетные передаточные функции сигма-нейрона при разных значениях величины l при условии выполнения критерия (4). Видно, что передаточная функция хорошо описывается сигмоидальной зависимостью вида (6) только при малых значениях l, а с увеличением индуктивности джозефсоновского плеча форма передаточной функции стремится к ступенчатой. Поиск путей выполнения упомянутых выше условий является предметом работ по совершенствованию конструкции сигма-нейрона.

Очевидным способом является использование более совершенных технологических методов для изготовления образцов, поскольку форма кривой определяется *нормированным* значением индуктивности джозефсоновского плеча. В частности, простое уменьшение размера контакта в 7 раз (до 2 мкм) приведет к 50-кратному уменьшению критического тока (менее 1 мкА) и такому же росту джозефсоновской индуктивности. При этом величина геометрической индуктивности L может быть увеличена до 50 раз при сохранении значения $l = 0.4$, полученного в данной работе. Полученное приращение длины может быть направлено на увеличение взаимной индуктивности с приемным контуром. Еще одним решением может быть уменьшение относительной ширины индуктивной линии измерительного СКВИДа. Согласно уравнению (32), уменьшение величины M_{sq} может быть достигнуто путем увеличения ширины экрана, либо путем уменьшения размеров структуры в целом при неизменной величине w_{scr}. Еще одним направлением совершенствования конструкции сигма-нейрона может быть оптимизация формы и соединений индуктивных линий с целью повышения чувствительности к входному сигналу.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе была экспериментально опробована простейшая топология сигма-нейрона, предполагающая изготовление образца в виде многослойной тонкопленочной структры над толстым сверхпроводящим экраном. Измерена передаточная функция образца, представляющая собой сумму сигмоидальной и линейной компонент. Обнаружена неожиданно большая передача входного сигнала в измерительную цепь, вызванная малой взаимной индуктивностью нейрона и контрольной линии. Предложены направления совершенствования конструкции нейрона с целью минимизации обнаруженного эффекта.

Финансирование. Экспериментальное исследование и анализ передаточной функции (см. разд. 4 и 6) проводились в ИФТТ РАН при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-72-00053). Изготовление образца, включая разработку технологических указаний (см. разд. 2), проводились специалистами НИТУ МИСиС в рамках программы исследований лаборатории сверхпроводящих метаматериалов. Разработка и анализ конструкции практического сигма-нейрона (см. разд. 3) были выполнены в рамках программы исследований отдела микроэлектроники НИИЯФ МГУ. Модель стационарного состояния практического сигма-нейрона (см. разд. 5) была сформулирована в рамках производственной практики аспиранта МФТИ А. С. Ионина.

Благодарности. Авторы благодарны В. Н. Шилову и Н. С. Степакову за помощь в изготовлении образцов и проведении эксперимента.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Bartolozzi, G. Indiveri, and E. Donati, *Embodied Neuromorphic Intelligence*, Naturecommunications **13**, 1 (2022).

2. C. D. Schuman, S. R. Kulkarni, M. Parsa et al., *Opportunities for Neuromorphic Computing Algorithms and Applications*, Nature Computational Science **2**, 10 (2022).

3. B. J. Shastri, A. N. Tait, T. Ferreira de Lima et al., *Photonics for Artificial Intelligence and Neuromorphic Computing*, Nature Photonics **15**, 102 (2021).

4. M. Davies, A. Wild, G. Orchard et al., *Advancing Neuromorphic Computing with Loihi: A Survey of Results and Outlook*, Proceedings of the IEEE **109**, 911 (2021).

5. D. Marković, A. Mizrahi, D. Querlioz et al., *Physics for Neuromorphic Computing*, Nature Reviews Physics **2**, 499 (2020).

6. D. Marković and J. Grollier, *Quantum Neuromorphic Computing*, Applied Physics Letters **117**, 150501 (2020).

7. Y. van De Burgt, A. Melianas, S. T. Keene et al., *Organic Electronics for Neuromorphic Computing*, Nature Electronics **1**, 386 (2018).

8. C. D. Schuman, T. E. Potok, R. M. Patton et al., *A Survey of Neuromorphic Computing and Neural Networks in Hardware*, arXiv preprint arXiv:1705.06963 (2017).

9. G. W. Burr, R. M. Shelby, A. Sebastian et al., *Neuromorphic Computing Using Non-volatile Memory*, Advances in Physics: X, **2**, 89 (2017).

10. Furber, S. *Large-scale neuromorphic computing systems*, Journal of neural engineering **13**, 051001 (2016).

11. S. K. Esser, R. Appuswamy, P. Merolla et al., *Backpropagation for Energy-Efficient Neuromorphic Computing*, Advances in neural information processing systems **28** (2015).

12. H. Markram, E. Muller, S. Ramaswamy et al., *Reconstruction and Simulation of Neocortical Microcircuitry*, Cell **163**, 456 (2015).

13. D. Monroe, *Neuromorphic Computing Gets Ready for the (Really) Big Time*, Communications of the ACM **57**, 13 (2014).

14. https://videocardz.com/newz/tesla-d1-chip-features-50-billion-transistors-scales- up-to-1-1-exaflops-with-exapod

15. R. Irwin, S. Dimitriadis, J. He et al., *Chemformer: a Pretrained Transformer for Computational Chemistry*, Machine Learning: Science and Technology **3**, 015022 (2022).

16. H. Tao, T. Wu, M. Aldeghi et al., *Nanoparticle Synthesis Assisted by Machine Learning*, Nature Reviews Materials **6**, 701 (2021).

17. G. R. Khattak, S. Vallecorsa, F. Carminati et al., *High Energy Physics Calorimeter Detector Simulation Using Generative Adversarial Networks with Domain Related Constraints*, IEEE Access **9**, 108899 (2021).

18. Y. Meurice, J. C. Osborn, R. Sakai et al., *Tensor Networks for High Energy Physics: Contribution to Snowmass 2021*, arXiv preprint arXiv:2203.04902 (2022).

19. R. Wang and R. Yu, *Physics-guided Deep Learning for Dynamical Systems: A Survey*, arXiv preprint arXiv:2107.01272 (2021).

20. J. Gilman, L. Walls, L. Bandiera et al., *Statistical Design of Experiments for Synthetic Biology*, ACS Synthetic Biology **10**, 1 (2021).

21. Y. Ren, T. Chakraborty, S. Doijad et al., *Prediction of Antimicrobial Resistance Based on Whole- Genome Sequencing and Machine Learning*, Bioinformatics **38**, 325 (2022).

22. J. Gangiredla, H. Rand, D. Benisatto et al., *GalaxyTrakr: a Distributed Analysis Tool for Public Health Whole Genome Sequence Data Accessible to Non-bioinformaticians*, BMC genomics **22**, 1 (2021).

23. https://irds.ieee.org/editions/2022/more-moore

24. https://irds.ieee.org/editions/2022/irds%E2%84%A2-2022-cryogenic-electronics- and-quantum-information-processing

25. C. E. Leiserson, N. C. Thompson, J. S. Emer et al., *There's Plenty of Room at the Top: What Will Drive Computer Performance after Moore's Law?* Science **368**, eaam9744 (2020).

26. T. N. Theis and H. S. P. Wong, *The End of Moore's Law: A New Beginning for Information Technology*, Computing in Science Engineering **19**, 41 (2017).

27. I. I. Soloviev, N. V. Klenov, S. V. Bakurskiy et al., *Beyond Moore's Technologies: Operation Principles of a Superconductor Alternative*, Beilstein Journal of Nanotechnology **8**, 2689 (2017).

28. https://www.technologyreview.com/2020/02/24/905789/were-not-prepared-for-the-end-of-moores-law/

29. M. Campbell, *Computational Acceleration: Offense in Depth*, Computer **54**, 55 (2021).

30. https://www.techpowerup.com/284936/intel-rebadges-10nm-enhanced-superfin-node-as-intel-7-invents-other-creative-node-names?cp=2

31. O. A. Mukhanov, V. K. Semenov, and K. K. Likharev, *Ultimate Performance of RSFQ Logic Circuits*, IEEE Transactions on Magnetics **23**, 759 (1987).

32. D. E. Kirichenko, S. Sarwana, and A. F. Kirichenko, *Zero Static Power Dissipation Biasing of RSFQ Circuits*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **21**, 776 (2011).

33. O. A. Mukhanov, *Energy-Efficient Single Flux Quantum Technology*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity, **21**, 760 (2011).

34. M. H. Volkmann, A. Sahu, C. J. Fourie et al., *Implementation of Energy Efficient Single Flux Quantum Digital Circuits with Sub-aJ/bit Operation*, Superconductor Science and Technology **26**, 015002 (2012).

35. M. Tanaka, M. Ito, A. Kitayama et al., *18-GHz, 4.0-aJ/bit Operation of Ultra-Low-Energy Rapid Single-Flux-Quantum Shift Registers*, Japanese Journal of Applied Physics **51**, 053102 (2012).

36. Q. P. Herr, A. Y. Herr, O. T. Oberg et al., *Ultra-low-power Superconductor Logic*, Journal of Applied Physics **109**, 103903 (2011).

37. A. F. Kirichenko, I. V. Vernik, J. A. Vivalda et al., *ERSFQ 8-bit Parallel Adders as a Process Benchmark*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **25**, 1 (2014).

38. A. F. Kirichenko, I. V. Vernik, O. A. Mukhanov et al., *ERSFQ 4-to-16 Decoder for Energy-Efficient RAM*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **25**, 1 (2014).

39. I. V. Vernik, A. F. Kirichenko, O. A. Mukhanov et al., *Energy-Efficient and Compact ERSFQ Decoder for Cryogenic RAM*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **27**, 1 (2016).

40. N. K. Katam, O. Mukhanov, and M. Pedram, *Simulation Analysis and Energy-Saving Techniques for ERSFQ Circuits*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **29**, 1 (2019).

41. M. A. Manheimer, *Cryogenic Computing Complexity Program: Phase 1 Introduction*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **25**, 1 (2015).

42. A. F. Kirichenko, I. V. Vernik, M. Y. Kamkar et al., *ERSFQ 8-bit Parallel Arithmetic Logic Unit*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **29**, 1 (2019).

43. N. Takeuchi, D. Ozawa, Y. Yamanashi et al., *An Adiabatic Quantum Flux Parametron as an Ultra-low-power Logic Device*, Superconductor Science and Technology **26**, 035010 (2013).

44. V. Semenov, G. Danilov, and D. Averin, *Negative-Inductance SQUID as the Basic Element of Reversible Josephson-Junction Circuits*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **13**, 938 (2003).

45. V. Semenov, G. Danilov, and D. Averin, *Classical and Quantum Operation Modes of the Reversible Josephson-Junction Logic Circuits*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **17**, 455 (2007).

46. И. И. Соловьев, Г. С. Хисматуллин, Н. В. Кленов и др., *π-контакты в ячейках адиабатической сверхпроводниковой логики*, Радиотехника и электроника **67**, 1232 (2022).

47. N. Takeuchi, Y. Yamanashi, and N. Yoshikawa, *Adiabatic Quantum-Flux-Parametron Cell Library Adopting Minimalist Design*, Journal of Applied Physics **117**, 173912 (2015).

48. Q. Xu, Y. Yamanashi, C. L. Ayala et al, *Design of an Extremely Energy-Efficient Hardware Algorithm Using Adiabatic Superconductor Logic*, 2015 15th International Superconductive Electronics Conference (ISEC), Nagoya, Japan (2015), p. 1.

49. A. E. Schegolev, N. V. Klenov, I. I. Soloviev et al., *Adiabatic Superconducting Cells for Ultra-low-power Artificial Neural Networks*, Beilstein journal of nanotechnology **7**, 1397 (2016).

50. N. V. Klenov, A. E. Schegolev, I. I. Soloviev et al., *Energy Efficient Superconducting Neural Networks for High-speed Intellectual Data Processing Systems*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **28**, 1301006 (2018).

51. I. I. Soloviev, A. E. Schegolev, N. V. Klenov et al., *Adiabatic Superconducting Artificial Neural Network: Basic Cells*, Journal of Applied Physics **124**, 152113 (2018).

52. N. V. Klenov, A. V. Kuznetsov, A. E. Schegolev et al., *A Neuron Based on a Single Flux Qubit*, Low Temperature Physics **45**, 769 (2019).

53. S. Bakurskiy, M. Kupriyanov, N. V. Klenov et al., *Controlling the Proximity in a Co/Nb Multilayer: the Properties of Electronic Transport*, Beilstein Journal of Nanotechnology **11**, 1336 (2020).

54. A. E. Schegolev, N. V. Klenov, I. I. Soloviev et al., *Superconducting Neural Networks: from an Idea to Fundamentals and, further, to Application*, Nanobiotechnology Reports **16**, 811 (2021).

55. A. E. Schegolev, N. V. Klenov, I. I. Soloviev et al., *Learning Cell for Superconducting Neural Networks*, Superconductor Science and Technology **34**, 015006 (2021).

56. M. Bastrakova, A. Gorchavkina, A. Schegolev et al., *Dynamic Processes in a Superconducting Adiabatic Neuron with Non-shunted Josephson Contacts*, Symmetry **13**, 1735 (2021).

57. A. E. Schegolev, N. V. Klenov, S. V. Bakurskiy et al., *Tunable Superconducting Neurons for Networks Based on Radial Basis Functions*, Beilstein Journal of Nanotechnology **13**, 444 (2022).

58. M. V. Bastrakova, D. S. Pashin, D. A. Rybin et al., *A Superconducting Adiabatic Neuron in a Quantum Regime*, Beilstein Journal of Nanotechnology **13**, 653 (2022).

59. L. N. Kanal, *Perceptron. In Encyclopedia of Computer Science* John Wiley and Sons: Chichester, UK (2003).

60. В. В. Шмидт, *Введение в физику сверхпроводников*, М.: МЦНМО, Изд. 2-е (2000).

61. А. Бароне и Дж. Паттерно, *Эффект Джозефсона*, Мир, Москва (1984).

62. К. К. Лихарев, *Введение в динамику джозефсоновских переходов*, Наука, Москва (1985).

63. Yu. M. Shukrinov, I. R. Rahmonov, K. V. Kulikov et al., *Modeling of LC-shunted Intrinsic Josephson Junctions in High-Tc Superconductors*, Superconductor Science and Technology **30**, 024006 (2017).

64. Yu. M. Shukrinov, I. R. Rahmonov, and G. Filatrella, *Dependence of the Maximal Superconducting Current on the Resonance Frequency in a Shunted Josephson Junction*, Journal of Experimental and Theoretical Physics **125**, 781 (2017).

65. S. K. Tolpygo, J. L. Mallek, V. Bolkhovsky et al., *Progress toward Superconductor Electronics Fabrication Process with Planarized NbN and NbN/Nb Layers*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **33**, 1 (2023).

66. М. С. Шевченко, Л. В. Филиппенко, О. С. Киселев и др., *Джозефсоновские туннельные переходы с интегральным СИН-шунтированием*, Физика твердого тела **64**, 1223 (2022).

67. M. S. Shevchenko, A. A. Atepalikhin, F. V. Khan et al., *Shunted Josephson Junctions and Optimization of Niobium Integrated Matching Circuits*, IEEE Transactions on Applied Superconductivity **32**, 1100205 (2022).

68. A. Gubin, K. Il'in, S. Vitusevich et al., *Dependence of Magnetic Penetration Depth on the Thickness of Superconducting Nb Thin Films*, Physical Review B **72**, 064503 (2005).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1022–1025 © 2023

О ТЕПЛОЕМКОСТИ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ СФЕР

С. М. Стишов [a*]

[a] *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук*
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 июля 2023 г.,
после переработки 2 августа 2023 г.
Принята к публикации 4 августа 2023 г.

Обсуждаются термодинамические свойства больцмановской системы твердых сфер. Как оказалось, нулевая энергия системы уменьшается с температурой настолько медленно, что является почти постоянной добавкой к классической величине. В результате теплоемкость системы мало отличается от классического значения $3/2k$ везде, кроме узкой области низких температур, где теплоемкость падает до нуля. Предсказываемый линейный температурный вклад в теплоемкость, как это имеет место в идеальном ферми-газе, обнаруживается в системе квантовых твердых сфер при самых низких температурах.

DOI: 10.31857/S0044451023120155
EDN: MXZOFX

1. ВВЕДЕНИЕ

При достаточно высоких температурах или в системах с сильным отталкивающим взаимодействием, когда обмен частицами практически невозможен, эффектами статистики Бозе и Ферми можно пренебречь. Однако система может быть квантовомеханической из-за «эффектов дифракции», связанных с волновой природой частиц. Более того, эффекты квантовой статистики экспоненциально затухают с ростом температуры, а «эффекты дифракции» исчезают как обратная степень температуры при $T \to \infty$. Таким образом, в квантовой системе твердых сфер существует значительный диапазон температур, где эффекты квантовой статистики играют лишь незначительную роль [1]. Далее мы обсудим поведение энергии и теплоемкости больцмановской системы твердых сфер.

2. ДИСКУССИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Система классических твердых сфер представляет собой простейшую нетривиальную систему с взаимодействием вида:

$$\Phi(r) = 0, \; r > \sigma, \qquad \Phi(r) = \infty, \; r < \sigma. \tag{1}$$

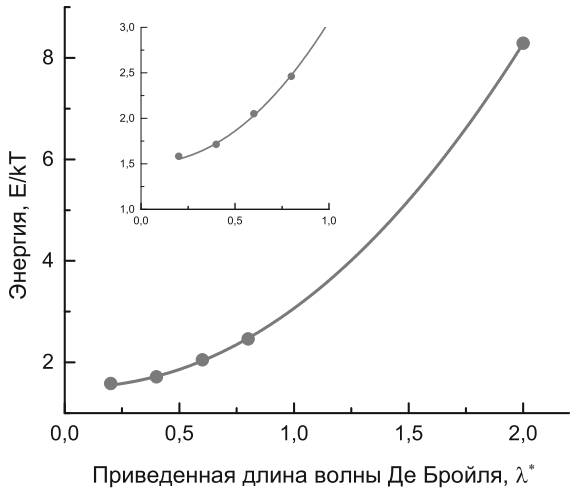


Рис. 1. Зависимость безразмерной энергии E/kT жидкости квантовых твердых сфер от приведенной длины волны де Бройля $\lambda^* = h/(2\pi mkT\sigma^2)^{1/2}$, кружки — результаты расчетов [7], линия — аппроксимация

Однако, в отличие от классической системы твердых сфер, в квантовом случае в силу принципа неопределенности происходит межчастичное отталкивание, обеспечивающее существование «возвращающей» силы по отношению к длинноволновым акустическим деформациям [1]. Модель твердых сфер широко используется для описания сильно взаимодействующих систем. Вспомним теорию критических явлений Ван-дер-Ваальса, в которой оттал-

* E-mail: stishovsm@lebedev.ru

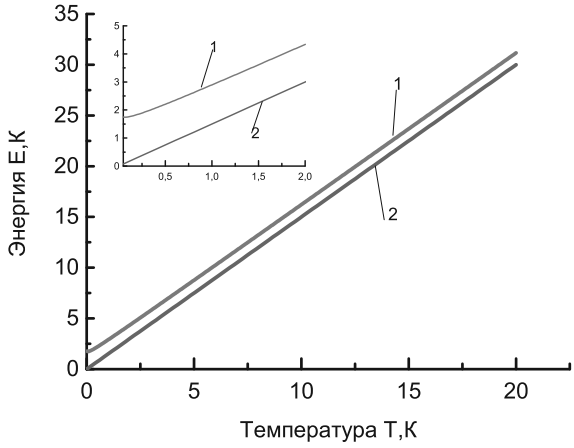


Рис. 2. Зависимость энергии квантовой (1) и классической (2) систем твердых сфер от температуры

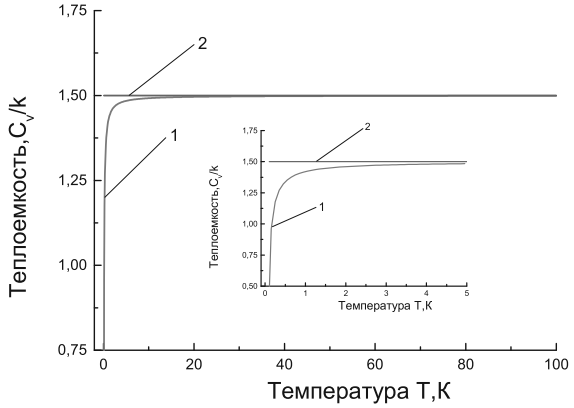


Рис. 3. Теплоемкость квантовой (1) и классической (2) систем твердых сфер

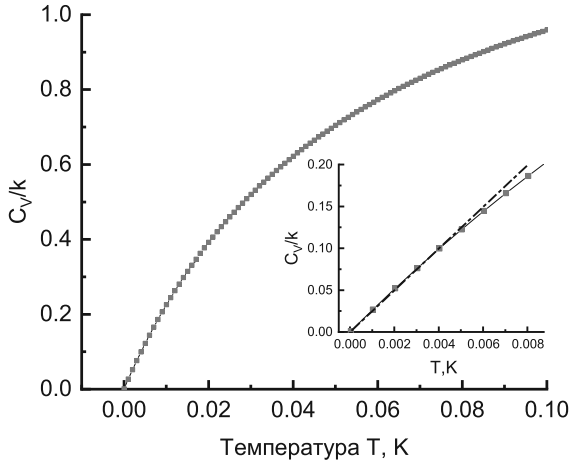


Рис. 4. Теплоемкость квантовой системы твердых сфер при низкой температуре

кивательное взаимодействие между частицами описывается потенциалом твердых сфер. Впоследствие было затрачено много усилий на разработку теории жидкостей с использованием модели твердых сфер в качестве нулевого приближения в рамках теории возмущений [2]. Квантовая модель твердых сфер использовалась при анализе поведения квантовых систем с короткодействующими взаимодействиями, в частности, гелия [3, 4].

Теперь обратим внимание на одно конкретное исследование термодинамических свойств квантовых твердых сфер, опубликованное много лет назад в [5]. Неожиданным результатом этого исследования стало утверждение о ферми-жидкостной линейной температурной зависимости теплоемкости системы $C_v \backsim T$, возникающей из-за фактора «физической непрницаемости», а не «статистики» [5]. Однако реальная физика этой ситуации не ввполне ясна.

Действительно, в системе плотных твердых сфер частицы заключены в некоторую ячейку (клетку), образованную соседними частицами. Следовательно, энергия тведых частиц является квантованой. Однако из-за неправильных форм яячеек в системе соответствующие энергетические уровни должны быть различными для каждой конкретной клетки. Любопытно, что расчеты [6] удельной теплоемкости квантовой частицы в ящике не показывают линейного поведения при низкой температуре. Тем не менее, результаты расчетов термодинамических свойств квантовой системы твердых сфер методом Монте-Карло, проведенных в работе [7], могут служить подтверждением правильности цитируемого исследования [5]. Автор [7] представил значения безразмерной энергии E/kT жидкого состояния системы в зависимости от приведенной плотности $\rho^* = \rho\sigma^3$ (диаметр σ-сферы) вдоль направлений с постоянной $\lambda^*(\lambda^* = h/(2\pi mkT\sigma^2)^{1/2}$ — отношение тепловой длины волны де Бройля к диаметру твердой сферы). Для настоящего анализа выбраны результаты расчета энергии при плотности $\rho^* = 0.3$, охватывающей наибольший диапазон приведенных длин де Бройля λ^*. Соответствующие данные показаны на рис. 1. Как видно из рис. 1, расчетные данные явно экстраполируются классическому значению $E/kT = 1.5$, при $\lambda^* \to 0$ к что подтверждает справедливость результатов расчетов. Отметим, что полная энергия квантовых твердых сфер включает только кинетическую энергию поступательного движения частиц и нулевую энергию, связанную с принципом неопределенности. Аппроксимационная формула, описывающая численные данные [7],

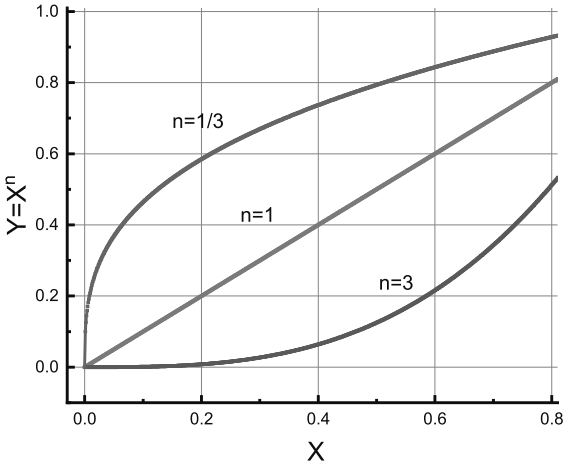


Рис. 5. Функции вида $Y = X^n$ в окрестности x=0

имеет вид

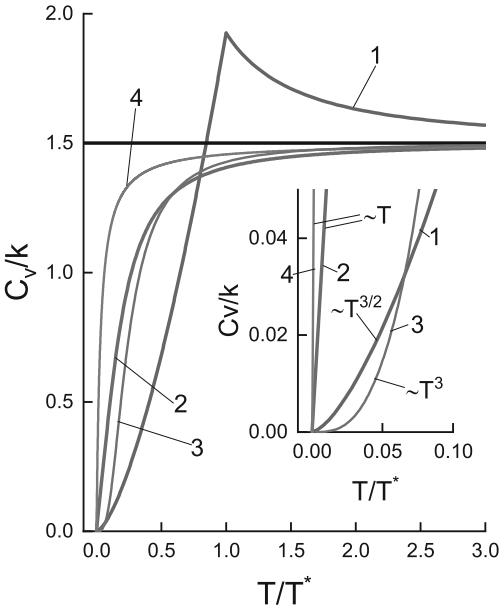


Рис. 6. Нормированные теплоемкости модельных систем (1 — C_v идеального бозе-газа, $T^* = T_c$ – температура фазового перехода, 2 — C_v идеального ферми-газа, $T^* = T_{Fermi}$, 3 — C_v of Debye solid, $T^* = T_\Theta$ — температура Дебая, 4 — C_v квантовой системы твердых сфер, $T^* = \dfrac{\hbar^2}{m\sigma^2} = 5.7 \cdot 10^{-1} K$)

$$E/kT = 1.5 + 1.5645(\lambda^*)^{2.1169}. \qquad (2)$$

Подставив численные данные в выражение λ^* (σ = 3.5 Å, m=28.0134 a.e. [7]), получим для энергии и теплоемкости:

$$E = 1.5T + 1.395T^{-0.06}, \qquad (3)$$

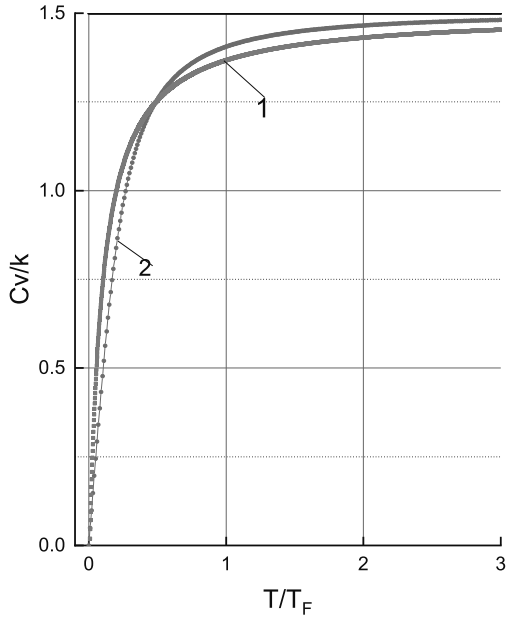


Рис. 7. Приведенная теплоемкость квантовой системы твердых сфер (1) по сравнению с теплоемкостью идеального ферми-газа (2)

$$C_v = 1.5 - 0.084T^{-1.06}. \qquad (4)$$

Отметим, как следует из соотношения (4), C_v обращается в нуль при небольшой, но конечной температуре, равной $5.7 \cdot 10^{-2}$, что, очевидно, является результатом расчетных ошибок и приближений. Это несоответствие исправляется при необходимости.

Из выражений (3) и (4) следуют весьма неожиданные результаты. Нулевая энергия уменьшается с температурой так медленно, что оказывается почти постоянной прибавкой к классическому значению, рис.2. Поведение квантового вклада в энергию системы твердых сфер (рис. 2) подтверждает вывод работы [8] о том, что, вопреки наивным ожиданиям, квантовые эффекты оказываются весьма важными, даже когда тепловая длина волны де Бройля составляет лишь небольшую часть диаметра твердой сферы. В силу указанной специфики квантового вклада теплоемкость системы мало отличается от классического значения 3/2 k везде, кроме узкой области низких температур, где теплоемкость системы падает до нуля (рис. 3).

Низкотемпературная часть теплоемкости квантовой системы твердых сфер изображена на рис. 4. Как видно, зависимость $C_v(T)$ заведомо содержит низкотемпературную линейную составляющую. Конечное значение производной dC_v/dT в начале координат, как это имеет место в случае ферми-газа, явно подтверждает этот вывод. Рисунок 5 хорошо

иллюстрирует это положение. Напомним, что линейная температурная зависимость теплоемкости ферми-газа возникает только при $T/T_f << 1$, где T_f — энергия Ферми. При более высоких температурах поведение теплоемкости существенно нелинейно (см. [9]). Такая же ситуация ожидается и в нашем случае, и при $T/\varepsilon << 1$ наблюдается линейное поведение теплоемкости, где ε — некоторый энергетический барьер, препятствующий свободному движению частиц. Из рис.4 можно заключить, что $\varepsilon \approx 10^{-2}K$. В связи с этим полезно проанализировать рис.6, где представлены четыре кривые $C_v(T)$, описывающие поведение теплоемкости в зависимости от температуры идеальных бозе- и ферми-газов, квантовых больцмановских и дебаевских тел. На рис.6 видно, что кривые ведут себя поразному вблизи нуля температуры, что, безусловно, связано с разным характером возбуждений, ответственных за теплоемкость. Вероятно, именно одночастичный характер тепловых возбуждений в флюидной системе твердых сфер и идеальном ферми-газе определяет их линейную зависимость теплоемкости от температуры. Отчетливое сходство кривых теплоемкости идеального ферми-газа и жидкости с твердыми сферами показано на рис.7. В этой связи не будет удивительным, что теплоемкость жидкого гелия при температуре, далекой от вырождения ведет себя подобным образом [10, 11].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Поведение теплоемкости больцмановской флюидной системы квантовых твердых сфер, следующее из расчетов методом квантового Монте-Карло, оказалось подобным поведению теплоемкости идеального ферми-газа. Мы предполагаем, что причина такого сходства кроется в особенностях одночастичной природы возбуждений, ответственных за характеристики теплоемкости в обеих средах.

Благодарности. Автор выражает признательность А.М. Белемуку и А.Е. Петровой за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. J. Runge and G. V. Chester, Phys. Rev. B **38**, 135 (1988).

2. J. A. Barker and D. Henderson, J.Chem.Phys. **47**, 2856 (1967).

3. J.-P. Hansen, D. Levesque, and D. Schiff, Phys. Rev. A **3**, 776 (1971).

4. M. H. Kalos, D. Levesque, and L. Verlet, Phys.Rev. A **9**, 2178 (1974).

5. R. K. Cole, Jr., Phys.Rev. **155**, 114 (1967).

6. H. B. Rosenstock, Am. J. Phys.,**30**,38 (1962).

7. L. M. Sesé, J. Chem. Phys. **136**, 244504 (2012).

8. R. K. Bhaduri, W. wan Dijk, and M. K. Srivastava, Europ. J. Phys. **27**, 1323 (2006).

9. R. K. Pathria and P. D. Beale, *Statistitical Mechanics*, Third Edition, Elsevier (2011).

10. S. M. Stishov, JETP letters, **31**, 272 (1980).

11. E. V. Lebedeva, A. M. Dyugaev, and P. D. Grigor'ev, Low Temp. Phys. **40**, 475 (2014).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1026–1038 © 2023

МАГНИТНЫЕ МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И СУПЕРПАРАМАГНИТНАЯ БЛОКИРОВКА ПОРОШКОВЫХ СИСТЕМ НАНОЧАСТИЦ БИОГЕННОГО ФЕРРИГИДРИТА

А. А. Красиков [a*], ***Ю. В. Князев*** [a], ***Д. А. Балаев*** [a**], ***С. В. Столяр*** [a,b], ***В. П. Ладыгина*** [b], ***А. Д. Балаев*** [a], ***Р. С. Исхаков*** [a]

[a] *Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук 660036, Красноярск, Россия*

[b] *ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук 660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 10 июля 2023 г.,
после переработки 26 июля 2023 г.
Принята к публикации 27 июля 2023 г.

Изучена и проанализирована магнитополевая зависимость температуры суперпарамагнитной блокировки T_B систем антиферромагнитно упорядоченных наночастиц ферригидрита. Исследованы две порошковые системы наночастиц — «биогенный» ферригидрит, выделенный в результате жизнедеятельности бактерий, на поверхности частиц (средний размер 2.7 нм) которого присутствует тонкая органическая оболочка, а также биогенный ферригидрит, прошедший низкотемпературный отжиг, в результате которого увеличился средний размер частиц (3.8 нм) и «выгорела» органическая оболочка. Характер температурных зависимостей намагниченности, измеренных после охлаждения в малом поле, а также вид полученных зависимостей $T_B(H)$ демонстрируют специфические черты, указывающие на влияние магнитных межчастичных взаимодействий. Детальный анализ зависимостей $T_B(H)$ в рамках модели случайной магнитной анизотропии позволил получить количественные оценки интенсивности магнитных межчастичных взаимодействий и определить константы магнитной анизотропии индивидуальных частиц ферригидрита.

DOI: 10.31857/S0044451023120167
EDN: MZIWKV

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования магнитных свойств порошковых систем магнитных наночастиц являются неотъемлемой составляющей их характеризации и позволяют определять важные, как с точки зрения физического материаловедения, так и для конкретных применений параметры. К таким параметрам относятся величины магнитного момента частицы и эффективной (зависящей от размера частицы) константы магнитной анизотропии K_{eff}. Однако следует различать свойства индивидуальной наночастицы и свойства ансамбля наночастиц. Для последнего большую роль могут играть эффекты магнитных межчастичных взаимодействий, и если ими пренебрегать, то, извлекаемые из эксперимента параметры могут иметь ошибочные значения. Иллюстрацией этого является, например, рассмотрение температуры суперпарамагнитной (СПМ) блокировки T_B (обычно определяемой из магнитной восприимчивости, либо намагниченности в малом поле после охлаждения в нулевом внешнем поле (ZFC)). Для систем невзаимодействующих частиц температура T_B опре-

* E-mail: KAA3000@yandex.ru
** E-mail: dabalaev@iph.krasn.ru

деляется как

$$T_B = K_{eff}V/\ln(\tau_m/\tau_0)k. \quad (1)$$

Это соотношение вытекает из неель-брауновского выражения для характерного времени τ переворота магнитного момента частицы

$$\tau = \tau_0 \exp(K_{eff}V/kT)$$

при $\tau = \tau_m$ (τ_m — характеристическое время экспериментальной методики, V — объем частицы, величина τ_0 находится в пределах $10^{-9}-10^{-13}$ с, k — постоянная Больцмана). По многочисленным экспериментальным данным [1–7] известно, что для систем наночастиц с идентичными размерами, температура T_B может значительно возрастать для тех систем, в которых есть магнитные межчастичные взаимодействия. И в этом случае оценка по выражению (1) будет давать завышенное значение K_{eff}.

Имеются различные подходы к выявлению и оценке степени влияния на физические параметры магнитных межчастичных взаимодействий [1, 4, 8–12]. Один из них, впервые предложенный в работах [3, 8], основан на анализе полевой зависимости температуры СПМ блокировки. В данной работе этот подход применяется к порошковым системам наночастиц ферригидрита.

Ферригидрит (номинальная химическая формула $Fe_2O_3 \times nH_2O$) принадлежит к классу антиферромагнитных (АФМ) материалов [13]. Такие материалы, реализованные в виде наночастиц, демонстрируют магнитные характеристики, весьма схожие с таковыми для ферро- или ферримагнитных (ФМ) оксидных наночастиц [13, 14]. Фундамент физики наноразмерных АФМ-частиц был заложен Неелем [15], и основным отличием АФМ-наночастиц от их объемных аналогов можно считать неполную компенсацию магнитных подрешеток в наночастицах. Это приводит к появлению у АФМ-наночастицы нескомпенсированного магнитного момента μ_{un}, величина которого может быть оценена из соотношения

$$\mu_{un} \sim \mu_{at}N^b. \quad (2)$$

Здесь μ_{at} — магнитный момент магнитоактивного атома, N — количество магнитоактивных атомов в частице, а показатель степени b зависит от типа дефектов, приводящих к декомпенсации, он может принимать значения в диапазоне $1/3-2/3$ [15].

Выражение (2) предсказывает достаточно небольшую величину μ_{un} для АФМ-частиц с N порядка 10^4-10^5 (размер частиц — десятки нанометров), если μ_{un} сравнивать с магнитным моментом μ_p ФМ-наночастиц. Однако для частиц экстремально малых размеров (2–4 нм, а именно такими размерами характеризуется ферригидрит), величина μ_{un} уже сравнима с μ_p для ФМ-частиц (для последних большая доля поверхности отрицательно сказывается на величине μ_p из-за формирования магнито-мертвого поверхностного слоя [16–19]). Для наночастиц ферригидрита и в молекулах ферритина было получено, что μ_{un} формируется спинами нескольких десятков атомов железа в частице ($\mu_{at} \approx 5\mu_B$, μ_B — магнетон Бора) и достигает величин $100-300\,\mu_B$ (показатель степени b в выражении (1) составляет $\approx 1/2$) [20–26].

Ферригидрит может быть получен химическим способом [22, 27, 28], либо выделен как продукт жизнедеятельности бактерий или микроорганизмов [24, 29]. Если в первом случае получаемая порошковая система состоит из наночастиц, находящихся в непосредственном контакте друг с другом, то для биогенного ферригидрита возможно частичное образование ультратонкого органического покрытия частиц [29, 30], вызванное условиями культивирования бактерий. Одним из немногих и эффективных путей контролируемого управления размерами наночастиц ферригидрита является низкотемпературная ($150-200^\circ$ C) термообработка получаемого золя [25, 26, 31, 32]. Увеличение частиц в размерах в ходе такой низкотемпературной термообработки связано с их агломерацией, а для биогенного ферригидрита этот процесс сопровождается также «выгоранием» органической оболочки. Необходимо отметить, что при более высоких температурах отжига происходит превращение ферригидрита в гематит [32–34].

Заметное влияние магнитных межчастичных взаимодействий на магнитные свойства порошковых систем ферригидрита систем отмечалось в ряде работ [30, 35–40] на основании анализа данных АС магнитной восприимчивости, либо эффекта Мёссбауэра. Достаточно интересным представляется способ провести подобный анализ, рассматривая полевую зависимость температуры СПМ блокировки. Целью данной работы было установление роли магнитных межчастичных взаимодействий в реализации СПМ состояния наночастиц биогенного ферригидрита. Для этого исследованы и проанализированы в рамках модели [3, 8] зависимости $T_B(H)$ двух образцов: исходного образца биогенного ферригидрита, и образца, прошедшего низкотемпературный отжиг.

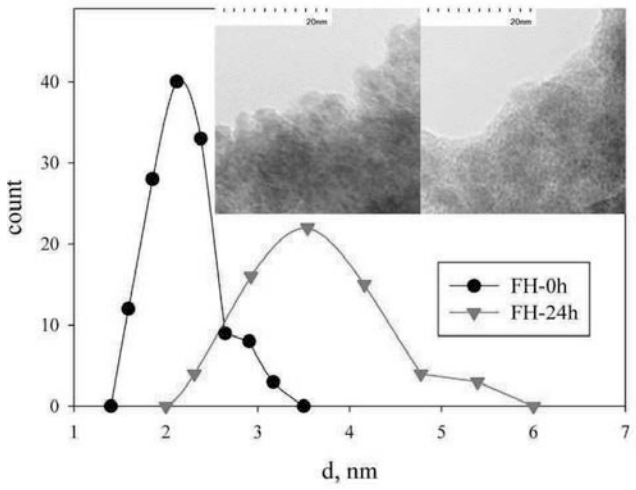


Рис. 1. (Цветной онлайн)Типичные изображения, полученные с помощью просвечивающей электронной микроскопии, для образцов FH-0h (фото слева), FH-24h (фото справа), а также распределения по размерам частиц

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Образец ферригидрита биогенного происхождения был получен путем выделения из бактериальных осадков после культивирования бактерий *Klebsiella oxytoca* в анаэробных условиях, как описано ранее [24, 31, 37]. Получаемый высушенный золь представляет собой агрегированную систему покрытых тонкой органической оболочкой [30] наночастиц ферригидрита с малым средним размером $\sim$ 2–3 нм. Исследованный образец биогенного ферригидрита далее будет обозначен как FH-0h. Часть этого образца была подвергнута низкотемпературному отжигу при 150° C в воздушной атмосфере в течение 24 h. Далее этот образец обозначен как FH-24h.

Исследования методом электронной микроскопии проводились на просвечивающем электронном микроскопе Hitachi HT7700 при ускоряющем напряжении 100 кВ. Образцы приготавливались путем взбалтывания порошка наночастиц в спирте в ультразвуковой ванне и последующего нанесения полученной суспензии на поддерживающие сетки с перфорированным углеродным покрытием.

Мёссбауэровские спектры были получены на спектрометре MS-1104Em (произведенного в Исследовательском физическом институте Южного Федерального университета, Россия) с источником Co^{57}(Rh) в температурном диапазоне 4–300 K (криостат CFSG-311-MESS фирмы Cryotrade Engineering).

Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ в поле $H = 100$ Э измерены на SQUID магнитометре [41]; в бóльших полях (1–30 кЭ) на вибрационном магнитометре [42]. Использованы режимы охлаждения в нулевом внешнем поле ZFC и охлаждения во внешнем поле (FC). Данные по магнитному моменту приведены в единицах *emu* на массу исследуемого порошка.

3. ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ

3.1. Микроструктура

Рисунок 1 иллюстрирует типичные результаты просвечивающей электронной микроскопии исследованных образцов. Визуально из микрофотографий видно, что в образце FH-24h размер частиц больше, чем в исходном образце FH-0h. Приведенные на рис. 1 распределения по размерам частиц, полученные из нескольких микрофотографий, подтверждают это. Средние размеры частиц $\langle d \rangle$ составили 2.7 и 3.8 нм, а максимальные размеры (размеры, больше которых частиц не зафиксировано) d_{max} составили 3.3 и 5.8 нм для образцов FH-0h и FH-24h соответственно. Отметим, что наличие (или отсутствие) органического покрытия частиц ферригидрита из данных TEM установить проблематично. Указанные величины d_{max} будут использованы при анализе зависимостей $T_B(H)$. Увеличение размеров частиц после низкотемпературного отжига связано с «выгоранием» органической оболочки в исходном образце и дальнейшей агломерацией частиц, приводящей к их укрупнению. Это схематично показано на рис. 2 с соблюдением относительных размеров частиц.

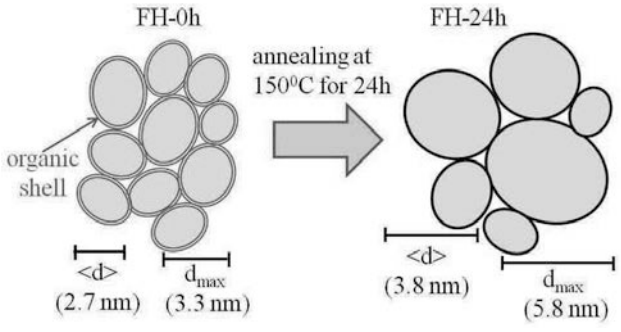


Рис. 2. (Цветной онлайн). Схематичное представление изменения микроструктуры в результате отжига для образцов FH-0h и FH-24h с соблюдением относительных размеров наночастиц ферригидрита

Таблица 1. Мёссбауэровские параметры при температурах 4.2 и 300 K. IS — химический сдвиг относительно α-Fe, ± 0.005 мм/с H_{hf} — сверхтонкое поле на ядрах железа, ± 2 кЭ, QS — квадрупольное расщепление, ± 0.02 мм/с, W — ширина мёссбауэровской линии на полувысоте, ± 0.02 мм/с, A — относительная заселенность позиции, ± 0.05 a.u.)

Образец/T	IS	H_{hf}	QS	W	A	Позиция
FH-24h	0.336	–	0.52	0.37	0.51	Fe1
300 K	0.338	–	0.87	0.35	0.37	Fe2
	0.338	–	1.27	0.33	0.13	Fe3
FH-24h	0.488	513	0.0	0.49	0.45	Fe1
4.2 K	0.458	489	0.0	0.58	0.30	Fe2
	0.428	459	0.0	0.49	0.23	Fe3
FH-0h	0.334	–	0.47	0.37	0.48	Fe1
300 K	0.343	–	0.74	0.29	0.30	Fe2
	0.344	–	1.06	0.33	0.22	Fe3
FH-0h	0.501	508	0.0	0.23	0.47	Fe1
4.2 K	0.480	479	0.0	0.33	0.36	Fe2
	0.499	443	0.0	0.58	0.15	Fe3

3.2. Мёссбауэровская спектроскопия

Мёссбауэровские спектры исследованных образцов при $T = 4.2$ K и 300 K приведены на рис. 3. При комнатной температуре (рис. 3a) спектры образцов представляют собой дублет, описывающийся суперпозицией трех компонент. Мёссбауэровские параметры, химический сдвиг IS, квадрупольное расщепление QS (см. табл. 1) хорошо согласуются с известными данными для ферригидрита [33, 38, 43, 44]. Указанные три компоненты соответствует трем неэквивалентным позициям железа (обозначенным как Fe1, Fe2, Fe3) в ферригидрите [33,38,43,44]. Катионы железа находятся в трехвалентном состоянии во всех позициях. Соотношение относительных заселенностей A этих дублетов в спектрах обоих образцов практически идентично и близко к соотношению 3 : 2 : 1. Применительно к наноразмерным магнитным частицам дублет является проявлением СПМ состояния магнитных моментов частиц [13,37,38,45].

Понижение температуры приводит к возникновению сверхтонкой структуры спектра (рис. 3b), и это является признаком заблокированного состояния магнитных моментов частиц в мёссбауэровской методике [13, 37, 38, 45]. В нашем случае, это — нескомпенсированные магнитные моменты частиц μ_{un}, см. Введение. Для спектров при $T = 4.2$ K математическая обработка также как и для $T = 300$ K, показывает три характерные позиции железа (Fe1, Fe2, Fe3) в октаэдрическом окружении. Относительные заселенности A позиций Fe1, Fe2, Fe3 в пределах точности обработки спектров совпадают данными для $T = 300$ K. Из табл. 2 видно, что для образца FH-24h величины сверхтонкого поля H_{hf} несколько больше, чем для образца FH-0h. Это, скорее всего, связано с бóльшим размером частиц в образце FH-24h, см. рис. 1, 2.

Таким образом, данные мёссбауэровской спектроскопии подтверждают, что оба образца представляют собой наноразмерные частицы ферригидрита. Низкотемпературный отжиг не привел к появлению других фаз оксида железа.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рисунок 4 иллюстрирует зависимости $M(T)$ исследованных образцов, полученные в различных внешних полях и в режимах ZFC и FC. Данные для каждого поля содержат, по крайней мере, две характерные точки: температуру необратимого поведения намагниченности T_{irr} (в области $T > T_{irr}$ зависимости $M(T)_{ZFC}$ и $M(T)_{FC}$ совпадают) и температуру T_{max}, при которой зависимости $M(T)_{ZFC}$ демонстрируют максимум. Обе температуры, T_{irr} и T_{max}, уменьшаются с увеличением внешнего поля. Описываемое поведение типично для систем магнитных наночастиц, в которых происходит переход из СПМ состояния (высокие температуры) в заблокированное состояние (низкие температуры). Бóльшие зна-

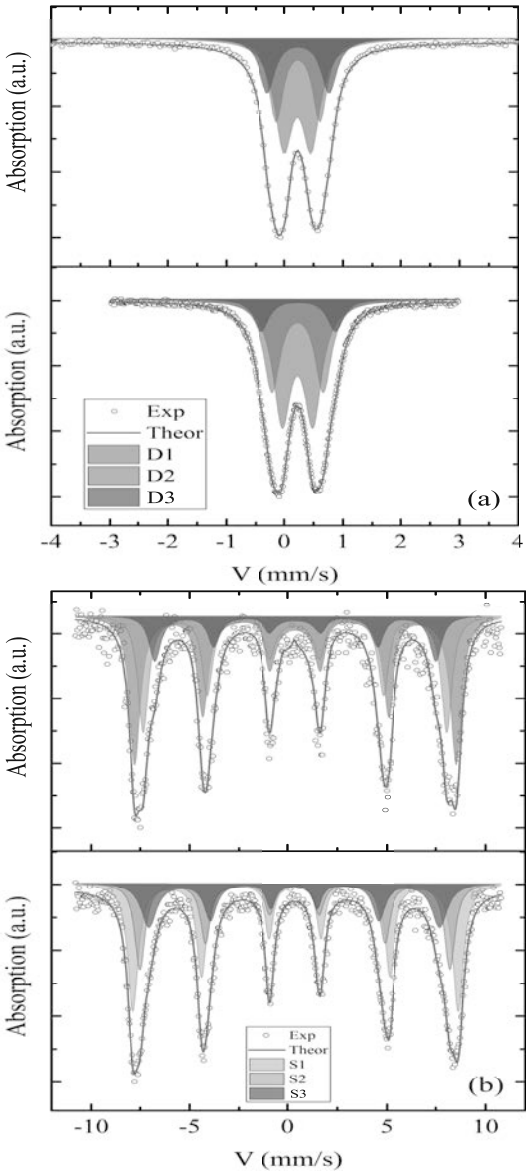


Рис. 3. (Цветной онлайн).Мёссбауэровские спектры образцов FH-0h (сверху) и FH-24h (снизу) образцов при 300 K (a) и при 4.2 K (b). Символы — эксперимент, линии — результаты обработки, закрашенные дублеты D (a) и секстеты S (b) — парциальные составляющие спектров (для D1, D2, D3 S1, S2, S3 номер соответствует позиции железа Fe1, Fe2, Fe3, см. табл. 1)

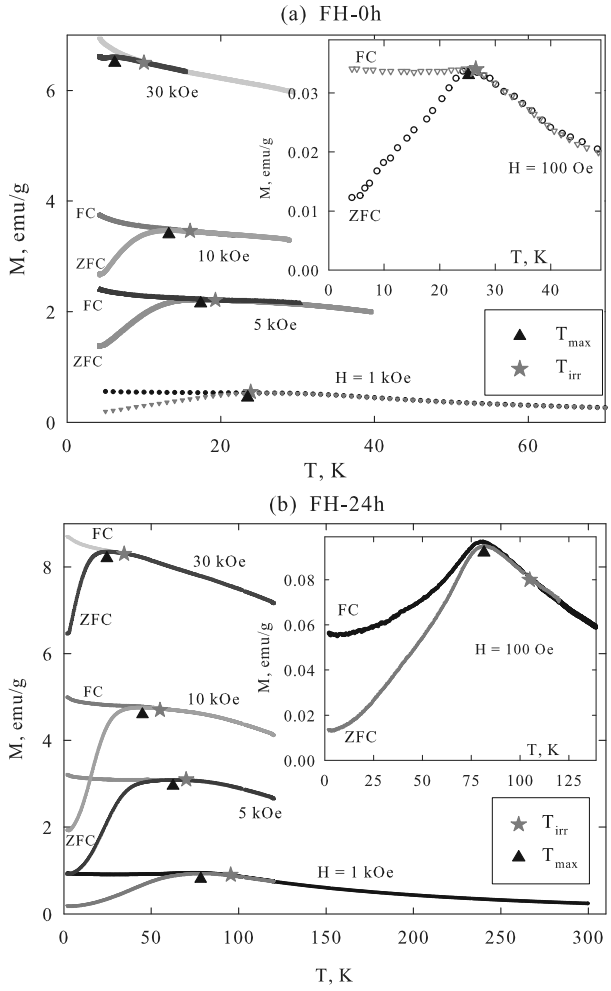


Рис. 4. (Цветной онлайн)Температурные зависимости намагниченности $M(T)_{ZFC}$ и $M(T)_{FC}$ в различных полях (указаны на рисунках) для образцов FH-0h (a) и FH-24h (b). На вставках — данные для $H = 100$ Э. Также показаны характерные температуры необратимого поведения намагниченности T_{irr} и максимума зависимости $M(T)_{ZFC}$ T_{max} (см. легенды на рисунках)

чения T_{irr} и T_{max} (при одинаковых значениях поля) для образца FH-24h логично могут быть объяснены в рамках выражения (1) учитывая то, что размер частиц в образце FH-24h заметно больше, чем в образце FH-0h (см. разд. 3.1 и рис. 1, 2). В полях $H \geq 1$ кЭ зависимости$M(T)_{FC}$ для обоих образцов имеют «классический» вид — намагниченность увеличивается с уменьшением температуры в области температур ниже T_{max}. Однако в поле $H = 100$ Э для образца FH-0h зависимость $M(T)_{FC}$ в области $\langle T_{max} \rangle$ является слабо изменяющейся функцией и демонстрирует слабо выраженный локальный минимум. (см. вставку рис. 4a). Такой вид зависимости $M(T)$ в условиях FC является характерным признаком наличия магнитных межчастичных взаимодействий [2–5, 29, 38, 40]. Для образца FH-24h зависимость $M(T)_{FC}$ в области $\langle T_{max} \rangle$ является уже убывающей с ростом температуры функцией (показано на вставке рис. 4b), что косвенно может указывать на усиление влияния магнитных межчастичных взаимодействий. Поэтому проанализируем полученные

данные, а именно полевые зависимости температур СПМ блокировки, в рамках модели [8], учитывающей такие взаимодействия.

В основе модели [3, 8], названной авторами моделью случайной анизотропии (далее — моделью СА), лежит рассмотрение кластера частиц, в котором магнитные моменты частиц ведут себя скоррелировано из-за влияния магнитных межчастичных взаимодействий. Тогда в выражении (1), определяющем температуру перехода в СПМ состояние, вместо объема V одной частицы (например, частицы среднего размера) будет фигурировать «эффективный» объем кластера, содержащего некоторое количество частиц. С увеличением внешнего поля размер кластера должен уменьшаться, поскольку зеемановская энергия $\mu_p H$ будет превосходить энергию магнитных межчастичных взаимодействий, и влияние последних станет незначительным. Тогда в достаточно большом внешнем поле «эффективный» размер кластера станет близким к размеру частиц, а, температура СПМ блокировки примет, приблизительно, то же значение, что и для системы невзаимодействующих частиц. Авторами [3, 8] была предложена следующая зависимость размера кластера $L_H(H)$ от поля:

$$L_H(H) = d + \sqrt{\frac{2A_{eff}}{M_S H + C}}. \qquad (3)$$

В этом выражении M_S — намагниченность насыщения частицы, параметры A_{eff} и C характеризуют интенсивность магнитных межчастичных взаимодействий. Выражение (3) содержит корневую зависимость корреляционного размера от внешнего поля, вытекающую из микромагнитной теории [46], и A_{eff} имеет тот же смысл, что обменная константа для нанокристаллических сплавов [3, 8], очевидно, эта величина пропорциональна интенсивности магнитных межчастичных взаимодействий. Параметр C также характеризует межчастичные взаимодействия, и он обратно пропорционален их силе. Математически, этот параметр устраняет расходимость выражения (3) в малых внешних полях, а при больших значениях С понятие корреляционного радиуса L_H теряет смысл: $L_H \approx d$. Для рассматриваемого кластера частиц L_H константа магнитной анизотропии будет иной, чем для отдельной частицы: $K_H = K_{eff}/N_P^{1/2}$, где N_P — число частиц в кластере, а K_{eff} соответствует характеристике отдельной невзаимодействующей частицы [3, 8] (как в выражении (1)).

Классическая зависимость $T_B(H)$ для невзаимодействующих частиц, помимо множителя $T_B(H = 0)$, выражение (1), определяется степенной функцией от внешнего поля [3, 8]:

$$T_B(H) = \frac{K_{eff}V}{k_B \ln(\tau/\tau_0)}\left[1 - \frac{M_S H}{2K_{eff}}\right]^{3/2}. \qquad (4)$$

Подстановка в (4) объема кластера вместо объема частицы (для случая частиц шарообразной формы) и соответствующей константы анизотропии K_H, с учетом объемной концентрации xx магнитных частиц, приводит к следующему выражению для температуры СПМ блокировки:

$$T_B(H) = \frac{\pi K_{eff}\left[d^3 + x(L_H^3 - d^3)\right]}{6k_B \ln\left(\frac{\tau_m}{\tau_0}\right)\sqrt{1 + \frac{x(L_H^3 - d^3)}{d^3}}} \times \\ \times \left[1 - \frac{M_S H\sqrt{1 + \frac{x(L_H^3 - d^3)}{d^3}}}{2K_{eff}}\right]^{\frac{3}{2}}. \qquad (5)$$

Согласно выражениям (1) и (5), температура СПМ блокировки пропорциональна объему частиц. Очевидно, что температура T_{irr}, характеризующая начало необратимого поведения зависимостей $M(T)$ (рис. 4), соответствует частицам наибольшего размера d_{max}. С другой стороны, иногда целесообразно рассматривать функцию $f_d(T) = -(d(M(T)_{FC} - M(T)_{ZFC}/dT$ [4, 8, 31]. Температура, при которой функция $f_d(T)$ демонстрирует максимум, отождествляется с температурой СПМ блокировки $\langle T_B\rangle$ частиц среднего размера $\langle d\rangle$. Однако в этом подходе для данных при $H = 30$ кЭ (для образца FH-24h), и $H = 10$ кЭ и более (для образца FH-0h) температура $\langle T_B\rangle$ уже находится вне экспериментально доступного интервала — ниже 4.2 K. Кроме того, в достаточно малом поле $H = 100$ Э зависимость $f_d(T)$ для образца FH-24h — сложная немонотонная функция и определить $\langle T_B\rangle$ невозможно. Температура $\langle T_{max}\rangle$ зависимостей $M(T)_{ZFC}$ соответствует блокировке частиц некоторого размера, находящегося в диапазоне между $\langle d\rangle$ и d_{max}, однако в этом случае есть неопределенность в выборе этого размера. Исходя из этих соображений, при дальнейшем анализе влияния внешнего поля на температуру СПМ блокировки мы будем использовать характерную температуру T_{irr}, считая, что она соответствует максимальному размеру частиц d_{max}. Отметим, что обработка имеющихся данных $\langle T_B\rangle$ из функций $f_d(T)$ дает схожие результаты.

Экспериментальные зависимости $T_{irr}(H)$ приведены на рис. 5b (символы). Для анализа зависимо-

сти $T_{irr}(H)$ в рамках модели СА [3,8] [8,3] — выражения (3) и (5), необходимо определить минимальное количество подгоночных параметров.

Значения M_S определяются из анализа изотерм кривых намагничивания $M(H)$ в СПМ области температур [13,14]. Обычно такой анализ заключается в фитинге экспериментальных данных функцией типа $M(H) = M_{SP}(H) + \chi H$. В этой функции первое слагаемое отвечает за СПМ поведение нескомпенсированных магнитных моментов частиц — μ_{un}, а второе слагаемое соответствует АФМ восприимчивости и другим вкладам, линейно зависимым от внешнего поля [20–27, 29, 37, 38, 48, 49]. В результате подгонки, с учетом распределения $f(\mu_{un})$, определяется средний магнитный момент частицы $\langle\mu_{un}\rangle$, причем значения $\langle\mu_{un}\rangle$, обычно, слабо изменяются в области низких температур [20–27, 29, 37, 38, 48, 49]. Для исследованных образцов FH-0h и FH-24h величина $\langle\mu_{un}\rangle$ в области низких температур составляет $\approx 160\mu_B$ и $\approx 300\mu_B$ соответственно. Из соотношения $M_S = \mu_{un}/V$, получим, что значения M_S составляют 20 и 13.3 Gs (при значении физической плотности ферригидрита $\approx 3.8\,\mathrm{g/cm^3}$) для образцов FH-0h и FH-24h соответственно. Указанные величины M_S были использованы в процедуре подгонки зависимостей $T_{irr}(H)$, и варьирование этих значений в пределах $\pm 5\%$ практически не влияет на результаты анализа.

Концентрация частиц x определяется толщиной органического покрытия частиц ферригидрита, которое, согласно результатам работы [30], присутствует для образца FH-0h. Для этого образца мы берем значение x, равное 0.75, исходя из разумного предположения достаточно тонкого покрытия, средней толщиной порядка 0.15 нм. Низкотемпературный отжиг приводит к укрупнению наночастиц ферригидрита и, наиболее сильные изменения, происходят после нескольких часов отжига [26, 27], в то время как отличие в магнитных свойствах для образцов, прошедших отжиг в течение 24 и 240 часов, уже незначительные [26,27]. Это дает основания считать, что при отжиге порядка суток органическая оболочка практически полностью «выгорает», и поэтому для образца FH-24h было взято $x = 1$. Варьирование указанных значений x в пределах ± 0.1 приводит к изменению других подгоночных параметров не более, чем на 5 – 7%.

Для характерных времен τ_m и τ_0 в выражениях (3) и (5) были взяты общепринятые значения 10^2 с и 10^{-12} с соответственно [13], и максимальные размеры частиц d_{max} соответствовали данным просвечивающей электронной микроскопии (раздел 3.1):

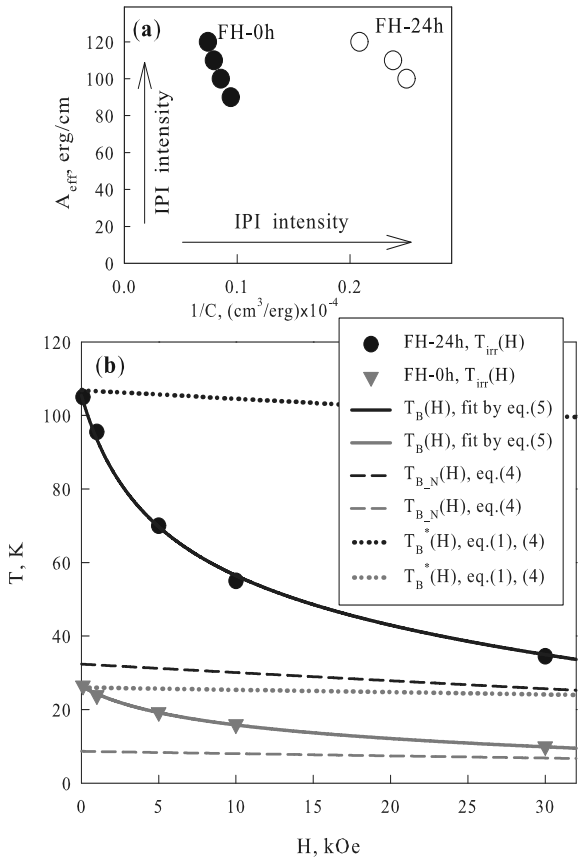


Рис. 5. (Цветной онлайн) a — области значений подгоночных параметров C и A_{eff}, при которых достигается хорошее согласие зависимостей $T_{irr}(H)$ и расчетом по модели СА, в координатах $1/C$, A_{eff}. b — температуры T_{irr} в зависимости от внешнего поля H (символы) для исследованных образцов. Сплошные линии — результаты подгонки в рамках модели СА — выражения (3) и (5) с параметрами, указанными в табл. 2. Точечные линии построены по выражению (4) при согласии с экспериментом в поле 100 Э. Штриховые линии — «ожидаемые» зависимости температуры блокировки при полном отсутствии магнитных межчастичных взаимодействий (выражение (4)) с величинами K_{eff}, приведенными в табл. 2

3.3 нм и 5.8 нм для образцов FH-0h и FH-24h соответственно.

Таким образом, в выражениях (3) и (5) остаются три варьируемых параметра: K_{eff}, A_{eff} и C. Первый из них может несколько отличаться для частиц различных размеров из-за вклада поверхностной магнитной анизотропии [50,51]. Однако в выражении (5) значение K_{eff} влияет в основном на величину температуры СПМ блокировки в достаточно больших полях. Два других параметра, A_{eff} и C, определяют полевую зависимость размера кластера

Таблица 2. Параметры, использованные при построении зависимостей $T_{irr}(H)$ на рис. 5b и отношение $L_H(H=0)/\langle d\rangle$ ($\langle d\rangle$ = 2.7 и 3.8 нм для образцов FH-0h и FH-24h соответственно)

Образец	x, %	K_{eff}, эрг/см^3	C, эрг/см^3	A_{eff}, эрг/см	$L_H(H=0)$, нм	$\frac{L_H(H=0)}{\langle d\rangle}$
FH-0h	0.75	$2.1\cdot10^6$	$11.7\cdot10^4$	$100\cdot10^{-10}$	7.4	2.7
FH-24h	1	$1.4\cdot10^6$	$4.8\cdot10^4$	$120\cdot10^{-10}$	13.0	3.4

$L_H(H)$, и процедура подгонки сводится к нахождению функциональной зависимости $L_H(H)$, при которой адекватно описываются экспериментальные данные (зависимость $T_{irr}(H)$). Если большее значение A_{eff} однозначно соответствует увеличению размера L_H, то меньшее значение C приводит к росту L_H в области низких полей.

Следовательно, расположение точек, соответствующих значениям C, A_{eff}, полученным в ходе обработки эксперимента, в координатах $1/C$, A_{eff}, должно стремиться вправо и вверх при усилении магнитных межчастичных взаимодействий. Области обсуждаемых параметров, при которых достигается хорошее согласие, в указанных координатах показаны на рис. 5a. Хотя области значений параметра A_{eff} близки для исследованных образцов, тенденция сдвига «вправо и вверх» имеет место для образца без органической оболочки частиц. Отметим, что при некотором произвольном выборе конкретной пары подгоночных параметров на рис. 5a, величина корреляционного размера L_H, обсуждаемого ниже, практически, не изменяется. На рис. 5b приведены типичные результаты обработки зависимостей $T_{irr}(H)$ в рамках описанного подхода. Параметры x, K_{eff}, C и A_{eff}, использованные для построения зависимостей $T_{irr}(H)$ на рис. 5b по выражениям (3) и (5), приведены в табл. 2.

Интересно сопоставить результаты проведенного выше анализа в рамках модели CA с подходом, в котором не учитываются магнитные межчастичные взаимодействия. На рис. 5b показаны полевые зависимости температуры СПМ блокировки, рассчитанные по выражению (4) и обозначенные как $T_B^*(H)$ (точечные линии на рис. 5b). Для этих зависимостей использовались значения K_{eff}^*, при которых $T_B^*(H=0)$ согласуются с экспериментальными значениями T_{irr} в малом внешнем поле (100 Э). В этом случае величины K_{eff}^* получатся в три и более раз большими, чем K_{eff} в рамках модели CA (можно сравнить с данными табл. 2): $K_{eff}^* \approx 6.15\cdot10^6$ эрг/см^3 для образца FH-0h и $K_{eff}^* \approx 4.65\cdot10^6$ эрг/см^3 для образца FH-24h. Можно также рассчитать «ожидаемые» зависимости температуры СПМ блокировки от поля для случая, если частицы в исследованных образцах будут пространственно разделены так, что магнитные взаимодействия между ними станут ничтожными. Для построения таких зависимостей, обозначенных далее как $T_{B_N}(H)$, мы взяли значения K_{eff}, полученные в рамках модели CA (табл. 2), и использовали выражение (4) с теми же значениями $d = d_{max}$). На рис. 5b эти зависимости показаны штриховыми линиями. Разница между T_B^* и T_{B_N} в малом внешнем поле составляет ≈75 K для образца FH-24h (при $T_B^*(0) \approx T_{irr}$ (100 Э) ≈107 K) и ≈17.4 K для образца FH-0h (при $T_B^*(0) \approx T_{irr}$ (100 Э) ≈ 26.3 K). Приведенные выше оценки убедительно доказывают, что для систем наночастиц ферригидрита использование данных по температуре СПМ блокировки только для малых полей при определении такого важного параметра, как константа магнитной анизотропии, дает завышенные значения.

Рассмотрим теперь величины K_{eff}, полученные в рамках модели CA. Из табл. 2 видно, что для частиц большего размера величина K_{eff} меньше. Это, очевидно, связано с влиянием поверхностной магнитной анизотропии, поскольку магнитные взаимодействия между частицами здесь уже учтены. Вклад поверхностной магнитной анизотропии обычно связывается с соответствующей константой K_S и, с учетом константы объемной магнитной анизотропии K_V, записывается в виде [50, 51]:

$$K_{eff} = K_V + 6K_S/d. \qquad (6)$$

Подставляя величины K_{eff} и соответствующие значения $d = d_{max}$ в выражение (6), можно определить, что $K_V \approx 4.7\cdot10^5$ эрг/см^3 и $K_S = 0.09$ эрг/см^2. Полученная величина K_S типична для железооксидных наночастиц [52–58], и близка к значениям, полученным на других образцах наноферригидрита [1)]

[1)] Значения K_{eff} по выражению (5) были получены в приближении сферической формы частиц, а выражение (6), возможно, более справедливо для частиц кубической формы

[29, 37, 38].

Проанализируем полученные в рамках модели СА параметры, отвечающие за интенсивность магнитных взаимодействий. Оба параметра — A_{eff} и C, определяют корреляционный размер L_H. В табл. 2 приведены значения $L_H(H = 0)$, а полевые зависимости $L_H(H)$ показаны на рис. 6. Для образца FH-24h этот размер больше, чем для образца FH-0h, однако эти образцы различаются размерами частиц (рис. 1, 2). Для сопоставления с зависимостями $L_H(H)$ на рис. 6 также показаны максимальный d_{max} и средний $\langle d \rangle$ размеры частиц (горизонтальные линии). Из рис. 6 видно, что размер L_H уменьшается с ростом внешнего поля, приближаясь к d_{max} в полях около 30 кЭ, в соответствии с концепцией модели СА.

Одной их характеристик интенсивности магнитных взаимодействий логично считать отношение $L_H(H)/d$. Эта величина показывает, во сколько раз L_H в некотором внешнем поле превышает размер частиц d. В табл. 2 приведены значения $L_H/\langle d \rangle$ для нулевого внешнего поля, и если их сравнивать, то для образца FH-24h влияние межчастичных взаимодействий больше, хотя величины $L_H(H = 0)/\langle d \rangle$ различаются только на $\sim$20 – 25%. Для образца FH-0h при $H \approx 0$ кластер размером L_H включает в себя $2.7^3 \approx 20$ частиц среднего размера, в то время как для образца FH-24h при $H \approx 0$ в таком кластере находится около $3.4^3 \approx 40$ частиц среднего размера. В достаточно большом внешнем поле, $H = 30$ кЭ, в кластере остается 7 – 8 частиц среднего размера для обоих образцов.

На основании проведенного выше анализа можно сказать, что вклад магнитных межчастичных взаимодействий в процессы СПМ блокировки имеет место для обоих образцов, но для образца FH-24h влияние таких взаимодействий проявляется сильнее. Оценка величины энергии магнитных дипольдипольных взаимодействий $E_{dip} = kT_{dip}$ только качественно может объяснить влияние магнитных межчастичиных взаимодействий для обоих образцов. Согласно оценкам, полученным в Приложении, T_{dip} составляет ≈ 7 K для образца FH-0h, и ≈ 12.3 K для образца FH-24h, причем, это верхний предел для указанных оценок. Также в Приложении показано, что E_{dip} должна практически не зависеть от размера частиц в случае ферригидрита, и бóльшая величина E_{dip} для образца FH-24h определяется отсутствием органической оболочки частиц в этом образце. Указанные величины E_{dip} (≈ 7 K — образец FH-0h и ≈ 12.3 K — образец FH-24h) не могут количественно объяснить разницу между экспериментальными значениями T_{irr} и оценочными значениями T_{B_N} (полученными из величины K_{eff} из табл. 2) в малом внешнем поле, см. рис. 5b. Выше было показано, что разница $T_{irr} - T_{B_N}$ составляет ≈ 17.4 K и ≈ 75 K в поле $H = 100$ Э для образцов FH-0h и FH-24h соответственно.

Это приводит к выводу, что магнитные межчастичные взаимодействия вызваны обменными (или суперобменными), либо косвенными взаимодействиями между атомами соседних частиц, что не противоречит использованной в данной работе модели СА [3, 8] для интерпретации результатов. Наличие корневой зависимости обменной константы ($L \propto A_{eff}^{1/2}$) в выражении (3) не исключает возможность реализации формирования кластера частиц из-за достаточно слабых обменных взаимодействий. Отметим, что полученная оценка величины A_{eff} более чем на два порядка меньше соответствующих констант для массивных ферромагнитных материалов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была исследована зависимость температуры СПМ блокировки от внешнего магнитного поля $T_B(H)$ двух образцов порошковых систем наноферригидрита. Анализ полученных зависимостей $T_B(H)$ показал, что классическое выражение, в котором нет учета магнитных межчастичных взаимодействий, не может описать экспериментально наблюдаемое достаточно быстрое уменьшение температуры блокировки с увеличением внешнего поля. С другой стороны, подход в рамках модели СА [3, 8], в котором рассматриваются кластеры частиц, магнитные моменты которых ведут себя скоррелировано, позволяет не только достигнуть хорошего согласия экспериментальных и модельных зависимостей $T_B(H)$, но и получить разумные величины эффективной константы магнитной анизотропии.

Скоррелированное поведение магнитных моментов частиц является признаком магнитных межчастичных взаимодействий, и, следовательно, в магнитном поведении систем наночастиц ферригидрита такие взаимодействия играют важную и существенную роль.

Кроме указанной особенности функциональной зависимости $T_B(H)$ (быстрое уменьшение с ростом поля), магнитные межчастичные взаимодействия приводят увеличению температуры СПМ блокировки, определяемой в небольших полях. Отме-

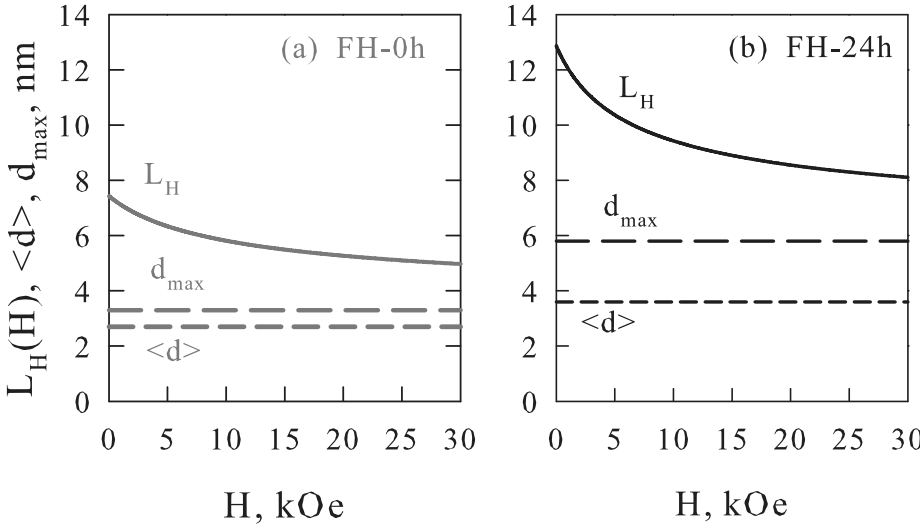


Рис. 6. (Цветной онлайн) Поведение размера кластера L_H от внешнего поля, полученное в результате подгонки зависимостей $T_{irr}(H)$ (рис. 5b) по выражениям (3) и (5), в сравнении со средним $\langle d\rangle$ и максимальным dmax размерами частиц образцов FH-0h (a) FH-24h (b)

Таблица A1. Пропорциональность между величиной магнитного момента частицы μ_p и ее объема V, размера d, а также пропорциональность энергии дипольных взаимодействий E_{dip} (по выражению (A1)) и размера частиц d для случаев ФМ упорядочения (2-й столбец) и АФМ упорядочения (3-й, 4-й и 5-й столбцы — различные значения b по гипотезе Нееля (2))

$\mu_p \propto V^b$	$\mu_p \propto V^1$	$\mu_p \propto V^{2/3}$	$\mu_p \propto V^{1/2}$	$\mu_p \propto V^{1/3}$
$\mu_p \propto f(d)$	$\mu_p \propto d^3$	$\mu_p \propto d^2$	$\mu_p \propto d^{3/2}$	$\mu_p \propto d^1$
$E_{dip} \propto f(d)$	$E_{dip} \propto d^3$	$E_{dip} \propto d$	$E_{dip} \propto d^0 \approx \text{const}$	$E_{dip} \propto d^{-1}$

тим, что при использовании классического неель-брауновского выражения, извлекаемые константы магнитной анизотропии получаются завышенными в несколько раз. В рамках использованного подхода модели СА возможно получить величины констант магнитной анизотропии K_{eff}, как характеристику невзаимодействующих частиц. Для образцов ферригидрита, исследованных в данной работе, величины K_{eff} оказались зависимыми от размера частиц, что позволяет говорить о вкладе поверхностной магнитной анизотропии и разделить константы, соответствующие объемной и поверхностной анизотропии: $K_V \approx 4.7{\cdot}10^5$ эрг/см^3, $K_S = 0.09$ эрг/см^2. Проведенная количественная оценка энергии магнитных взаимодействий превышает возможный вклад магнитных диполь-дипольных взаимодействий, что указывает на обменные (прямые, либо косвенные) взаимодействия между атомами соседних частиц в исследованных системах ферригидрита.

ПРИЛОЖЕНИЕ. ОЦЕНКА ВЕЛИЧИНЫ ЭНЕРГИИ МАГНИТНЫХ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ СИСТЕМ АФМ-НАНОЧАСТИЦ

Из магнитостатики энергия магнитных диполь-дипольных взаимодействий E_{dip} для двух частиц с магнитными моментами μ_{p1} и μ_{p2} определяется как

$$E_{dip} = kT_{dip} \approx \mu_{p1}\mu_{p2}/d^3_{p-p}. \qquad \text{(A1)}$$

Здесь d_{P-P} — расстояние между центрами частиц. Если частицы одинакового размера, имеют одинаковый магнитный момент ($\mu_{p1} = \mu_{p2}$) и находятся в непосредственном контакте (не имеют какой-либо «немагнитной» оболочки), то $d_{P-P} = d$. Для однодоменных ФМ-наночастиц $\mu_p \propto V \propto d^3$, тогда выражение (A1) дает $E_{dip} \propto d^3$. Для АФМ-наночастиц (будем также рассматривать частицы одинакового

размера) зависимость E_{dip} от размера будет зависеть от величины показателя степени b в выражении (2), в котором $\mu_{un} \propto N^b \propto V^b$. Если $b = 2/3$ и $\mu_{p1,2} = \mu_{un} \propto V^{2/3} \propto d^2$ (это случай, в котором у частицы нечетное количество ферромагнитно упорядоченных плоскостей [15]), то $E_{dip} \propto d$. Если $b = 1/3$ и $\mu_{p1,2} = \mu_{un} \propto V^{1/3} \propto d^1$ (это случай, в котором μ_{un} определяется дефектами на поверхности частицы), то $E_{dip} \propto d^{-1}$, и вклад межчастичных взаимодействий быстро уменьшается с увеличением размера частиц. Если, наконец, $b = 1/2$ и $\mu_{p1,2} = \mu_{un} \propto V^{1/2} \propto d^{3/2}$ (μ_{un} определяется дефектами как на поверхности, так и в объеме частицы), то $E_{dip} \propto d^0 \approx$ const, т. е., энергия диполь-дипольного взаимодействия не зависит от размера частиц. Полученные типы пропорциональности для рассмотренных случаев приведены в табл. A1.

Для систем частиц ферригидрита, в которых реализуется случай $b \approx 1/2$ и отсутствует какая-либо органическая оболочка, влияние магнитных диполь-дипольных межчастичных взаимодействий будет одинаковым для образцов, содержащих частицы различных размеров. Разумеется, если в выражении (A1) учесть органическое покрытие частиц (как для образца FH-0h), т. е. , вместо $d_{P-P} = d$ подставить $d_{P-P} = d + 2l$, где l — толщина органического покрытия, то величина E_{dip} будет меньше для образца с органическим покрытием частиц. Для количественной оценки по выражению (A1) необходимо учесть количество ближайших соседей N_N. При $N_N = 12$, $\mu_{p1,2} = \langle\mu_{un}\rangle = 160\mu_B$, $d_{P-P} = \langle d\rangle + 2l$, $\langle d\rangle = 2.7$ нм, $l = 0.15$ нм из выражения (A1) получим, что для образца FH-0h $T_{dip} \approx 7$ K. Для образца FH-24h при $N_N = 12$, $\mu_{p1,2} = \langle\mu_{un}\rangle = 300\mu_B$, $d_{P-P} = \langle d\rangle = 3.8$ нм величина T_{dip} составляет 12.3 K.

Благодарности. Авторы благодарят М. Н. Волочаева за микроскопические исследования. Исследования электронной микроскопии проведены на оборудовании Центра Коллективного Пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 22-72-00134.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Mørup, M. F. Hansen, and C. Frandsen, Beilstein J. Nanotechnol. **1**, 182 (2010).

2. D. Caruntu, G. Caruntu, and Ch. J. O'Connor, J. Phys. D: Appl. Phys. **40**, 5801 (2007).

3. M. Knobel, W. C. Nunes, H. Winnischofer, T. C. R. Rocha, L. M. Socolovsky, C. L. Mayorga, and D. Zanchet, J. of Non-Crystalline Solids **353**, 743 (2007).

4. M. Knobel, W. C. Nunes, L. M. Socolovsky, E. De Biasi, J. M. Vargas, and J. C. Denardin, J. of Nanoscience and Nanotechnology **8**, 2836 (2008).

5. A. M. Pereira, C. Pereira, A. S. Silva, D. S. Schmool, C. Freire, J.-M. Gren?che, and J. P. Ara?jo, J. Appl. Phys. **109**, 114319 (2011).

6. D. A. Balaev, S. V. Semenov, A. A. Dubrovskiy, S. S. Yakushkin, V. L. Kirillov, O. N. Martyanov, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 199 (2017).

7. C. A. M. Vieira, R. Cabreira Gomes, F. G. Silva, A. L. Dias, R. Aquino, A. F. C. Campos, and J. Depeyrot, J. Phys. : Condens. Matter. **31**, 17580 (2019).

8. J. M. Vargas, W. C. Nunes, L. M. Socolovsky, M. Knobel, and D. Zanchet, Phys. Rev. B **72**, 184428 (2005).

9. K. Nadeem, H. Krenn, T. Traussnig, R. W?rschum, D. V. Szabø, and I. Letofsky-Papst, J. Magn. Magn. Mater. **323**, 1998 (2011).

10. S. V. Komogortsev, V. A. Fel'k, and O. A. Li, J. Magn. Magn. Mater. **473**, 410 (2011).

11. L. L. Afremov, S. V. Anisimov, and I. G. Iliushin, Chinese J. of Phys. **70**, 324 (2021).

12. С. В. Комогорцев, Р. С. Исхаков, В. А. Фельк, ЖЭТФ **5**, 886 (2019).

13. S. Mørup, D. E. Madsen, C. Fradsen, C. R. H. Bahl, and M. F. Hansen, J. Phys. : Condens. Matter **19**, 213202 (2007).

14. Ю. Л. Райхер, В. И. Степанов, ЖЭТФ **134**, 514 (2008).

15. L. Néel, C. R. Acad. Sci. Paris **253**, 203 (1961).

16. A. Millan, A. Urtizberea, N. J. O. Silva, F. Palacio, V. S. Amaral, E. Snoeck, and V. Serin, J. Magn. Magn. Mater. **312**, L5 (2007).

17. P. Dutta, S. Pal, M. S. Seehra, N. Shah, G. P. Huffman, J. Appl. Phys. **105**, 07B501 (2009).

18. V. L. Kirillov, D. A. Balaev, S. V. Semenov, K. A. Shaikhutdinov, and O. N. Martyanov, Mater. Chem. Phys. **145**, 75 (2014).

19. V. L. Kirillov, S. S. Yakushkin, D. A. Balaev, A. A. Dubrovskiy, S. V. Semenov, Yu. V. Knyazev, O. A. Bayukov, D. A. Velikanov, D. A. Yatsenko, and O. N. Martyanov, Mater. Chem. Phys. **225**, 292 (2019).

20. C. Gilles, P. Bonville, K. K. W. Wong, and S. Mann, Eur. Phys. J. B **17**, 417 (2014).

21. C. Gilles, P. Bonville, H. Rakoto, J. M. Broto, K. K. W. Wong, and S. Mann, J. Magn. Magn. Mater. **241**, 430 (2002).

22. A. Punnoose, T. Phanthavady, M. Seehra, N. Shah, and G. Huffman, Phys. Rev. B **69**, 054425 (2004).

23. N. J. O. Silva, V. S. Amaral, and L. D. Carlos, Phys. Rev. B **71**, 184408 (2005).

24. Д. А. Балаев, А. А. Дубровский, А. А. Красиков, С. В. Столяр, Р. С. Исхаков, В. П. Ладыгина, Е. Д. Хилажева, Письма ЖЭТФ **98**, 160 (2013).

25. Д. А. Балаев, А. А. Красиков, А. А. Дубровский, С. В. Семенов, О. А. Баюков, С. В. Столяр, Р. С. Исхаков, В. П. Ладыгина, Л. А. Ищенко, ЖЭТФ **146**, 546 (2014).

26. D. A. Balaev, A. A. Krasikov, A. A. Dubrovskiy, S. I. Popkov, S. V. Stolyar, O. A. Bayukov, R. S. Iskhakov, V. P. Ladygina, and R. N. Yaroslavtsev, J. Magn. Magn. Mater. **410**, 71 (2016).

27. С. В. Столяр, Р. Н. Ярославцев, Р. С. Исхаков, О. А. Баюков, Д. А. Балаев, А. А. Дубровский, А. А. Красиков, В. П. Ладыгина, А. М. Воротынов, М. Н. Волочаев, ФТТ **59**, 538 (2017).

28. S. V. Stolyar, D. A. Balaev, A. A. Krasikov, A. A. Dubrovskiy, R. N. Yaroslavtsev, O. A. Bayukov, M. N. Volochaev, and R. S. Iskhakov, J. Supercond. Nov. Magn. **31**, 1133 (2018).

29. Yu. V. Knyazev, D. A. Balaev, S. V. Stolyar, O. A. Bayukov, R. N. Yaroslavtsev, V. P. Ladygina, D. A. Velikanov, and R. S. Iskhakov, J. Alloys Compd. **851**, 156753 (2021).

30. Yu. V. Knyazev, D. A. Balaev, R. N. Yaroslavtsev, A. A. Krasikov, D. A. Velikanov, Yu. L. Mikhlin, M. N. Volochaev, O. A. Bayukov, S. V. Stolyar, and R. S. Iskhakov, Adv. Nano Res. **12**, 605 (2022).

31. Д. А. Балаев, А. А. Красиков, С. В. Столяр, Р. С. Исхаков, В. П. Ладыгина, Р. Н. Ярославцев, О. А. Баюков, А. М. Воротынов, М. Н. Волочаев, А. А. Дубровский, ФТТ **58**, 1724 (2016).

32. L. Gutivrrez, V. Barrøn, M. Andrés-Vergés, C. J. Serna, S. Veintemillas-Verdaguer, M. P. Morales, and F. J. L?zaro, J. Geophys. Res. Solid Earth **121**, 4118 (2016).

33. С. В. Столяр, О. А. Баюков, В. П. Ладыгина, Р. С. Исхаков, Л. А. Ищенко, В. Ю. Яковчук, К. Г. Добрецов, А. И. Поздняков, О. Е. Пиксина, ФТТ **53**, 97 (2011).

34. B. Vallina, J. D. Rodriguez-Blanco, A. P. Brown, L. G. Benning, and J. A. Blanco, J. Nanopart. Res. **16**, 2322 (2014).

35. E. L. Duarte, R. Itri, E. Lima Jr, M. S. Baptista, T. S. Berquø, and G. F. Goya, Nanotechnology **17**, 5549 (2006).

36. T. S. Berquø, J. J. Erbs, A. Lindquist, R. L. Penn, and S. K. Banerjee, J. Phys. : Condens. Matter **21**, 176005 (2009).

37. Yu. V. Knyazev, D. A. Balaev, S. V. Stolyar, A. A. Krasikov, O. A. Bayukov, M. N. Volochaev, R. N. Yaroslavtsev, V. P. Ladygina, D. A. Velikanov, and R. S. Iskhakov, J. Alloys Compd. **889**, 161623 (2021).

38. D. A. Balaev, S. V. Stolyar, Yu. V. Knyazev, R. N. Yaroslavtsev, A. I. Pankrats, A. M. Vorotynov, A. A. Krasikov, D. A. Velikanov, O. A. Bayukov, V. P. Ladygina, and R. S. Iskhakov, Results Phys. **35**, 105340 (2022).

39. Yu. V. Knyazev, D. A. Balaev, S. A. Skorobogatov, D. A. Velikanov, O. A. Bayukov, S. V. Stolyar, R. N. Yaroslavtsev, and R. S. Iskhakov, Phys. Rev. B **107**, 115413 (2023).

40. A. A. Krasikov, Yu. V. Knyazev, D. A. Balaev, D. A. Velikanov, S. V. Stolyar, Yu. L. Mikhlin, R. N. Yaroslavtsev, and R. S. Iskhakov, Physica B **660**, 414901 (2023).

41. Д. А. Великанов, Вестник СибГАУ **2(48)**, 176 (2013).

42. А. Д. Балаев, Ю. В. Бояршинов, М. М. Карпенко, Б. П. Хрусталев, ПТЭ **3**, 167 (1985).

43. J. Zhao, F. E. Huggins, Z. Feng, and G. P. Huffman, Phys. Rev. B **54**, 3404 (1996).

44. S. V. Stolyar, D. A. Balaev, V. P. Ladygina, A. A. Dubrovskiy, A. A. Krasikov, S. I. Popkov, O. A. Bayukov, Yu. V. Knyazev, R. N. Yaroslavtsev, M. N. Volochaev, R. S. Iskhakov, K. G. Dobretsov, E. V. Morozov, O. V. Falaleev, E. V. Inzhevatkin, O. A. Kolenchukova, and I. A. Chizhova, J. Supercond. Nov. Magn. **31**, 2297 (2018).

45. J. Fock, M. F. Hansen, C. Frandsen, and S. Mørup, J. Magn. Magn. Mater. **445**, 11 (2018).

46. E. M. Chudnovsky, WM. Saslow, and R. A. Scrota, Phys. Rev. B **33**, 251 (1986).

47. J. C. Denardin, A. L. Brandl, M. Knobel, P. Panissod, A. B. Pakhomov, H. Liu, and X. X. Zhang, Phys. Rev. B **65**, 064422 (2002).

48. Д. А. Балаев, С. И. Попков, А. А. Красиков, А. Д. Балаев, А. А. Дубровский, С. В. Столяр, Р. Н. Ярославцев, В. П. Ладыгина, Р. С. Исхаков, ФТТ **59**, 1920 (2017).

49. А. А. Красиков, Д. А. Балаев, ЖЭТФ **163**, 115 (2023).

50. A. Aharoni, J. Appl. Phys. **61**, 3302 (1987).

51. F. Bødker, S. Mørup, and S. Linderoth, Phys. Rev. Lett. **72**, 282 (1994).

52. J. Mohapatra, M. Xing, J. Elkins, J. Beatty, and J. Ping Liu, J. Phys. D: Appl. Phys. **53**, 504004 (2020).

53. D. A. Balaev, I. S. Poperechny, A. A. Krasikov, S. V. Semenov, S. I. Popkov, Y. V. Knyazev, V. L. Kirillov, S. S. Yakushkin, O. N. Martyanov, and Yu. L. Raikher, J. Phys. D: Appl. Phys. **54**, 275003 (2021).

54. R. D. Zysler, M. Vasquez Mansilla, D. Fiorani, Eur. Phys. J. B **41**, 171 (2004).

55. M. P. Proenca, C. T. Sousa, A. M. Pereira, P. B. Tavares, J. Ventura, M. Vazquez, and J. P. Araujo, Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 9561 (2011).

56. X. Batlle and A. Labarta, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**, R15 (2002).

57. C.-R. Lin, R.-K. Chiang, J.-S. Wang, and T.-W. Sung, J. Appl. Phys. **99**, 08N710 (2006).

58. Ю. В. Князев, Д. А. Балаев, В. Л. Кириллов, О. А. Баюков, О. Н. Мартьянов, Письма в ЖЭТФ **108**, 558 (2018).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1039–1055 © 2023

ИНЖЕКЦИЯ СПИНА ДВИЖУЩЕЙСЯ ДОМЕННОЙ СТЕНКОЙ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ИЗОЛЯТОРА С ДВУМЕРНЫМ МЕТАЛЛОМ

А. Г. Мальшуков *

Институт спектроскопии Российской академии наук
108840, Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 февраля 2023 г.,
после переработки 30 мая 2023 г.
Принята к публикации 31 мая 2023 г.

Показано, что доменная стенка, движущаяся параллельно магнитно-компенсированной границе между антиферромагнитным изолятором и двумерным металлом, способна инжектировать спиновую поляризацию в металл. При этом предполагается, что локализованные спины изолятора взаимодействуют со спинами электронов проводимости с помощью обменного взаимодействия на границе раздела. Использован формализм неравновесных гриновских функций для электронов, испытывающих потенциальное и спин-орбитальное рассеяние на случайных примесях. Этот формализм позволяет исследовать эффекты, обусловленные инжекцией, диффузией и релаксацией спиновой плотности в двумерном газе электронов. Показано, что инжекция макроскопической намагниченности в металлическую пленку осуществляется во втором порядке теории возмущений по обменному взаимодействию на границе раздела. При достаточно слабой спиновой релаксации инжектированная намагниченность может оказаться значительно сильнее магнетизма Паули, который обусловлен слабым ферромагнитным обменным полем. Это поле создается движущейся доменной стенкой в антиферромагнитном изоляторе и ориентирует спины электронов металла уже в первом порядке теории возмущений. Показано, что вызванная доменной стенкой спиновая поляризация чувствительна к геометрии поверхности Ферми и сильно возрастает при приближении энергии Ферми к сингулярности Ван Хова, если волновой вектор обратной магнитной решетки антиферромагнетика близок к вектору конгруэнтности поверхности (линии) Ферми. Показано, что спиновая поляризация следует за движением доменной стенки, распределяясь при этом асимметрично около нее на расстояния, которые могут быть гораздо больше, чем толщина доменной стенки.

DOI: 10.31857/S0044451023120179

EDN: MYBQCA

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время антиферромагнетики (АФМ) привлекли к себе возрастающее внимание из-за перспективы их применения во многих приложениях спинтроники. Одной из важнейших характеристик устройств, использующих спиновый транспорт, является их способность передавать и контролировать спиновую поляризацию. С этой точки зрения АФМ-материалы демонстрируют немало интересных свойств. Результаты исследований в этой области были изложены в нескольких обзорах (например, [1–4]). Значительный прогресс был достигнут в понимании механизмов передачи углового момента между локализованными спинами и электронами проводимости в металлических АФМ, так же как и транспорта углового момента через границу раздела металла и АФМ-изолятора (АФМИ) или АФМ [5–11]. Эти механизмы позволяют контролировать как локализованные спины АФМ, так и спины электронов проводимости. Например, как следует из недавних экспериментов, спиновый ток электронов может вызвать поворот магнитных моментов АФМ [4, 12–14]. И наоборот, когда неелевский дальний порядок меняется во времени, угловой момент может передаваться через границу раздела электронам парамагнитного металла, контактирующего с АФМ [6, 15]. При этом спиновая поляризация мо-

* E-mail: malsh@isan.troitsk.ru

жет доставляться к этой границе спиновыми волнами [6, 16–18] или движущимися магнитными текстурами нетривиальной топологии, такими как доменные стенки (ДС) и скирмионы. По сравнению с ферромагнетиками, в АФМ спиновые волны и топологические спиновые текстуры проявляют намного более быструю динамику с меньшей диссипацией энергии. Например, в АФМИ спиновые волны способны пробегать большие (субмикронные) расстояния благодаря их относительно большому времени жизни [19], тогда как ДС могут двигаться гораздо быстрее, чем в ферромагнетиках [20–24]. Эти выдающиеся свойства АФМ и АФМИ создают базис для их будущего применения в спинтронике.

До сих пор основные усилия в исследовании спинового транспорта из АФМИ в парамагнитный металл были сосредоточены на трехмерных металлах. С другой стороны, большой интерес привлекают к себе двумерные гетероструктуры, которые состоят из магнитных материалов и двумерных металлов. Главным образом этот интерес вызван прогрессом в создании новых разнообразных двумерных ван-дерваальсовых металлов и изоляторов. Однако проблема инжекции спина (спиновой накачки) в двумерный металл посредством движущейся в АФМИ магнитной текстуры не была затронута в литературе.

В то же время есть существенные различия в том, как этот эффект проявляется в двумерных и трехмерных системах. Прежде всего двумерные электроны взаимодействуют с локализованными спинами на поверхности раздела, которые образуют текстуру той же пространственной размерности, что и газ электронов проводимости. Таким образом, интерференция зависящих от спина когерентных амплитуд рассеяния на двух АФМ-подрешетках может привести к значительному возрастанию взаимодействия электронов проводимости с локализованными спинами АФМ. Этот эффект становится особенно заметным, когда поверхность (линия) Ферми имеет конгруэнтные участки, которые совмещаются при сдвиге на волновой вектор, отвечающий АФМ-порядку локализованных спинов на поверхности раздела. В то же время в трехмерных системах данный эффект ослаблен из-за интегрирования по волновому вектору, который перпендикулярен поверхности.

Еще одна особенность двумерной системы состоит в том, что транспорт электронов осуществляется вдоль границы раздела. Поэтому электроны всегда находятся в близком контакте со спинами АФМ, в то время как в трехмерных металлах угловой момент, полученный электронами от динамической текстуры АФМИ, уносится ими в глубь металла. Поэтому такой металл может рассматриваться как спиновый резервуар. В этом случае транспорт углового момента через поверхность раздела определяется так называемой смешанной проводимостью [6, 25], которая представляет собой локальный параметр, относящийся к данной поверхности. Такого рода подход не пригоден для анализа переноса спина через границу раздела между АФМИ и двумерным металлом, так как данный процесс тесно связан с транспортом электронов вдоль поверхности. Поэтому требуется унифицированная теория, которая учитывает квантовую динамику двумерного газа электронов и их взаимодействие с локализованными спинами АФМ с зависящей от времени и пространственных координат спиновой структурой.

При решении этой задачи будет использован формализм неравновесных функций Грина [26] для «грязного» двумерного металла, электроны в котором взаимодействуют с локализованными спинами АФМИ посредством обменного взаимодействия J. Этот подход будет применяться к проблеме инжекции спиновой плотности в металл посредством ДС, которая скользит вдоль магнитно-скомпенсированной поверхности раздела, как показано на рис. 1. Кроме потенциального рассеяния электронов на случайно распределенных примесях будет также учитываться их спин-орбитальное рассеяние. Последнее приводит к релаксации спиновой плотности электронов проводимости, в результате чего в диффузионном режиме распределение спиновой плотности расплывается и убывает во времени. Электроны будут рассматриваться в рамках простой модели сильной связи, где квадратные кристаллические решетки металла и АФМИ образуют соизмеримый контакт. Обменное взаимодействие рассматривается по теории возмущений, которую можно использовать когда $J \ll \mu$, где μ — химический потенциал электронов проводимости, отсчитанный от центра зоны проводимости, где располагаются сингулярность Ван Хова и вызванная обменным взаимодействием щель [1] в спектре электронов. Предполагается, что μ находится недалеко от данной щели.

В рамках теории возмущений накачка макроскопической спиновой поляризации под действием быстро меняющегося в пространстве АФМ-порядка осуществляется только при четных степенях J. С другой стороны, кроме такого быстро меняющегося в пространстве АФМ-спинового порядка, меняющаяся во времени АФМ-текстура сопровождается появлением слабой ферромагнитной упорядоченно-

сти вблизи движущейся ДС [27]. В свою очередь, такая макроскопическая намагниченность приводит к спиновой поляризации двумерного газа электронов уже в первом порядке по J (магнетизм Паули). Однако, как будет показано ниже, при соответствующем подборе параметров, эффект, вызванный вторым порядком теории возмущений, может существенно превзойти магнетизм Паули, так как эти оба явления обусловлены сильно отличающимися физическими механизмами. Действительно, в первом случае угловой момент, который переносит ДС, переносится также через границу раздела и передается электронам. Этот процесс сопровождается увеличением спиновой поляризации электронов проводимости вблизи ДС, причем спиновая плотность тем больше, чем больше время релаксации спина. Наоборот, эффект первого порядка представляет собой намагниченность Паули, созданную «ферромагнитным» обменным полем в окрестности ДС. Данная спиновая поляризация не зависит существенным образом от времени спиновой релаксации.

Статья построена следующим образом. Во втором разделе излагается общий формализм, относящийся к вычислению спиновой поляризации двумерного грязного газа электронов под действием движущейся АФМ ДС. Третий раздел посвящен расчету спиновой поляризации. Результаты обсуждаются в последнем разделе. Детали вычислений приведены в Приложениях.

2. ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ

2.1. Основные уравнения

В данном разделе спиновая поляризация двумерного газа электронов будет выражена согласно теории возмущений по обменному взаимодействию спинов электронов проводимости с локализованными спинами АФМИ. Предполагая, что двумерная кристаллическая решетка металла находится в контакте с поверхностной решеткой атомов АФМ, обменное взаимодействие можно записать в виде

$$M = J\sum_i c_i^\dagger \mathbf{S}_i(t)\cdot\boldsymbol{\sigma} c_i, \tag{1}$$

где $c_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$ — двухкомпонентный оператор рождения электронов с проекциями спина вверх ($\uparrow$) или вниз ($\downarrow$), а оператор уничтожения c_i эрмитово сопряжен оператору рождения $c_i^\dagger$. Вектор $\mathbf{S}_i(t)$ представляет собой спин, который локализован на узле решетки $\mathbf{r}_i$, а $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор, составленный из матриц Паули. Так как имеются две подрешетки, их узлы будут обозначаться как $i1$ и $i2$. Соответственно, $\mathbf{S}_{i1}$ и $\mathbf{S}_{i2}$ обозначают локализованные на этих узлах спины. Эти спины рассматриваются здесь как классические переменные, которые удовлетворяют ограничению $|\mathbf{S}_i(t)| = S$. Считается, что $\mathbf{S}_i$ меняются медленно в каждой из двух АФМ-подрешеток. Поэтому можно рассматривать два векторных поля, $\mathbf{m}_1(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{m}_2(\mathbf{r},t)$, которые определены на подрешетках 1 и 2, где $\mathbf{m}_{1(2)}(\mathbf{r}_i,t) = \mathbf{S}_{i1(2)}/S$. Неелевский порядок задается векторным полем

$$\mathbf{n}(\mathbf{r},t) = \frac{\mathbf{m}_1(\mathbf{r},t) - \mathbf{m}_2(\mathbf{r},t)}{|\mathbf{m}_1(\mathbf{r},t) - \mathbf{m}_2(\mathbf{r},t)|},$$

причем $|\mathbf{n}(\mathbf{r},t)| = 1$. Из-за сильного обменного взаимодействия между спинами двух подрешеток имеет место соотношение $\mathbf{m}_1(\mathbf{r},t) \simeq -\mathbf{m}_2(\mathbf{r},t)$. Поэтому макроскопическое поле

$$\mathbf{m}(\mathbf{r},t) = (\mathbf{m}_1(\mathbf{r},t) + \mathbf{m}_2(\mathbf{r},t))/2 \ll 1.$$

В этом случае, исходя из уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта, можно показать, что $\mathbf{m}$ выражается через $\mathbf{n}$ как [27]

$$\mathbf{m}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{E_{ex}}\partial_t \mathbf{n}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{n}(\mathbf{r},t), \tag{2}$$

где E_{ex} — обменная энергия ближайших спинов АФМ. Далее, выражая операторы c_i как

$$c_i = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i),$$

матричные элементы обменного взаимодействия в уравнении (1) можно выразить через $\mathbf{n}_\mathbf{f}(t)$ и $\mathbf{m}_\mathbf{f}(t)$, которые представляют собой зависящие от волнового вектора $\mathbf{f}$ пространственные компоненты Фурье этих полей. Эти матричные элементы имеют вид

$$M_{\mathbf{k}+\mathbf{f},\mathbf{k}}(t) = JS[c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{f}+\mathbf{G}}\mathbf{n}_\mathbf{f}(t)\cdot\boldsymbol{\sigma}c_\mathbf{k} + c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{f}}\mathbf{m}_\mathbf{f}(t)\cdot\boldsymbol{\sigma}c_\mathbf{k}], \tag{3}$$

где $\mathbf{G} = (G_x, G_y)$ — вектор переброса, связанный с АФМ-порядком в АФМИ. Для квадратной решетки имеем

$$G_x = \pm\pi/a, \quad G_y = \pm\pi/a.$$

В то же время вектор $\mathbf{f}$ мал, а именно, $f \ll 1/a$, где a — постоянная кристаллической решетки. Это имеет место потому, что относительно плавное пространственное изменение полей $\mathbf{n}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{m}(\mathbf{r},t)$ определяется спиновой текстурой ДС, толщина которой предполагается намного большей, чем a.

Спиновая плотность электронов может быть выражена через гриновскую функцию Келдыша

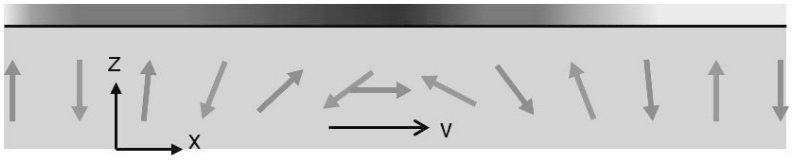


Рис. 1. (В цвете онлайн.) Двуслойная система состоит из АФМИ и двумерной пленки парамагнитного металла. ДС, движущаяся слева направо со скоростью v, приводит к накоплению спиновой плотности в металлической пленке. Инжектированный спин ориентирован параллельно оси y. Спиновая плотность (показана цветом) асимметрично распределена вокруг ДС на расстоянии, которое может быть существенно больше ее толщины

$G^K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ [26,28], которая представляет собой 2×2-матрицу в пространстве спиновых переменных. Соответствующее выражение имеет вид

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t) = -\frac{i}{4}\mathrm{Tr}[\boldsymbol{\sigma}\langle G^K(\mathbf{r},t;\mathbf{r},t)\rangle_{imp}], \qquad (4)$$

где $\langle\ldots\rangle_{imp}$ обозначает усреднение по положениям примесей. В свою очередь, используя теорию возмущений по обменному взаимодействию M, функцию Келдыша можно выразить в виде разложения по степеням J. Соответствующую поправку $\delta G^K(\mathbf{q},\omega)$ к пространственно-временной компоненте Фурье функции $G^K(\mathbf{r},t;\mathbf{r},t)$, где $\mathbf{q}$ и ω обозначают волновой вектор и частоту, можно выразить через невозмущенные гриновские функции $G^K_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon)$, $G^r_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon)$ и $G^a_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon)$, которые соответственно представляют собой келдышевскую, запаздывающую и опережающую функции. Эти функции не усреднены по положениям примесей. Поэтому кроме энергии ϵ они зависят от двух волновых векторов, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$. Они могут быть представлены в виде 2×2-матрицы

$$\hat{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon) = \begin{bmatrix} G^r_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon) & G^K_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon) \\ 0 & G^a_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon) \end{bmatrix}, \qquad (5)$$

где в термодинамическом равновесии функция $G^K_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon)$ имеет вид

$$G^K_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon) = \left(G^r_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon) - G^a_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\epsilon)\right)\mathrm{th}(\epsilon/2k_BT). \qquad (6)$$

Согласно теории неравновесных функций Келдыша [26,28], поправку $\delta G^K(\mathbf{q},\omega)$ можно записать как

$$\delta G^K(\mathbf{q},\omega) = \int\frac{d\epsilon}{2\pi}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{p}'}\Big[\hat{G}_{\mathbf{k}^+,\mathbf{p}^+}\left(\epsilon^+\right)\times \\ \times\,\hat{\Sigma}_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\epsilon,\omega,\mathbf{q})\hat{G}_{\mathbf{p}'^-,\mathbf{k}^-}\left(\epsilon^-\right)\Big]^K, \qquad (7)$$

где $\epsilon^\pm = \epsilon \pm \omega/2$, $\mathbf{k}^\pm = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$, а верхний индекс «$K$» обозначает келдышевскую компоненту произведения матриц в (7). Выполнив преобразование Фурье зависящих от времени функций $\mathbf{n}_\mathbf{f}(t)$ и $\mathbf{m}_\mathbf{f}(t)$ в уравнении (3), можно выразить $\hat{\Sigma}$ в виде

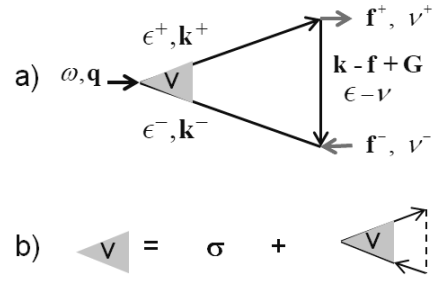


Рис. 2. (В цвете онлайн.) *a*) Фейнмановская диаграмма второго порядка для спиновой плотности $\mathbf{S}(\mathbf{q},\epsilon)$, созданной движущейся ДС. Красные стрелки показывают взаимодействие с ДС (3), $\mathbf{k}^\pm = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$, $\mathbf{f}^\pm = \mathbf{f} \pm \mathbf{q}/2$, $\epsilon^\pm = \epsilon \pm \omega/2$ и $\nu'^\pm = \nu' \pm \omega/2$. *b*) Уравнение Бете–Солпитера для спиновой вершины $\mathbf{V}$, где $\boldsymbol{\sigma}$ — вектор, составленный из матриц Паули. Упругое рассеяние на примесях показано штриховой линией

$$\hat{\Sigma}_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\epsilon,\omega,\mathbf{q}) = \hat{\Sigma}^{(1)}(\omega,\mathbf{q})\delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} + \\ + \int\frac{d\nu}{2\pi}\sum_{\mathbf{f}}\hat{\Sigma}^{(2)}_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,\mathbf{f}), \qquad (8)$$

где собственно-энергетические функции $\hat{\Sigma}^{(1)}$ и $\hat{\Sigma}^{(2)}$ соответствуют поправкам первого и второго порядков. Они имеют вид

$$\hat{\Sigma}^{(1)}(\omega,\mathbf{q}) = \hat{1}JS\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{m}_{\mathbf{q},\omega} \qquad (9)$$

и

$$\hat{\Sigma}^{(2)}_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,\mathbf{f}) = 2J^2S^2\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+}\right)\times \\ \times\,\hat{G}_{\mathbf{p}-\mathbf{f}+\mathbf{G},\mathbf{p}'-\mathbf{f}+\mathbf{G}}(\epsilon-\nu)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}), \qquad (10)$$

где $\nu^\pm = \nu \pm \omega/2$, $\mathbf{f}^\pm = \mathbf{f} \pm \mathbf{q}/2$ и $\hat{1}$ обозначает единичную матрицу в пространстве келдышевских переменных.

Поправка второго порядка по J к спиновой плотности $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ показана в виде диаграммы Фейнмана на рис. 2*a*, тогда как слагаемое первого порядка имеет вид обычной фермионной петли. Усреднение в уравнении (4) по случайным положениям примесей

приводит [29] к появлению средних функций Грина и вершинной части $\mathbf{V}$ на рис. 2. Эта вершина учитывает многократное рассеяние частиц, которое вызывает диффузию и релаксацию спиновой плотности. В рамках борновского приближения вычисление $\mathbf{V}$ сводится к решению уравнения Бете – Солпитера, которое графически изображено на рис. 2*b*. Процессы многократного рассеяния становятся важны, когда передача энергии и импульса в вершине оказывается много меньше, чем $\Gamma = 1/2\tau$ и $\Gamma = 1/l$, где τ и l — соответственно время и длина свободного пробега электронов. Поэтому на рис. 2 видно, что диффузионный режим осуществляется, когда $\omega \ll \Gamma$ и $q \ll 1/l$. В то же время вершины, отвечающие обменному взаимодействию электронов с локализованными спинами (обозначены красными стрелками на рис. 2), не чувствительны к процессам многократного рассеяния, так как там имеет место передача большого импульса переброса (порядка $\mathbf{G}$) из-за АФМ-упорядочения этих спинов. Используя уравнения (5), (6) и уравнения (9), (10), можно выразить $\langle \delta G^K \rangle_{imp}$ в соотношении (7) и функцию $\mathbf{S}(\mathbf{q}, \omega)$, которая представляет собой фурье-преобразованное выражение (4), через усредненные по примесям запаздывающие и опережающие гриновские функции. Спиновая поляризация может быть записана как сумма слагаемых, одни из которых можно представить как сумму содержащих вершины $\mathbf{V}$ слагаемых и слагаемых, которые не содержат их. Первые будут обозначаться как $\mathbf{S}_V(\mathbf{q}, \omega)$. Эта функция включает в себя только те вершины, которые содержат произведения запаздывающих и опережающих функций Грина в лестничных диаграммах на рис. 2*b*. В иных случаях перенормировка вершин не имеет места [29], и мы имеем неперенормированную вершину $\boldsymbol{\sigma}$ вместо $\mathbf{V}$. Соответствующий вклад в $\mathbf{S}(\mathbf{q}, \omega)$ будет обозначаться как $\mathbf{S}_0(\mathbf{q}, \omega)$. Все члены, которые получаются из произведения келдышевских матриц в уравнении (7), можно сгруппировать в виде

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_V^{(1)} + \mathbf{S}_V^{(2)} + \mathbf{S}_0^{(1)} + \mathbf{S}_0^{(2)},$$

где верхние индексы «(1)» и «(2)» указывают на то, что соответствующее слагаемое происходит от $\hat{\Sigma}^{(1)}$, или $\hat{\Sigma}^{(2)}$ в уравнении (7). Детали вычислений представлены в Приложении B.

Уравнения (31)–(37) в Приложении B составляют основу для вычисления спиновой плотности, создаваемой ДС в двумерном газе. Слагаемые в уравнениях (31) и (32) представляют собой спиновую плотность, обусловленную взаимодействием $JS\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{q},\omega}$ электронов с макроскопическим зеемановским полем $JS\mathbf{m}_{\mathbf{q},\omega}$. Она выражается через зависящую от времени и пространства спиновую восприимчивость Паули, которая представлена фермионной петлей, где диффузия спиновой плотности стандартным образом учитывается введением вершинной функции $\mathbf{V}$ [28, 29]. В то же время уравнения (33) и (34) описывают эффект, природа которого существенно отличается от магнетизма Паули. Они описывают процесс второго порядка, где пространственные изменения локализованных спинов с волновым вектором $\mathbf{G}$ обратной решетки АФМ вызывают квантовые переходы электронов проводимости между состояниями с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} + \mathbf{G}$. ДС с относительно плавно меняющимся неелевским вектором $\mathbf{n}_\mathbf{f}$, где $f \ll G$, добавляет $\mathbf{f}$ к $\mathbf{G}$. Поэтому амплитуда рассеяния второго порядка на ДС, представленная функцией $G^i_{\mathbf{k}-\mathbf{f}+\mathbf{G}}$ в уравнении (37), пропорциональна $(E_{\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{f}} - E_\mathbf{k})^{-1}$. В этом выражении вектор $\mathbf{k}$ близок к поверхности Ферми. Соответственно, величина $(E_{\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{f}} - E_\mathbf{k})^{-1}$ растет, если поверхность Ферми имеет участки, которые близки к условию конгруэнтности, отвечающей вектору $\mathbf{G}$. Это способствует усилению в уравнениях (33) и (34) эффекта второго порядка теории возмущений по обменному взаимодействию. Более того, это усиление становится зависящим от $\mathbf{f}$, хотя этот вектор и намного меньше, чем $\mathbf{G}$. С другой стороны, эта зависимость исчезает, когда поверхность Ферми далека от условий конгруэнтности. В этом случае амплитуда рассеяния может быть разложена по степеням $\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{f}$, где $\mathbf{v}_F$ — скорость электронов на поверхности Ферми. Так как вектор $\mathbf{f}$ связан с координатной зависимостью неелевского параметра порядка, такого рода разложение генерирует появление в спиновой плотности градиентных членов вида $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t) \times \nabla^i \mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$. Такого вида члены, где вместо $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$ фигурирует ферромагнитный параметр дальнего порядка, обсуждались при рассмотрении накачки спина ферромагнитной ДС в трехмерную пленку металла [30]. Однако, как показано в Приложении B, в случае АФМ такого рода градиентные члены не оказывают существенного влияния.

2.2. Влияние беспорядка

В данном разделе будет рассмотрено влияние случайных примесей на спиновый транспорт в двумерном газе электронов. Помимо обычного потенциального рассеяния на примесях будет также учитываться спин-орбитальное рассеяние. Последнее приводит к релаксации спина электронов. Рассматривая короткодействующий потенциал взаимодействия примесей с электронами, амплитуду рассея-

ния на одиночной примеси можно записать в виде [31]

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = s + ib\boldsymbol{\sigma}\cdot[\mathbf{k}\times\mathbf{k}']. \tag{11}$$

Первое слагаемое в этом соотношении представляет собой изотропную и не зависящую от спина амплитуду, тогда как второе — амплитуду спин-орбитального рассеяния. В двумерной системе оба волновых вектора электронов, падающего $\mathbf{k}$ и рассеянного $\mathbf{k}'$, принадлежат плоскости xy. Поэтому в амплитуду спин-орбитального рассеяния в уравнении (11) входит только матрица Паули σ_z. Следовательно, вероятность рассеяния в борновском приближении теории возмущений не зависит от спина. Как следует из работы [31], полную скорость рассеяния электронов на примесях, Γ, можно выразить в виде суммы зависящих и не зависящих от спина каналов рассеяния. Из соотношения (11) следует, что

$$\Gamma = \frac{1}{2\tau} = \pi N_F\left(s^2 + \frac{k_F^4}{2}b^2\right), \tag{12}$$

где τ — время свободного пробега электрона между упругими столкновениями, а N_F и k_F — плотность состояний и волновой вектор электронов на поверхности Ферми соответственно. При этом усредненная по примесям запаздывающая функции Грина принимает вид [31]

$$G^r_{\mathbf{k}}(\omega) = (G^a_{\mathbf{k}}(\omega))^* = \frac{1}{\omega - E_{\mathbf{k}} - \mu + i\Gamma}. \tag{13}$$

При рассмотрении диффузии частиц и релаксации спина следует учитывать процессы их многократного рассеяния. Эти процессы можно учесть с помощью вершинной функции $\mathbf{V}(\omega,\mathbf{q})$ в уравнениях (31) и (33) Приложения В. Так как усредненные гриновские функции в уравнении (13) не зависят от спина, вершину $\mathbf{V}$ можно легко вычислить путем суммирования лестничных диаграмм. При этом удобно использовать ее векторные компоненты V^l ($l = x, y, z$), которые выражаются как

$$V^l\mathbf{e}^l = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\mathbf{V}\sigma^l], \quad l = x, y, z,$$

где $\mathbf{e}^l$ — единичный вектор в направлении l. Детальное вычисление V^l изложено в Приложении А. В рамках диффузионного приближения, которое справедливо при $\omega \ll \Gamma$ и $qv_F \ll \Gamma$, сумма лестничных диаграмм приводит к

$$V^l(\omega,\mathbf{q}) = \frac{2\Gamma}{i\omega - Dq^2 - \Gamma_s^l}, \tag{14}$$

где, как следует из уравнения (29) в Приложении А, скорости спиновой релаксации Γ_s^l определены соотношениями

$$\Gamma_s^x = \Gamma_s^y = \pi N_F k_F^4 b^2, \quad \Gamma_s^z = 0,$$

а коэффициент диффузии $D = v_F^2\tau/2$. Следует отметить, что спиновая релаксация обращается в нуль, когда $l = z$ в уравнении (14). Это происходит потому, что проекция спина на ось z сохраняется из-за специфической формы амплитуды спин-орбитального рассеяния, которая в двумерных системах пропорциональна σ_z. В этой ситуации должны приниматься во внимание другие механизмы спиновой релаксации, которые намного слабее, чем рассматриваемое спин-орбитальное рассеяние. Однако такой канал спиновой релаксации, как рассеяние на магнонах АФМИ с одноосной анизотропией, может оказаться эффективным только при достаточно высокой температуре, тогда как при низких температурах этот неупругий механизм ослаблен из-за ферми-жидкостного поведения электронного газа даже в отсутствие щели в спектре магнонов. То же самое можно сказать относительно спин-решеточной релаксации электронов. Спин-орбитальное расщепление зоны проводимости могло бы привести к релаксации спина Дьяконова–Переля [32]. В рассматриваемой здесь простой модели спин-орбитальная связь не рассматривается. Тем не менее некоторое конечное значение Γ_s^z может учитываться в качестве феноменологического параметра.

3. СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

3.1. Спиновая накачка, вызванная антиферромагнитно-упорядоченной намагниченностью доменной стенки

Основываясь на изложенном в предыдущем разделе формализме, рассмотрим спиновую поляризацию, которая создается в нормальном металле обменным взаимодействием с АФМИ в присутствии движущейся ДС. В разд. 2.1 было показано, что спиновая поляризация двумерного металла определяется двумя механизмами. А именно, существует макроскопическое «ферромагнитное» обменное поле, которое оказывает поляризующее влияние на электроны в первом порядке теории возмущений по J, а также имеет место эффект второго порядка, обусловленный быстро меняющейся в пространстве АФМ-намагниченностью. Этот эффект, кото-

рый представлен уравнениями (33) и (34) в Приложении B, рассмотрен в данном разделе.

В рамках классической теории неелевский вектор $\mathbf{n}(\mathbf{r},t)$ рассматриваемой здесь ДС определяется известным одномерным решением уравнения движения в АФМ с легкой осью [33, 34]. Предполагается, что прецессия этого вектора вокруг легкой оси отсутствует, что, однако, зависит от способа возбуждения движения ДС. Например, если ее движение обусловлено потоком магнонов [35, 36], то это могло бы вызвать прецессию неелевского вектора. В других случаях азимутальный угол вектора $\mathbf{n}(\mathbf{r},t)$ остается неизменным во времени. Поляризация спина электронов металла, которая может создаваться такой ДС, существенным образом зависит от этого угла. Это становится понятным из следующего рассуждения. Из-за того, что $\hat{G}$ в уравнении (10) не зависит от спина, поскольку запаздывающая G^r и опережающая G^a функции в уравнении (13) не зависят от него, спиновая структура функции $\hat{\Sigma}$ в уравнении (10) определяется произведением $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-})$. Спин-зависящая часть произведения равна $i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+}\times\mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-})$. Поэтому матрица $\boldsymbol{\sigma}$ в этом уравнении перпендикулярна к плоскости, в которой располагается меняющийся во времени неелевский вектор. В то же время этот вектор фиксирован своим заданным азимутальным углом. В свою очередь, как следует из уравнений (33), (35) и (14), вычислив след матрицы в (33), можно убедиться в том, что данное направление спина совпадает с направлением вершинной функции $\mathbf{V}$. Важно, что ее векторные компоненты зависят от соответствующих времен релаксации. Например, если $\mathbf{n}(\mathbf{r},t)$ принадлежит плоскости xy, скорость релаксации спиновой плотности, наведенной в двумерном газе, равна Γ^z_s. Эта скорость, как показано выше, может оказаться намного меньше, чем Γ^x_s и Γ^y_s, если главным механизмом спиновой релаксации является спин-орбитальное рассеяние на примесях. Здесь, однако, рассматривается иной случай, когда легкая ось параллельна оси z, тогда как ДС двигается в направлении x со скоростью v. В этом случае вектор $\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+}\times\mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}$ принадлежит плоскости xy. Поэтому в диффузионный пропагатор (14) входят скорости спиновой релаксации Γ^x_s и Γ^y_s. В отсутствие прецессии вокруг легкой оси вектор Нееля записывается в сферических координатах как

$$\mathbf{n}(\mathbf{r},t)=(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta), \qquad (15)$$

где

$$\cos\theta=\mathrm{th}[(x-vt)/\lambda],$$

λ — толщина ДС, а угол ϕ фиксирован. Ниже, для простоты, мы выберем $\phi=0$ (ДС Нееля). В этом случае функции P^{ijk} в уравнении (35) пропорциональны матрице Паули σ^y. В результате, вычислив след в уравнениях (33) и (34), получим

$$\mathrm{Tr}[\mathbf{V}\sigma^y]=2V^y\mathbf{e}^y.$$

Таким образом, инжектированная в металл спиновая плотность направлена параллельно y.

Параметры рассматриваемой системы выбраны таким образом, что волновые векторы q и f в уравнениях (7)–(10) намного меньше, чем k_F, а частоты ω и ν намного меньше химического потенциала μ, отсчитываемого от середины зоны проводимости. Для двигающейся с постоянной скоростью ДС переменные ω и q, так же как ν и f, связаны друг с другом. Действительно, векторы $\mathbf{n}_{\mathbf{f}^\pm,\nu^\pm}$ в уравнении (10) можно представить в виде

$$\mathbf{n}_{\mathbf{f}^\pm,\nu^\pm}=2\pi\delta(\nu^\pm-vf^\pm_x)\int d\xi\exp(-if^\pm_x\xi)\mathbf{n}(\xi), \quad (16)$$

где $\xi=x-vt$. Дельта-функция в этом соотношении фиксирует частоты согласно $\nu^\pm=vf^\pm_x$. Из комбинации уравнений

$$\nu^\pm=\nu\pm\omega/2, \quad f^\pm_x=f_x\pm q_x/2$$

следует, что

$$\nu=vf_x, \quad \omega=vq_x.$$

Отметим, что переменные ω и q характеризуют диффузию электронов, так как диффузионный пропагатор (14) зависит от этих переменных. В то же время ν и f связаны с пространственно-временной зависимостью вектора $\mathbf{n}(\mathbf{r},t)$ внутри ДС. Интегрирование по волновым векторам и частотам в уравнении (33) можно упростить при малых ω и ν, заменив $\mathrm{th}(\Omega/k_BT)$ в уравнении (35) на $\mathrm{th}(\Omega/k_BT)-\mathrm{th}(\epsilon/k_BT)$. Такая замена не меняет результат, так как те члены в (33), которые пропорциональны $\mathrm{th}(\epsilon/k_BT)$, сокращают друг друга. Поэтому, независимо от того, принимает ли Ω значение $\Omega=\epsilon\pm\omega/2$ или $\Omega=\epsilon+\nu$, при низких температурах интегрирование по энергии электрона ϵ ограничено ее малыми значениями. В результате главный вклад в уравнение (33) дают значения вектора k, которые близки к поверхности Ферми. В рассматриваемом случае гамильтониан электронов двумерного металла представлен простой моделью сильной связи на квадратной решетке. Соответственно, их энергия определяется выражением

$$E_{\mathbf{k}}=-\alpha(\cos k_xa+\cos k_ya),$$

где α определяет ширину зоны проводимости, которая равна 4α. Отметим, что в этом случае

$$E_{\mathbf{k}} = -E_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}.$$

Интегрируя уравнение (33) по $\mathbf{k}$, в главном приближении по малым параметрам $\omega/\Gamma, \nu/\Gamma, v_F q/\Gamma, v_F f/\Gamma$ и Γ/μ мы получим y-компоненту $S_V^{y(2)}(\omega, \mathbf{q})$ вектора $\mathbf{S}_V^{(2)}(\omega, \mathbf{q})$ в виде

$$S_V^{y(2)}(\omega, \mathbf{q}) = -i\frac{J^2 S^2}{\mu^2} V^y(\omega, \mathbf{q}) N_F(\mu) \times \\ \times \int \frac{d\nu}{2\pi} \sum_{\mathbf{f}} \nu [\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+} \times \mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}], \quad (17)$$

где $N_F(\mu)$ — плотность состояний электронов на поверхности Ферми. Детально, соответствующие вычисления можно найти в Приложении В. Из этих вычислений следует, что $S_V^{y(2)}$ дает главный вклад в спиновую плотность $\mathbf{S}^{(2)}$, представляющую собой сумму $S_0^{y(2)}(\omega, \mathbf{q})$ и $S_V^{y(2)}(\omega, \mathbf{q})$. Действительно, как следует из сравнения уравнений (34) и (33), эти функции отличаются друг от друга отсутствием в $S_0^{y(2)}(\omega, \mathbf{q})$ диффузионного пропагатора $V^y(\omega, \mathbf{q})$. Последний, однако, намного больше, чем 1, так как в диффузионном режиме частота упругих столкновений Γ велика по сравнению со знаменателем выражения (14). Следовательно, полная спиновая плотность

$$\mathbf{S}^{(2)} = \mathbf{S}_0^{(2)} + \mathbf{S}_V^{(2)} \simeq \mathbf{S}_V^{(2)}.$$

Важно отметить, что, как видно из уравнений (38), (40) и (42) в Приложении В, величина $\mathbf{S}^{(2)}$ оказывается пропорциональной μ^{-2}. Из-за того что химический потенциал отсчитывается от середины зоны, такая зависимость означает, что эффект накачки спина возрастает, когда μ приближается к сингулярности Ван Хова. Эта закономерность согласуется с указанным выше влиянием на инжекцию спина эффектов, обусловленных конгруэнтностью поверхности Ферми.

Отметим, что в случае движущейся в направлении x одномерной ДС вторую строку в уравнении (17) можно представить в виде

$$\int \frac{d\nu}{2\pi} \sum_{\mathbf{f}} \nu [\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+} \times \mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}] = 2\pi i v \times \\ \times \delta(\omega - v q_x) \delta_{q_y} \int d\xi e^{-iq_x \xi} \left[\mathbf{n}(\xi) \times \nabla_\xi \mathbf{n}(\xi)\right]. \quad (18)$$

Поэтому, полагая $\cos\theta = \mathrm{th}(\xi/\lambda)$ в соотношении (15), получим

$$\mathbf{n}(\xi) \times \nabla_\xi \mathbf{n}(\xi) = (1/\lambda)\,\mathrm{ch}^{-1}(\xi/\lambda).$$

Далее, основываясь на уравнениях (14), (17) и (18), пространственную зависимость спиновой плотности можно записать в виде

$$S^{y(2)}(\mathbf{r}, t) = S^{y(2)}(\xi) = S_V^{y(2)}(\xi),$$

где

$$S^{y(2)}(\xi) = \frac{J^2 S^2}{\mu^2} \int \frac{dq d\xi'}{2\pi\lambda} \frac{N_F v \Gamma}{\mathrm{ch}(\xi'/\lambda)} \frac{e^{iq(\xi-\xi')}}{Dq^2 - ivq + \Gamma_s^y}. \quad (19)$$

Вычисляя интеграл по q, получим

$$S^{y(2)}(\xi) = \frac{J^2 S^2}{2\mu^2} \frac{\Gamma N_F v}{\sqrt{v^2 + 4\Gamma_s^y D}} \int \frac{d\xi'}{\lambda} \frac{1}{\mathrm{ch}(\xi'/\lambda)} \times \\ \times \left(e^{-p_1|\xi-\xi'|}\theta(\xi-\xi') + e^{p_2|\xi-\xi'|}\theta(\xi'-\xi)\right), \quad (20)$$

где

$$p_1 = (1/2D)(v + \sqrt{v^2 + 4\Gamma_s^y D}), \\ p_2 = (1/2D)(v - \sqrt{v^2 + 4\Gamma_s^y D}).$$

Эти параметры определяют ширину диффузионного расплывания плотности спина впереди $(1/p_1)$ и позади $(1/p_2)$ центра ДС. На практике эти ширины намного больше, чем ширина ДС λ. Принимая во внимание, что $D \sim v_F^2 \tau$, из выражений для p_1 и p_2 следует, что $p_1\lambda \ll 1$ и $p_2\lambda \ll 1$, если $\max[v_F/v, 1/\sqrt{\Gamma_s \tau}] \gg \lambda/l$, где l — длина свободного пробега электронов. Допустим, что имеют место типичные соотношения $v_F/v \gg 1$ и $\Gamma_s \tau \ll 1$. Поэтому $p_1\lambda$ и $p_2\lambda$ малы, если отношение λ/l не слишком велико. В этом случае интегрирование по ξ' в (20) ограничено малым интервалом вокруг $\xi' = 0$. Следовательно, полагая $\xi' = 0$ в уравнении (20), его можно упростить до

$$S^{y(2)} = \frac{S^2 J^2}{2\mu^2} \frac{\pi \Gamma N_F v}{\sqrt{v^2 + 4\Gamma_s^y D}} \times \\ \times \left(e^{-p_1\xi}\theta(\xi) + e^{p_2|\xi|}\theta(-\xi)\right). \quad (21)$$

Отметим, что сингулярность производной от $S^y(\xi)$ при $\xi = 0$ исчезает, когда принимается во внимание реальный профиль ДС в интеграле по ξ'. Однако такие тонкие детали не важны на представляющих интерес расстояниях, которые намного больше, чем толщина ДС.

3.2. Спиновая поляризация, наведенная макроскопической намагниченностью доменной стенки

Спиновая поляризация, которая создается в нормальном металле «ферромагнитной» частью обменного поля ДС выражается уравнениями (31) и (32) из Приложения B. В случае одномерной ДС, движущейся со скоростью v в направлении x, имеем

$$\mathbf{m}(\mathbf{r},t)=\mathbf{m}(x-vt)\equiv\mathbf{m}(\xi).$$

Выполняя преобразование Фурье выражения $\mathbf{m}(\mathbf{r},t)$ в уравнении (2), можно убедиться в том, что его фурье-образ $\mathbf{m}_{\mathbf{q},\omega}$ равен правой части соотношения (18), умноженной на коэффициент $-i/E_{ex}$. Это выражение следует подставить в обменное взаимодействие (9), которое, в свою очередь, входит в уравнения (31) и (32) для спиновой плотности. Принимая во внимание уравнение (14), в главном приближении по отношению к малым параметрам ω/Γ и $v_F q_x/\Gamma$ спиновая плотность

$$S^{(1)}=S_V^{(1)}+S_0^{(1)}$$

может быть записана как

$$S^{y(1)}(\xi)=-i\frac{JS}{E_{ex}}N_F v\int\frac{dqd\xi'}{2\pi}\frac{e^{iq(\xi-\xi')}}{\lambda\,\mathrm{ch}(\xi'/\lambda)}\times\\ \times\left[\frac{vq}{Dq^2-ivq+\Gamma_s^y}-i\right]. \quad (22)$$

Как и в разд. 3.1, интегрирование по ξ' можно упростить на расстояниях от ДС, которые намного больше, чем λ. В результате получим

$$S^{y(1)}(\xi)=\frac{\pi JSN_F v}{E_{ex}}\times\\ \times\left(\delta(\xi)+\frac{vp_1e^{-p_1\xi}\theta(\xi)+vp_2e^{p_2|\xi|}\theta(-\xi)}{\sqrt{v^2+4\Gamma_s^y D}}\right). \quad (23)$$

Первое слагаемое в этом уравнении представлено дельта-функцией, поскольку представляют интерес относительно большие расстояния, в то время как вблизи ДС эта дельта-функция заменяется на $\pi^{-1}\lambda^{-1}\,\mathrm{ch}^{-1}(\xi/\lambda)$, как следует из второго слагаемого в квадратных скобках уравнения (22).

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Выше было показано, что движущаяся ДС в АФМИ вызывает накопление макроскопической спиновой плотности в двумерном металле, контактирующем с АФМ, причем контактирующая с металлом поверхность АФМИ считается магнитно-компенсированной. Спиновая плотность в металле представляет собой сумму двух частей, $\mathbf{S}^{(1)}$ и $\mathbf{S}^{(2)}$, у которых отличные от нуля (для неелевской ДС) y-компоненты определены уравнениями (20), (21) и (22), (23). Спиновая поляризация перпендикулярна плоскости вращения неелевского вектора внутри ДС. В рассматриваемом случае — это плоскость zx. Поэтому поляризация параллельна оси y. Спиновые плотности $\mathbf{S}^{(1)}$ и $\mathbf{S}^{(2)}$ имеют очень разную физическую природу. Так, $\mathbf{S}^{(1)}$ создается плавной частью обменного поля движущейся ДС. Она обусловлена магнетизмом Паули в первом порядке теории возмущений по обменному полю, в то время как $\mathbf{S}^{(2)}$ создается АФМ-упорядоченными спинами во втором порядке теории возмущений по J. Интересно сравнить эти два конкурирующих механизма. Рассмотрим накопленную в металле полную поляризацию (на единицу длины ДС). Интегрируя по x плотность спина в уравнениях (21) и (23), получим

$$S_{tot}^{y(1)}=\pi(JS/E_{ex})N_F v,\\ S_{tot}^{y(2)}=(J^2S^2/\mu^2)(\Gamma/\Gamma_s^y)N_F v.$$

Во-первых, следует отметить фундаментальную разницу между этими двумя эффектами. Эффект, обусловленный АФМ-порядком, приводит к полному спину $S_{tot}^{(2)}$, который формально расходится при $\Gamma_s\to 0$ [1)], в то время как $S_{tot}^{(1)}$ не зависит от времени релаксации спина. Причина состоит в том, что первый из механизмов осуществляет накачку (или инжекцию) спина в металл. В отсутствие релаксации спина такая накачка приведет к росту поляризации, которая может достичь насыщения только в присутствии спиновой релаксации. Во втором же случае макроскопическое обменное поле ориентирует спины электронов благодаря магнетизму Паули. Движение ДС приводит лишь к перераспределению спиновой плотности по металлической пленке. Из сравнения соотношений $S_{tot}^{y(1)}$ и $S_{tot}^{y(2)}$ видно, что механизм инжекции доминирует при $JS>(\Gamma_s^y/\Gamma)(\mu^2/E_{ex})$. Например, полагая $JS/\mu=0.1$ и $\mu\sim E_{ex}$, это неравенство можно удовлетворить при $\Gamma_s^y/\Gamma\lesssim 0.1$, что всегда имеет место, если спиновая релаксация определяется спин-орбитальным рассеянием. В этом случае Γ_s

[1)] Когда поляризация становится слишком большой, становится важным учитывать эффект обратной связи. Этот случай требует отдельного анализа.

определяется релятивистской поправкой к амплитуде рассеяния электронов, в то время как главная (нерелятивистская) часть этой амплитуды задает скорость релаксации импульса электронов Γ. Поэтому всегда $\Gamma_s \ll \Gamma$. Кроме того, ожидается, что химический потенциал μ намного меньше, чем ширина зоны проводимости, где имеет место сингулярность Ван Хова. В приведенной выше оценке соотношения двух эффектов предполагалось, что μ одного порядка величины с обменным взаимодействием локализованных спинов в АФМ, но намного больше, чем взаимодействие локализованных спинов со спинами электронов проводимости.

Важно иметь в виду, что последнее условие следует из теории возмущений по J. Действительно, невозмущенные гриновские функции, которые использовались выше при вычислении фейнмановских диаграмм, не учитывают взаимодействия J электронов с АФМ-порядком, не возмущенным ДС. С другой стороны, это взаимодействие приводит к возникновению щели в середине зоны проводимости [1, 5] и к изменению электронных волновых функций. Этими эффектами можно пренебречь только для достаточно далеких от середины зоны состояний электронов. При учете щели энергия электронов представлена двумя ветвями $\pm\sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 + S^2J^2}$. Поэтому очевидно, что связанные с этой щелью эффекты можно игнорировать, когда $S^2J^2 \ll \mu^2$ и $E_{\mathbf{k}} \approx \mu$. В этом состоит главное условие, ограничивающее силу эффектов, обусловленных вторым порядком теории возмущений, использующейся в данной работе.

Поскольку вызванный накачкой спиновой поляризации эффект доминирует, далее мы подробнее обсудим этот эффект. Как следует из уравнений (20) и (21), инжектированная спиновая поляризация распределена асимметрично относительно центра ДС. Хвост спиновой поляризации распространяется позади движущейся ДС на расстоянии $\sim p_2^{-1}$, которое растет вплоть до ∞, когда $v \gg v_F\sqrt{\Gamma_s\tau}$. В то же время впереди ДС спиновая плотность распределена в пределах расстояний $\sim p_1^{-1}$, которые всегда меньше, чем $l/\sqrt{(v^2/v_F^2) + \Gamma_s\tau}$. Величина индуцированной намагниченности максимальна в центре ДС. Из уравнения (21) следует, что

$$S^y(0) = N_F\Gamma\frac{J^2S^2}{\mu^2}\frac{v}{\sqrt{v^2 + 4\Gamma_s^y D}}. \qquad (24)$$

Эта поляризация обращается в нуль при $v = 0$ и достигает максимума, когда скорость ДС $v \gg \sqrt{\Gamma_s^y D} \sim v_F\sqrt{\Gamma_s^y\tau}$ с учетом того, что $D = v_F^2\tau/2$. Однако предполагается, что v не может превышать групповую скорость магнонов, играющую роль скорости света. При этом условии такой релятивистский эффект, как лоренцево сжатие ДС, может быть проигнорирован [34, 35]. Далее отметим, что S^y возрастает пропорционально μ^{-2} при $\mu \to 0$, где уровень Ферми приближается к середине зоны. Это положение μ соответствует условию конгруэнтности для поверхности Ферми, когда $E_{\mathbf{k}_F} = E_{\mathbf{k}_F+\mathbf{G}}$, что качественно согласуется с поведением амплитуды рассеяния электронов на спиновой текстуре АФМ, которое обсуждалось в разд. 2.1. Чтобы численно оценить эффект спиновой накачки, вызванный ДС, полезно сравнить его со спиновой поляризацией электронного газа, созданной статическим магнитным полем H_{eff}. Так как последняя равна $N_F\mu_BH_{eff}$, мы имеем $\mu_BH_{eff} = S^y(0)/N_F$, где $S^y(0)$ определяется уравнением (24). Из этого уравнения видно, что при $\Gamma_s^y D/v^2 \gg 1$ эффективное магнитное поле $\mu_BH_{eff} \sim \Gamma(J^2S^2/\mu^2)(v/v_F)(\Gamma_s^y\tau)^{-1/2}$. Полагая $\tau = 10^{-13}$ с, $\Gamma_s^y = 10^9$ с$^{-1}$, $v_F = 10^5$ м/с, $v = 100$ м/с, $J^2S^2/\mu^2 = 0.01$ и $\Gamma = \hbar/2\tau \approx 3$ мэВ, получим $\mu_BH_{eff} = 0.003$ мэВ, или $H_{eff} \approx 0.05$ Тл. В этой области параметров индуцированная спиновая поляризация линейно возрастает вместе со скоростью ДС. Как показано в работах [35, 36], в АФМИ спиновые волны создают эффективный механизм, вызывающий движение ДС.

Еще более сильное влияние на динамику ДС в металлических АФМ может оказать электрический ток благодаря эффекту, рассмотренному в работе [20]. Что касается влияния магнонов, относительно высокая скорость ДС $v \approx 100$ м/с была рассчитана [36] для циркулярно поляризованных магнонов, в то время как линейно поляризованные магноны оказывают гораздо более слабое влияние на ДС. Следует отметить, что в первом случае магноны вызывают прецессию ДС, когда аксиальный угол в уравнении (15) меняется во времени как $\phi = \Omega t$. В результате этого в системе покоя ДС инжектированная спиновая плотность должна осциллировать, в отличие от определяемой уравнением (21) стационарной плотности. Более того, вектор спиновой поляризации будет иметь не только S^y-компоненты. Такого рода ситуация не рассматривалась в данной работе. Кроме того, дополнительное исследование было бы полезно провести вблизи сингулярности Ван Хова, как это обсуждалось в конце разд. 2.1.

Спиновая поляризация, инжектированная ДС, может быть детектирована с помощью измерения электрического тока в контакте, выполненном из

тяжелого металла. Этот контакт может быть, например, расположен на правом краю металлической пленки, показанной на рис. 1. Электрический ток в контактирующем электроде возникает благодаря обратному спиновому эффекту Холла или спин-гальваническому эффекту из-за сильной спин-орбитальной связи электронов в тяжелом металле. Этот метод обычно используют для измерения инжектированной спиновой плотности [1].

Другой метод, который мы детально обсудим, основан на конверсии спинового тока в электрический при прохождении первого через ферромагнитную пленку [37,38]. В рассматриваемой схеме измерения ДС, проходя мимо детектора на рис. 3, инжектирует спиновый ток в контакт и создает там импульс электрического напряжения. Соответствующие вычисления представлены в Приложении C. Индуцированный спиновым током электрический потенциал определяется с помощью уравнения (59). Оценим его при $\Gamma = 30$ мэВ, что соответствует времени свободного пробега электронов в двумерной пленке $\tau \approx 1/2\Gamma = 10^{-14}$ с и длине свободного пробега 10 нм со скоростью на поверхности Ферми 10^6 м/с. При этом получим константу диффузии $D_N \equiv D = v_F^2\tau/2 = 50$ см^2/с. Положим $J^2S^2/\mu^2 = 0.1$, $N_F = m/2\pi \approx 2\cdot 10^{14}$ эВ$^{-1}$ см$^{-2}$ и $N_{FF} = 2\cdot 10^{22}$ эВ$^{-1}$ см$^{-3}$. Последний параметр — это типичное значение плотности состояний для переходных $3d$-металлов. При $d = 10$ нм двумерная плотность состояний ферромагнитной пленки $dN_{FF} = 2\cdot 10^{16}$ эВ$^{-1}$см$^{-2}$. Плотность состояний нормального металла оценивалась для параболической зоны. Возрастание плотности вблизи сингулярности Ван Хова игнорировалось. В рассматриваемой модели сильной связи это возрастание важно учитывать, только когда величина μ очень близка к АФМ-щели [5]. Другие параметры: $v = 100$ м/с, $\tilde{P} = 0.1$, $\tau_{Ns} = \Gamma_{Ns}^{-1} \equiv 1/\Gamma_s^y = 100$ пс, $\tau_{Fs} = \Gamma_{Fs}^{-1} = 10$ пс и $D_F = 50$ см^2/с. С этими параметрами из уравнения (59) получим $\Delta\Phi \approx 30$ нВ. Параметры системы могут существенно меняться, так что $\Delta\Phi$ может оказаться как меньше, так и больше этой оценки. Для наилучшего результата измерения важно использовать очень тонкие ферромагнитные пленки, в идеале — двумерные пленки. Во всяком случае описанный выше метод позволяет детектировать спиновую инжекцию от одиночной ДС.

Финансирование. Работа финансировалась согласно проекту исследований FFUU-2021-0003 Института спектроскопии Российской академии наук.

ПРИЛОЖЕНИЕ A. ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЕРШИННОЙ ФУНКЦИИ $\mathbf{V}(\mathbf{q},\omega)$

Петля, представляющая собой элемент последовательности лестничных диаграмм на рис. 2, имеет вид

$$\psi_0^{ij} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{Tr}[\sigma^i G^r(\epsilon^+,\mathbf{k}^+) f(\mathbf{k}^+,\mathbf{k}^{+\prime})\sigma^j \times \\ \times f(\mathbf{k}^{-\prime},\mathbf{k}^-) G^a(\epsilon^-,\mathbf{k}^-)], \quad (25)$$

где G^r и G^a определяются соотношением (13). Так как $\epsilon \ll \mu$, интегрирование в уравнении (25) ограничено областью $k \simeq k_F$. Поэтому можно положить $|\mathbf{k}^{\pm}| = k_F$ и $|\mathbf{k}^{\pm\prime}| = k_F'$ в амплитуде рассеяния f, которая определяется соотношением (11). Заметим, что, вообще говоря, в случае несферической поверхности Ферми $k_F \neq k_F'$. Далее, как было отмечено в основном тексте, спин-зависимая часть амплитуды f пропорциональна σ_z. Следовательно, вычисляя след в (25), можно выразить его как

$$\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\sigma^i f(\mathbf{k}^+,\mathbf{k}^{+\prime})\sigma^j f(\mathbf{k}^{-\prime},\mathbf{k}^-)] = s^2\delta^{ij} + \\ + b^2k_F^2k_F'^2(1-(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{k}}')^2)(\delta^{iz}\delta^{jz} - \delta^{ix}\delta^{jx} - \delta^{iy}\delta^{jy}), \quad (26)$$

где $\hat{\mathbf{k}}$ и $\hat{\mathbf{k}}'$ — единичные волновые векторы, параллельные $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ соответственно. Предположим для простоты, что линия Ферми приблизительно представляет собой окружность, когда химический потенциал достаточно далек от середины зоны электронов в рассматриваемой модели сильной связи. В этом случае, проводя интегрирование в уравнении (25) по $|\mathbf{k}|$ и учитывая (26), получим

$$\psi_0^{zz} = 2\pi i N_F \int \frac{d\phi}{2\pi}\frac{s^2 + b^2k_F^4(1-(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{k}}')^2)}{\omega - \mathbf{v}_F\cdot\mathbf{q} + 2i\Gamma} \quad (27)$$

и

$$\psi_0^{xx} = \psi_0^{yy} = 2\pi i N_F \int \frac{d\phi}{2\pi}\frac{s^2 - b^2k_F^4(1-(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{k}}')^2)}{\omega - \mathbf{v}_F\cdot\mathbf{q} + 2i\Gamma}, \quad (28)$$

где ϕ — полярный угол вектора $|\hat{\mathbf{k}}|$. Эти функции зависят от угла между $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{q}$. Эта зависимость происходит от второго слагаемого в интегралах (27) и (28), величина которого, в свою очередь, пропорциональна величине спин-орбитального рассеяния $b^2k_F^4$. Последняя намного меньше, чем вероятность обычного потенциального рассеяния s^2. Таким образом, в главном приближении вершинная функция не зависит от угла. Следовательно, в рамках этого приближения уравнения (27) и (28) можно усреднить

по направлениям $\mathbf{k}'$. Разлагая их по малым ω, q и b, вплоть до неисчезающих членов, после усреднения по $\hat{\mathbf{k}}'$ и подстановки Γ из уравнения (12) получим

$$\psi_0^{xx} = \psi_0^{yy} = 1 + \frac{1}{2\Gamma}(i\omega - Dq^2 - 2\pi N_F b^2 k_F^4),$$
$$\psi_0^{zz} = 1 + \frac{1}{2\Gamma}(i\omega - Dq^2). \quad (29)$$

Суммируя лестничные диаграммы, можно выразить вершинную функцию V^l через ψ_0 как

$$V^l = \frac{1}{1 - \psi_0^{ll}}. \quad (30)$$

Окончательно, подставляя ψ_0^{ll} из соотношений (29), получим уравнение (14).

ПРИЛОЖЕНИЕ В. ВЫЧИСЛЕНИЕ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ

Из уравнений (7)–(10) следует, что δG^K и, следовательно, спиновая плотность могут быть представлены произведениями запаздывающих и опережающих функций Грина в разных комбинациях. Так, произведение двух функций входит в $\mathbf{S}^{(1)}$, в то время как три функции фигурируют в $\mathbf{S}^{(2)}$. В первом случае келдышевская компонента произведения имеет вид

$$[G_1 G_2]^K = G_1^K G_2^a + G_1^r G_2^K,$$

в то время как тройное произведение имеет вид

$$[G_1 G_2 G_3]^K = G_1^K G_2^a G_3^a + G_1^r G_2^K G_3^a + G_1^r G_2^r G_3^K.$$

Индексы «1», «2» и «3» обозначают сокращенно переменные в усредненных функциях Грина, а G^K выражается как

$$G_{\mathbf{k}}^K(\epsilon) = [G_{\mathbf{k}}^r(\epsilon) - G_{\mathbf{k}}^a(\epsilon)] \operatorname{th} \frac{\epsilon}{k_B T}.$$

Следуя этим правилам, получаем спиновую плотность в виде

$$\mathbf{S}_V^{(1)}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{i}{4}\sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \mathrm{Tr}[\mathbf{V}(\omega,\mathbf{q}) G_{\mathbf{k}^+}^r(\epsilon^+) \times$$
$$\times \Sigma^{(1)}(\omega,\mathbf{q}) G_{\mathbf{k}^-}^a(\epsilon^-)] \left(\operatorname{th} \frac{\epsilon^+}{k_B T} - \operatorname{th} \frac{\epsilon^-}{k_B T} \right), \quad (31)$$

$$\mathbf{S}_0^{(1)}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{i}{4}\sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \mathrm{Tr} \Big[\boldsymbol{\sigma} G_{\mathbf{k}^+}^r(\epsilon^+) \Sigma^{(1)}(\omega,\mathbf{q}) \times$$
$$\times G_{\mathbf{k}^-}^r(\epsilon^-) \operatorname{th} \frac{\epsilon^-}{k_B T} - \boldsymbol{\sigma} G_{\mathbf{k}^+}^a(\epsilon^+) \Sigma^{(1)}(\omega,\mathbf{q}) \times$$
$$\times G_{\mathbf{k}^-}^a(\epsilon^-) \operatorname{th} \frac{\epsilon^+}{k_B T} \Big], \quad (32)$$

$$\mathbf{S}_V^{(2)}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{i}{4}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{f}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{d\nu}{2\pi} \mathrm{Tr} \Big[\mathbf{V}(\omega,\mathbf{q}) (P^{raa}(\epsilon^+) -$$
$$- P^{rra}(\epsilon^-) + P^{rra}(\epsilon - \nu) - P^{raa}(\epsilon - \nu)) \Big] \quad (33)$$

и

$$\mathbf{S}_0^{(2)}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{i}{4}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{f}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{d\nu}{2\pi} \times$$
$$\times \mathrm{Tr} \Big[\boldsymbol{\sigma} (P^{rrr}(\epsilon^-) - P^{aaa}(\epsilon^+)) \Big], \quad (34)$$

где функции $P^{ijk}(\Omega)$, в которых Ω принимает значения $\Omega = \epsilon^{\pm}$ или $\Omega = \epsilon - \nu$, определяются как

$$P^{ijk}(\Omega) = G_{\mathbf{k}^+}^i \left(\epsilon^+\right) \Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)j}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,\mathbf{f}) \times$$
$$\times G_{\mathbf{k}^-}^k(\epsilon^-) \operatorname{th} \frac{\Omega}{k_B T}, \quad (35)$$

где

$$G_{\mathbf{k}}^i(\omega) = \langle G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^i(\omega) \rangle_{imp} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad (36)$$
$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)i}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,f) = \langle \Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(2)i}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,f) \rangle_{imp} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'},$$
$$i = r,\, a.$$

Из уравнения (10) следует, что после усреднения по координатам примесей функция $\Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(2)i}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,f)$ принимает вид

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)i}(\epsilon,\omega,\mathbf{q};\nu,f) = 2J^2 S^2 \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+} \right) \times$$
$$\times G_{\mathbf{k}-\mathbf{f}+\mathbf{G}}^i(\epsilon - \nu)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{f}^-,\nu^-}^*). \quad (37)$$

Далее проведем вычисление спиновой плотности, начиная с уравнения (33). В правой части этого уравнения имеются четыре слагаемых: $P^{raa}(\epsilon^+)$, $P^{rra}(\epsilon^-)$, $P^{rra}(\epsilon+\nu)$ и $P^{raa}(\epsilon+\nu)$. Каждое из них пропорционально статистическим факторам, которые имеют вид

$$\mathrm{th}[(\epsilon + \omega_i)/2k_B T] - \mathrm{th}[\epsilon/2k_B T],$$

где $\omega_i = \pm\omega$ или $\omega_i = \nu$. Так как эти частоты малы, все эти факторы также малы. Однако первые два слагаемых в (33) оказываются намного меньше, чем остальные. Причина заключается в том, что они пропорциональны ω, в то время как два других слагаемых $\sim \nu$. Однако функция $\Sigma_{\mathbf{k}}^i(\epsilon,\omega;\nu,\mathbf{f})$ в уравнении (35) — это нечетная функция ν и $\mathbf{f}$ при $\nu \ll \epsilon$, так как два вектора Нееля в (10) составляют векторное произведение, как это было показано в разд. 3.1.

Действительно, выражение $\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+} \times \mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}$ меняет знак при $\nu \to -\nu$, $\mathbf{f} \to -\mathbf{f}$, так как при таком обращении знака $\mathbf{f}^\pm \to -\mathbf{f}^\mp$ и $\nu^\pm \to -\nu^\mp$. Следовательно, $\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+} \leftrightarrows \mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}$. Таким образом, пропорциональные ω члены в уравнении (37) имеют дополнительный малый фактор, так как они должны обращаться в нуль вместе с ν и f. Наоборот, слагаемые, статистические факторы которых оказываются интегрально пропорциональны ν, изначально представляют собой нечетные по ν функции. Следовательно, соответствующая подынтегральная функция в (33) оказывается четной по ν. По этой причине она доминирует в (33) при $\nu\Gamma \gg \omega\max(\nu, v_F f)$. Используя уравнение (10), соответствующий вклад в соотношение (33) можно записать в виде

$$\mathbf{S}_V^{(2)}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{2}J^2S^2\sum_{\mathbf{f}}\int\frac{d\nu}{2\pi}I(\omega,\mathbf{q};\nu,\mathbf{f})\times \\ \times \operatorname{Tr}\left[\mathbf{V}(\omega,\mathbf{q})\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\left[\mathbf{n}_{\mathbf{f}^+,\nu^+}\times\mathbf{n}^*_{\mathbf{f}^-,\nu^-}\right]\right)\right], \quad (38)$$

где

$$I(\omega,\mathbf{q};\nu,\mathbf{f}) = \sum_{\mathbf{k}}\int\frac{d\epsilon}{2\pi}G^r_{\mathbf{k}^+}(\epsilon^+)G^a_{\mathbf{k}^-}(\epsilon^-)\times \\ \times (G^r_{\mathbf{k}+\mathbf{f}+\mathbf{G}}(\epsilon+\nu) - G^a_{\mathbf{k}+\mathbf{f}+\mathbf{G}}(\epsilon+\nu))\times \\ \times\left(\operatorname{th}\frac{\epsilon+\nu}{k_BT} - \operatorname{th}\frac{\epsilon}{k_BT}\right). \quad (39)$$

Подставляя в это уравнение выражения для гриновских функций из уравнения (5) и представляя там энергию электронов как $E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \simeq E_{\mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{Q}$, где $\mathbf{Q} = \mathbf{q}/2$ или $\mathbf{Q} = \mathbf{f}$, а $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ — скорость электронов на поверхности Ферми, интеграл I можно представить в виде

$$I = \int\frac{d^2k}{4\pi^2}\int\frac{d\epsilon}{2\pi}\Big(\epsilon+\frac{\omega}{2} - E_{\mathbf{k}} - \frac{\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{q}}{2} + \mu + i\Gamma\Big)^{-1}\times \\ \times 2\operatorname{Im}[G^r_{\mathbf{k}+\mathbf{f}+\mathbf{G}}(\epsilon+\nu)]\times \\ \times\left(\epsilon - \frac{\omega}{2} - E_{\mathbf{k}} + \frac{\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{q}}{2} + \mu - i\Gamma\right)^{-1}\times \\ \times\left(\operatorname{th}\frac{\epsilon+\nu}{k_BT} - \operatorname{th}\frac{\epsilon}{k_BT}\right), \quad (40)$$

где

$$G^r_{\mathbf{k}+\mathbf{f}+\mathbf{G}}(\epsilon+\nu)] = \\ = (\epsilon+\nu - E_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}\cdot\mathbf{f} + \mu + i\Gamma)^{-1}. \quad (41)$$

Следует учесть, что в рамках рассматриваемой модели сильной связи $E_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = -E_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = -v_{\mathbf{k}}$. Тогда, учитывая, что $|\epsilon| \sim |\nu| \ll \mu$, также как и ω, Γ, $v_{\mathbf{k}}q$, $v_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}f \ll \mu$, главный вклад в интеграл при малых температурах определяется полюсами $E_{\mathbf{k}}$ вблизи энергии Ферми. Поэтому можно положить $v_{\mathbf{k}} \simeq v_{\mathbf{k}_F} \equiv v_F$, где $E_{\mathbf{k}_F} = \mu$. В главном приближении, когда $\mu \gg \Gamma \gg [v_Fq, v_Ff, \nu, \omega]$, интегрирование приводит к

$$I(\omega,\mathbf{q};\nu,\mathbf{f}) = -i\frac{\nu}{\mu^2}N_F. \quad (42)$$

Подставляя это выражение в уравнение (38), в результате получаем уравнение (17).

ПРИЛОЖЕНИЕ C. ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ИНЖЕКТИРОВАННОГО СПИНА

Схема измерения спиновой плотности показана на рис. 3. Если эффекты релаксации спина в ферромагнетике слабы, то электрический ток J_F в нем может быть представлен в виде суммы токов электронов с двумя возможными проекциями их спинов на ось квантования, $J_{F\uparrow}$ и $J_{F\downarrow}$:

$$\begin{aligned} J_{F\uparrow} &= -D_{F\uparrow}e\nabla_x c_{F\uparrow} - \sigma_{F\uparrow}\nabla_x\Phi, \\ J_{F\downarrow} &= -D_{F\downarrow}e\nabla_x c_{F\downarrow} - \sigma_{F\downarrow}\nabla_x\Phi, \end{aligned} \quad (43)$$

где $D_{F\uparrow}$ и $D_{F\downarrow}$ — коэффициенты диффузии в каждой из магнитных подзон, а $\sigma_{F\uparrow}$, $\sigma_{F\downarrow}$ — проводимости. В диффузионном режиме эти токи создаются градиентами соответствующих плотностей электронов, $c_{F\uparrow}$ и $c_{F\downarrow}$, и градиентом электрического потенциала Ф. Так как проводимости и коэффициенты диффузии электронов с противоположно направленными спинами, как правило, отличаются друг от друга в ферромагнетиках, характеристики транспорта спина и заряда становятся взаимно зависящими друг от друга. Поэтому поляризованный по спину ток может индуцировать электрический ток и электрический потенциал, и, обратно, электрический ток способен индуцировать спиновый ток [37, 38]. Эта взаимозависимость может послужить основой для электрического детектирования спинового тока и спиновой плотности. Так как в рассматриваемом примере спиновая поляризация, накачанная ДС, направлена параллельно оси y, естественно рассмотреть ферромагнетик на рис. 3, намагниченность которого параллельна той же оси. Поэтому спиновая поляризация ρ_{Fs} и спиновый ток J_{Fs} ориентированы вдоль оси y.

Обозначим электрический и спиновый токи соответственно как $J_F = J_{F\uparrow} + J_{F\downarrow}$ и $J_{Fs} = J_{F\uparrow} - J_{F\downarrow}$. Таким же образом для плотностей заряда и спина

Рис. 3. Схема измерения спиновой поляризации, инжектированной ДС. Мгновенное положение центра ДС ($x = 0$) показано штриховой линией. Стрелка указывает направление движения ДС

получим $\rho_F = ec_{F\uparrow} + ec_{F\downarrow}$ и $\rho_{Fs} = ec_{F\uparrow} - ec_{F\downarrow}$. Комбинируя два уравнения (43) и принимая во внимание условие электрической нейтральности $\rho_F = 0$, получим соотношения

$$\begin{aligned} J_F &= -D_{Fs}\nabla_x\rho_{Fs} - \sigma_F\nabla_x\Phi, \\ J_{Fs} &= -D_F\nabla_x\rho_{Fs} - \sigma_{Fs}\nabla_x\Phi, \end{aligned} \tag{44}$$

где

$$D_F = (D_{F\uparrow} + D_{F\downarrow})/2, \quad D_{Fs} = (D_{F\uparrow} - D_{F\downarrow})/2,$$
$$\sigma_F = \sigma_{F\uparrow} + \sigma_{F\downarrow}, \quad \sigma_{Fs} = \sigma_{F\uparrow} - \sigma_{F\downarrow}.$$

Так как в разомкнутой цепи $J_F = 0$, из уравнения (44) получим

$$\sigma_F\nabla_x\Phi = -D_{Fs}\nabla_x\rho_{Fs}. \tag{45}$$

Подставляя это соотношение во второе уравнение (44), получим

$$J_{Fs} = -\tilde{D}_F\nabla_x\rho_{Fs}, \tag{46}$$

где

$$\tilde{D}_F = D_F(1 - PD_{Fs}/D_F)$$

и P обозначает коэффициент поляризации,

$$P = (\sigma_{F\uparrow} - \sigma_{F\downarrow})/(\sigma_{F\uparrow} + \sigma_{F\downarrow}).$$

Ниже эта несущественная перенормировка коэффициента диффузии будет игнорироваться. Соответственно, положим $\tilde{D}_F = D_F$. В свою очередь, уравнение диффузии спина имеет обычный вид:

$$\frac{\partial\rho_{Fs}}{\partial t} = -\nabla_x J_{Fs} - \Gamma_{Fs}\rho_{Fs}, \tag{47}$$

где Γ_{Fs} — скорость релаксации спина. Учитывая уравнение (46) и выполняя фурье-преобразование по времени, это уравнение можно записать в виде

$$-i\omega\rho_{Fs} = D_F\nabla_x^2\rho_{Fs} - \Gamma_{Fs}\rho_{Fs}. \tag{48}$$

Далее, уравнение (45) можно проинтегрировать по ферромагнитной области $x > 0$. В результате найдем соотношение, которое позволяет выразить электрическое напряжение через спиновую плотность на границе между ферромагнетиком и двумерным металлом. Оно имеет вид

$$\sigma_F\Delta\Phi = D_{Fs}\rho_{Fs}(0), \tag{49}$$

где $\Delta\Phi$ — напряжение, которое измеряется вольтметром (см. рис. 3). Было принято во внимание, что $\rho(x) \to 0$ при $x \gg \sqrt{D_F/\Gamma_{Fs}}$. Если толщина d магнитной пленки намного меньше длины диффузии спина ($d \ll \sqrt{D_F/\Gamma_{Fs}}$), спиновая плотность будет однородно распределена по толщине d. Поэтому $d\rho_{Fs}$ можно рассматривать как двумерную спиновую плотность. То же можно сказать и о спиновом токе dJ_{Fs}. Спиновая плотность вычисляется с помощью уравнения (48) с граничными условиями

$$d\rho_{Fs}(0) = \rho_{Ns}(0), \quad dJ_{Fs}(0) = J_{Ns}(0), \tag{50}$$

где $J_{Ns}(0)$ и $\rho_{Ns}(0)$ — спиновые ток и плотность на границе, в области нормального металла ($x < 0$). Эти граничные условия справедливы, если на границе раздела отсутствует заметная релаксация спина. В ферромагнетике соотношение между $J_{Fs}(0)$ и $\rho_{Fs}(0)$ нетрудно найти из решения уравнения (48), которое имеет вид

$$\rho_{Fs}(x) = \rho_{Fs}(0)\exp[-x/l_{Fs}(\omega)], \tag{51}$$

где

$$l_{Fs}^{-1} = \sqrt{(\Gamma_{Fs} - i\omega)D_F^{-1}}.$$

Далее, из уравнения (46) получим искомое соотношение

$$J_{Fs}(0) = \rho_{Fs}(0)D_F/l_{Fs}. \tag{52}$$

Уравнение диффузии спина в нормальном металле имеет вид

$$-i\omega\rho_{Ns} = D_N\nabla_x^2\rho_{Ns} - \Gamma_{Ns}\rho_{Fs} + W(\omega, x). \tag{53}$$

Это уравнение получено из уравнений (17) и (18), записанных в координатном представлении. В (53) параметры ρ_{Ns}, Γ_{Ns} и D_N можно соотнести соответственно с S^y, Γ_s^y и D в основном тексте. Вычисленный таким образом источник W имеет вид

$$W(\omega,x)=N_F\Gamma v\frac{J^2S^2}{\mu^2}\int dt\frac{1}{\lambda\,\mathrm{ch}[(x-vt)/\lambda]}e^{i\omega t}. \tag{54}$$

Как станет ясно ниже, при выбранных значениях параметров v и Γ_{Ns} характерная длина v/ω по порядку величины составляет 10^2 нм, что намного больше типичной толщины ДС λ. Поэтому можно положить $t=x/v$ в показателе экспоненты подынтегрального выражения в уравнении (54). Таким образом, получим

$$W(\omega,x)=\pi N_F\Gamma\frac{J^2S^2}{\mu^2}e^{i\omega x/v}. \tag{55}$$

Общее решение уравнения (53) при $x<0$ представляет собой сумму двух функций. Одна из них происходит от источника, а другая — от границы раздела с ферромагнетиком. Первая функция $\rho_{Ns}^{(1)}$ представляет собой фурье-образ функции (21), тогда как вторая функция $\rho_{Ns}^{(2)}$ получается из уравнения (53) в виде

$$\rho_{Ns}^{(2)}(x)=Ae^{-|x|/l_{Ns}}, \tag{56}$$

где

$$l_{Ns}^{-1}=\sqrt{(\Gamma_{Ns}-i\omega)D_N^{-1}}.$$

Предполагалось, что ширина контакта между ферромагнетиком и двумерной пленкой намного меньше, чем длина диффузии l_{Ns}, которая находится в субмикронной области. Поэтому возможно рассматривать такой контакт как точечный при $x=0$. Вследствие этого выражение для $\rho^{(2)}$ принимает простой вид (56). Коэффициенты A и $\rho_{Fs}(0)$ в (51) и (56) могут быть найдены из граничных условий (50) и (52). В рассматриваем случае из-за сохранения спинового тока на границе раздела имеем

$$J_{Ns}(0^-)-J_{Ns}(0^+)=dJ_{Fs}(0). \tag{57}$$

Отсюда, учитывая уравнения (56) и (52), получим

$$d\rho_{Fs}(0)=\\ =\frac{v^2W(\omega,0)}{D_N(vp_1+i\omega)(vp_2+i\omega)}\frac{1}{1+(l_{Ns}/2l_{Fs})}, \tag{58}$$

где параметры p_1 и p_2 определены в разд. 3.1.

Индуцированный спиновым током электрический потенциал в ферромагнитной пленке может быть вычислен с помощью уравнения (45). Зависимость электрического напряжения от времени представляет собой импульс, вид которого определяется пространственной зависимостью спиновой плотности (21). В центре импульса, при $t=0$, спиновая плотность в точке $x=0$ может быть вычислена путем интегрирования уравнения (58) по ω. Так как $p_1>0$, а $p_2<0$, $\rho_{Fs}(0)$ имеет простой полюс в верхней комплексной полуплоскости, тогда как другой полюс и разрезы находятся в нижней полуплоскости. Так как интеграл сходится, вычисляя вычет в полюсе $\omega=ivp_1$ и подставляя результат в соотношение (45), окончательно получим

$$e\Delta\Phi|_{t=0}=r\Gamma\tilde{P}\frac{\pi N_F}{2N_{FF}d}\frac{J^2S^2}{\mu^2}\frac{v}{\sqrt{v^2+4\Gamma_{Ns}D_N}}, \tag{59}$$

где

$$N_{FF}=\frac{N_{F\uparrow}+N_{F\downarrow}}{2}$$

— плотность электронных состояний на поверхности Ферми ферромагнетика (на одну спиновую проекцию), безразмерный коэффициент r равен

$$r=\left[\frac{1}{1+l_{Ns}/2l_{Fs}}\right]_{\omega=ivp_1}, \tag{60}$$

а

$$\tilde{P}=\frac{D_{F\uparrow}-D_{F\downarrow}}{D_{F\uparrow}+D_{F\downarrow}} \tag{61}$$

совпадает с коэффициентом поляризации ферромагнетика. При вычислении электрического напряжения (59) было использовано соотношение Эйнштейна $\sigma_F=2e^2D_FN_{FF}$. Электрический потенциал $\Delta\Phi|_{t=0}$ вычислен при некоторых значениях параметров в конце разд. 4.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, Rev. Mod. Phys. **90**, 015005 (2018).

2. O. Gomonay, V. Baltz, A. Brataas, and Y. Tserkovnyak, Nat. Phys. **14**, 213 (2018).

3. H. Yan, Z. Feng, P. Qin, X. Zhou, H. Guo, X. Wang, H. Chen, X. Zhang, H. Wu, C. Jiang, and Z. Liu, Adv. Materials **32**, 1905603 (2020).

4. P. Wadley, B. Howells, J. Železný, C. Andrews, V. Hills, R. P. Campion, V. Novak, K. Olejnik, F. Maccherozzi, S. S. Dhesi, S. Y. Martin, T. Wagner, J. Wunderlich, F. Freimuth, Y. Mokrousov, J. Kunes, J. S. Chauhan, M. J. Grzybowski, A. W. Rushforth, K. W. Edmonds, B. L. Gallagher, and T. Jungwirth, Science **351**, 587 (2016).

5. J. Železný, H. Gao, K. Výborný, J. Zemen, J. Mašek, A. Manchon, J. Wunderlich, J. Sinova, and T. Jungwirth, Phys. Rev. Lett. **113**, 157201 (2014).

6. R. Cheng, J. Xiao, Q. Niu, and A. Brataas, Phys. Rev. Lett. **113**, 057601 (2014).

7. H. B. M. Saidaoui, A. Manchon, and X. Waintal, Phys. Rev. B **89**, 174430 (2014).

8. A. C. Swaving and R. A. Duine, Phys. Rev. B **83**, 054428 (2011).

9. S. Takei, B. I. Halperin, A. Yacoby, and Y. Tserkovnyak, Phys. Rev. B **90**, 094408 (2014).

10. A. S. Núnez, R. A. Duine, P. M. Haney, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **73**, 214426 (2006).

11. Y. Ohnuma, H. Adachi, E. Saitoh, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **89**, 174417 (2014).

12. P. Zhang, C. T. Chou, H. Yun, B. C. McGoldrick, J. T. Hou, K. A. Mkhoyan, and L. Liu, arXiv:2201.04732.

13. E. Cogulu, H. Zhang, N. N. Statuto, Y. Cheng, F. Yang, R. Cheng, and A. D. Kent, arXiv:2112.12238.

14. K. A. Omari, L. X. Barton, O. Amin, R. P. Campion, A. W. Rushforth, P. Wadley, and K. W. Edmonds, J. Appl. Phys. **127**, 193906 (2020).

15. L. Frangou, S. Oyarzun, S. Auffret, L. Vila, S. Gambarelli, and V. Baltz, , Phys. Rev. Lett. **116**, 077203 (2016).

16. P. Vaidya, S. A. Morley, J. Tol, Y. Liu, R. Cheng, A. Brataas, D. Lederman, and E. Barco, Science **368**, 160 (2020).

17. J. Li, C. B. Wilson, R. Cheng, M. Lohmann, M. Kavand, W. Yuan, M. Aldosary, N. Agladze, P. Wei, M. S. Sherwin, and J. Shi, Nature **578**, 70 (2020).

18. H. Wang, Y. Xiao, M. Guo, E. L. Wong, G. Q. Yan, R. Cheng, and C. R. Du, Phys. Rev. Lett. **127**, 117202 (2021).

19. R. Lebrun, A. Ross, S. A. Bender, A. Qaiumzadeh, L. Baldrati, J. Cramer, A. Brataas, R. A. Duine, and M. Kläui, Nature **561**, 222 (2018).

20. O. Gomonay, T. Jungwirth, and J. Sinova, Phys. Rev. Lett. **117**, 017202 (2016).

21. S. K. Kim, G. S. D. Beach, K.-J. Lee, T. Ono, Th. Rasing, and H. Yang, Nat. Mater. **21**, 24 (2022).

22. C. O. Avci, E. Rosenberg, L. Caretta, F. Buttner, M. Mann, C. Marcus, D. Bono, C. A. Ross, and G. S. D. Beach, Nat. Nanotechnol. **14**, 561 (2019).

23. H. A. Zhou, Y. Dong, T. Xu, K. Xu, L. S. Tejerina, L. Zhao,Y. Ba, P. Gargiani, M. Valvidares, Y. Zhao, M. Carpentieri, O. A. Tretiakov, X. Zhong, G. Finocchio, S. K. Kim, and W. Jiang, arXiv:1912.01775.

24. S. Velez, J. Schaab, M. S. Wornle, M. Muller, E. Gradauskaite, P. Welter, C. Gutgsell, C. Nistor, C. L. Degen, M. Trassin, M. Fiebig, and P. Gambardella, Nat. Commun. **10**, 4750 (2019).

25. Y. Tserkovnyak, A. Brataas, and G. E. W. Bauer, Phys. Rev. Lett. **88**, 117601 (2002).

26. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1515 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965)].

27. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, М. В. Четкин, УФН **28**, 563 (1985) [Usp. Fiz. Nauk **146**, 417 (1985)].

28. J. Rammer and H. Smith, Rev. Mod. Phys. **58**, 323 (1986).

29. B. L. Altshuler and A. G. Aronov, in *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, ed. by A. L. Efros and M. Pollak, North-Holland, Amsterdam (1985), Ch. 1.

30. E. van der Bijl, R. E. Troncoso, and R. A. Duine, Phys. Rev. B **88**, 064417 (2013).

31. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **42**, 1088 (1962) [A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP **15**, 752 (1962)].

32. М. И. Дьяконов, В. И. Перель, ЖЭТФ **33**, 1053 (1971) [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 1954 (1971)].

33. N. L. Schryer and L. R. Walker, J. Appl. Phys. **45**, 5406 (1974).

34. A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, Phys. Rep. **194**, 117 (1990).

35. S. K. Kim, Y. Tserkovnyak, and O. Tchernyshyov, Phys. Rev. B **90**, 104406 (2014).

36. E. G. Tveten, A. Qaiumzadeh, and A. Brataas, Phys. Rev. Lett. **112**, 147204 (2014).

37. А. Г. Аронов, Письма в ЖЭТФ **24**, 37 (1976) [Sov. Phys. JETP Lett. **24**, 32 (1976)].

38. M. Johnson and R. H. Silsbee, Phys. Rev. B **37**, 5312 (1988).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1056–1069 © 2023

ТЕРМОЭДС И ЭФФЕКТ ХОЛЛА В КОРРЕЛИРОВАННЫХ МЕТАЛЛАХ И ДОПИРОВАННЫХ МОТТ-ХАББАРДОВСКИХ ДИЭЛЕКТРИКАХ: DMFT-ПРИБЛИЖЕНИЕ

Э. З. Кучинский [*]***, Н. А. Кулеева, М. В. Садовский*** [**]

Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук
620016, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 20 июня 2023 г.,
после переработки 20 июня 2023 г.
Принята к публикации 24 июня 2023 г.

Проведено сравнительное теоретическое исследование термоэдс и эффекта Холла в модели Хаббарда для коррелированного металла и моттовского диэлектрика (рассматриваемого в качестве прототипа купратного сверхпроводника) для разных концентраций носителей тока. Анализ проведен в рамках стандартного DMFT-приближения. Для моттовского диэлектрика в качестве типичного допирования рассматривается случай частичного заполнения нижней хаббардовской зоны дырками. Рассчитана зависимость термоэдс от степени такого допирования и определено значение критической концентрации носителей, при которой происходит смена знака термоэдс. Получена аномальная зависимость термоэдс от температуры, существенно отличающаяся от линейной температурной зависимости, характерной для обычных металлов. Качественно анализируется роль рассеяния на беспорядке. Сравнение с результатами аналогичного исследования эффекта Холла показало, что нарушение электрон-дырочной симметрии приводит к появлению достаточно широкой области заполнений вблизи половинного, где термоэдс и коэффициент Холла имеют разные знаки. Предложена схема, позволяющая по данным ARPES получать число носителей заряда и проводить полуколичественную оценку коэффициента Холла и термоэдс с использованием обычных DFT-расчетов электронного спектра.

DOI: 10.31857/S0044451023120180
EDN: MYGZSV

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема описания концентрационной зависимости термоэдс и эффекта Холла в сильнокоррелированных системах известна уже давно. Она остается актуальной в связи с экспериментальными исследованиями этих эффектов в высокотемпературных сверхпроводниках на основе оксидов меди (купратов) при различных уровнях их допирования. Одной из основных для физики купратов является точка зрения о том, что эти системы являются сильнокоррелированными и металлическое (в том числе сверхпроводящее) состояние в них реализуется в результате допирования исходной фазы моттовского диэлектрика, который в простейшем случае может быть описан в рамках модели Хаббарда.

Наиболее разработанным методом теоретического описания модели Хаббарда для широкого набора параметров этой модели остается подход, основанный на применении динамической теории среднего поля (DMFT) [1–3]. Систематическое исследование концентрационной и температурной зависимостей эффекта Холла в таком подходе было проведено в наших недавних работах [4,5]. Аналогичных работ по изучению концентрационной зависимости и температурной зависимости термоэдс практически нет. Данная работа, в основном, посвящена изучению именно этого вопроса в сравнении с ранее полученными данными по эффекту Холла.

2. ТЕРМОЭДС И КОФФИЦИЕНТ ХОЛЛА. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Как уже отмечено выше, общим подходом к исследованию модели Хаббарда является теория динамического среднего поля (DMFT) [1–3], которая дает точное описание системы в пределе пространства

[*] E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru
[**] E-mail: sadovski@iep.uran.ru

бесконечной размерности (решетки с бесконечным числом ближайших соседей). Выход за рамки этого приближения [6, 7] обычно сильно усложняет рассмотрение. Целью данной работы является систематическое исследование концентрационной и температурной зависимостей термоэдс при различных степенях допирования нижней хаббардовской зоны в рамках стандартного приближения DMFT. Также мы проведем подробное сравнение результатов для термоэдс с результатами для коэффициента Холла, полученными нами в работах [4, 5] в аналогичном подходе.

Имея в виду возможное сравнение с экспериментальными данными для купратов, мы далее рассматриваем двумерную модель электронного спектра в приближении сильной связи:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos(p_x a) + \cos(p_y a)) - \\ - 4t' \cos(p_x a)\cos(p_y a), \quad (1)$$

где a — параметр (квадратной) решетки.

Для такой двумерной модели далее мы рассмотрим ряд конкретных случаев.

1. Спектр с перескоком лишь на ближайших соседей ($t' = 0$) и полной электрон-дырочной симметрией.

2. Спектр с $t'/t = -0.25$, качественно соответствующий электронной дисперсии в системах типа LSCO.

3. Спектр с $t'/t = -0.4$, качественно соответствующий ситуации, наблюдаемой в YBCO.

Термоэдс определяется выражением [1, 8, 9]

$$S = -\frac{k_B}{e}\frac{1}{T}\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \varepsilon\tau(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \tau(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)}, \quad (2)$$

где k_B — постоянная Больцмана (в дальнейшем температуру будем писать в энергетических единицах, полагая $k_B = 1$), e — модуль заряда электрона,

$$f(\varepsilon) = (e^{\varepsilon/T} + 1)^{-1}$$

— функция распределения Ферми. Ниже везде значения термоэдс мы приводим в единицах

$$\frac{k_B}{e} \approx 86 \left[\frac{\text{мкВ}}{\text{К}}\right].$$

Введенный в (2) релаксационный параметр

$$\tau(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 A^2(\mathbf{p}\varepsilon) \quad (3)$$

полностью определяется спектральной плотностью одноэлектронной функции Грина $G(\mathbf{p}\varepsilon)$:

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} G^R(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (4)$$

В стандартной DMFT [1–3] собственно-энергетическая часть функции Грина является локальной, т.е. не зависящей от импульса. Вследствие такой локальности и обычная, и холловская проводимости также полностью определяются спектральной плотностью $A(\mathbf{p}\varepsilon)$.

Обычная (диагональная) статическая проводимость имеет вид [1]

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi e^2}{2\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)\tau(\varepsilon), \quad (5)$$

а холловская (недиагональная) проводимость определяется как

$$\sigma_{xy}^H = -\frac{2\pi^2 e^3 a^2 H}{3\hbar^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)\tau_H(\varepsilon), \quad (6)$$

где H — напряженность магнитного поля вдоль оси z. Здесь мы ввели еще холловский релаксационный параметр

$$\tau_H = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial {p_y}^2} A^3(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (7)$$

Таким образом, коэффициент Холла

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}^H}{H\sigma_{xx}^2} \quad (8)$$

также полностью определяется спектральной плотностью $A(\mathbf{p}\varepsilon)$, которую мы далее будем находить в рамках DMFT. Эффективную однопримесную модель Андерсона DMFT в данной работе, как и в работах [4,5], будем решать с помощью метода численной ренормгруппы (NRG) [10].

Рассмотрим случай низких температур ($T \ll E_F$). Для любой функции $\Phi(\varepsilon)$, для которой сходится интеграл, имеем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \Phi(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) = \Phi(0) + \frac{\pi^2}{6}T^2\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial {\varepsilon}^2}\right)_{\varepsilon=0} + \ldots \quad (9)$$

Тогда для диагональной проводимости из (5) получаем

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{\hbar}\frac{\pi}{2}\tau(0), \quad (10)$$

а термоэдс при низкой температуре имеет вид

$$S = -\frac{k_B}{e}\frac{\pi^2}{3}T\frac{d\tau(\varepsilon)/d\varepsilon}{\tau(\varepsilon)}\bigg|_{\varepsilon=0} = -\frac{k_B}{e}\frac{\pi^2}{3}T\,\frac{d\ln\tau(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon=0}, \quad (11)$$

так что из (11) и (10) немедленно получаем формулу Зеебека [8, 11]:

$$S = -\frac{k_B}{e}\frac{\pi^2}{3}\,T\,\frac{d\ln\sigma_{xx}(\mu)}{d\mu}, \quad (12)$$

где μ — химический потенциал (от которого у нас всегда отсчитывается энергия ε).

Таким образом, при низких T модуль термоэдс линейно растет с ростом T, а знак S полностью определяется знаком $d\tau(\varepsilon)/d\varepsilon|_{\varepsilon=0}$ или $d\sigma_{xx}(\mu)/d\mu$. Далее нас будет интересовать зависимость от заполнения зоны

$$n = n_\uparrow = n_\downarrow = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)N(\varepsilon)$$

(мы будем рассматривать только парамагнитное состояние), где $N(\varepsilon)$ — плотность состояний на одну проекцию спина. Если явным образом учитывать химический потенциал, то (11) можно переписать в виде

$$S = -\frac{k_B}{e}\frac{\pi^2}{3}T\frac{d\tau(\mu)/d\mu}{\tau(\mu)} = -\frac{k_B}{e}\frac{\pi^2}{3}T\frac{dn}{d\mu}\frac{d\tau(n)/dn}{\tau(n)}. \quad (13)$$

Здесь $dn/d\mu > 0$, поскольку при низких температурах

$$\frac{dn}{d\mu} = \frac{d}{d\mu}\int\limits_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon\, N(\varepsilon) = N(\mu) > 0.$$

Таким образом, знак S полностью определяется знаком $d\tau(n)/dn$ или $d\sigma_{xx}(n)/dn$.

Холловская проводимость (6) при низких температурах с учетом (9) принимает вид

$$\sigma_{xy}^H = -\frac{2\pi^2 e^3 a^2 H}{3\hbar^2}\,\tau_H(0) \quad (14)$$

и коэффициент Холла

$$R_H = -\frac{a^2}{e}\,\frac{8}{3}\,\frac{\tau_H(0)}{\tau^2(0)}. \quad (15)$$

Знак коэффициента Холла полностью определяется знаком $\tau_H(0)$ или знаком $\tau_H(n)$.

Видим, что знаки термоэдс и холловского коэффициента определяются, вообще говоря, совершенно разными величинами, и заполнения зоны, при которых эти величины меняют знак, в общем случае могут не совпадать.

3. ТЕРМОЭДС И КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА В ОТСУТСТВИЕ КОРРЕЛЯЦИЙ ($U = 0$)

Чтобы более подробно исследовать ситуацию, рассмотрим сначала случай, когда электронные корреляции отсутствуют (хаббардовское взаимодействие $U = 0$). В отсутствие корреляций и других процессов рассеяния электронов (идеальный проводник) и числитель, и знаменатель выражения (2) для термоэдс и (8) для коэффициента Холла расходятся, поэтому для регуляризации расчетов необходимо ввести некоторое слабое рассеяние электронов, например, взяв одноэлектронную функцию Грина в виде

$$G^R(\mathbf{p}\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{p}) + i\gamma}, \quad (16)$$

где $\gamma \ll t$ — частота рассеяния (например, на примесях), тогда спектральная плотность имеет вид

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = \frac{1}{\pi}\,\frac{\gamma}{\left(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{p})\right)^2 + \gamma^2}. \quad (17)$$

Зависимости термоэдс и коэффициента Холла, полученные непосредственно из (2) и (8) с использованием спектральной плотности (17) с $\gamma/8t = 0.005$, приведены на рис. 1 как для случая полной электрон-дырочной симметрии ($t' = 0$), так и для случая $t'/t = -0.4$, характерного, например, для купратной системы YBCO. Видим, что в случае полной электрон-дырочной симметрии термоэдс (рис. 1*a*) в соответствии с (11) и (12) линейно зависит от температуры вплоть до высоких температур $T/8t \approx 0.06$, а R_H (рис. 1*c*) практически не зависит от T. И термоэдс, и коэффициент Холла меняют знак при половинном заполнении зоны. В случае заметного нарушения такой симметрии ($t'/t = -0.4$) наблюдается заметное отклонение от линейной зависимости термоэдс от температуры (см. рис. 1*b*) при высоких $T/8t \approx 0.06$, коэффициент Холла (рис. 1*d*) при высоких T также начинает заметно зависеть от температуры. Смена знака S наблюдается при заполнении $n \approx 0.65$ существенно больше половинного, а коэффициент Холла, наоборот, меняет знак при заполнении заметно ниже половинного, причем с ростом температуры это отклонение от половинного заполнения, при котором R_H меняет знак, только растет, и при $T/8t \approx 0.06$ это заполнение $n \approx 0.22$. Таким образом, при $t'/t = -0.4$ образуется достаточно широкая область заполнений зоны n, при которых коэффициент Холла R_H уже имеет положительный (дырочный) знак, а знак термоэдс S все еще отрицательный (электронный). Как показано выше, знак термоэдс полностью определяется знаком $d\tau(n)/dn$,

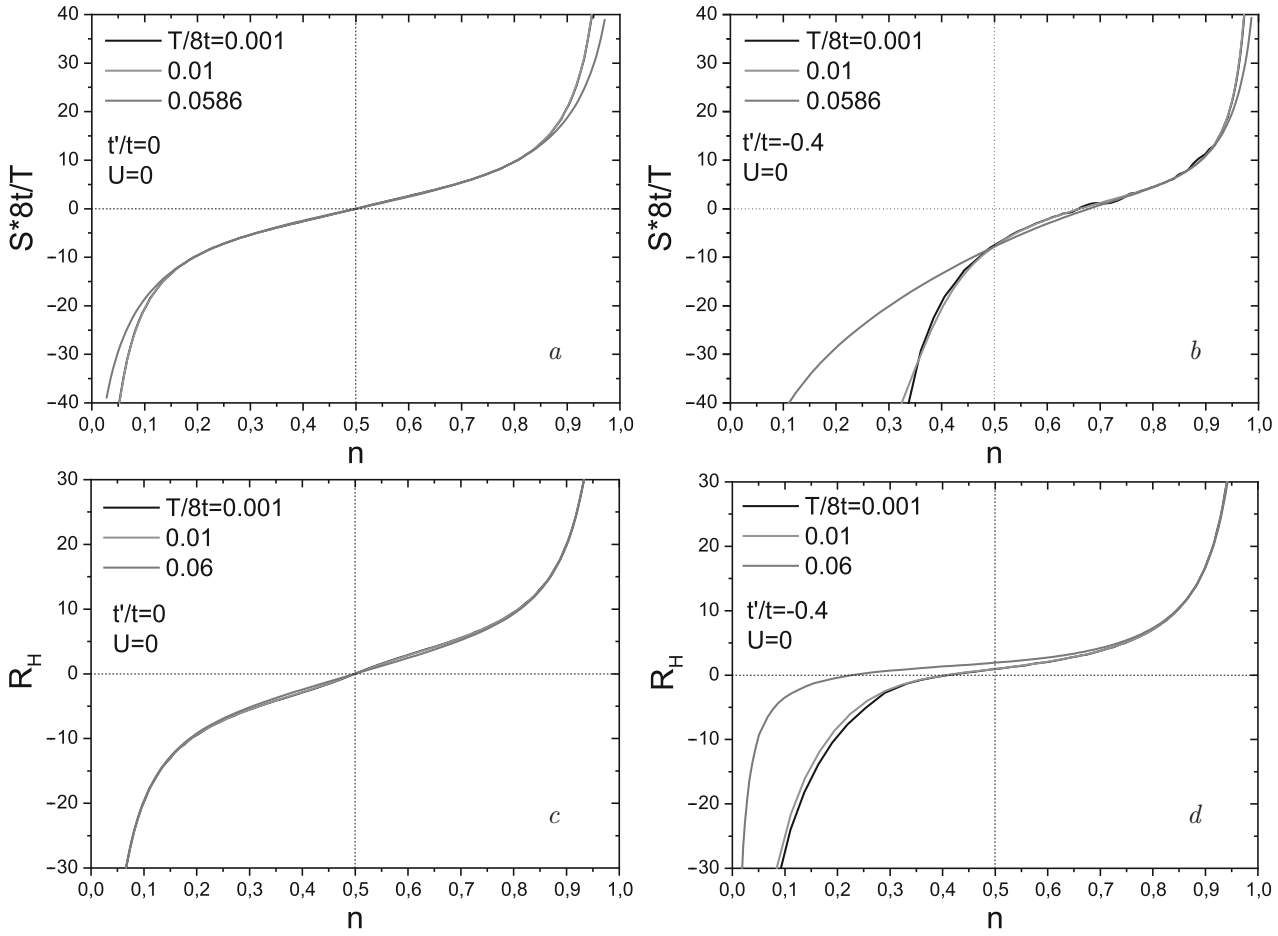


Рис. 1. Зависимость термоэдс (a,b) и коэффициента Холла (c,d) от степени заполнения зоны для $t' = 0$ — a,c и $t'/t = -0.4$ — b,d

а знак коэффициента Холла — знаком $\tau_H(n)$. Поэтому для прояснения ситуации полезно было бы проанализировать зависимости $\tau(n)$ и $\tau_H(n)$. Однако и релаксационный параметр τ, и холловский релаксационный параметр τ_H расходятся как $\tau \sim 1/\gamma$ и $\tau_H \sim 1/\gamma^2$ при $\gamma \to 0$, поэтому удобно ввести некоторые приведенные релаксационные параметры, которые вообще не зависят от γ, а являются некоторыми характеристиками спектра на поверхности Ферми. Как будет продемонстрировано ниже, эти величины полезны и для анализа систем с сильными электронными корреляциями.

При $\gamma \ll t$ спектральная плотность имеет узкий пик при $\varepsilon \sim \varepsilon(\mathbf{p})$, тогда

$$\tau(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 \left(\frac{1}{\pi}\,\frac{\gamma}{(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p}))^2+\gamma^2}\right)^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[\sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 \delta(\xi-\varepsilon(\mathbf{p}))\right] \times \left(\frac{1}{\pi}\,\frac{\gamma}{(\varepsilon-\xi)^2+\gamma^2}\right)^2, \quad (18)$$

так что можем написать

$$\tau(\varepsilon) \approx \tau_0(\varepsilon) \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{1}{\pi}\,\frac{\gamma}{(\varepsilon-\xi)^2+\gamma^2}\right)^2 = \frac{1}{2\pi\gamma}\,\tau_0(\varepsilon), \quad (19)$$

где ввели

$$\tau_0(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 \delta(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})). \quad (20)$$

Аналогично

$$\tau_H(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 \frac{\partial^2\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} A^3(\varepsilon,\mathbf{p}) \approx \approx \tau_{0H}(\varepsilon) \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{1}{\pi}\,\frac{\gamma}{\xi^2+\gamma^2}\right)^3 = \frac{3}{8}\,\frac{1}{\pi^2\gamma^2}\,\tau_{0H}(\varepsilon), \quad (21)$$

где ввели

$$\tau_{0H}(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}\right)^2 \frac{\partial^2\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2}\,\delta(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})). \quad (22)$$

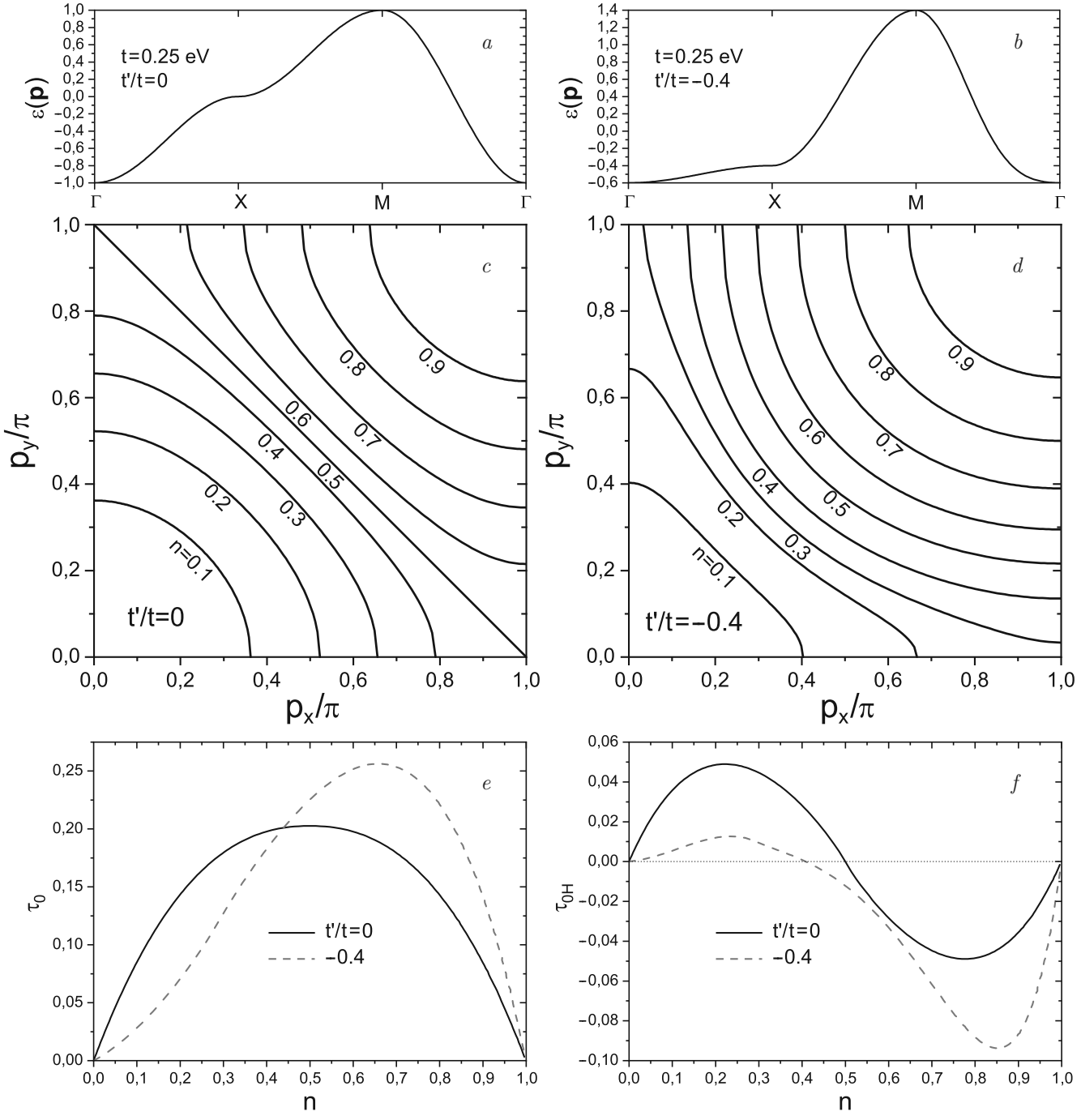


Рис. 2. Электронный спектр по симметричным направлениям зоны Бриллюэна (a,b), поверхности Ферми для различных заполнений зоны (c,d) и зависимость приведенных релаксационных параметров τ_0 и τ_{0H} от заполнения зоны (e,f) для $t' = 0$, $t'/t = -0.4$

Тогда при низкой температуре ($T \ll E_F$) вместо (13) для термоэдс получаем

$$S = -\frac{k_B}{e}\,\frac{\pi^2}{3}\,T\,\frac{d\tau_0(\mu)/d\mu}{\tau_0(\mu)} = -\frac{k_B}{e}\,\frac{\pi^2}{3}\,T\,\frac{dn}{d\mu}\,\frac{d\tau_0(n)/dn}{\tau_0(n)} \quad (23)$$

и знак S противоположен знаку $d\tau_0(n)/dn$.

Для коэффициента Холла вместо (15) получаем

$$R_H = -\frac{a^2}{e}\,\frac{4\tau_{0H}(n)}{\tau_0^2(n)} \quad (24)$$

и знак R_H противоположен знаку $\tau_{0H}(n)$. Отметим, что $\partial^2\varepsilon(\mathbf{p})/\partial p_y^2$ — единственная знакопеременная величина в (22).

На рис. 2 приведены спектры $\varepsilon(\mathbf{p})$ по симметричным направлениям зоны Брюллиэна (рис. 2*a, b*) и поверхности Ферми, отвечающие различным значениям заполнения зоны (рис. 2*c, d*) для двух вариантов t'/t. В случае полной электрон-дырочной симметрии ($t' = 0$) и при половинном заполнении наблюдается смена типа поверхности Ферми (рис. 2*c*) от электронного кармана вокруг Г-точки зоны Брюллиэна, характерного для $n < 0.5$ к дырочному карману вокруг М-точки зоны Брюллиэна, характерному для $n > 0.5$. Вследствие электрон-дырочной симметрии области практически квадратичного электронного (вблизи Г-точки) и дырочного (вблизи М-точки) спектра одинаковы (рис. 2*a*). Поэтому τ_{0H} и соответственно R_H меняют знак при половинном заполнении (рис. 2*f*). Вследствие электрон-дырочной симметрии $\tau_0(n) = \tau_0(0.5 + n)$ ($n \leqslant 0.5$) и производная $d\tau_0(n)/dn$ (а значит, и S) также может менять знак только при половинном заполнении (см. рис. 2*e*).

При нарушении электрон-дырочной симметрии ($t'/t = -0.4$) область квадратичного электронного спектра влизи Г-точки зоны Брюллиэна становится совсем узкой, а область квадратичного дырочного спектра вблизи М-точки, наоборот, становится гораздо шире (см. рис. 2*b*). Соответственно область, где поверхность Ферми является электронным карманом вокруг Г-точки, ограничена малыми заполнениями $n < 0.3$, а в широкой области заполнений $n \geqslant 0.3$ поверхность Ферми имеет характер дырочного кармана вокруг М-точки зоны Брюллиэна (рис. 2*d*). Поэтому смена знака τ_{0H} и соответственно R_H наблюдается при заполнении $n \approx 0.4$ меньше половинного (рис. 2*e*). Более того, величина положительных значений $\tau_{0H}(n)$ при $n < 0.4$ существенно меньше модуля отрицательных значении $\tau_{0H}(n)$ при $n > 0.4$, поэтому «размазка» картины за счет производной от функции распределения $(-\partial f/\partial\varepsilon)$ в (6) при высоких температурах приводит к тому, что R_H меняет знак при гораздо меньшем заполнении (рис. 1*d*). В частности, при $T/8t = 0.06$ R_H меняет знак при $n \approx 0.2$.

Величина $\tau_0(n)$ при $t'/t = -0.4$ (рис. 2*e*), наоборот, имеет максимум при заполнении n больше половинного, и смена знака $d\tau_0(n)/dn$, а значит, и S наблюдается при $n \approx 0.66$. Естественно, что поведение $\tau_0(n)$ достаточно симметрично относительно максимума, а «размазка» за счет производной от функции распределения в (2) вблизи этого максимума мало изменяет S, поэтому заполнение $n \approx 0.66$, при котором меняет знак термоэдс, мало изменяется с ростом температуры (см. рис. 1*b*).

Таким образом, с ростом $|t'|$ заполнение, при котором меняет знак R_H, все более смещается в область n меньше половинного заполнения зоны, а заполнение, при котором меняет знак S, все более смещается в область $n > 0.5$. В результате, с ростом $|t'|$ вблизи половинного заполнения возникает все более широкая область заполнений, в которой коэффициент Холла и термоэдс имеют разный знак, и рост температуры только увеличивает эту область. Ниже мы увидим, что такая тенденция наблюдается и в системах с сильными электронными корреляциями.

4. ТЕРМОЭДС В СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННОМ МЕТАЛЛЕ И ДОПИРОВАННОМ МОТТОВСКОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

Прежде чем переходить к результатам DMFT-расчетов, следуя [4, 5], проведем простейший качественный анализ. Нетрудно понять, что глубоко в состоянии моттовского диэлектрика с хорошо определенными верхней и нижней хаббардовскими зонами при допировании дырками и термоэдс, и коэффициент Холла фактически определяются заполнением нижней хаббардовской зоны (верхняя находится существенно выше по энергии и практически не заполнена). В такой ситуации в модели с электрон-дырочной симметрией (в двумерном случае это соответствует спектру с $t' = 0$) оценка заполнения зоны, при котором происходит смена знака термоэдс, может быть получена из очень простых соображений. Будем рассматривать парамагнитную фазу $n_\uparrow = n_\downarrow = n$, так что n далее обозначает плотность электронов на одну проекцию спина, а их полная плотность равна $2n$. Далее мы будем рассматривать лишь дырочное допирование моттовского диэлектрика, и число таких «дырок» $p = 1 - 2n$.

В условиях электрон-дырочной симметрии естественно предположить, что смена знака и термоэдс, и коэффициента Холла происходит вблизи половинного заполнения нижней хаббардовской зоны $n_0 \approx 1/2$. Пусть мы рассматриваем состояния с проекцией спина «вверх», тогда полное число состояний в нижней хаббардовской зоне есть $1 - n_\downarrow = 1 - n$. Для заполнения зоны получаем $n = n_\uparrow = n_0(1-n) \approx 1/2(1-n)$. Таким образом, для заполнения, при котором происходит смена знака термоэдс и коэффициента Холла, получаем $n_c \approx 1/3$ и число «дырок» $p_c = 1 - 2n_c \approx 1/3$ [4, 5].

В общем случае ситуация конечно сложнее. В сильнокоррелированных системах и термоэдс, и коэффициент Холла (как и другие электронные

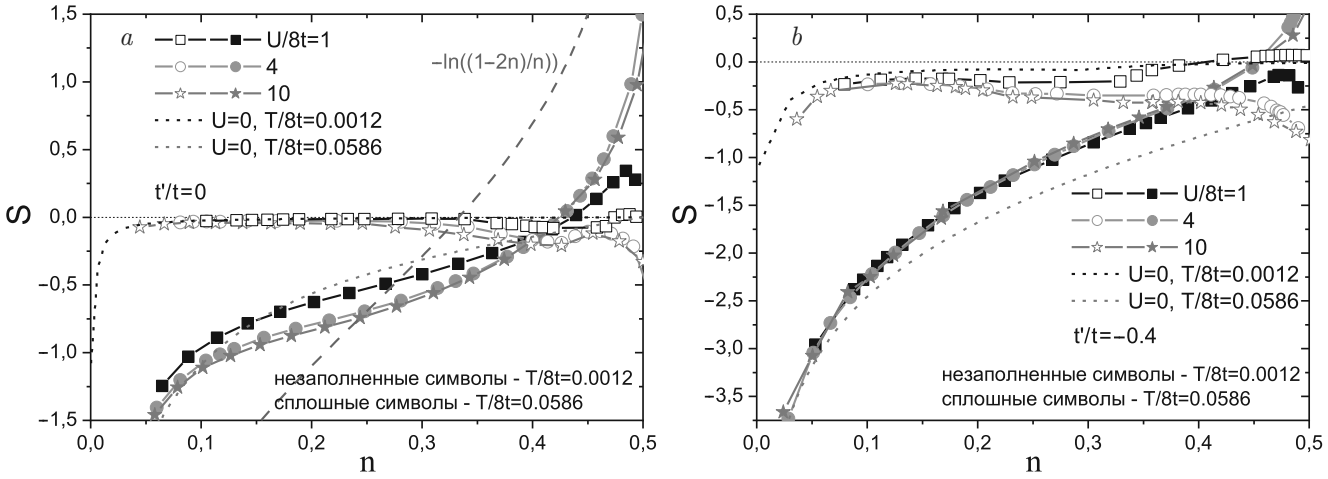


Рис. 3. Зависимость термоэдс в случае $t' = 0$ (a) и $t'/t = -0.4$ (b) от степени заполнения зоны для различных значений силы электронных корреляций U в низкотемпературном режиме (незаполненные символы) и в высокотемпературном режиме (заполненные символы)

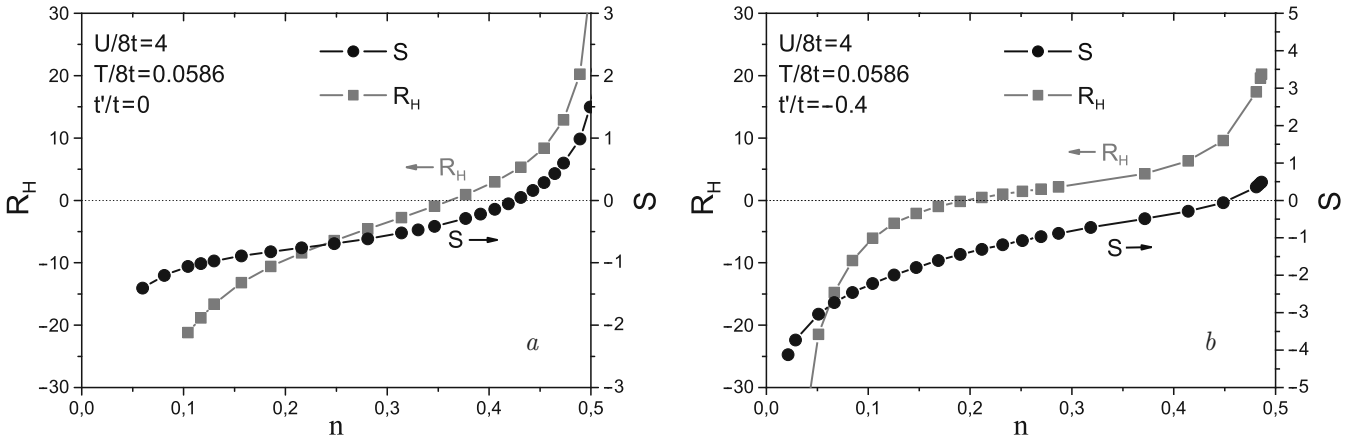


Рис. 4. Сравнение высокотемпературных зависимостей термоэдс и коэффициента Холла [4, 5] от степени заполнения зоны для $t' = 0$ (a) и $t'/t = -0.4$ (b)

свойства) оказываются существенно зависящими от температуры. При низкой температуре в таких системах в DMFT-приближении наряду с нижней и верхней хаббардовскими зонами вблизи уровня Ферми формируется узкая квазичастичная зона — так называемый квазичастичный пик в плотности состояний [1–3]. В допированном дырками моттовском диэлектрике такой пик лежит вблизи верхнего края нижней хаббардовской зоны. Поэтому при низкой температуре термоэдс, как и коэффициент Холла, во многом определяется заполнением этой квазичастичной зоны. При достаточно высокой температуре (порядка или больше ширины квазичастичного пика) этот пик размывается и термоэдс полностью определяется заполнением нижней хаббардовской зоны. Таким образом, при анализе термоэдс, как и для эффекта Холла [4,5], необходимо рассматривать два существенно разных температурных режима.

На рис. 3 приведена зависимость термоэдс от заполнения зоны, как в сильнокоррелированном металле ($U/8t = 1$), так и в допированном моттовском диэлектрике ($U/8t = 4, 10$). Видим, что в высокотемпературном режиме (кривые с заполненными символами) термоэдс даже в модели с полной электрон-дырочной симметрией $t' = 0$ (рис. 3a) в допированном моттовском диэлектрике изменяет знак при заполнении заметно ближе к половинному ($n = 0.42$), чем показывает наша качественная оценка. Отметим, что коэффициент Холла [4, 5] в этом случае меняет знак при $n_H \sim 0.36$ (см. рис. 4a), что достаточно близко к нашей качественной оценке. Для сравнения на рис. 3a синей штриховой линией приведен точный результат [12]:

$$S = -\frac{k_B}{e} \ln \frac{2p}{1-p} = -\frac{k_B}{e} \ln \frac{1-2n}{n} \qquad (25)$$

для предела $U \gg t$. Видим, что в этом атомном пре-

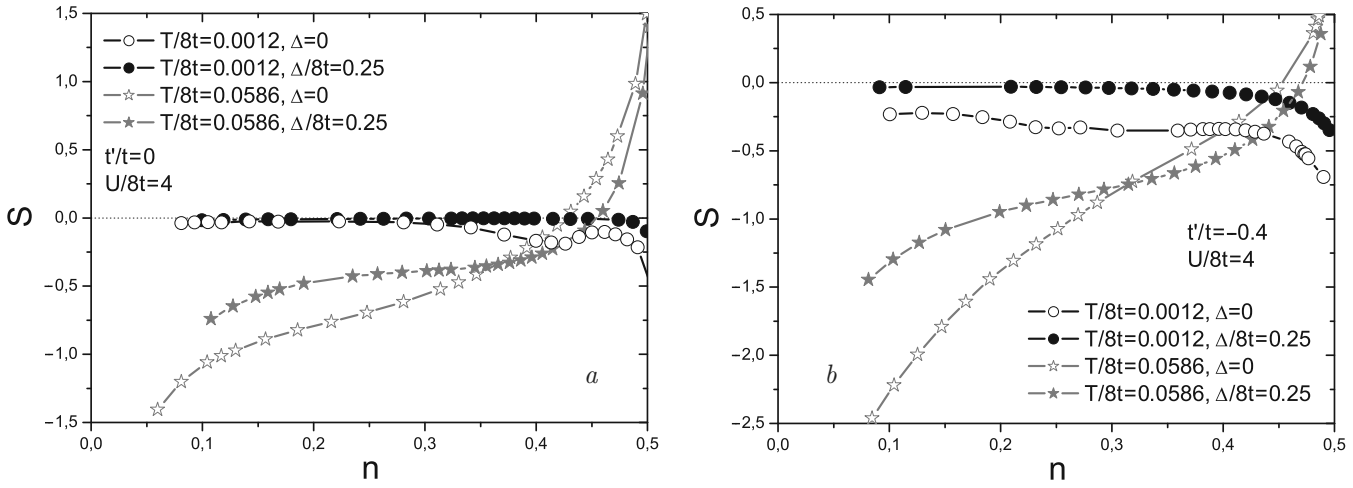


Рис. 5. Зависимость термоэдс от степени заполнения зоны в присутствии примесного рассеяния ($\Delta/8t = 0.25$, заполненные символы) и в его отсутствии ($\Delta = 0$, незаполненные символы) для $t' = 0$ (a) и $t'/t = -0.4$ (b)

деле термоэдс меняет знак при $n = 1/3$ в полном соответствии с нашей оценкой. Возможно, что такое заметное отличие является следствием использования нами приближения DMFT. Кластерная DMFT-модель [9] и расчеты Монте-Карло [13] дают при $U \gg t$ для термоэдс поведение существенно ближе к точному результату (25). Недостатком этих подходов является, однако, возможность проведения расчетов лишь области очень высоких температур $T \sim t$.

При заметном нарушении электрон-дырочной симметрии наша качественная оценка перестает выполняться и для коэффициента Холла [4, 5], и для термоэдс (см. рис. 3*b*). Причем в соответствии с приведенным нами выше анализом случая $U = 0$ отклонение от электрон-дырочной симметрии приводит к уменьшению заполнения, при котором происходит смена знака коэффициента Холла [4, 5], и увеличению заполнения (уменьшению уровня дырочного допирования), при котором происходит смена знака термоэдс (см. рис. 4*b*). Таким образом, и в сильнокоррелированных системах нарушение электрон-дырочной симметрии приводит к достаточно широкой области заполнения, при которой коэффициент Холла и термоэдс имеют разные знаки.

Для сравнения высокотемпературного поведения термоэдс и коэффициента Холла [4,5] в дырочно-допированном моттовском диэлектрике их зависимость от заполнения зоны приведена на рис. 4 для $t'/t = 0; -0.4$.

В низкотемпературном пределе (кривые с незаполненными символами на рис. 3) наличие квазичастичного пика приводит в допированном моттовском диэлектрике к отсутствию смены знака термоэдс, которая остается отрицательной (электронной) во всей области дырочного допирования. Отметим, что и коэффициент Холла при низких температурах становится положительным (дырочным) лишь в узкой области вблизи половинного заполнения, т. е. при очень маленьком дырочном допировании [4, 5]. В низкотемпературном режиме и ширина, и амплитуда квазичастичного пика зависят как от заполнения, так и от температуры. Существенная зависимость квазичастичного пика от заполнения зоны в низкотемпературном режиме приводит к достаточно широкой области заполнений зоны, где термоэдс уменьшается с ростом n (см. рис. 3). Такие аномалии зависимости от заполнения, связанные с квазичастичным пиком, для термоэдс даже заметно сильнее, чем для коэффициента Холла [4, 5].

К размытию и исчезновению квазичастичного пика приводит не только рост температуры, но и разупорядочение [6, 14], а также, например, псевдощелевые флуктуации, которыми локальный подход DMFT полностью пренебрегает [6, 15]. Таким образом, область применимости приведенных выше простейших оценок и качественного поведения термоэдс в рамках DMFT для высокотемпературного режима в реальности может оказываться заметно шире.

В общем случае расчет влияния рассеяния на беспорядке (тем более псевдощелевых флуктуаций) на термоэдс представляет собой очень сложную задачу. Для простых оценок ниже приводятся результаты расчетов по формулам (2), (3), в которых просто использованы значения спектральной плотности $A(\mathbf{p}\varepsilon)$ для неупорядоченной модели Хаббарда, полученные в рамках подхода DMFT+Σ [6,15]. Параметр беспорядка Δ здесь обозначает эффективную частоту рассеяния электронов случайным полем при-

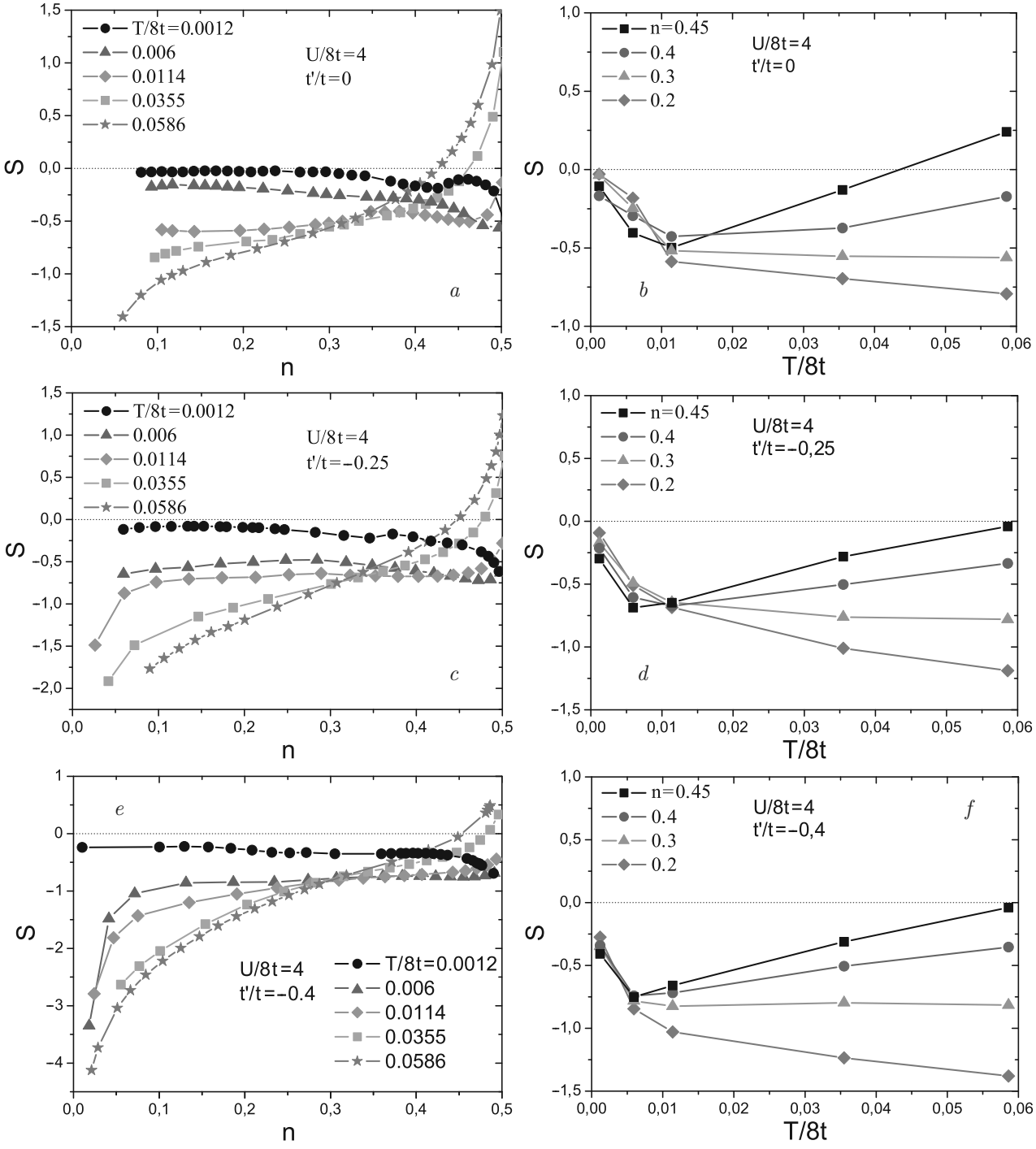


Рис. 6. Зависимость термоэдс от степени заполнения зоны для различных значений температуры (a,c,e) и температурная зависимость S для разных значений заполнения зоны (b,d,f)

месей (в самосогласованном борновском приближении). Ясно, что такой подход, основанный только на учете беспорядка в спектральной плотности, является чересчур упрощенным, но он представляется разумным для качественного анализа.

На рис. 5 приведено сравнение зависимостей термоэдс от степени заполнения зоны в отсутствие беспорядка (незаполненные символы) и для рассеяния на примесях с $\Delta/8t = 0.25$ для случая моттовского диэлектрика $U/8t = 4$. Если в высокотемпературном режиме беспорядок достаточно слабо влиял на коэффициент Холла [4, 5] для различных значений t'/t, то для термоэдс влияние беспорядка даже в этом режиме вполне заметно. Беспорядок приводит к уменьшению термоэдс при заполнениях вблизи половинного (малое дырочное допирование), при-

водя к уменьшению дырочного допирования, при котором происходит смена знака S. При достаточно большом дырочном допировании, где термоэдс отрицательна, рост беспорядка приводит к довольно заметному уменьшению абсолютной величины S. В низкотемпературном режиме, где термоэдс отрицательна, при любом дырочном допировании рост беспорядка приводит к сильному уменьшению абсолютной величины термоэдс.

На рис. 6 приведены зависимости термоэдс от степени заполнения зоны и температуры в случае моттовского диэлектрика с $U/8t = 4$ для различных моделей электронного спектра, как в случае полной электрон-дырочной симметрии $t' = 0$, так и при $t'/t = -0.25$ и $t'/t = -0.4$, характерных для купратных систем LSCO и YBCO соответственно.

На зависимости S от степени заполнения зоны мы наблюдаем плавную эволюцию от низкотемпературного режима к высокотемпературному. Если при низких температурах для всех рассмотренных значений t'/t термоэдс отрицательна при любом заполнении, то с ростом температуры вблизи половинного заполнения появляется область положительных значений термэдс. Дырочное допирование, при котором происходит смена знака S, растет с ростом температуры и уменьшается с ростом $|t'/t|$. Необходимо отметить, что для коэффициента Холла [4, 5] рост $|t'/t|$, наоборот, приводит к увеличению области дырочных допирований с положительным дырочным коэффициентом Холла и росту дырочного допирования, при котором R_H меняет знак. Ситуация во многом аналогичная тому, что мы наблюдали в отсутствие корреляций ($U = 0$) — рост $|t'/t|$ приводит к увеличению заполнения зоны, при котором меняет знак термоэдс, и уменьшению заполнения, при котором меняет знак R_H.

На рис. 6*b,d,f* приведены температурные зависимости термоэдс для различных степеней заполнения зоны. Во всех случаях наблюдается существенная зависимость S от температуры. Во всех случаях при низкой температуре термоэдс отрицательна и по абсолютной величине растет с ростом температуры. При высоких температурах вблизи половинного заполнения (малое дырочное допирование) термоэдс растет с ростом температуры со сменой знака S и положительной величине S при высоких T. При малом заполнении (большом дырочном допировании) абсолютная величина S при высоких температурах продолжает расти с ростом T, хотя и медленнее, чем при низких температурах.

В последнее время появились расчеты термоэдс в модели Хаббарда методом квантового Монте-Карло [13] при достаточно разумной температуре $T = t/4$. Результаты этих расчетов хорошо воспроизводят экспериментальные данные по термоэдс при комнатной температуре для целого ряда дырочных купратов (см. рис. 1 в [13]). В частности, они воспроизводят смену знака термоэдс при дырочном допировании $p \approx 0.15$. На рис. 7 проведено сравнение результатов наших DMFT-расчетов с Монте-Карло [13]. Видим, что результаты наших DMFT-расчетов термоэдс при $U/8t = 4$ близки к результатам Монте-Карло при $U/8t \approx 1$, а значит, и к экспериментальным данным при комнатной температуре для термоэдс в купратах. Отметим, что в рамках DMFT-приближения при $U/8t = 1$ система еще остается (даже при половинном заполнении) сильнокоррелированным металлом, а при $U/8t = 4$ является допированным моттовским диэлектриком, каковыми обычно считаются купраты.

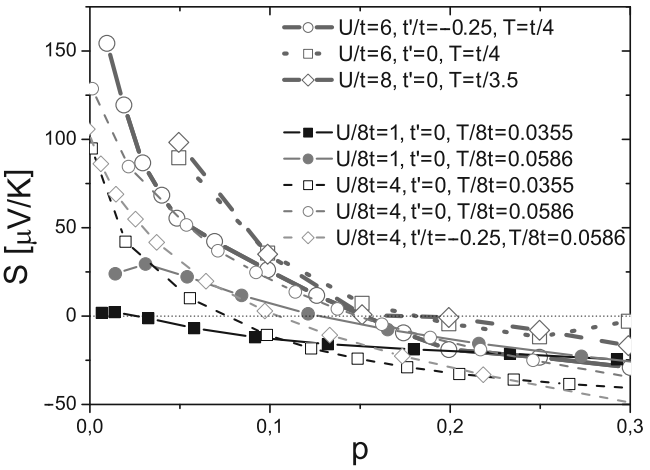


Рис. 7. Сравнение результатов DMFT и расчетов Монте-Карло [13] (толстые синие кривые) для зависимости термоэдс от дырочного допирования p

5. ОЦЕНКА КОНЦЕНТРАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА, ТЕРМОЭДС И КОЭФФИЦИЕНТА ХОЛЛА ПО ДАННЫМ ARPES

Измерение термоэдс и коэффициента Холла относятся к основным экспериментальным методам определения типа и концентрации носителей заряда. Однако, как продемонстрировано выше, особенно в условиях нарушения электрон-дырочной симметрии ($t' \neq 0$) возникает широкая область заполнений зоны, где термоэдс и эффект Холла дают разные типы носителей заряда (p–n-аномалия). Как показано в [4, 5], в области допирований, где происходит смена знака эффекта Холла резко возрастет холловское число (число носителей, формально опре-

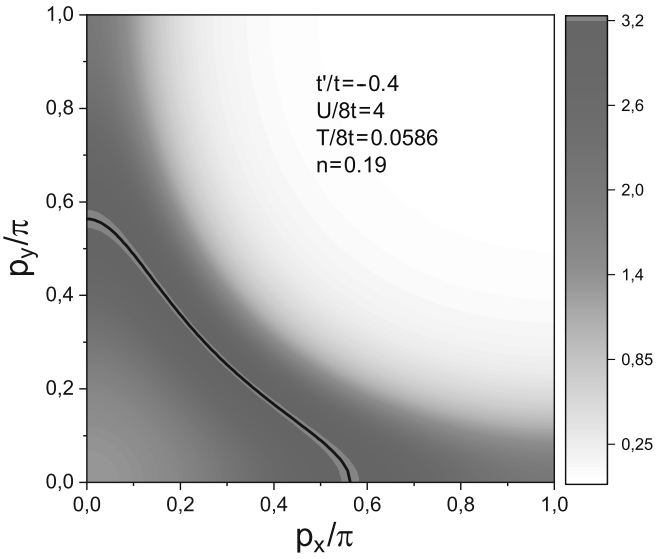


Рис. 8. Спектральная плотность в четверти зоны Бриллюэна. Кривая — поверхность Ферми, определяемая уравнением (26)

деляемое из этого эффекта), так что оно не может служить величиной, определяющей реальное число носителей заряда.

Ниже мы продемонстрируем, что для полуколичественной оценки числа носителей заряда, а также для оценки термоэдс и коэффициента Холла в допированном моттовском диэлектрике достаточно данных ARPES и электронного спектра, полученного в рамках стандартных DFT-расчетов.

В системах с сильными электронными корреляциями, в том числе и в допированном моттовском диэлектрике, продолжает работать фермижидкостное описание, поверхность Ферми остается хорошо определенной, как и квазичастицы вблизи нее [16]. На рис. 8 приведена спектральная плотность $A(\mathbf{p}, 0)$ на уровне Ферми, полученная в рамках DMFT в высокотемпературном режиме, когда температура заметно больше ширины квазичастичного пика, но все еще заметно меньше энергии Ферми. Заполнение зоны взято равным $n = 0.19$, при котором в случае $t'/t = -0.4$ коэффициент Холла меняет знак [4, 5]. Видим, что спектральная плотность достаточно «размыта», но имеет максимум на поверхности Ферми, показанной на рис. 8 черной кривой, полученной из уравнения

$$\mu - \varepsilon(\mathbf{p}) - \operatorname{Re}\Sigma(0) = 0, \tag{26}$$

где μ — химический потенциал, определяемый заполнением в рамках DMFT, а $\Sigma(0)$ — локальная (DMFT) собственно-энергетическая часть на уровне Ферми.

Введем теперь $\mu_{eff} = \mu - \operatorname{Re}\Sigma(0)$, тогда вместо (26) получаем уравнение

$$\mu_{eff} - \varepsilon(\mathbf{p}) = 0, \tag{27}$$

определяющее поверхность Ферми, как в случае без электронных корреляции ($U = 0$), но с химическим потенциалом μ_{eff}. Конечно, в общем случае спектральная плотность заметно «размазана» вокруг поверхности Ферми, но ее максимум лежит на ней (рис. 8). Поэтому для качественной (но более простой) оценки коэффициента Холла и термоэдс мы можем воспользоваться отвечающими $U = 0$ формулами (23) и (24), но с $\mu \to \mu_{eff}$. Естественно, заполнение n_0, отвечающее химическому потенциалу μ_{eff} в системе без электронных корреляции ($U = 0$), не совпадает с реальным заполением зоны n в коррелированной системе. Разумно предположить, что это n_0 просто соответствует заполнению нижней хаббардовской зоны. Тогда, зная n_0, можно легко получить полное заполнение n всей зоны. Действительно, полное число состояний в нижней хаббардовской зоне $1 - n$, так что полное заполнение $n = n_0(1 - n)$, и мы получаем

$$n = \frac{n_0}{1 + n_0}. \tag{28}$$

На рис. 9 приведены зависимости между n_0 и n, а также сравнение простых оценок для коэффициента Холла и термоэдс с точными DMFT-результатами. В высокотемпературном режиме ($T/8t = 0.0586$), когда пропадает квазичастичный пик в плотности состояний, видим, что соотношение (28) неплохо выполняется. Оценки, полученные в таком подходе для термоэдс S_0 и особенно для коэффициента Холла R_{H0}, оказываются достаточно близкими к точным результатам.

В низкотемпературном режиме наличие квазичастичного пика в плотности состояний в приближении DMFT приводит к тому, что соотношение (28) перестает выполняться и n_0 фактически совпадает с n. Полученная оценка для коэффициента Холла R_{H0} очень близка к точным DMFT-результатам (за исключеннием аномалий в R_H, связанных с квазичастичным пиком при $t' = 0$ [4, 5] (рис. 9*h*). В то же время оценка термоэдс при низких температурах оказывается неудовлетворительной. Это, вероятно, связано с более существенной для термоэдс ролью «размытия» спектральной плотности вокруг поверхности Ферми и аномалий, связанных с заполнением квазичастичного пика.

Необходимо еще раз отметить, что аномалии в низкотемпературном режиме определяются наличи-

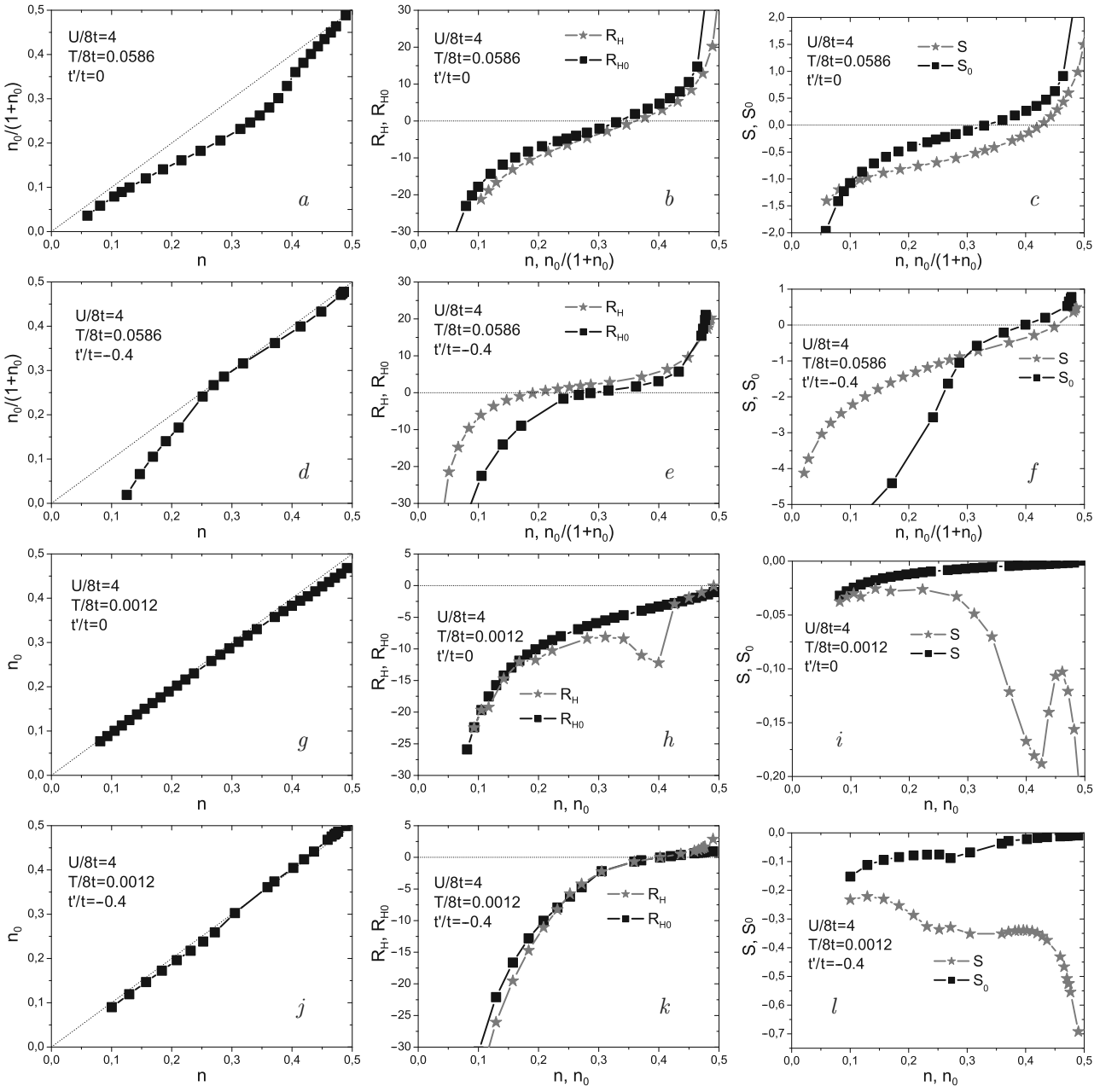


Рис. 9. Связь между эффективным заполнением зоны без корреляций n_0 и полным заполнением коррелированной зоны n (a,d,g,j). Сравнение оценок, полученных для коэффициента Холла R_{H0} (b,e,h,k) и термоэдс S_0 (c,f,i,l), с DMFT-результатами (R_H, S)

ем квазичастичного пика в DMFT-приближении, который пропадает как при повышении температуры, так и вследствие беспорядка, а также при учете нелокальных корреляций при выходе за рамки DMFT. Поэтому наиболее вероятно, что качественно результаты, полученные в высокотемпературном режиме, являются достаточно общими.

Используя данные ARPES для допированного моттовского диэлектрика, можно определить n_0 (фактически это площадь части зоны Брюллюэна под поверхностью Ферми) и с использованием (28) определить полное заполнение n, а значит, и уровень дырочного допирования $p = 1 - 2n$. Стандартные DFT-расчеты электронного спектра с учетом заполнения некоррелированной зоны n_0 позволяют с использованием (23) и (24) провести таким образом и оценку R_H и S.

Фактически эти результаты находятся в полном соответствии с картиной «скрытой» ферми-жидкости, предложенной в [16].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали поведение термоэдс в металлической фазе, возникающей при допировании моттовского диэлектрика. Основное внимание мы уделили случаю дырочного допирования, характерного для большей части купратов. Был рассмотрен ряд двумерных моделей сильной связи для электронного спектра, подходящих для описания электронной структуры в купратах. Во всех моделях в допированном моттовском диэлектрике наблюдается аномальная температурная зависимость термоэдс S, существенно отличающаяся от линейной, характерной для обычных металлов. В низкотемпературном пределе S во многом определяется заполнением квазичастичного пика, что приводит к отрицательности термоэдс при любом дырочном допировании и аномальной зависимости S от заполнения, когда отрицательная (электронная) термоэдс растет по абсолютной величине с добавлением электронов. Для термоэдс низкотемпературные аномалии, связанные с заполнением квазичастичного пика, оказываются гораздо сильнее, чем для коэффициента Холла. В высокотемпературном пределе, когда квазичастичный пик существенно подавлен, S в основном определяется заполнением нижней (при дырочном допировании) или верхней (при электронном допировании) хаббардовской зоны. В этом пределе качественная оценка показывает, что смена знака S, как и эффекта Холла, в простейшем (симметричном $t' = 0$) случае должна происходить при заполнении зоны $n = 1/3$ в расчете на одну проекцию спина, что соответствует дырочному допированию $p = 1 - 2n = 1/3$. DMFT-расчеты показывают, что смена знака S в этом случае наблюдается при $n = 0.42$, а смена знака эффекта Холла при $n = 0.36$. Таким образом, даже в случае электрон-дырочной симметрии есть узкая область заполнений, где R_H уже положителен, а S еще отрицательна. Нарушение электрон-дырочной симметрии приводит к росту заполнения n, при котором меняет знак S, и уменьшению n, при котором меняет знак R_H, приводя к появлению достаточно широкой области заполнений, где термоэдс и коэффициент Холла имеют разные знаки. Предложена схема, позволяющая по ARPES-данным получать число носителей заряда в допированном моттовском диэлектрике и с использованием DFT-расчетов электронного спектра проводить полуколичественную оценку коэффициента Холла и термоэдс.

В принципе, на качественном уровне возможность разных знаков термоэдс и эффекта Холла известна довольно давно и наблюдалась в целом ряде экспериментов в неупорядоченных системах [17, 18]. Систематическое исследование термоэдс в купратах в зависимости от степени допирования было проведено в работах [19, 20]. Было продемонстрировано, что термоэдс целого ряда купратов меняет знак вблизи уровня дырочного допирования $p = 1 - 2n \approx 0.1$–0.2 в окрестности оптимального уровня допирования $p \approx 0.16$, соответствующего максимуму температуры сверхпроводящего перехода. В работе [21] такое поведение термоэдс было интерпретировано как связанное с близостью к некоторой квантовой критической точке, связанной с отделением верхней хаббардовской зоны. К сожалению, в этих работах не было проведено сравнение с данными по эффекту Холла. В работах [22–25] были проведены измерения эффекта Холла для ряда купратов при низких температурах в экстремально сильных магнитных поля (в нормальной фазе), которые также продемонстрировали аномальное поведение (рост холловского числа носителей) для уровня допирования $p \approx 0.2$–0.25. В этих работах аномальное поведение эффекта Холла было связано с близостью квантовой критической точки, соответствующей закрытию псевдощели. В работах [4,5] такое поведение эффекта Холла было интепретировано как связанное с близостью к точке смены знака этого эффекта (которое, впрочем, не наблюдалось в образцах, исследованных в [22–25]) безотносительно к наличию квантовой критической точке. Полученные выше результаты DMFT-приближения находятся в качественном соответствии с экспериментальными данными. В частности, уровень дырочного допирования моттовского диэлектрика, при котором меняет знак термоэдс, всегда получается меньше уровня допирования, при котором меняет знак эффект Холла. Все это подчеркивает важность систематического сравнительного изучения эффекта Холла и термоэдс в купратах.

Благодарности. Авторы признательны П. Филлипсу (P. Phillips), обратившему наше внимание на важность исследования концентрационной зависимости термоэдс в рамках DMFT, а также Д. И. Хомскому, принявшему активное участие в начальной стадии работы по эффекту Холла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995).

2. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

3. D. Vollhardt, in *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, ed. by A. Avella and F. Mancini, AIP Conf. Proc., AIP, Melville, New York, Vol. 1297 (2010), p. 339; ArXiV: 1004.5069.

4. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, Д. И. Хомский, М. В. Садовский, Письма ЖЭТФ **115**, 444 (2022) [JETP Letters **115**, 402 (2022)].

5. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, М. В. Садовский, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **163**, 417 (2023) [JETP **136**, 368 (2023)].

6. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012) [Physics Uspekhi, **55**, 325 (2012)].

7. G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held, Rev. Mod. Phys. **90**, 025003 (2018).

8. О. Маделунг, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1980) [O. Madelung, *Festkörpertheorie*, Springer-Verlag, Berlin (1973)].

9. S. Chakraborty, D. Galanakis, and P. Phillips, Phys. Rev. B **82**, 214503 (2010).

10. R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, Rev. Mod. Phys. **60**, 395 (2008).

11. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир , Москва (1974) [J. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press (1973)].

12. G. Beni, Phys. Rev. B **19**, 2186 (1974).

13. W. O. Wang, J. K. Ding, E. W. Huang, B. Moritz, and Th. P. Devereaux, arXiv: 2302.13169.

14. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **133**, 670 (2008) [JETP **106**, 581 (2008)].

15. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B**72**, 155105 (2005).

16. Wenhu Xu, K. Haule, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **111**, 036401 (2013).

17. R. S. Allgaier, Phys. Rev. **185**, 227 (1969).

18. Н. Мотт, Э. Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, Мир, Москва (1982) [N. F. Mott, E. A. Davis, *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*, Clarendon Press, Oxford (1979)].

19. S. D. Obertelli, J. R. Cooper, and J. L. Tallon, Phys. Rev. B **46**, 14928 (1992).

20. T. Honma and P. H. Hor, Phys. Rev. B **77** , 184520 (2008).

21. A. Garg, B. Sriram Shastry, K. B. Dave, and P. Phillips, New J. of Phys. **13**, 08332 (2011).

22. F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G. S. Boebinger, Phys. Rev. Lett. **101**, 017004 (2009).

23. S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberte, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Beard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, and C. Proust, Nature **531**, 210 (2016).

24. C. Collignon, S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, F. Laliberte, O. Cyr-Choiniere, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud, anf L. Taillefer, Phys. Rev. B**95**, 224517 (2017).

25. C. Proust and L. Taillefer, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10** 409 (2019).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1070–1086 © 2023

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДРОБЛЕНИЯ КАПЛИ ЖИДКОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВОЗДУШНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

К. В. Анисифоров [a], ***А. Б. Георгиевская*** [a,b,c*], ***Е. В. Левкина*** [a], ***Н. В. Невмержицкий*** [a,b], ***В. А. Раевский***, ***Е. Д. Сеньковский*** [a], ***Е. А. Сотсков*** [a]

[a] *Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ) 607188, Саров, Нижегородская обл., Россия,*

[b] *СарФТИ НИЯУ МИФИ 607186, Саров, Нижегородская обл., Россия*

[c] *Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева 603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 10 ноября 2022 г.,
после переработки 23 марта 2023 г.
Принята к публикации 23 марта 2023 г.

Приведены результаты расчетно-экспериментальных исследований фрагментации капли жидкости (вода, спирт, глицерин) при воздействии воздушной ударной волны с давлением 0.2 и 3.2 ати. Эксперименты проводились на воздушной ударной трубе; диаметр капли жидкости составлял приблизительно 0.6 мм и 2 мм. Процесс регистрировался скоростной видеосъемкой. Зарегистрированы частицы диспергированной жидкости размером от ≈ 5 мкм, построены распределения частиц жидкости по размерам и определены скорости отдельных частиц. Экспериментальные результаты сопоставлены с результатами расчетно-теоретических оценок.

DOI: 10.31857/S0044451023120192
EDN: MYJPPQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В ряде прикладных задач, например, при автогенных катастрофах на опасных производственных объектах ударная волна (УВ) может проходить через облако частиц диспергированной взрывоопасной жидкости и приводить к дополнительному их дроблению. Мелкие фрагменты жидкости могут воспламениться и привести к большим разрушениям. Поэтому для прогнозирования масштабов разрушения при авариях и принятия мер дополнительной защиты важно иметь математическую модель, описывающую процесс фрагментации капель и формирования дисперсной среды. При этом прямое численное моделирование дробления жидкости в газовом потоке сопряжено с определенными сложностями. Это связано с необходимостью проведения расчетов в широком диапазоне размеров — от миллиметров до нескольких микрон, что требует большого количества счетных ячеек и, соответственно, сверхмощных компьютеров. С другой стороны, процесс дробления контролируется поверхностным натяжением, прямое моделирование которого в программных комплексах, предназначенных для расчета быстропротекающих процессов, сложно. Дополнительные трудности вносит необходимость учета теплообмена между газом и жидкостью и испарения последней.

Экспериментальные исследования дробления жидкости и последующего испарения образующихся капель после воздействия ударной волны ведутся давно. Результаты исследования процессов взаимодействия капель жидкости с воздушной ударной волной подробно отражены в обзорных работах [1–3]. В частности, в работе [3] оценены

* E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

минимальные размеры капель воды и ряда органических соединений (углеводородов), образующихся в результате процессов дробления и испарения, на основе расчетного анализа высокоскоростной регистрации.

В работе [4] на ударной трубе исследовалось дробление капли жидкости (бензин, керосин, чернила, глицерин) после прохождения УВ методом проектирования фрагментов капли на измерительный экран и последующей компьютерной обработки отпечатков капель. Автором работы [4] на основе полученных результатов построена эмпирическая модель, позволяющая рассчитывать средний размер в облаке образующихся капель жидкости в зависимости от числа Лапласа и соотношения плотностей газа до и после прохождения УВ. Диапазон применимости модели по числу Лапласа $\mathrm{La} = \sigma\rho L/\eta^2 \approx (5.8\text{–}9.0)\cdot 10^4$ (где L — характеристическая длина, σ — коэффициент поверхностного натяжения, ρ — плотность жидкости, η — динамическая вязкость), по соотношению сжатия газа после прохождения УВ — (1.1–1.3).

В работах, посвященных исследованиям начальной стадии деформирования капли и уноса вещества с ее поверхности [5], условиям воспламенения аэрозолей жидкого горючего в газообразном окислителе [6], определено влияние параметров УВ (плотности газа, скоростных характеристик потока) и жидкости (вязкости и поверхностного натяжения) на среднемассовый размер отрывающихся капель и время их отрыва. В зависимости от числа Вебера основными механизмами формирования частиц выступают либо срыв пограничного слоя, либо срыв микрочастиц с гребней возмущений на поверхности капли в результате развития неустойчивости Кельвина – Гельмгольца. Диапазон применимости расчетных зависимостей соответствует числам Рейнольдса $\mathrm{Re} < 10^3$ ($\mathrm{Re} = \rho v D_g/\eta = v D_g \nu$, где ρ — плотность среды, v — характерная скорость, D_g — гидравлический диаметр, η и ν — динамическая и кинематическая вязкость среды соответственно) и Вебера $\mathrm{We} < 5\cdot 10^3$ ($\mathrm{We} = \rho L v^2/\sigma$, где ρ — плотность среды, v — скорость, L — характеристическая длина, σ — коэффициент поверхностного натяжения).

Подробный обзор механизмов дробления капель жидкостей, основанный на зарубежных данных по глицерину, воде и силиконовым маслам, в зависимости от числа Вебера и Рейнольдса приведен в работе [7] и в отечественных монографиях [8,9]. Согласно этим данным изменение формы капли до ее полного разрушения в газовом потоке сильно зависит от величины числа Вебера. При числах $\mathrm{We} > 60$ капля всегда приобретает форму диска, с краев которого срывается слой или мелкие частицы (механизм обдирки слоя, либо взрывное дробление). В основной же массе капли процесс разрушения спровоцирован действием неустойчивости Рэлея – Тейлора. В итоге образовавшийся диск разрушается на более крупные фрагменты по сравнению с сорвавшейся с краев мелкой фракцией.

В последние два десятилетия активно развиваются оптические методы регистрации, основанные на использовании короткоимпульсных источников света ≈ 0.1–30 нс [10–12]. Применение подобных методов позволяет регистрировать не просто картину деформирования капли или оценивать средний размер образовавшихся частиц, а определять спектральное распределение частиц в потоке по полученным изображениям. Преимуществом такого метода исследования является отсутствие контакта жидкой частицы с какими-либо экранами, вносящими погрешность в оценку размера, а также возможность определять время установления окончательного спектра размеров частиц.

В РФЯЦ-ВНИИЭФ для регистрации процесса дробления капли воды был впервые применен микроскопический оптический метод [13]. Суть этого метода заключается в том, что поток частиц регистрируется видеокамерой через оптическую систему от микроскопа с большим оптическим увеличением (5–50 крат) при подсветке течения короткими лазерными импульсами (4–7 нс). В [14] были проведены исследования дробления и испарения капель ($d_0 \approx 2$ мм) в потоке воздуха за фронтом УВ амплитудой от $\Delta P \approx 0.2$ ати до $\Delta P \approx 42$ ати (где «ати» — обозначение для избыточного давления, равного разнице между абсолютным и атмосферным (барометрическим) давлением при условии, что абсолютное давление больше атмосферного) при больших значениях чисел Рейнольдса и Вебера: $\mathrm{Re} > 10^3$, $\mathrm{We} > 10^3$.

В работе [14] спектр размеров частиц жидкости после дробления капли определялся в окрестности переднего фронта потока частиц, т. е. не по всей области фрагментации капли. Анализ изображений указывал на то, что процесс формирования конечных размеров частиц еще не закончился. Таким образом, для уточнения спектрального распределения частиц по размеру полностью диспергированной жидкости на ударной трубе проведены экспериментальные (с применением метода [13]) и расчетные исследования разрушения капель воды под действием воздушной УВ амплитудой 0.2 ати

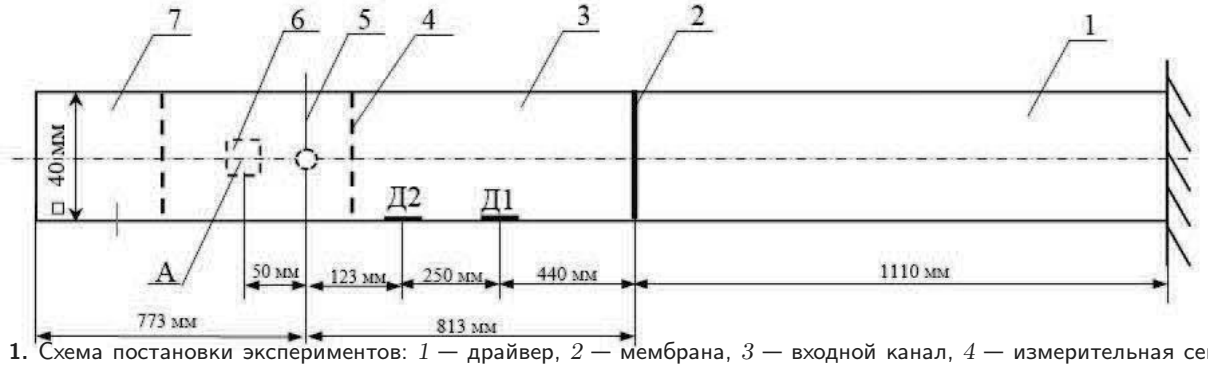


Рис. 1. Схема постановки экспериментов: *1* — драйвер, *2* — мембрана, *3* — входной канал, *4* — измерительная секция, *5* — игла, *6* — капля, *7* — выходной канал, Д1 и Д2 — датчики давления, А — область регистрации

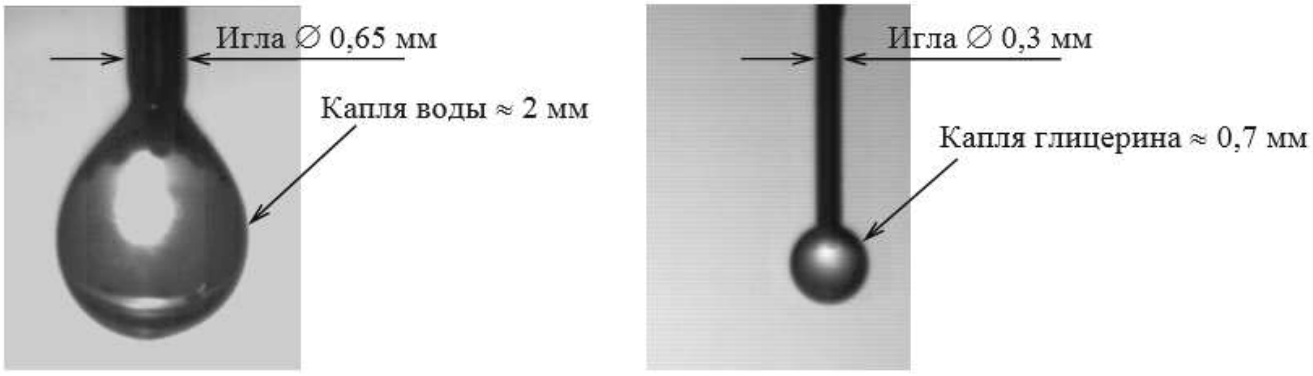


Рис. 2. Фото капли на игле

и 3.2 ати. Для сопоставления приводятся также результаты экспериментов по дроблению капель спирта и глицерина при значениях чисел Рейнольдса и Вебера, близких к используемым в экспериментах с каплей воды.

В данной работе приводятся результаты исследований конечной стадии разрушения жидкой капли — дробления капли за счет развитой неустойчивости Рэлея – Тейлора и образования спектра размеров частиц. Экспериментальные результаты сопоставлены с результатами расчетного моделирования.

2. ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Исследования проводились на воздушной ударной трубе. Схема постановки экспериментов представлена на рис. 1.

Ударная труба (УТ) состояла из камер высокого (драйвер) и низкого давлений. Драйвер герметично отделялся от камеры низкого давления мембраной из лавсана толщиной $h = (0.05–0.15)$ мм. Камера низкого давления состояла из входного и выходного каналов и измерительной секции с внутренним сечением 40×40 мм^2. УТ была изготовлена из стали, за исключением измерительной секции, состоящей из пластин прозрачного оргстекла, обрамленных в обоймы из металла.

Капля жидкости создавалась на конце иглы медицинского шприца. Диаметр капли жидкости составлял $d_0 \approx 0.6$ мм и $d_0 \approx 2$ мм (см. рис. 2).

Во входном, выходном каналах УТ и в измерительной секции находился воздух при атмосферных условиях. В драйвер УТ закачивался сжатый воздух под избыточным давлением. Мембрана разрушалась электровзрывом наклеенной на нее нихромовой проволочки при импульсном напряжении 60 кВ. После разрушения мембраны во входном канале УТ формировалась УВ интенсивностью $\Delta P \approx 0.2$ ати или $\Delta P \approx 3.2$ ати. По установленным в стенках УТ пьезокерамическим датчикам и расстоянию между ними определялись давление и скорость УВ. Массовая скорость потока воздуха за фронтом УВ рассчитывалась по известным соотношениям [15] (см. также табл. 2).

Для масштабирования частиц по центру сечения ударной трубы в месте предполагаемой видеорегистрации устанавливался репер в виде проволочки ∅350 мкм или 650 мкм. Перед динамическим опытом репер убирался. Начальный размер капли жидкости определялся по видеокадрам статических экспериментов.

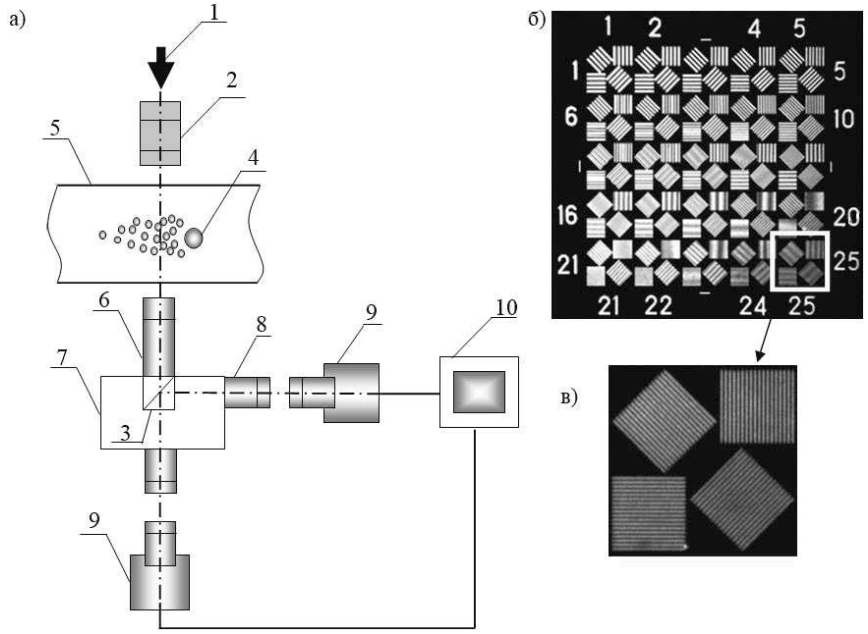


Рис. 3. Схема регистрации ($а$), снимок миры № 1 ($б$) и увеличенный квадрат 25 миры при $k = 30$ ($в$): *1* — лазерный луч, *2* — телескоп-рассеиватель, *3* — светоделительный кубик, *4* — фрагменты капли воды, *5* — канал ударной трубы, *6* — объектив 5x, *7* — оптический модуль, *8* — окуляр 10x, *9* — видеокамера CCD, *10* — персональный компьютер

Процесс регистрировался видеокамерой в проходящем свете через оптическую систему от микроскопа ИМЦ-100-50 [13]. Коэффициент оптического увеличения в опытах с $\Delta P \approx 0.2$ ати составлял $k = 10$x и $k = 30$x, в опытах с $\Delta P \approx 3.2$ ати — $k = 30$x и $k = 50$x. Течение в опытах с $\Delta P \approx 0.2$ ати регистрировалось многокадровой видеокамерой (разрешение 1024×1024 пикселей при 5000 кадров/с) с подсветкой ацетилен-кислородной лампой-вспышкой [16], в опытах с $\Delta P \approx 3.2$ ати — двумя видеокамерами CCD (разрешение камер 2040×2040 пикселей, размер пикселя 7 мкм) с подсветкой двухимпульсной лазерной установкой (длина волны 532 нм, длительность импульса 7 нс). Схема регистрации процесса дробления капли представлена на рис. 3.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Согласно данным работ [3,6–8,14] дробление капли жидкости при числах Вебера $\mathrm{We} > 30$ происходит следующим образом. Под действием УВ сферическая капля с начальным диаметром d_0 превращается в диск размером $d \sim (2\text{–}3)d_0$. В течение времени

$$t_0 = \frac{d_0}{U_g}\left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{1/2}$$

происходит деформирование начального объема жидкости. С момента $t = (0.1\text{–}0.5)t_0$ начинается срыв с экваториальной зоны капли тонкого слоя жидкости и его последующее дробление, либо срыв микрокапель в результате действия неустойчивости Кельвина – Гельмгольца [17]. При $t > t_0$ в полюсной зоне капли развивается неустойчивость Рэлея – Тейлора, в результате чего к моменту времени $t \approx (3\text{–}5)t_0$ капля распадается на фрагменты.

В настоящей работе исследовалось дробление капель при числах Вебера $\mathrm{We} = 35\text{–}14000$. В таком широком диапазоне чисел Вебера изложенный механизм деформирования капли и ее разрушения может иметь свои особенности. При числах $\mathrm{We} > 1000$ происходит преимущественно взрывное дробление без краевых срывов частиц и вызванное только интенсивным развитием неустойчивости Рэлея – Тейлора. При числах $\mathrm{We} = 60\text{–}1000$ разрушение капли изначально происходит по механизму обдирки поверхностного слоя, связанному с развитием неустойчивости Кельвина – Гельмгольца. При числах $\mathrm{We} = 30\text{–}60$ имеет место переходный режим хаотичного разрушения, когда обдирку пограничного слоя сопровождает выдувание «мешков». При двух последних механизмах вслед за обдиркой происходит перфорирование диска из-за развитых возмущений на передней поверхности, вызванных неустойчивостью Рэлея – Тейлора, и по достижении критической деформации основная масса капли разрушается.

На рис. 4 представлены видеокадры фрагментации капли жидкости из работы авторов [13] при мак-

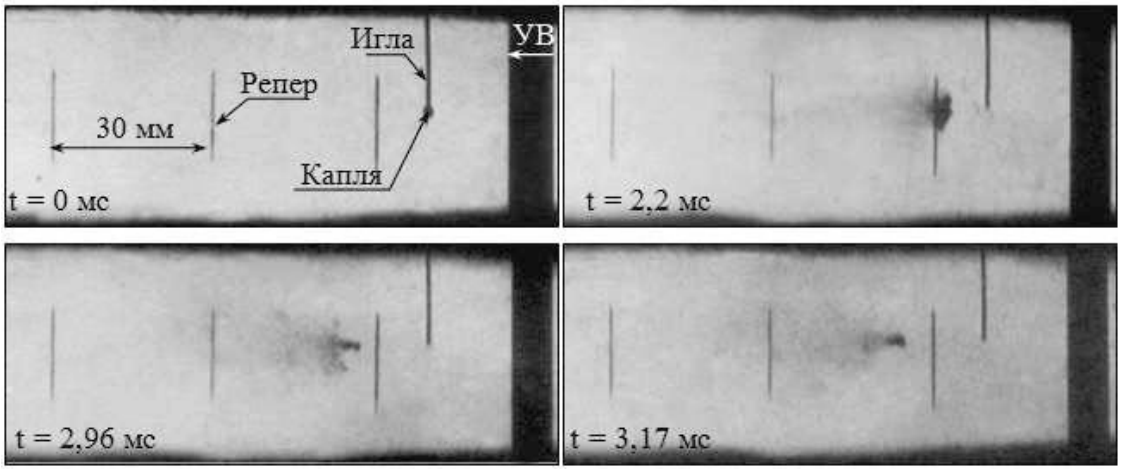


Рис. 4. Кинограмма диспергирования капли жидкости $d_0 = 2$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати

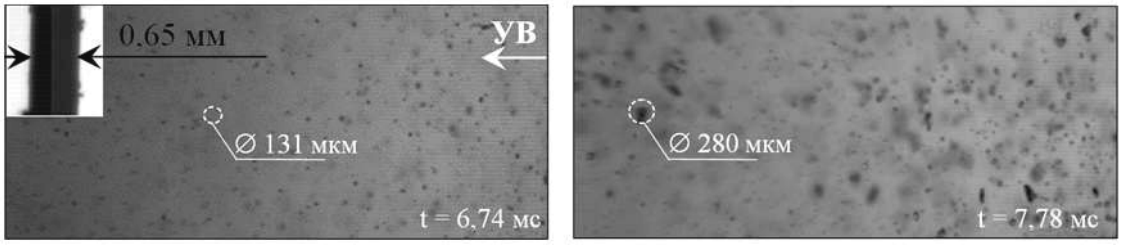


Рис. 5. Фрагментация капли воды $d_0 \approx 2$ мм в опыте при $\Delta P \approx 0.2$ ати: УВ — направление ударной волны. $\mathrm{Re} = 8.1 \cdot 10^3$, $\mathrm{We} = 117$, $\mathrm{La} = 3 \cdot 10^5$

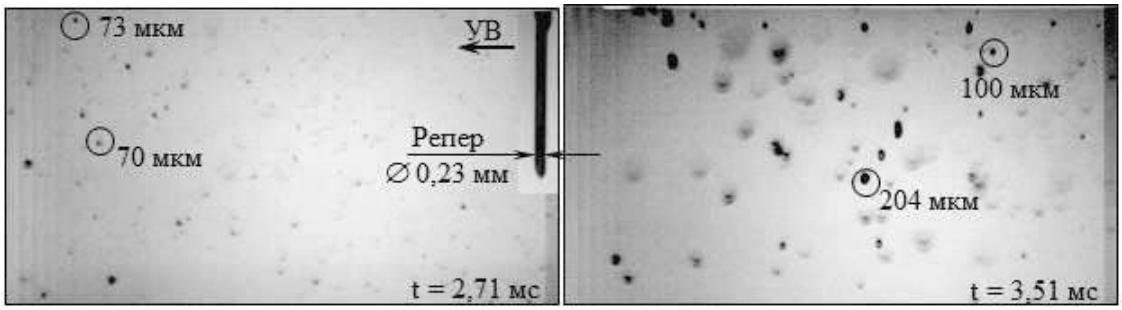


Рис. 6. Фрагментация капли воды $d_0 \approx 0.6$ мм в опыте при $\Delta P \approx 0.2$ ати: УВ — направление ударной волны. $\mathrm{Re} = 2.4 \cdot 10^3$, $\mathrm{We} = 35$, $\mathrm{La} = 8.9 \cdot 10^4$

роскопической регистрации (с $k = 1$x). Здесь визуализируется только интегральная картина течения: превращение капли в диск, «сдирание» жидкости с поверхности капли, отрыв и движение ядра капли (основной массы исходной капли).

На рис. 5 показаны полученные в настоящей работе кадры процесса дробления капли воды $d_0 = 2$ мм при давлении $\Delta P \approx 0.2$ ати, на рис. 6–8 — капли воды, спирта и глицерина $d_0 = 0.6$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати, на рис. 9, 10 — капли воды $d_0 = 2$ мм, $\Delta P \approx 3.2$ ати при микроскопической регистрации ($k = (10$–$50)$x). На кадры для сравнения нанесен репер.

Из рис. 5–8 видно, что после воздействия УВ капля жидкости дробится на фрагменты различной геометрии. Размер фрагментов капель воды при $d_0 = 0.6$ мм значительно меньше, чем при $d_0 = 2$ мм. Размер фрагментов капли спирта при $d_0 = 0.6$ мм меньше размера фрагментов аналогичной капли воды. Неожиданную форму приобретают фрагменты диспергированной капли глицерина: за частицами тянутся длинные жидкие волокна, вызванные высокой вязкостью глицерина.

Из рис. 9 довольно подробно во времени регистрируется стадия деформирования капли в диск и срыв с краев частиц, данный эксперимент прове-

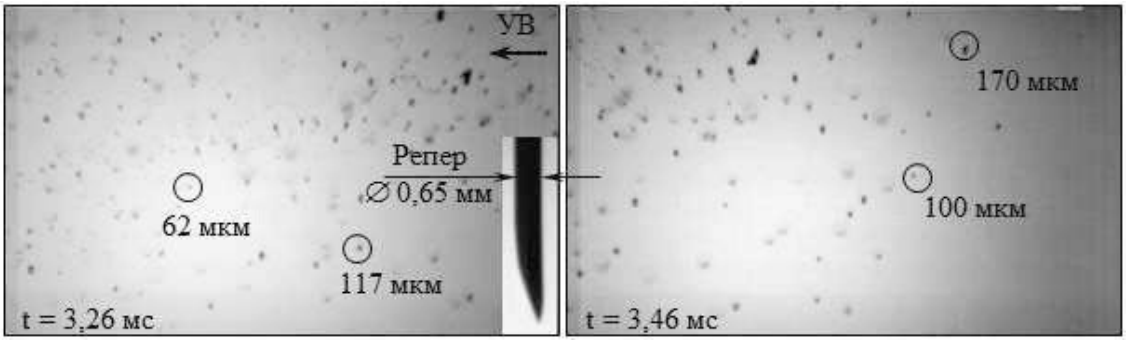


Рис. 7. Фрагментация капли спирта $d_0 \approx 0.6$ мм в опыте при $\Delta P \approx 0.2$ ати: УВ — направление ударной волны. $\mathrm{Re} = 2.4 \cdot 10^3$, $\mathrm{We} = 127$, $\mathrm{La} = 1.5 \cdot 10^4$

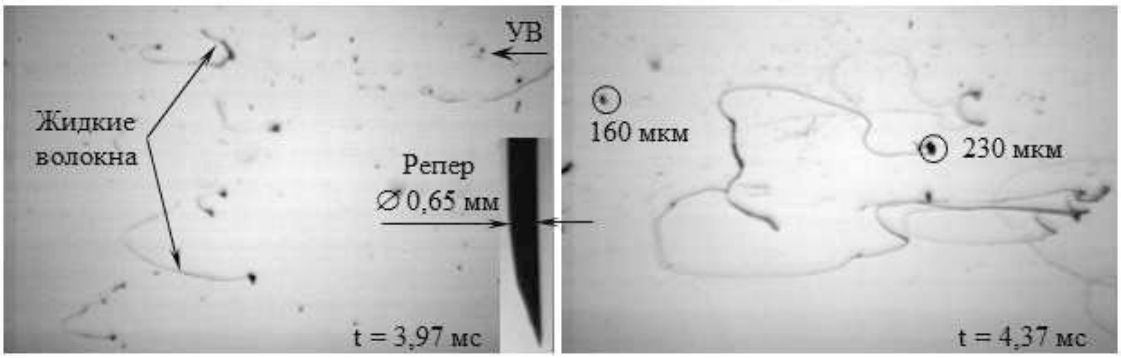


Рис. 8. Фрагментация капли глицерина $d_0 \approx 0.6$ мм в опыте при $\Delta P \approx 0.2$ ати: УВ — направление ударной волны. $\mathrm{Re} = 2.4 \cdot 10^3$, $\mathrm{We} = 43$, $\mathrm{La} = 0.4$

ден при числе Вебера 14000. В большинстве классификаций при числах Вебера $\mathrm{We} > 1000$ происходит взрывное дробление без обдирки и образования сплюснутого эллипсоида. В эксперименте сдирание частиц с краев имеет место уже к моменту времени $0.1t_0$, деформирование в диск происходит за время $\approx 0.5t_0$.

Изображения обрабатывались по специальной математической программе, которая убирает полутона, связанные со статической и кинематической нерезкостью, с цифровым шумом матрицы видеокамеры и отражением света частицами, и определяет площадь изображения частиц, лежащих в фокусе оптической системы (т. е. частиц с гистограммой яркости, близкой к гистограмме яркости репера). Диаметр частицы d определяется по ее площади и масштабируется на размер репера. По результатам метрологической экспертизы относительная погрешность измерения диаметра частицы составляет 17%.

На рис. 11 представлены экспериментальные интегральные распределения фрагментов капли жидкости по размерам $R(d)$, рассчитанные по формуле

$$R = \frac{N - \sum_{i=1}^{n} n_i}{N},$$

где N — общее количество частиц в эксперименте, n_i — количество частиц в i-интервале диаметров с учетом количества в предыдущем интервале.

Из рис. 11 видно, что при увеличении давления за фронтом УВ спектры размеров частиц смещаются в сторону меньших размеров: для капли $d_0 = 2$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати в спектре превалируют частицы размером 50–100 мкм, при $\Delta P \approx 3.2$ ати — фрагменты капли диаметром 4–7 мкм. В этих экспериментах число Вебера изменялось на два порядка ($\mathrm{We} = 117$ в опыте с $\Delta P \approx 0.2$ ати, $\mathrm{We} = 1.4 \cdot 10^4$ в опыте с $\Delta P \approx 3.2$ ати), число Рейнольдса — на один порядок ($\mathrm{Re} = 8.1 \cdot 10^3$ в опыте с $\Delta P \approx 0.2$ ати, $\mathrm{Re} = 9.9 \cdot 10^4$ в опыте с $\Delta P \approx 3.2$ ати).

Важно также отметить, что, несмотря на заметное различие чисел Лапласа в опытах с каплями воды ($\mathrm{La} = 8.9 \cdot 10^4$), спирта ($\mathrm{La} = 1.5 \cdot 10^4$) и глицерина ($\mathrm{La} = 0.4$), заметного изменения дисперсного состава микрочастиц при дроблении капель размером 0.6 мм не произошло. Глицерин обладает высокой вязкостью по сравнению с водой и этиловым спиртом. Однако по завершении переходных процессов и при формировании конечного спектра размеров частиц вязкость не оказала на него существенного влияния.

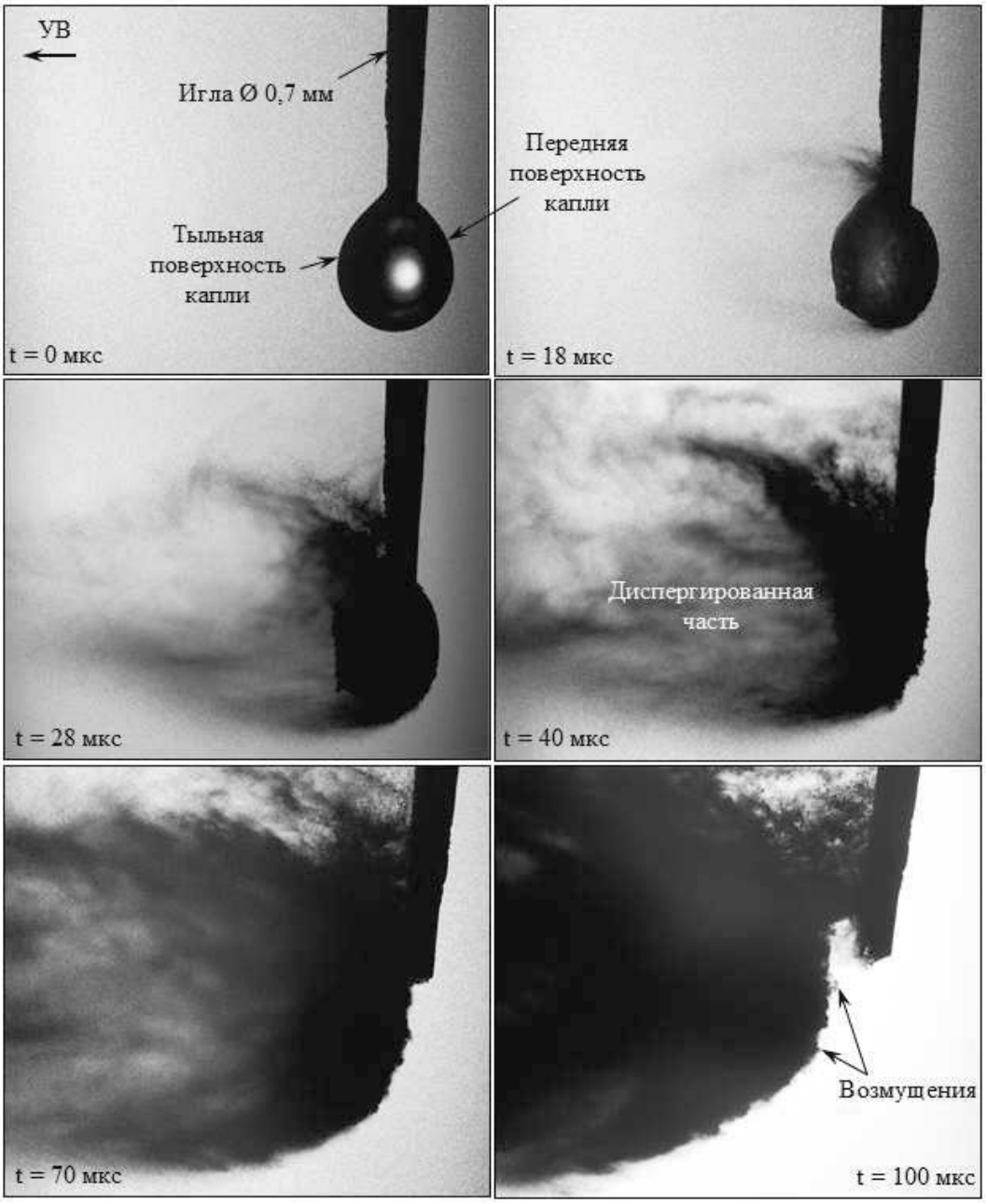


Рис. 9. Фрагментация капли воды $d_0 \approx 2$ мм при $\Delta P \approx 3.2$ ати, размер регистрируемого поля (8.3×8.3) мм^2, $k = 15$x, $\mathrm{Re} = 9.9 \cdot 10^4$, $\mathrm{We} = 1.4 \cdot 10^4$, $\mathrm{La} = 6.4 \cdot 10^6$

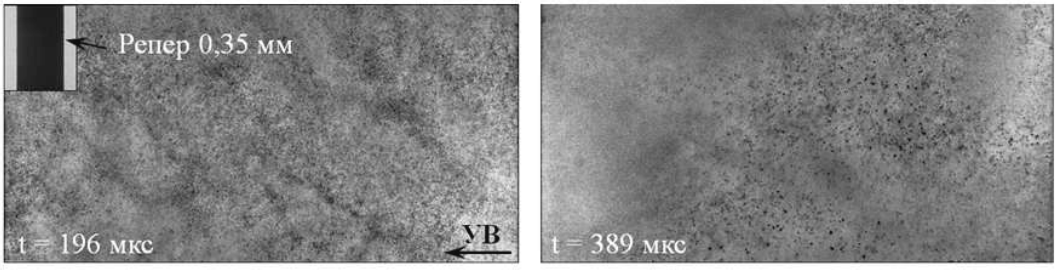


Рис. 10. Кадры фрагментов капли воды $d_0 \approx 2$ мм при $\Delta P \approx 3.2$ ати, размер регистрируемого поля (4.5×4.5) мм^2, $k = 30$x; размер регистрируемого поля (2.65×2.65) мм^2, $k = 50$x, $\mathrm{Re} = 9.9 \cdot 10^4$, $\mathrm{We} = 1.4 \cdot 10^4$, $\mathrm{La} = 6.4 \cdot 10^6$

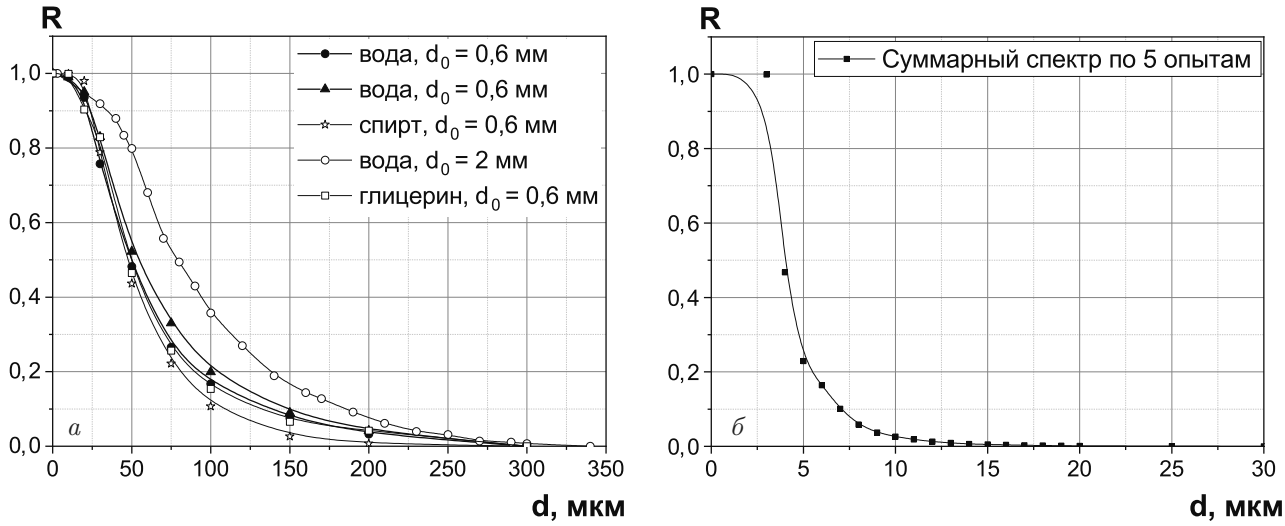


Рис. 11. Зависимости $R(d)$ для частиц жидкости при различных давлениях УВ: *а*) капля $d_0 = 2$ мм и $d_0 = 0.6$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати, *б*) капля $d_0 = 2$ мм при $\Delta P \approx 3.2$ ати

Изменение начального диаметра капли воды играет существенную роль в формировании конечного спектра размеров фрагментов. В этих экспериментах число Вебера изменялось в 3.5 раза (We = 117 в опыте с $d_0 = 2$ мм, We = 35 в опыте с $d_0 = 0.6$ мм), число Лапласа — на один порядок (La $= 3{\cdot}10^5$ в опыте с $d_0 = 2$ мм, La $= 8.9 \cdot 10^4$ в опыте с $d_0 = 0.6$ мм). Распределение частиц по размеру смещается в сторону крупных фрагментов при дроблении изначально более крупных капель.

По совокупности полученных экспериментальных результатов можно сделать вывод, что важное влияние на конечное распределение частиц по размеру, образовавшихся в результате дробления капли в газовой среде, оказывает число Вебера, связанное с интенсивностью нагружения капли жидкости, ее размером и поверхностным натяжением самой жидкости.

4. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССА С ПРИМЕНЕНИЕМ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Отразить в численных расчетах все этапы эволюции жидкой капли, деформирующейся после воздействия распространяющейся по газу УВ, а затем разрушающейся на отдельные фрагменты, сложная задача. Прямое численное моделирование таких задач требует задания большого количества точек, так как капля может распадаться на фрагменты размером на 1–3 порядка меньше исходного. Кроме того, формирование спектра размеров частиц контролируется поверхностным натяжением, которое зачастую не учитывается в газодинамических расчетах. Несмотря на указанные сложности, можно моделировать численными методами некоторые аспекты деформирования капли, а также извлекать количественные значения величин, впоследствии влияющих на установившийся спектр размеров фрагментов. Для определения того, какие величины вносят свой вклад в спектральный состав размеров частиц, следует рассмотреть закон движения капли в газовой среде. На движение частицы произвольной формы массы m в газе с плотностью ρ_g и скоростью U_g оказывает влияние сила сопротивления F [18]:

$$m\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F} = \frac{1}{2}\rho_g C_x S\big|\mathbf{U} - \mathbf{U}_g\big|(U_g - U), \qquad (1)$$

где C_x — коэффициент сопротивления, S — площадь поперечного сечения частицы.

Для сферической частицы закон движения (1) приобретает вид

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \frac{3}{4}\frac{\rho_g C_x (U_g - U)\,\big|\mathbf{U} - \mathbf{U}_g\big|}{\rho_0 d_0}, \qquad (2)$$

где d_0 — диаметр сферической частицы.

Коэффициент сопротивления сферической частицы C_x зависит от числа Рейнольдса следующим образом [18]:

$$C_x = \frac{24}{\mathrm{Re}}(1 + 0.167\,\mathrm{Re}^{2/3}). \qquad (3)$$

Формула (3) справедлива при числах Рейнольдса $\mathrm{Re} < 10^3$. При $\mathrm{Re} = 10^3$–$3 \cdot 10^5$ коэффициент сопротивления $C_x = 0.42$ [15]. При $\mathrm{Re} > 3 \cdot 10^5$ коэффициент сопротивления $C_x \approx 0.1$–0.2 [18].

Как показывают эксперименты, по мере движения в потоке газа сферическая капля жидкости деформируется в диск, что приводит к увеличению

ее диаметра в зависимости от времени, а следовательно, и поперечного сечения частицы, на которое воздействует газовый поток. При этом коэффициент лобового сопротивления C_x также меняется. При числах $\mathrm{Re} > 10^3$ коэффициент сопротивления диска $C_x = 1.18$ [19]. Закон движения частицы приобретает вид

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \frac{3}{4}\frac{\rho_g C_x (U_g - U)\left|\mathbf{U} - \mathbf{U}_g\right|(\overline{d}_{el}(t))^2}{\rho_0 (d_0)^3}, \qquad (4)$$

где $\overline{d}_{el}(t)$ — поперечный диаметр диска (эллипсоида).

Дробление изначально сферической капли жидкости в потоке газа за счет развитой неустойчивости Рэлея – Тейлора происходит, как показывают эксперименты, при достижении каплей трех ее начальных диаметров $\overline{d}_{el}(t) = 3d_0$. Однако развивающаяся неустойчивость Кельвина – Гельмгольца на краях капли приводит к срыву мелкодисперсных частиц, что уменьшает эффективный диаметр, участвующий в сопротивлении капли при движении в газе. Это позволяет упростить формулу (4), введя эффективный коэффициент формы C_f, отвечающий за отклонение от несферической формы, $\overline{d}_{el} = C_f d_0$:

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \frac{3}{4}\frac{\rho_g C_x (U_g - U)\left|\mathbf{U} - \mathbf{U}_g\right| C_f^2}{\rho_0 d_0}. \qquad (5)$$

Коэффициент C_f можно подобрать исходя из наилучшего описания экспериментальной траектории движения деформирующейся капли. Диапазон изменения этого коэффициента составляет 1–3.

Как показывают результаты проведенных экспериментов и соответствующих численных расчетов, скорость изначально покоящейся капли вплоть до полного ее дробления при данных условиях нагружения меняется достаточно слабо и значительно меньше скорости ударно-сжатого газа, $U \ll U_g$. В этом случае можно считать, что частица движется с постоянным ускорением и упростить закон ее движения (5):

$$U = \frac{3}{4}\frac{\rho_{SW} C_x U_g^2 C_f^2 t}{\rho_0 d_0}, \qquad \dot{U} = \frac{3}{4}\frac{\rho_{SW} C_x C_f^2 U_g^2}{\rho_0 d_0}, \qquad (6)$$

где ρ_{SW} — плотность газа за фронтом ударной волны.

Во всех опытах, представленных в настоящей работе, числа Рейнольдса находились в диапазоне 10^3–10^5, что предполагает коэффициент сопротивления C_x постоянным и равным 0.42.

Диаметр формирующегося эллипсоида из изначально сферической капли приблизительно равен пройденному ей пути:

$$\overline{d}_{el} \approx d_0 + \left|\dot{U}\right|\frac{t^2}{2}, \qquad (7)$$

а скорость увеличения диаметра капли, движущейся в газе при постоянном ускорении:

$$\dot{\overline{d}}_{el} \approx \left|\dot{U}\right| t. \qquad (8)$$

Разрушение капли происходит, когда диаметр эллипсоида становится втрое больше начального, тогда в момент разрушения t_f,

$$t_f \approx \frac{4d_0}{U_g}\sqrt{\frac{\rho_0}{3\rho_{SW} C_x C_f^2}}, \qquad (9)$$

скорость деформации капли достигает величины

$$\dot{\varepsilon}_i = \frac{\dot{\overline{d}}_{el}}{d_0} \approx \varphi\frac{U_g}{d_0}\sqrt{\frac{\rho_{SW}}{\rho_0}}, \qquad (10)$$

где $\varphi = \sqrt{3C_x C_f^2}$ — безразмерная константа, учитывающая специфику деформирования капли. Данный коэффициент φ можно определить по результатам численных расчетов и экспериментов при описании траектории движения капли до момента ее дробления.

При дроблении жидкости с поверхностным натяжением и вязкостью характерный размер образующихся фрагментов $\overline{d}$ можно оценить из баланса локальной кинетической энергии фрагмента и работы сил вязкости и поверхностного натяжения, затрачиваемой на образование новых поверхностей [20–22]:

$$\rho_0\frac{\dot{\varepsilon}_i^2\overline{d}^2}{8} = \alpha\frac{4\sigma}{\overline{d}} + \theta\mu\dot{\varepsilon}_i, \qquad (11)$$

где ρ_0 — плотность вещества, σ — поверхностное натяжение жидкости, μ — коэффициент вязкости, $\dot{\varepsilon}_i$ — скорость деформации, реализуемая во фрагменте при дроблении, α, θ — безразмерные константы, учитывающие специфику разрушения среды и формирования фрагментов.

При вязкости воды μ, равной справочным значениям $1 \cdot 10^{-3}$ Па · с при $T = 20\,^{\circ}$C, $\rho_0 = 1$ г/см^3, поверхностном натяжении $\sigma = 72.88$ мН/м при $T = 20\,^{\circ}$C [23] выражение (11) указывает на то, что вязкость жидкости влияет при очень высоких скоростях деформации $\sim 10^9$ 1/с. Согласно (10) при условиях экспериментов, представленных в работе, скорости деформации капли составляли $\sim 10^4$–10^5 1/с,

Таблица 1. Характерный диаметр частиц, $\overline{d}$, рассчитанный по соотношению (13) при $\epsilon = 1$ для условий экспериментов, представленных в работе

Материал	ΔP, ати	d_0, мм	We	Механизм деформирования капли	$\overline{d}$, мкм
вода	0.2	2	117	механизм обдирки поверхностного слоя	400
вода	0.2	0.6	35	переходный механизм хаотичного разрушения	183
спирт	0.2	0.6	127	механизм обдирки поверхностного слоя	119
глицерин	0.2	0.6	43	переходный механизм хаотичного разрушения	171
вода	3.2	2	14000	взрывное дробление	83

что позволяет пренебречь влиянием вязкости жидкости. Характерный размер образующихся частиц $\overline{d}$ при дроблении жидкой среды определяется выражением

$$\overline{d} = \alpha \sqrt[3]{\frac{32\sigma}{\rho_0 \dot{\varepsilon}_i^2}}. \qquad (12)$$

С учетом того, что скорость деформации капли (10) связана с характерным размером фрагментов $\overline{d}$ через соотношение (12), формула для оценки размеров частиц после дробления капли с начальным диаметром d_0 в газе имеет вид

$$\overline{d} = \xi \sqrt[3]{\frac{\sigma d_0^2}{\rho_{SW} U_g^2}} = \xi d_0 (\mathrm{We})^{-1/3} \text{ при } \overline{d} \leqslant d_0, \qquad (13)$$

где ξ — безразмерная константа, учитывающая специфику деформирования и разрушения капли в газовой среде, может быть определена из экспериментов.

Выражение (13) определяет критический характерный размер частиц, до которого может раздробиться жидкая капля с начальным размером d_0, поэтому $\overline{d} \leqslant d_0$. Согласно (13) характерный размер частиц пропорционален начальному размеру капли d_0 и обратно пропорционален корню кубическому из числа Вебера We. В табл. 1 приведен характерный размер частиц $\overline{d}$, рассчитанный по соотношению (13) при $\xi = 1$, при соответствующих эксперименту числах Вебера и начальных диаметрах капель. В таблице также указан соответствующий числу Вебера механизм деформирования и начала разрушения капли.

Согласно табл. 1, размеры частиц воды и глицерина, образующихся при дроблении капель диаметром 0.6 мм, практически одинаковы, что продиктовано близкими значениями чисел Вебера. Этот результат наблюдается в эксперименте, интегральные распределения частиц по размеру совпадают для двух жидкостей при одинаковом начальном размере капель (рис. 11*а*). При начальном диаметре капли спирта 0.6 мм в эксперименте спектр размеров частиц незначительно сместился в сторону меньших размеров по сравнению с интегральными распределениями размеров частиц воды и глицерина (рис. 11*а*). По расчетам характерный размер частиц спирта также незначительно уменьшается, что вызвано увеличением числа Вебера примерно в 3 раза по сравнению с водой и глицерином и его влиянием на размер фрагментов в степени $(-1/3)$. В опытах с каплями воды 2 мм, но с существенным отличием числа Вебера в 100 раз, наблюдается указанное расчетами заметное смещение интегрального распределения частиц по размеру в сторону меньших размеров при увеличении числа Вебера (рис. 11*а* и 11*б*).

Существенным для конечного спектра размеров частиц оказывается именно влияние начального размера капли жидкости, так как согласно (13) характерный размер частиц прямо пропорционален этому размеру. Это отражено в табл. 1 при сравнении характерных размеров частиц в опытах с избыточным давлением 0.2 ати и разными начальными диаметрами капель жидкости. Этот же результат наблюдается и в эксперименте, при начальном диаметре капли воды 2 мм интегральное распределение размеров частиц смещается заметно в сторону более крупных фрагментов по сравнению со всеми опытами, в которых размер капель был 0.6 мм (рис. 11*а*).

Таким образом, конечные размеры частиц, образующихся при дроблении капли, определяются двумя величинами — числом Вебера и начальным диаметром капли, при этом существенная роль отводится последнему. Наличие флуктуаций течений приведет к разбросу относительно характерного размера частиц $\overline{d}$. В ряде работ [24, 25] рекомендуется использовать при описании случайного разброса размеров частиц жидкости либо распределение Розина – Раммлера [24]:

Таблица 2. Параметры течения за фронтом воздушной ударной волны

ΔP	ρ_{SW}, кг/м^3	U_g, м/с	D, м/с	T_g, К
$\Delta P = 0.2$ ати	1.413	55	375	312
$\Delta P = 3.2$ ати	3.187	407	661	484

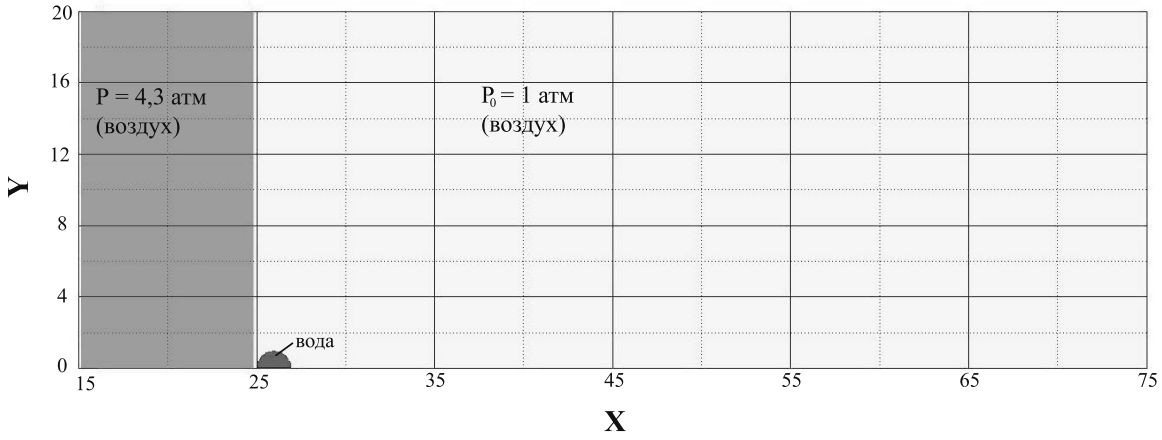


Рис. 12. Начальная геометрия двумерной задачи

$$R = \exp\left(-\left(\frac{d}{\overline{d}}\right)^n\right), \tag{14}$$

где n — параметр формы распределения, либо распределение на основе гамма-функции [25]:

$$R = 1 - \int_0^d \frac{1}{\overline{d}} \frac{k}{\Gamma(k)} \left(k\frac{d}{\overline{d}}\right)^{k-1} \exp\left(-k\left(\frac{d}{\overline{d}}\right)\right) dd, \tag{15}$$

где k — параметр формы распределения, $\Gamma(k)$ — гамма-функция.

Использование распределения Розина – Раммлера и гамма-распределения возможно только в том случае, если фрагментация частиц не сопровождается такими процессами, как кипение и испарение жидкости. В противном случае распределение размеров частиц будет зависеть от времени, а сама функция распределения будет иметь сложный вид.

Так как на характерный размер фрагментов оказывает влияние скорость деформации капли (10), (12), то данный параметр и следует оценивать в численных расчетах. Для оценки величины скорости деформации проводились двумерные численные расчеты, позволяющие выявить специфику деформирования сферической капли до момента ее полного разрушения. В дальнейшем спектральные характеристики процесса фрагментации капли рассчитывались по соотношениям (13)–(15) с поправкой на коэффициенты, подобранные по результатам численного моделирования и сравнения с экспериментом.

В расчетах использовался двумерный программный комплекс с эйлеровым решателем. Пример начальной геометрии задачи при размере капли 2 мм представлен на рис. 12.

Расчеты проводились в осесимметричной геометрии. Область заполнялась воздухом при нормальных условиях: $\rho_0 = 0.001205$ г/см^3, $P_0 = 1$ атм (10^5 Па), $C_0 = 335$ м/с, $T_0 = 293$ К — плотность, давление, скорость звука и температура при нормальных условиях (состояние газа перед фронтом ударной волны). Так как интенсивность ударной волны не слишком высокая, $P < 10P_0$ (P_0 — атмосферное давление), то в расчетах в качестве уравнения состояния воздуха использовалось уравнение состояния идеального газа с $\gamma = 1.4$. На левой границе области задавался втекающий воздушный поток с параметрами, соответствующими нагрузкам $\Delta P = 0.2$ ати и $\Delta P = 3.2$ ати (см. табл. 2: D — скорость ударной волны, T_g — температура за фронтом УВ).

На правой границе задавалось условие «свободное вытекание», на верхней границе — «жесткая стенка», на нижней — ось симметрии. Капля представляла собой эллипсоид диаметром $\overline{d}_0 = 2$ мм вдоль оси x и радиусом $\overline{R}_0 = 1.185$ мм вдоль оси y (или сферу с $\overline{d}_0 = 0.6$ мм, 2 мм в зависимости от начальной формы капли в эксперименте), заполненный водой с уравнением состояния типа Ми – Грюнайзена.

Один из расчетов деформирования капли под воздействием УВ $\Delta P = 3.2$ ати на различные моменты времени приведен на рис. 13. Выдачи представ-

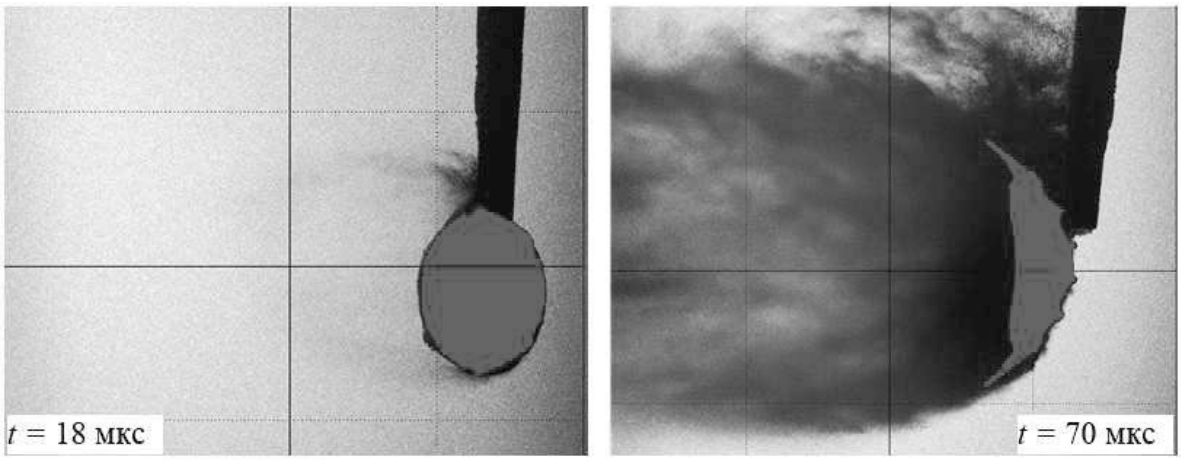


Рис. 13. Экспериментальная и расчетная картина деформирования капли воды в ударно-сжатом воздухе

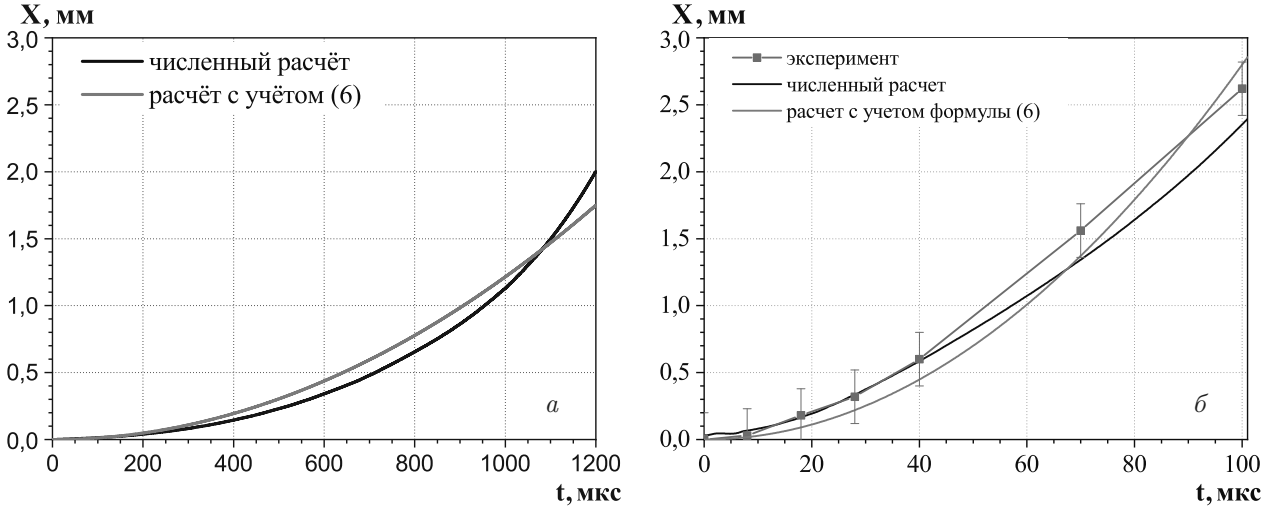


Рис. 14. $X(t)$-диаграмма движения передней поверхности капли воды начальным диаметром 2 мм от времени: $\Delta P = 0.2$ ати ($а$), 3.2 ати ($б$)

лены в плотностях в сечении капли, их наложили на экспериментальные изображения.

Сравнение изменения расчетной формы капли во времени с экспериментальными данными указывает на их качественное согласие. После прохождения воздушной УВ сферическая капля со временем деформируется в диск — диаметр значительно увеличивается по сравнению с исходным, а толщина уменьшается. В эксперименте уже с момента времени $t = 18$ мкс наблюдается срыв мелкодисперсных частиц воды с краев деформирующейся капли, связанный с развитием неустойчивости Кельвина – Гельмгольца. Эта стадия в расчете не моделируется ввиду отсутствия в газодинамической программе модели разрушения жидкой среды и поверхностного натяжения. В эксперименте и расчете на поверхности капли начинают развиваться мелкие возмущения, растущие со временем, что хорошо видно на передней поверхности капли воды на моменты времени $t = 40$–100 мкс. Этот процесс обусловлен развитием неустойчивости Рэлея – Тейлора, приводящим в итоге к разрушению капли на отдельные фрагменты. Данный численный расчет был проведен до момента времени $t = 100$ мкс, так как в дальнейшем вдоль толщины диска остается малое количество точек.

На рис. 14 представлено сравнение $X(t)$-диаграмм движения передней поверхности капли воды от времени, полученных с учетом аналитической зависимости (6), с помощью численных расчетов и экспериментально. Зависимость (6) проинтегрирована по времени и построена при величине коэффициента формы частицы $C_f = 1.9$ при $\Delta P = 0.2$ ати и $C_f = 2.6$ при $\Delta P = 3.2$ ати.

Таблица 3. Скорости деформации в капле жидкости, рассчитанные по соотношению (10) и определенные по результатам численного расчета, $\dot{\xi}_i$, характерный расчетный размер образующихся фрагментов $\overline{d}$ по (12) или (13) для условий экспериментов, представленных в работе

Материал	ΔP, ати	d_0, мм	We	C_f	t_f, мс (К)	$\dot{\varepsilon}_i$, 10^3 1/с		α	ξ	$\overline{d}$, мкм
						Формула (10)	Числен. расчет			
вода	0.2	2	117	1.9	1.81 (1.9)	2.2	2.8	0.131	0.25	102
вода	0.2	0.6	35	1	1.04 (3.5)	3.9	—		0.385	70
спирт	0.2	0.6	127		0.92 (3.5)	4.3	—			50
глицерин	0.2	0.6	43		1.17 (3.5)	3.4	—			66
вода	3.2	2	14000	2.6	0.12 (1.3)	33.5	40		0.2	17

При таких значениях констант C_f время полного разрушения капли воды диаметром 2 мм в соответствии с формулой (9) составляет $t_f = 1810$ мкс при $\Delta P = 0.2$ ати и $t_f = 120$ мкс при $\Delta P = 3.2$ ати, что находится в согласии с макроскопической регистрацией процесса деформирования капли (рис. 4 и рис. 13). В табл. 3 указаны времена разрушения основной массы капли t_f и поправочные коэффициенты, связывающие t_f и характерное время

$$t_0 = \frac{d_0}{U_g}\left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{1/2},$$

а именно,

$$t_f = Kt_0.$$

По результатам численных расчетов была определена скорость деформации капли на момент, близкий к разрушению ее основной массы (см. табл. 3). Отличие расчета по формуле (10) от результатов численных расчетов составило 15–20%.

Результаты расчетов скорости деформации среды по (10) с поправкой на коэффициент C_f, определенный по результатам численного моделирования, были использованы для расчета характерного размера частиц жидкостей $\overline{d}$ по формуле (12) или (13). Константа α, связанная со спецификой разрушения среды в формуле (12), была принята равной 0.131, исходя из наилучшего описания расчетными распределениями (14) и (15) экспериментальных спектров размеров частиц (см. рис. 15). Таким образом, константа $\xi = 2.2\alpha/(\mathrm{C}_x C_f)^{1/3}$ в формуле (13) менялась только за счет коэффициента C_f. Все величины приведены в табл. 3.

Соответствующее сопоставление расчетных по функциям (14) и (15) и экспериментальных интегральных спектров размеров частиц приведено на рис. 15. Наиболее близкого описания экспериментальных данных удается достичь при использовании распределения Розина – Раммлера с показателем $n = 1.3$–1.6 и распределения на основе гамма-функции с показателем $k = 2$–2.5.

Результаты всех экспериментов удается воспроизводить в единой манере, за исключением эксперимента с избыточным давлением $\Delta P \approx 3.2$ ати (рис. 15*д*). Для данного опыта расчетный размер частиц по (13) явно сильно завышен. Воспроизведение экспериментальных данных возможно только в случае, если константа $\xi = 0.05$, т. е. уменьшена в четыре раза, что приводит к уменьшению характерного размера $\overline{d}$ до 4 мкм вместо оцененных 17 мкм (рис. 15*е*). Среднее значение размера частиц по экспериментальным данным составило 4.6 мкм. По-видимому, данное обстоятельство связано с физическими процессами, происходящими с частицами на этапе их формирования, которые не учитываются.

Эксперимент с каплей воды, подвергнутой разрушению в условиях воздействия УВ амплитудой $\Delta P \approx 3.2$ ати, был дополнительно проанализирован на предмет влияния механизмов, которые были отброшены при использовании формул (12)–(15). Модель основана на том, что характерный размер частиц и разброс относительно него размеров частиц определяется взрывным дроблением капли за счет развития неустойчивости Рэлея – Тейлора. При этом пренебрегается влиянием срыва мелких частиц с краев капли, наблюдаемого в эксперименте, а также испарением частиц в разогретом газе независимо от механизма их образования.

Оценить вклад влияния срыва частиц с краев капли можно следующим образом. В работе [6] при-

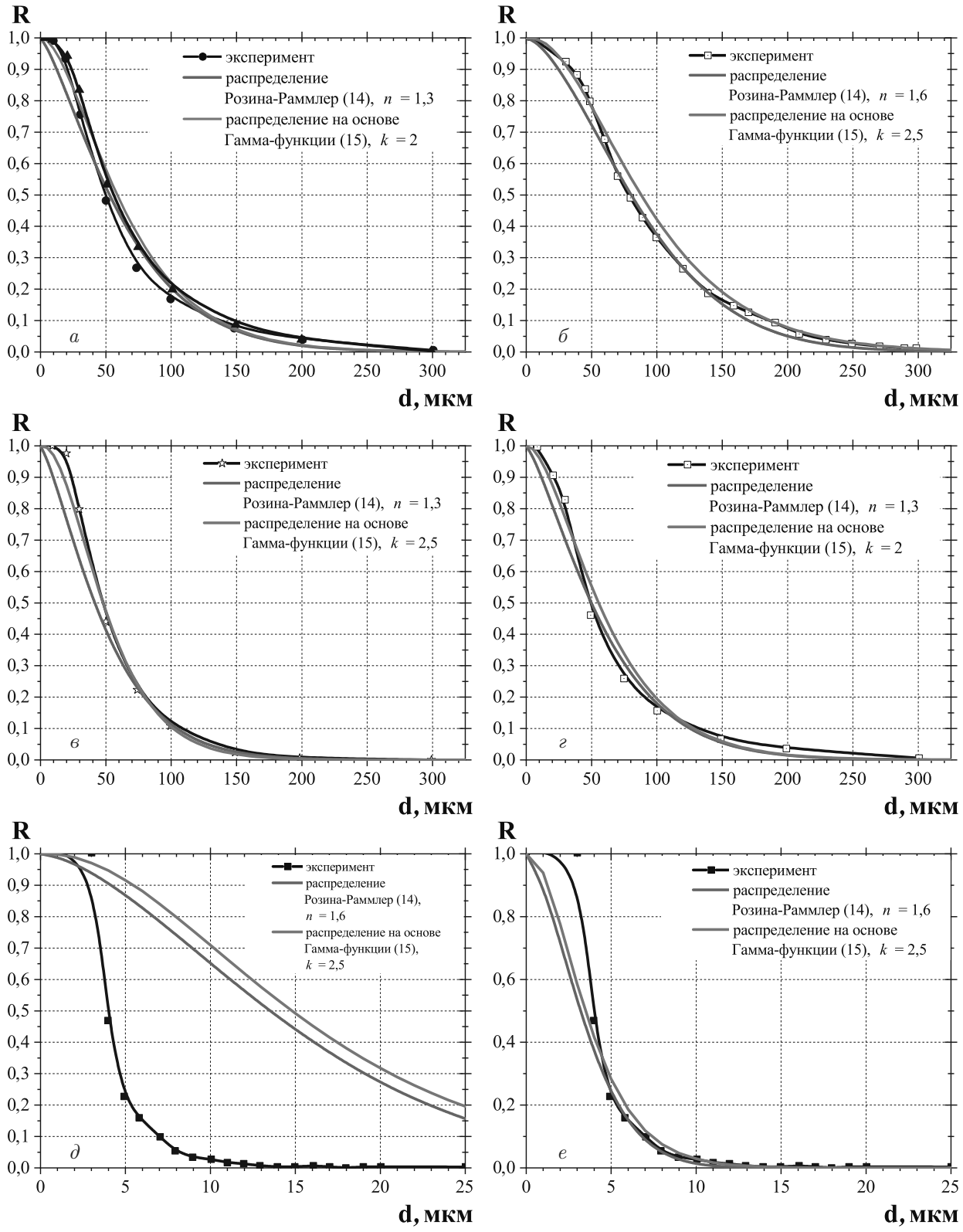


Рис. 15. Сравнение расчетного и экспериментального интегральных распределений частиц по размеру $R(d)$ для капель жидкости при различных давлениях УВ: *а*) капля воды $d_0 = 0.6$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати, *б*) капля воды $d_0 = 2$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати, *в*) капля спирта $d_0 = 0.6$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати, *г*) капля глицерина $d_0 = 0.6$ мм при $\Delta P \approx 0.2$ ати, *д*) капля воды $d_0 = 2$ мм при $\Delta P \approx 3.2$ ати, *е*) капля воды $d_0 = 2$ мм при $\Delta P \approx 3.2$ ати, $\xi = 0.05$ ($\overline{d} = 4$ мкм)

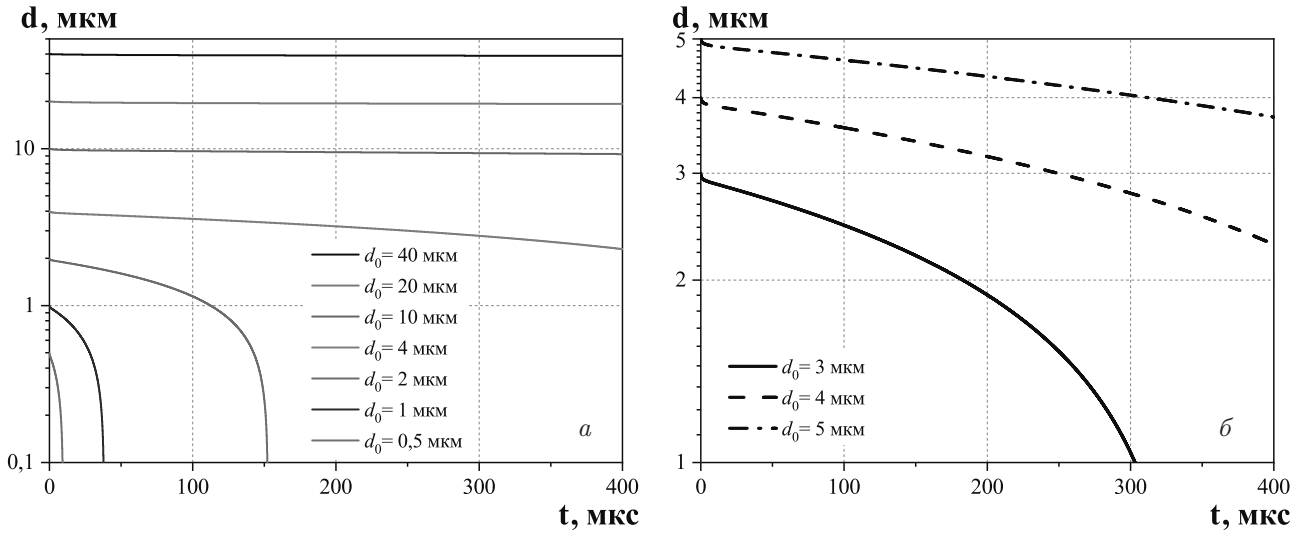


Рис. 16. Зависимость диаметра частицы от времени, построенная с учетом их разогрева за счет теплопроводности среды ($\Delta P = 3.2$ ати): *а*) начальный диаметр частиц 0.5–40 мкм, *б*) начальный диаметр частиц 3, 4, 5 мкм

ведено соотношение для оценки размеров частиц, образующихся в результате развития неустойчивости Кельвина – Гельмгольца:

$$\overline{d}_{KG} = 6.5 \sqrt[3]{\frac{\sigma\mu_L^2}{\rho_0(\rho_{SW}U_g^2)^2}}, \tag{16}$$

где μ_L — коэффициент вязкости. Для воды $\mu_L = 0.00145\,\text{Па}\cdot\text{см}$.

Характерный размер частиц, образующихся в результате отделения частиц с боковой поверхности деформирующейся капли, составляет по формуле (16) $\overline{d}_{KG} = 0.5$ мкм. Относительно данного размера также должен присутствовать разброс размеров частиц. Если предположить, что разброс размеров частиц относительно характерного размера $\overline{d}_{KG}$ также подчиняется распределению Розина – Раммлера (14) с показателем $n = 1.6$, то вероятность найти частицы с размерами больше 2.5 мкм составляет $R(d > 2.5\,\text{мкм}) \approx 0.0001$, т. е. основное количество частиц имеет размеры меньше разрешающей способности экспериментального микроскопического оптического метода. Таким образом, вклад в зарегистрированный спектр размеров частиц воды при нагрузке $\Delta P \approx 3.2$ ати от сорвавшихся с краев капли частиц исключается.

Формирование частиц может сопровождаться разогревом последних в газе за счет процессов теплопроводности. Это приводит к испарению поверхностного слоя частиц и, как следствие, изменению их размеров или полному исчезновению. Были сделаны оценки влияния разогрева частиц в ударно-сжатом газе на основе модели испарения ансамбля частиц для аэрозолей, изложенной в статье [26]:

$$\begin{aligned}
&\frac{dr}{dt} = -\frac{D_f M P_H^0}{rRT_g\rho_0} \times \\
&\quad \times \exp\left(\frac{2\sigma M}{\rho_0 tRT_d r} - \left(\frac{M\Delta H}{R}\left(\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_d^0}\right)\right)\right), \\
&\frac{dT_d}{dt} = \frac{3\lambda(T_g^0 - T_d)}{r^2\rho_0 C}\left[1 + \frac{r\rho_0(CT_d + \Delta H)}{\lambda(T_g^0 - T_d)}\frac{dr}{dt}\right], \\
&P_H = P_H^0 = \text{const}, \\
&T_g = T_g^0 = \text{const}.
\end{aligned} \tag{17}$$

Здесь r — радиус частицы, D_f — коэффициент диффузии, M — молярный вес жидкости, P_H и P_H^0 — начальное и текущее давление насыщенного пара, ΔH — скрытая теплота парообразования, R — универсальная газовая постоянная, T_d — температура жидкости, T_d^0 — начальная температура жидкости, C — теплоемкость жидкости, λ — теплопроводность газа, T_g^0 и T_g — начальная и текущая температура газа.

Модель испарения ансамбля частиц (17) значительно упрощена по сравнению с исходным вариантом [26]. Пренебрегалось изменением влажности среды, температуры газа и давления насыщенного пара. Такое упрощение оправдано в пределах времени регистрации. В расчете принимались следующие значения параметров воды и воздуха:

$D_f = 0.277 \cdot 10^{-4}$ м^2/с, $M = 18$ г/моль, $C = 4217$ Дж/кг·К, $\lambda = 0.04$ Дж/м·с·К, $T_d^0 = 293$ К, $\Delta H = 2.257$ кДж/г, $P_H^0 = 19.85 \cdot 10^5$ Па.

Анализ экспериментов показал, что нагретый газ до температуры 312 К в результате прохождения УВ $\Delta P = 0.2$ ати не приводит к заметному прогреву частиц за время регистрации. Однако разогретый газ до 484 К в результате прохождения УВ $\Delta P = 3.2$ ати оказывает влияние на изменение размера частиц за счет испарения их поверхностного слоя. Зависимости размера частиц от времени по модели (17) при различном их начальном диаметре приведены на рис. 16.

В соответствии с результатами расчетов все частицы размером меньше 2 мкм испаряются за время регистрации в эксперименте (300–400 мкс). В этом случае все частицы, сформированные в результате срыва с краев капли, должны испаряться и не вносить вклад в экспериментальный спектр размеров фрагментов. Частицы с начальным размером выше 10 мкм не претерпевают значительного изменения своего диаметра за время регистрации. Максимальное изменение диаметров составляет 1 мкм, что значительно меньше их начального размера. Заметное отличие наблюдается в области частиц с начальными размерами 3–5 мкм. Как видно из рис. 1*б*, такие частицы при своем начальном диаметре 3–5 мкм теряют до 1–2 мкм, уменьшаясь за время регистрации до 1–4 мкм. Именно в этой области размеров зарегистрировано максимальное количество частиц и наблюдалось заметное отклонение расчетного спектра размеров частиц от данных эксперимента. Таким образом, дробление капли воды в воздухе, сжатом УВ интенсивностью $\Delta P = 3.2$ ати, привело как к дроблению капли на частицы, так и к испарению поверхностного слоя последних, либо полному испарению некоторых частиц. В этом случае экспериментальный спектр размеров фрагментов должен смещаться в сторону меньших размеров по сравнению с расчетным распределением, что и наблюдается.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены экспериментальные и расчетно-теоретические исследования фрагментации капли жидкости (воды, спирта, глицерина) начальными диаметрами $d_0 = 0.6$ мм и 2 мм под действием воздушной ударной волны интенсивностью ≈ 0.2 и 3.2 ати. Применение микроскопического оптического метода позволило получить установившиеся распределения частиц по размерам и выявить следующие закономерности. А именно, по совокупности полученных экспериментальных данных можно сделать вывод, что важное влияние на конечное распределение частиц по размеру, образовавшихся в результате дробления капли в газовой среде, оказывают начальный размер капель и число Вебера, связанное с интенсивностью нагружения капли жидкости и поверхностным натяжением самой жидкости. Влияния чисел Рейнольдса и Лапласа не наблюдается.

Экспериментальный результат подтверждают и теоретические оценки, указывающие на то, что характерный размер частиц в образующемся потоке микрокапель прямо пропорционален начальному диаметру капли и обратно пропорционален числу Вебера в степени 1/3. Вязкость жидкости и газа не оказывают влияния на конечные размеры частиц.

Применение двумерного численного моделирования и экспериментальные данные позволили уточнить специфику деформирования капли жидкости и определить подгоночные параметры аналитической модели, необходимые для согласования расчетных спектров размеров частиц с экспериментальными. Эксперименты с разными типами жидкости и различным начальным диаметром капли при воздействии воздушной УВ ≈ 0.2 ати воспроизводятся расчетно в единой манере. Спектр размеров частиц, образовавшихся в результате воздействия воздушной УВ ≈ 3.2 ати, воспроизвести в той же манере расчетов не удалось, экспериментальный спектр размеров смещен в сторону меньших размеров частиц по сравнению с расчетным. Влияние оказало испарение поверхностного слоя частиц, либо полное испарение образующихся частиц в результате их прогрева ударно-сжатым воздухом, что не учитывается в модели.

Финансирование. Работа по расчетно-теоретическому анализу экспериментов выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (направление № 3 «Газодинамика и физика взрыва»).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Бузуков, ПМТФ **2**, 154 (1963).

2. Б. М. Беленький, Г. А. Евсеев, Изв. АН СССР, МЖГ **2**, 163 (1974).

3. В. М. Бойко, А. Н. Папырин, С. В. Поплавский, ПМТФ **2**, 108 (1987).

4. Р. Д. Еникеев, Ползуновский вестник **4**, 64 (2006).

5. В. М. Бойко, С. В. Поплавский, *Физическая модель разрушения капли за ударной волной по срывным механизмам,* Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика, Материалы международной конференции, посвященной 90-летию со дня рождения академика Н. Н. Яненко (2011).

6. К. Ю. Арефьев, А. В. Воронецкий, С. А. Сучков, Изв. вузов, Машиностроение **10**, 17 (2015).

7. D. D. Joseph, J. Belanger, and G. S. Beavers, Int. J. Multiphase Flow **25**, 1263 (1999).

8. Р. И. Нигматулин, *Динамика многофазных сред*, Наука, Москва (1987), ч. 1.

9. В. Г. Левич, *Физико-химическая гидродинамика*, Физматлит, Москва (1959).

10. S. Yu. Grigoryev, B. V. Lakatosh, M. S. Krovokorytov et al., *Expansion and Fragmentation of Liquid Metal Droplet by a Short Laser Pulse*, Phys. Rev. Appl. **10**, 064009 (2018); DOI: 10.1103/PhysRevApplied.10.064009.

11. Н. В. Невмержицкий, В. А. Раевский, Е. А. Сотсков, Е. Д. Сеньковский, Н. Б. Давыдов, Е. В. Бодров, С. В. Фролов, К. В. Анисифоров, А. Б. Георгиевская, Е. В. Левкина, О. Л. Кривонос, А. С. Кучкарева, А. Р. Гавриш, Б. И. Ткаченко, ФГВ **54**(5), 82 (2018).

12. D. Sorenson, R. Malone, B. Frogget, C. Ciarcia, T. Tunnell, and R. Fleur, *Particle Distribution Measurements Using In-Line Fraunhofer Holography*, SPIE 2869:206 (1997).

13. С. А. Абакумов, О. Л. Кривонос, Н. В. Невмержицкий, А. В. Руднев, Е. А. Сотсков, Е. Д. Сеньковский, Л. В. Точилина, С. В. Фролов, *Устройство для регистрации микронных частиц в газодинамическом потоке*, Пат. RU 139204 U1, зарегистр. 13 марта 2014.

14. Н. В. Невмержицкий, Е. А. Сотсков, Е. Д. Сеньковский и др., *Диспергирование капли жидкости под действием воздушной ударной волны интенсивностью от* 0.2 *до* 42 *атм,* Труды Международной конференции XI Харитоновские тематические научные чтения (2009).

15. *Физика взрыва*, под ред. Л. П. Орленко, Физматлит, Москва (2004).

16. О. И. Волченко, Е. Е. Мешков, Авторское свидетельство 1531596 МПК F21K 5/08, *Способ получения светового импульса*, Заявка 4287791 от 21.08.87 (опубл. 10.02.97).

17. H. L. F. Helmholtz, *Uber Discontinuirlisch Flussigkeits-Bewegungen*, Monatsberichte Konigl. Preus. Akad. Wiss, Berlin (1868).

18. Л. И. Седов, *Механика сплошной среды*, Наука, Москва (1976).

19. Л. Прандтль, *Гидроаэромеханика*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевск (2000).

20. D. E. Grady and M. E. Kipp, Mech. Matter **4**(3–4), 311 (1985).

21. *Разрушение разномасштабных объектов при взрыве*, Монография, под ред. А. Г. Иванова, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (2001).

22. А. Г. Иванов, В. А. Раевский, О. С. Воронцова, ФГВ **31**, 96 (1995).

23. А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский и др., *Физические величины: Справочник*, под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, Москва (1991).

24. Ф. М. Султанов, А. Л. Ярин, *Перколяционная модель процесса диспергирования капель по размерам*, ПМТФ № 5, 48 (1990).

25. E. Villermaux, *Fragmentation*, Annu. Rev. Fluid Mech. (2007), Vol. 39, p. 419.

26. А. А. Антонникова, Н. В. Коровина, О. В. Кудряшова, И. М. Васенин, Ползуновский вестник **1**, 123 (2013).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1087–1097 © 2023

ДИНАМИКА, СИММЕТРИЯ И УДАРНО-ИНДУЦИРОВАННОЕ «ПЫЛЕНИЕ» ПРИ КВАЗИИЗЭНТРОПИЧЕСКОМ И ИЗЭНТРОПИЧЕСКОМ УСКОРЕНИИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ЛАЙНЕРОВ

С. В. Ерунов [a], ***В. А. Огородников*** [a], ***А. О. Бликов*** [a], ***В. Н. Князев*** [b], ***Е. В. Кулаков*** [b*], ***А. Б. Георгиевская*** [a], ***Н. Б. Давыдов*** [b], ***А. С. Соколова*** [b], ***Е. А. Чудаков*** [a], ***М. В. Жерноклетов*** [b], ***А. В. Романов*** [b], ***И. А. Блинов*** [a], ***В. А. Аринин*** [b], ***М. В. Антипов*** [b], ***А. П. Явтушенко*** [b]

[a] *Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева 603155, Нижний Новгород, Россия*

[b] *Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики 607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 10 марта 2023 г.,
после переработки 18 мая 2023 г.
Принята к публикации 18 мая 2023 г.

Приведены результаты экспериментальных исследований двух устройств для газодинамического ускорения цилиндрических лайнеров из меди до скоростей $\sim$ 5–7 км/с с использованием энергии взрыва химических веществ. Продемонстрированы возможности ускорения лайнеров в условиях их изэнтропического и квазиизэнтропического нагружения при реализации высокого уровня динамики, симметрии схождения и подавления эффекта ударно-индуцированного «пыления».

DOI: 10.31857/S0044451023120209
EDN: MYKCBH

1. ВВЕДЕНИЕ

Для термоядерного зажигания дейтерий-тритиевой смеси (ДТ-смеси) посредством ее сжатия необходимо выполнение интегрального критерия [1, 2], который является обобщением критерия Лоусона и может быть представлен в виде условий

$$T \geqslant 2\text{–}3\,\text{кэВ}, \quad \rho r \geqslant 1\,\text{г}\cdot\text{см}^{-2}, \tag{1}$$

где ρ — максимальная плотность, T — максимальная температура, r — минимальный радиус сжимаемой смеси. При этом на условия зажигания влияют динамика и асимметрия сжатия, от которых зависит максимально достижимая плотность, а также перемешивание на границах разноплотных веществ и степень засоренности сжимаемой смеси частицами инертного материала, от которых зависит величина максимальной температуры в центре сжатой ДТ-смеси [3].

В [4] отмечалось, что при хорошей симметрии и большой энергии, например, за счет атомного взрыва, проблемы термоядерного зажигания и горения ДТ-смеси не существует. Проблема возникает при использовании для сжатия термоядерной смеси других более доступных, но менее энергетичных драйверов, основанных на энергии: взрыва химических взрывчатых веществ (ВВ) — газодинамического термоядерного синтеза (ГДТС), лазерного излучения — лазерного термоядерного синтеза (ЛТС), пучков заряженных частиц — ионного термоядерного синтеза (ИТС), магнито-кумулирующих систем — магнитно-газодинамического обжатия (МАГО).

В связи с этим возникает необходимость в поисках эффективных способов сжатия термоядерной смеси. Так, ВНИИЭФ разрабатывает взрывные цилиндрические устройства для газодинамическо-

* E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

го сжатия с помощью энергии ВВ замагниченной ДТ-плазмы, вбрасываемой в центральную полость посредством двух размещенных в торцах устройства инжекторов.

Важной проблемой для эффективности таких устройств является исключение поступления примесей вещества сжимающей оболочки (лайнера) в дейтериевую или дейтерий-тритиевую плазму в процессе ее сжатия, так называемого эффекта ударно-индуцированного «пыления» [5, 6].

В [7] приводятся результаты исследований по выбору способов ускорения плоских лайнеров из меди с помощью энергии ВВ. Показано, что при ускорении лайнеров до скоростей $\sim$ 5–6 км/с эффект ударно-индуцированного «пыления» может подавляться путем их плавного безударного нагружения и ускорения продуктами взрыва (ПВ) через вакуумированный зазор. Другой способ устранения эффекта выброса частиц с поверхности металла основан на ускорении лайнера в двухкаскадном устройстве при заполнении пространства между каскадами газом под давлением, обеспечивающим нагружение лайнера последовательностью слабых ударных волн (УВ), тем самым в металле сохраняются необходимые прочностные свойства, подавляющие развитие микровозмущений на поверхности.

Будем называть нагружение и последующее ускорение однокаскадного лайнера продуктами взрыва ВВ через вакуумированный зазор изэнтропическим, а серией слабых УВ — квазиизэнтропическим.

В данной работе приводятся результаты сравнительного анализа двух устройств с изэнтропическим и квазиизэнтропическим ускорением лайнеров цилиндрической геометрии для сжатия замагниченной плазмы. Анализ основан на результатах экспериментов и сопровождающих их численных расчетов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА И ПРИМЕНЯЕМЫЕ МЕТОДИКИ ДИАГНОСТИКИ

Исследовали две схемы цилиндрических устройств — однокаскадную с изэнтропическим и двухкаскадную с квазиизэнтропическим режимами ускорения лайнеров в виде составных цилиндрических оболочек из алюминия и меди. На рис. 1 приведены эскизы и поперечные разрезы этих цилиндрических устройств. Обе схемы разработаны под один габарит диаметром $\approx$ 330 мм.

В обеих конструкциях цилиндрических устройств использовали одинаковые системы инициирования детонации в зарядах ВВ из одинакового гексогеносодержащего состава, внешние радиусы цилиндрических зарядов ВВ (R_{HE} = 150 мм), длины зарядов ВВ (L_{HE} = 360 мм). Заряд ВВ состоял из трех частей: двух периферийных длиной по 90 мм и одной центральной длиной 180 мм. Полная масса заряда ВВ в однокаскадной конструкции устройства была больше, чем в двухкаскадной за счет меньшего радиуса его внутренней поверхности. Составы и радиусы границ оболочек биметаллических цилиндрических лайнеров одинаковы — оболочка из алюминиевого сплава АМГ-6 толщиной 3.5 мм и оболочка из меди М1 толщиной 0.5 мм. Длины лайнеров и конструкции закрепления в торцах несколько различались. Чистота обработки внутренней поверхности медной оболочки в однокаскадной конструкции составляла Ra 1.0 ($a_0 \approx 6$ мкм, $\lambda \approx 67$ мкм). Чистота обработки внутренней поверхности медной оболочки в двухкаскадной конструкции составляла Ra 0.5 ($a_0 \approx 3$ мкм, $\lambda \approx 67$ мкм, где a_0 — средняя полувысота рельефа микронеровностей (начальная амплитуда возмущений) и λ — среднее расстояние между ними (длина волны возмущений)). Чистота обработки внутренней поверхности при прочих равных условиях определяет эффект ударно-индуцированного «пыления» [6, 7]. Согласно расчетно-теоретическим и экспериментальным оценкам, для реализованной в этих экспериментах чистоты обработки внутренней поверхности медной оболочки «пыления» не должно быть.

Во внутренней полости лайнеров создавали разрежение ($p \approx 0.4$ мм рт. ст.). В однокаскадной конструкции в зазоре между зарядом ВВ и биметаллическим лайнером величиной 14.2 мм создавали разрежение ($p \approx 3$ мм рт. ст.). В двухкаскадной конструкции пространство между каскадами заполняли газом под давлением (аргон, $p \approx 60$ атм). В обоих устройствах на оси устанавливали одинаковые измерительные оптические приемники лазерной доплеровской диагностической системы гетеродин-интерферометра с PDV-датчиками (Photon Doppler Velocimetry) для диагностики динамики движения и определения параметров возможных «пылевых» потоков с внутренней поверхности лайнеров [8]. Приемники располагали по оси только на одной половине полости устройства. Коллиматоры PDV-датчиков устанавливали перед отражающими поверхностями поворотных призм равномерно под поверхностью приемника на трех уровнях по оси устройства (рис. 1), по 5–6 датчиков на каждом уровне. Всего в приемнике 16 датчиков. Наружный диаметр

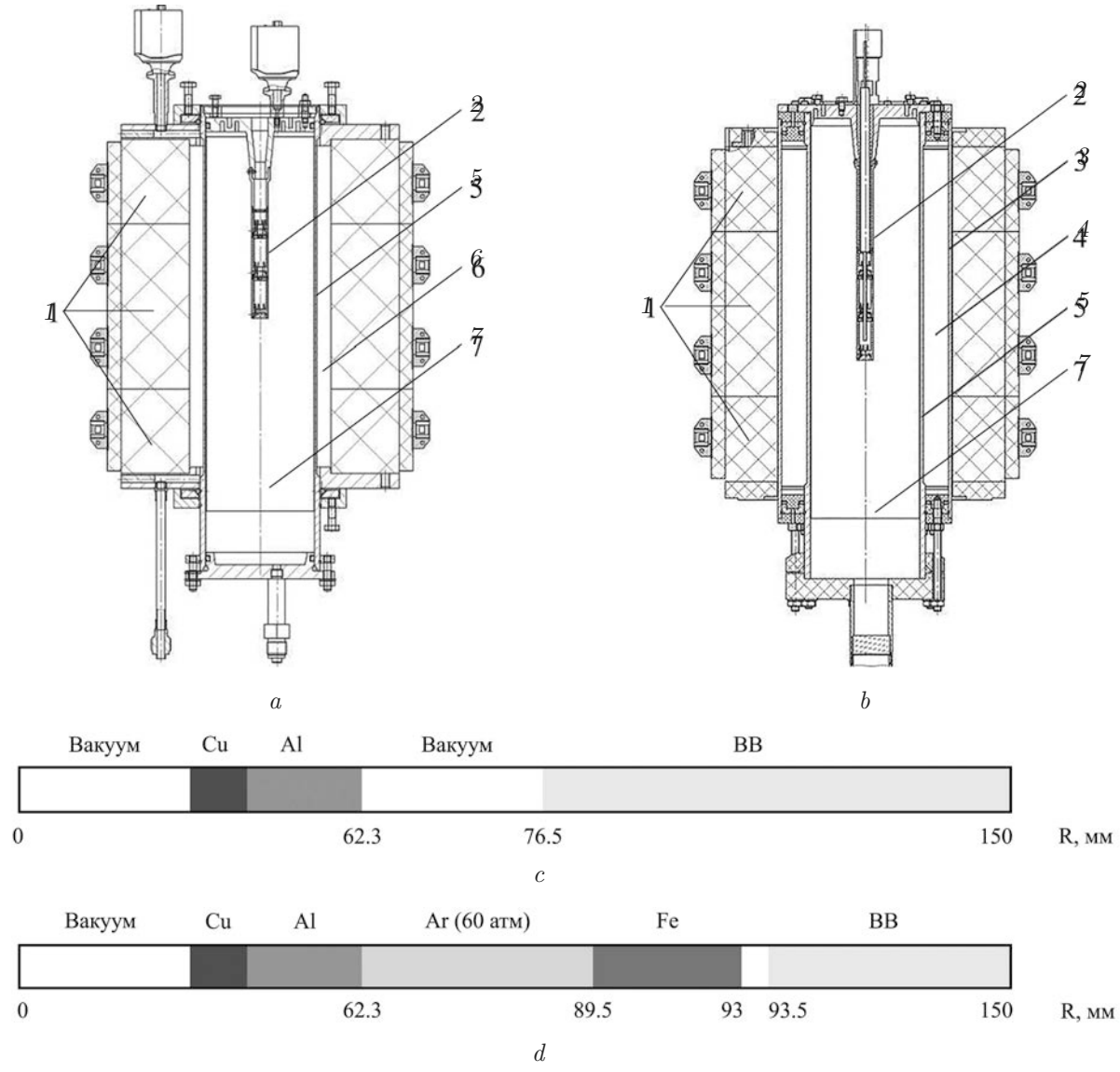
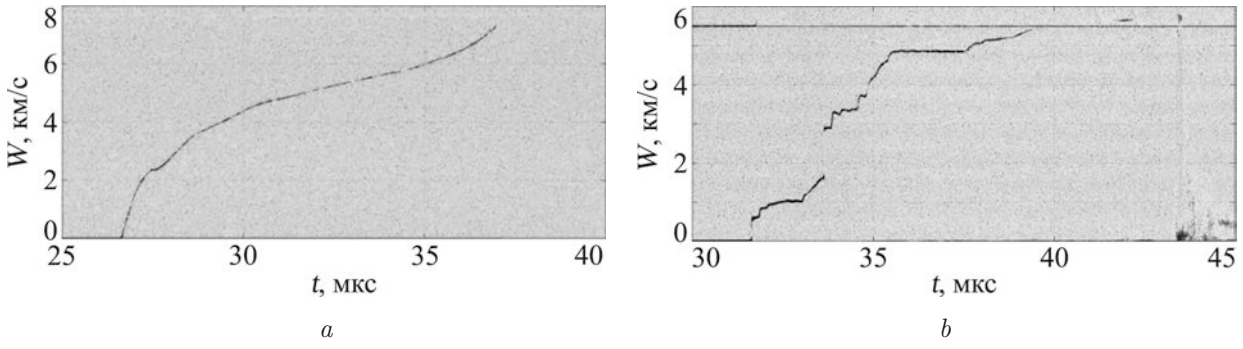


Рис. 1. Эскизы цилиндрических устройств и их поперечные разрезы: *a*, *c* — однокаскадная схема, *b*, *d* — двухкаскадная схема, *1* — заряд ВВ, *2* — измерительный приемник, *3* — оболочка первого каскада, *4* — межкаскадное пространство, заполненное аргоном, *5* — ускоряемый лайнер, *6* — вакуумированный зазор, *7* — вакуумированная полость

приемника составлял 18 мм. Используемая методика гетеродин-интерферометра позволяет проводить регистрацию скорости движения лайнера с точностью ± 20 м/с, временных интервалов с точностью ± 10 нс.

Наряду с методикой гетеродин-интерферометра схождение цилиндрических лайнеров регистрировали с помощью многокадровой рентгенографии. Для регистрации различных фаз движения лайнеров использовали рентгенографический комплекс ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» на основе трех бетатронов БИМ 234.3000, расположенных под углом 45° друг к другу, граничная энергия излучения которых составляла 60 МэВ, а длительность импульсов на полувысоте $\sim$ 150 нс [9]. Лайнеры с зарядами ВВ устанавливали вертикально в месте пересечения пучков излучения. Зону регистрируемого изображения выбирали от края измерительного приемника до противоположного торца устройства. Регистрацию рентгеновских изображений проводили с помощью пакета фотохромных экранов ADS–CR, расположенных друг за другом. Полученные на экранах изображения суммировали по специальному алгоритму [10]. Погрешность определения положения характерных границ по изображениям с учетом масштаба составляла 0.2 мм.

Для сравнительного анализа полученных результатов в целом и интерпретации отдельных данных проводили одномерные и двумерные расчеты



a *b*

Рис. 2. Спектрограммы движения ВГЛ из меди: a — однокаскадное устройство, b — двухкаскадное устройство

с использованием программного обеспечения и вычислительных комплексов РФЯЦ-ВНИИЭФ [11–13]. В одномерных расчетах определяли зависимости динамики схождения лайнеров от времени (перемещения $R(t)$ и скорости $W(t)$), а в двумерных расчетах — возможные отклонения от симметрии формы схождения внутренней границы лайнера из меди. Расчет детонации и условий нагружения лайнеров продуктами взрыва проводили с использованием уравнений состояния в форме Зубарева [14]. Для металлов (стали, алюминия и меди) использовали уравнение состояния в форме POCA [15]. Для аргона использовали уравнение состояния в форме идеального газа с $\gamma = 5/3$, для начального давления 60 атм принимали плотность аргона равной $\rho = 0.107\,\text{г/см}^3$. В расчетах учитывали сдвиговую прочность меди по релаксационной модели прочности [16]. Окончательную геометрию устройств и требования к классу обработки внутренней поверхности медного лайнера выбирали после подтверждения в численных расчетах отсутствия выброса материала из микрорельефа внутренней поверхности лайнеров при соответствующем режиме нагружения. Начальная геометрия устройств, использованная в расчетах, приведена на рис. 1.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведены характерные спектрограммы скорости движения внутренней границы лайнеров (ВГЛ) из меди, полученные методикой гетеродин-интерферометра в опытах с однокаскадным и двухкаскадным цилиндрическими устройствами.

На рис. 3 приведены экспериментальные зависимости скорости ВГЛ из меди $W(t)$ и $R(t)$ — диаграммы ее движения, полученные при обработке всех спектрограмм. На рис. 3 на графиках $W(t)$ указаны времена: t_1 — время начала движения ВГЛ из меди, t_2 — время окончания регистрации. Времена отсчитываются от момента подачи импульса на электродетонатор.

Анализ спектрограмм опытов указывает на то, что датчиками PDV не зарегистрировано наличие «пылевых» потоков перед лайнерами из меди в обоих цилиндрических устройствах в пределах чувствительности метода ($\sim 0.5\,\text{мг/см}^2$) [17]. При этом заметных различий в зарегистрированных зависимостях $W(t)$ отдельными датчиками PDV в пределах каждого устройства также не наблюдается. Для однокаскадного устройства с изэнтропическим ускорением лайнера среднее время начала его движения составило $t_1 = 26.5 \pm 0.2$ мкс. По разным датчикам наблюдается разброс скорости на отдельных участках движения, который на одинаковые моменты времени не превышает $\Delta W = \pm 0.2$ км/с. В конце регистрации ($t_2 \approx 37$ мкс) максимальная скорость лайнера составила $W = 7.3 \pm 0.2$ км/с. Асимметрия ВГЛ из меди характеризуется амплитудой $\Delta R \approx \pm 1$ мм.

Для устройства с квазиизэнтропическим ускорением лайнера среднее время начала его движения составило $t_1 = 31.06 \pm 0.07$ мкс. Профили скорости, регистрируемые разными датчиками, хорошо повторяют друг друга в начале движения, что свидетельствует о хорошей симметрии схождения лайнера на этой стадии. Начиная со второй ступени разгона, наблюдается расхождение в значениях скорости для разных каналов PDV-датчиков. Максимальный разброс скорости на одинаковые моменты времени не превышает $\Delta W = \pm 0.2$–0.3 км/с. В конце регистрации ($t_2 \approx 39$ мкс) максимальная скорость лайнера из меди составила $W = 5.4 \pm 0.2$ км/с. Асимметрия ВГЛ из меди характеризуется амплитудой $\Delta R \approx \pm 1$ мм.

На рис. 4 приведено сравнение усредненных зависимостей скорости $W(t)$ ВГЛ из меди в однокаскадном и двухкаскадном устройствах (время на графике отсчитывается от начала движения ВГЛ).

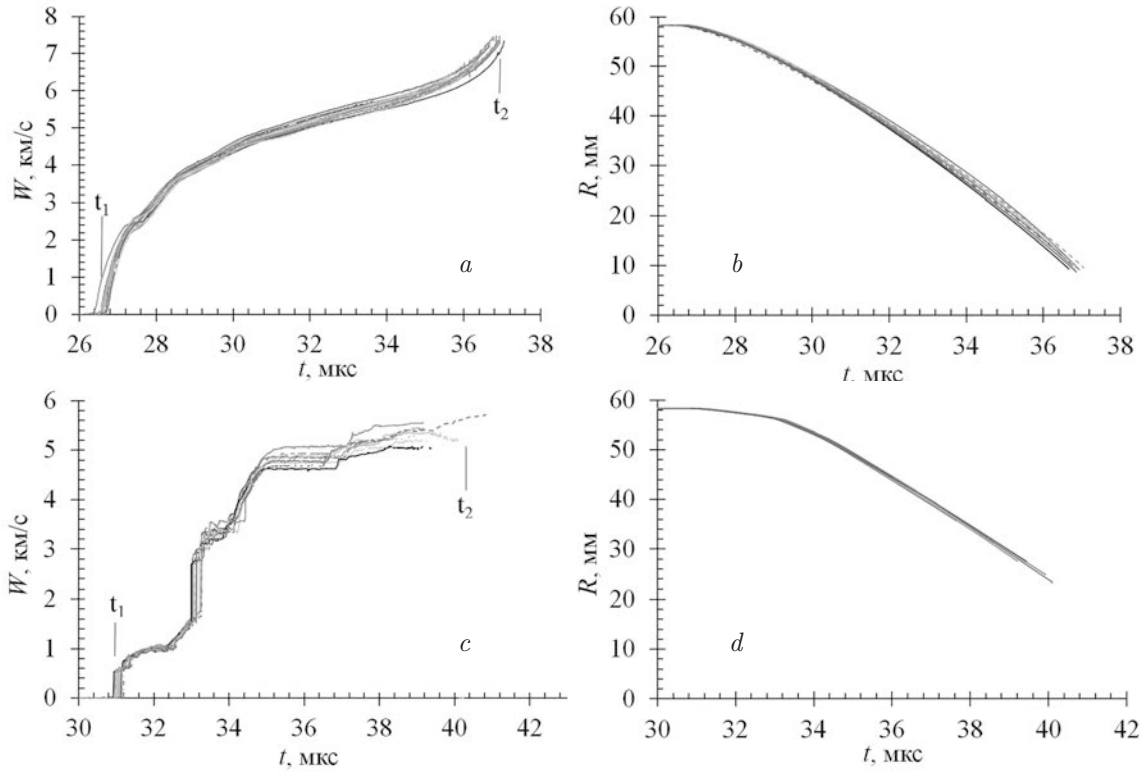


Рис. 3. Зависимости (от времени) скорости $W(t)$ и диаграммы движения $R(t)$ ВГЛ из меди: a, b — однокаскадное устройство, c, d — двухкаскадное устройство

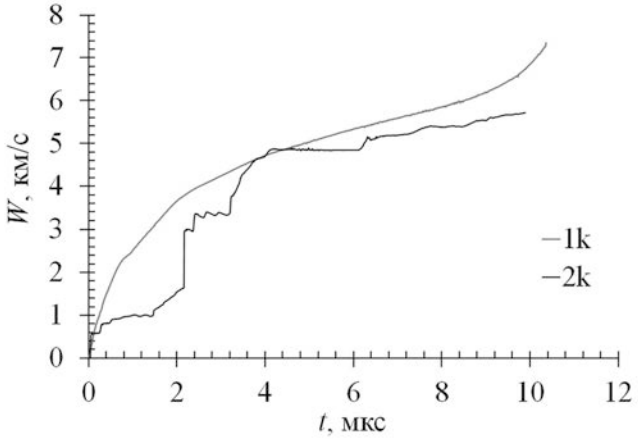


Рис. 4. Усредненные экспериментальные зависимости скорости движения внутренней границы лайнеров из меди: 1k — однокаскадное устройство, 2k — двухкаскадное устройство

Из рис. 4 видно, что при изэнтропическом ускорении лайнера (1k) набор скорости в первые 2 мкс плавный, без ударных скачков, и более быстрый, чем при квазиизэнтропическом ускорении (2k). За 8 мкс лайнер из меди набирает скорость 6.0 км/с, в дальнейшем разгоняется уже не столько за счет расширения ПВ, сколько за счет цилиндрического схождения. В устройстве с квазиизэнтропическим ускорением (2k) за это время лайнер из меди достигает скорости ~ 5.4 км/с, ускорения за счет цилиндрической кумуляции еще не происходит. Этот аспект в работе устройства является важным, так как время сохранения замагниченной плазмой своих теплофизических и электродинамических свойств составляет не более ~ 10 мкс.

На рис. 5 приведены рентгеновские снимки полученных в опытах изображений лайнеров при их изэнтропическом (верхний ряд) и квазиизэнтропическом (нижний ряд) ускорении на различные моменты рентгенографирования t_γ, отсчитываемые от момента подрыва устройства. Слева приведены предварительные снимки центрального ракурса, а над снимками указаны ракурсы съемки исследуемых цилиндрических устройств. На рис. 5 стрелками указаны области, принадлежащие медной (более светлая) и алюминиевой оболочкам. Также на изображении верхнего ряда указана зона стыка зарядов ВВ.

Из рис. 5 следует, что в двухкаскадной конструкции устройства наблюдается схождение лайнера с хорошим уровнем симметрии. В однокаскадной конструкции устройства на заключительной стадии схождения имеется локальное кольцевое возмущение биметаллической оболочки, находящееся в зоне стыка центрального и периферийного участ-

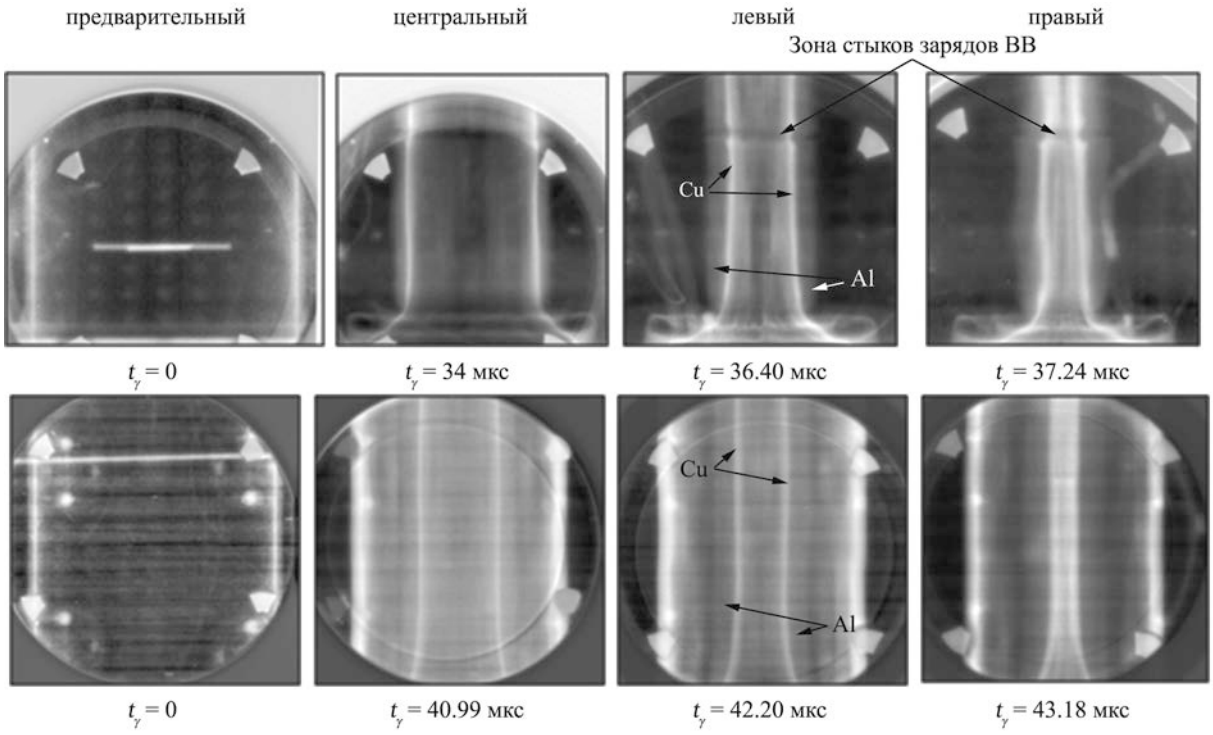


Рис. 5. Экспериментальные рентгенографические снимки

Таблица. Результаты рентгенографических опытов

Способ ускорения	t_γ, мкс	ВГЛ из меди		НГЛ из меди		НГЛ из алюминия	
		R_1, мм	СКО, мм	R_2, мм	СКО, мм	R_3, мм	СКО, мм
Изэнтропический (однокаскадное устройство)	34.00	27.82	0.12	29.83	0.15	35.51	0.27
	36.40	18.73	0.29	15.70	0.43	24.57	0.23
	37.24	7.35(4.9)	0.31(0.21)	11.69	0.55	21.23	0.47
Квазиизэнтропический (двухкаскадное устройство)	40.99	18.42	0.19	20.08	0.10	27.85	0.20
	42.20	10.83	0.13	13.35	0.31	23.42	0.20
	43.18	3.46	0.23	7.64	0.11	20.72	0.14

ков зарядов ВВ. Более того, из снимка на момент $t_\gamma = 37.24$ мкс следует и разная динамика схождения оболочки (разный диаметр полости) под разными частями заряда ВВ. Подобная осевая разнодинамичность не зарегистрирована лазерной доплеровской диагностикой на второй половине устройства. Для двухкаскадной конструкции такого расхождения динамики под разными частями составного заряда ВВ не зафиксировано. Это обстоятельство указывает на то, что конструкция однокаскадного цилиндрического устройства с зазором между зарядом ВВ и биметаллическим лайнером более чувствительна к начальным возмущениям, чем конструкция двухкаскадного устройства с газовой симметризацией. При этом на последние моменты времени рентгенографирования, соответствующие положению ВГЛ из меди на $R \sim 4$–5 мм, наблюдается ее гофрирование, связанное с развитием неустойчивости. Изображения крупномасштабных неоднородностей (гофры) представляют собой вертикальные светлые полосы внутри контура оболочки.

Для определения радиуса схождения ВГЛ и НГЛ (наружной границы лайнеров) проводили трассировку изображений (рис. 5) с использованием функционального метода [18]. Подробное описание технологии обработки аналогичных снимков приведено, например, в [19]. В таблице представлены данные по средним радиусам границ на стационарных участках траектории движения лайнеров и значения соответствующих среднеквадратичных отклонений (СКО) при различных временах рентгенографирования — t_γ.

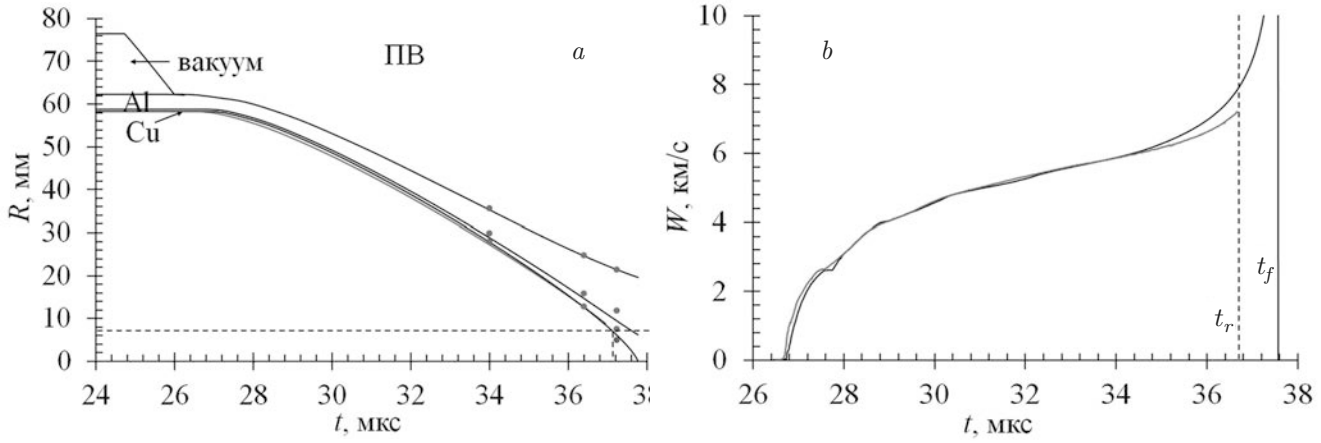


Рис. 6. Сравнение результатов расчета и эксперимента для однокаскадного устройства: a — R–t-диаграммы движения лайнеров, b — зависимости скорости $W(t)$

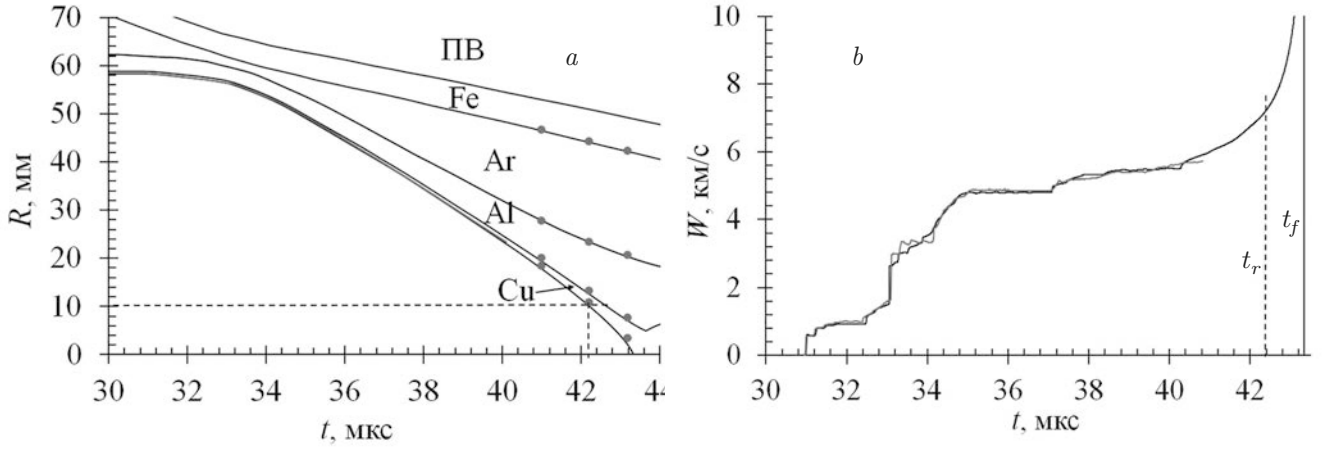


Рис. 7. Сравнение результатов расчета и эксперимента для двухкаскадного устройства: a — R–t-диаграммы движения лайнеров, b — зависимости скорости $W(t)$

Для однокаскадного устройства в таблице приведено два значения радиуса ВГЛ из меди на момент времени 37.24 мкс: первое — величина среднего радиуса в зоне ниже стыка зарядов ВВ, второе (в скобках) — средний радиус в зоне выше стыка зарядов ВВ. Для двухкаскадной конструкции такого расхождения радиусов по зонам не наблюдается.

Сопоставление экспериментальных результатов с результатами одномерных расчетов показало, что динамика схождения лайнеров достаточно точно описывается в манере, изложенной выше, для обеих конструкций. На рис. 6, 7 приведено сравнение расчетных и экспериментальных диаграмм движения $R(t)$ ВГЛ из меди, а также расчетной и усредненной экспериментальной зависимостей скорости $W(t)$ ВГЛ из меди для однокаскадного и двухкаскадного устройств. Красными линиями на рис. 6, 7 показаны экспериментальные зависимости $R(t)$ и $W(t)$, полученные при обработке данных методики PDV, красными круглыми маркерами — данные $R(t)$ рентгенографической методики. Сплошные черные линии — расчетные зависимости. Пунктирными черными линиями на графиках $R(t)$ указан расчетный момент подлета ВГЛ из меди к измерительному приемнику с датчиками PDV, на графиках $W(t)$ также вертикальными пунктирными черными линиями показан этот момент, а вертикальными сплошными черными линиями — момент фокусировки (схлопывание ВГЛ из меди в центре). На рис. 6*a* для однокаскадного устройства на момент времени 37.24 мкс приведены два значения радиуса ВГЛ из меди: синим круглым маркером показан средний радиус, полученный при обработке рентгенограммы в зоне выше стыка зарядов ВВ, красным круглым маркером — средний радиус в зоне ниже стыка зарядов ВВ (рис. 5).

Как показано на рис. 6, 7, для обеих конструкций расчетные скорости движения ВГЛ из меди соответ-

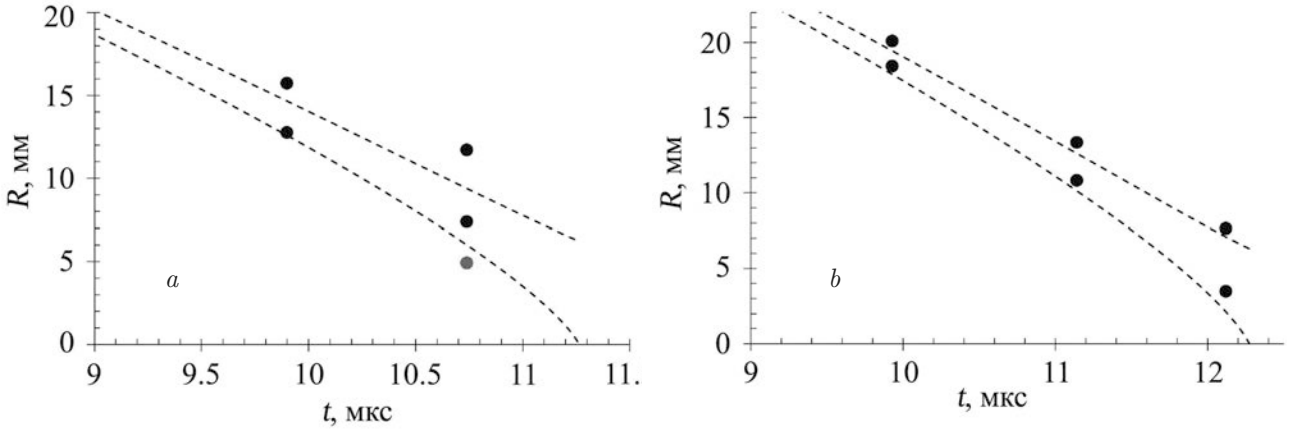


Рис. 8. R–t-диаграммы движения медных лайнеров для однокаскадного (a) и двухкаскадного (b) устройств на радиусах схождения $R \leqslant 20$ мм. Расчет — штриховые линии, рентгенографический эксперимент — круглые маркеры

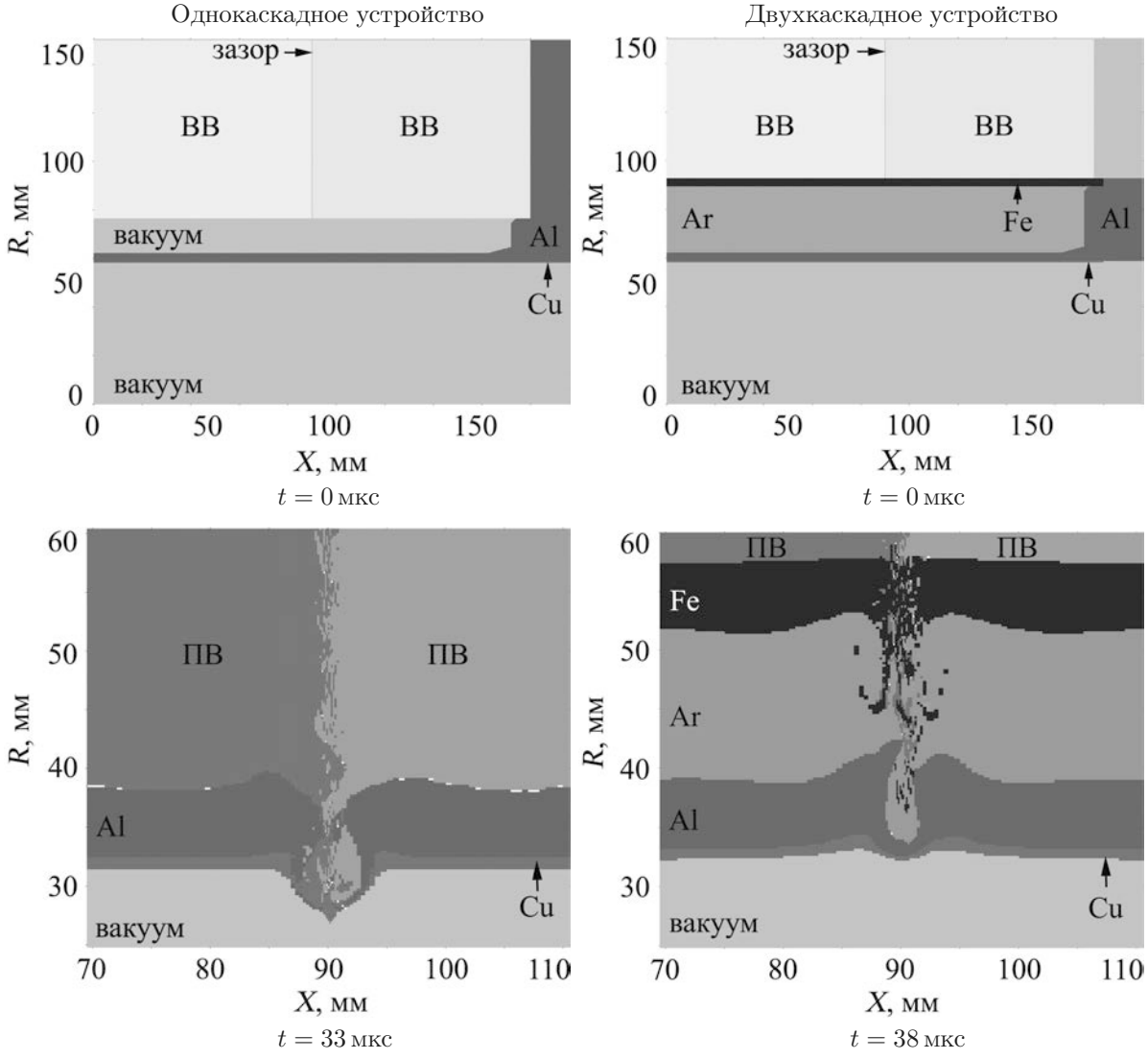


Рис. 9. Влияние зазоров в стыке зарядов ВВ в одно- и двухкаскадном устройствах

ствуют экспериментальным данным. Однако в однокаскадной конструкции экспериментальная скорость ВГЛ из меди через 8 мкс после начала движения начинает отклоняться от расчетной зависимости (радиус ВГЛ уже составил 10 мм). При этом анализ R–t-диаграммы движения ВГЛ из меди (сравнение с последним рентгенографическим кадром) указывает на то, что в дальнейшем некоторые участки оболочки, расположенные вблизи центральной ее части, продолжали свое движение в соответствии с расчетом (синий кружок на рис. 6*a*). В периферийной части устройства реализовался случай запаздывания ВГЛ из меди по сравнению с расчетом (красный кружок).

Для двухкаскадной конструкции получить данные по скоростям для столь глубоких радиусов оболочки, как в случае с однокаскадным устройством, не удалось из-за обрыва регистрации. Однако анализ R–t-диаграммы движения ВГЛ из меди указывает на то, что уже после радиуса схождения оболочки $\leqslant 20$ мм для двухкаскадной конструкции также наблюдается отличие расчетной динамики движения по сравнению с экспериментом (точки по ВГЛ смещены вправо по сравнению с расчетной кривой). Приведенный анализ иллюстрируется графиками рис. 8, где приведены расчетные R–t-диаграммы движения границ медной оболочки и экспериментальные точки на радиусах менее 20 мм для обеих конструкций. Время на графиках рис. 8 отсчитывается от начала движения ВГЛ из меди.

На рис. 9 приведены начальные геометрии двумерных расчетов и полученные расчетные геометрии сходящихся лайнеров в зоне стыка ВВ на момент достижения радиуса $\approx$ 30 мм. Расчеты были проведены в целях проверки предположения, что видимое на рентгенограмме локальное возмущение есть результат влияния зазора в стыке зарядов ВВ. Величина зазора выбрана, исходя из допусков на неплоскостность торцевых поверхностей, которые предполагают возможность локальных зазоров до 0.15 мм. Для мажорантной оценки в расчете задан зазор между торцами 0.2 мм. Расчеты влияния зазора в стыке зарядов ВВ проведены для обеих конструкций. Время на рисунках указано с привязкой к экспериментальным временам работы каждой конструкции.

Из эскизов, приведенных на рис. 9, следует, что возмущение на лайнере из меди от зазора в стыке зарядов ВВ существенно больше в случае однокаскадной конструкции взрывного цилиндрического устройства и, возможно, наступает его прорыв. Для двухкаскадной конструкции прорыв возможен только в первом каскаде, примыкающем к ВВ. Наличие газового слоя и алюминиевой оболочки второго каскада препятствуют прорыву медного лайнера.

Из приведенных результатов сопоставления эксперимента и расчетов следует, что экспериментальные данные для обоих устройств удовлетворительно описываются в одномерных расчетах, а причина нарушения симметрии лайнера в однокаскадном устройстве наиболее вероятно связана с наличием зазора в стыке зарядов ВВ, что указывает на необходимость использования сплошных зарядов ВВ.

При подготовке экспериментов с выбранными двумя схемами цилиндрического устройства проведены двумерные расчеты, задачей которых было определить требования по чистоте обработки внутренней поверхности медного лайнера с целью подавления эффекта ударно-индуцированного «пыления». В расчетах находились параметры возмущений (амплитуда и длина волны) на внутренней поверхности, при которых не происходит их роста с разрушением (т.е. пылеобразованием) в процессе схождения ВГЛ из меди.

Приведем методику этих двумерных расчетов на примере рассмотрения развития возмущения с критической амплитудой A_0 и длиной волны λ, превышение которого может вызвать пыление. Моделируется движение к центру участка цилиндрического медного лайнера с одиночным возмущением на внутренней поверхности. На наружной границе лайнера задается давление от времени, соответствующее получаемому в расчетах, описывающих движение лайнера для каждой схемы. Таким образом воспроизводится динамика разгона лайнера, реализуемая в двух рассматриваемых устройствах. По полученному в расчете изменению амплитуды возмущения делается вывод о возможности или отсутствии пыления.

На рис. 10 представлены задаваемые в расчетах зависимости давления от времени на НГЛ из меди для испытанных однокаскадного и двухкаскадного устройств. Время отсчитывается от момента начала детонации ВВ.

На рис. 11*a* приведена начальная геометрия двумерного расчета с заданием возмущения с $A_0 = 2a_0 = 6$ мкм, $\lambda = 50$ мкм, выставленного в качестве критического. При обработке поверхности недопустимым являлось увеличение начальной амплитуды возмущений $A_0 \geqslant 6$ мкм или уменьшение длины волны $\lambda \leqslant 50$ мкм. На рис. 11*b* показано полученное в расчетах изменение амплитуды возмущений от времени в однокаскадном и двухкаскадном устройствах.

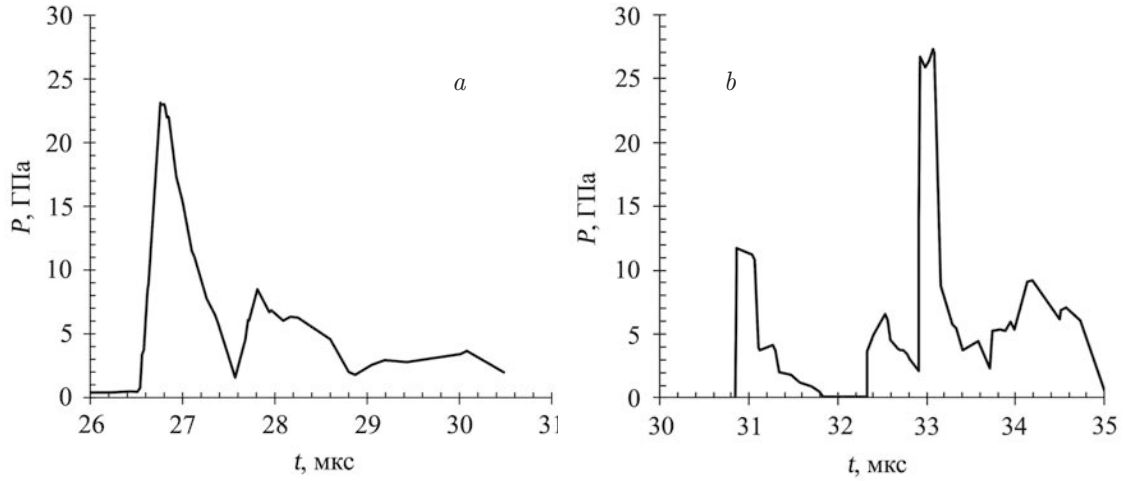


Рис. 10. Зависимости давления от времени на НГЛ из меди для однокаскадного (a) и двухкаскадного (b) устройств, задаваемые в расчетах

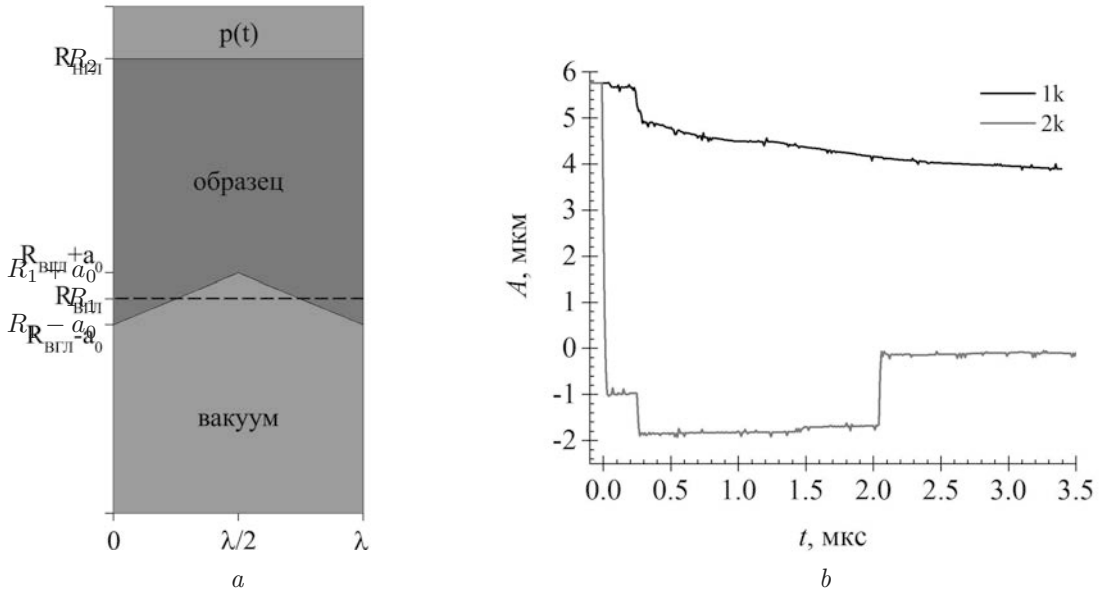


Рис. 11. a) Начальная геометрия расчета развития мелкомасштабных возмущений. Штриховой линией обозначено положение ВГЛ из меди при отсутствии возмущения. R_1 — радиус ВГЛ, R_2 — радиус НГЛ. b) Изменение амплитуды возмущений от времени, отсчитываемого с начала движения ВГЛ. 1k — однокаскадное устройство, 2k — двухкаскадное устройство

На рис. 11b положительные значения амплитуды соответствуют глубине впадины, отрицательные — высоте выступа. В однокаскадном устройстве амплитуда возмущений уменьшается до величины 4 мкм за первые 3 мкс и в дальнейшем возмущения не развиваются. В двухкаскадном устройстве за счет действия слабых УВ возмущения переворачиваются в противофазу в течение 2 мкс и в дальнейшем не развиваются при действии последующих УВ.

Таким образом, определено, что выбранные режимы нагружения позволяют подавить пылеобразование при росте мелкомасштабных возмущений с начальной амплитудой возмущений $A_0 \leqslant 6$ мкм и длиной волны $\lambda \geqslant 50$ мкм из микрорельефа поверхности в обоих устройствах. В экспериментах, проведенных с двумя типами устройств, в пределах чувствительности используемых методик не зарегистрировано эффекта ударно-индуцированного «пыления» с внутренней поверхности лайнеров из меди. Поэтому можно сделать вывод о том, что результаты предварительных двумерных численных расчетов, которые были проведены для прогнозирования выброса частиц с поверхности ВГЛ, подтвердились.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показана возможность подавления эффекта ударно-индуцированного «пыления» с внутренней границы цилиндрических лайнеров, разгоняемых с помощью энергии химического взрывчатого вещества путем их безударного квазиизэнтропического или изэнтропического ускорения до скоростей ~ 5–7 км/с.

2. Установлено, что для подавления крупномасштабных начальных возмущений использование двухкаскадной конструкции с газовым «смягчением» более эффективно, чем однокаскадной конструкции с вакуумным зазором.

3. Оба испытанных устройства имеют ресурс по оптимизации, хорошую симметрию схождения цилиндрических лайнеров, удовлетворительно описываются расчетами и могут быть использованы в задачах по сжатию замагниченной плазмы.

Благодарности. Авторы выражают признательность А. Л. Михайлову, который стоял у истоков работ, за внимательное прочтение и многочисленные ценные замечания, а также сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и расчетов, обработке и оформлении результатов: Д. Е. Зотову, А. В. Рыжкову, А. С. Пупкову, А. В. Котину, В. А. Комракову, В. В. Ковалдову, А .А. Утенкову, В. В. Санкину, И. В. Юртову, В. А. Баранову, Д. М. Моисееву, В. В. Ерастову, С. А. Янкову, И. В. Шмелеву, А. О. Яговкину, А. Е. Сафронову, А. Е. Ковалеву, М. И. Ткаченко, Т. А. Адигамовой, Г. С. Яндубаеву, С. Е. Елфимову, Р. В. Тилькунову, И. Б. Шадиееву, Б. И. Ткаченко, М. В. Логинову, Е. В. Шевнину.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках программы по созданию молодежных лабораторий (научная тема № FSWE — 2021-0010 «Газодинамика и физика взрыва») и Госкорпорации «Росатом» по программе РТТН (проект «Исследование теплофизических свойств веществ при сжатии до рекордно высоких давлений и магнитных полей»).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. С. Вахромеев, В. Н. Мохов, Н. А. Попов, Атомная энергия **49** (2), 121 (1980).

2. Е. Н. Аврорин, Л. П. Феоктистов, Л. П. Шабаршов, Физика плазмы **6**, 965 (1980).

3. В. Н. Мохов, в сб. *Высокие плотности энергии*, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (1997), с. 173.

4. Н. А. Попов, В. А. Щербаков, В. Н. Минеев и др., УФН **178**, 1087 (2008).

5. J. R. Asay and L. M. Bakker, J. Appl. Phys. **45**, 2540 (1974).

6. В. А. Огородников, А. Г. Иванов, А. Л. Михайлов и др., Физика горения и взрыва **34**, 103 (1998).

7. В. А. Огородников, С. В. Ерунов, А. О. Бликов и др., ЖЭТФ **160**, 621 (2021).

8. D. H. Dolan, Rev. Sci. Instr. **91**, 051501 (2020).

9. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov et al., in *11th IEEE Pulsed Power Conference/Digest of Tehnical Papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky (1997), p. 1669.

10. В. А. Аринин, Б. И. Ткаченко, *Труды РНТОРЭС имени А. С. Попова*, сер. Цифровая обработка сигналов и ее применение, вып. VII–2 (2006).

11. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин и др., ВАНТ, сер. Методики и программы числ. решения задач мат. физики, вып. 3, 11 (1982).

12. С. М. Бахрах, С. Ф. Спиридонов, А. А. Шанин, ДАН СССР **276**, 829 (1984).

13. Ю. В. Янилкин, А. А. Шанин, Н. П. Ковалев и др., ВАНТ, сер. Мат. моделир. физ. процессов, вып. 4, 69 (1993).

14. В. Н. Зубарев, А. А. Евстигнеев, Физика горения и взрыва **20**, 6 (1984).

15. Б. Л. Глушак, Л. Ф. Гударенко, Ю. М. Стяжкин, ВАНТ, сер. Мат. моделир. физ. процессов, вып. 2, 57 (1991).

16. Б. Л. Глушак, О. Н. Игнатова, С. С. Надежин и др., ВАНТ, сер. Мат. моделир. физ. процессов, вып. 2, 25 (2012).

17. А. В. Федоров, А. Л. Михайлов, С. А. Финюшин, и др., Физика горения и взрыва **81** (5), 78 (2018).

18. V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, Pattern Recognition and Image Analysis **19**, 63 (2010).

19. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **151**, 592 (2017).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1098–1119 © 2023

КВАЗИЛИНЕЙНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ ВЕЙБЕЛЕВСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В АНИЗОТРОПНОЙ БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

А. А. Кузнецов [*]***, А. А. Нечаев, М. А. Гарасёв, Вл. В. Кочаровский***

Институт прикладной физики Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 31 мая 2023 г.,
после переработки 19 июля 2023 г.
Принята к публикации 19 июля 2023 г.

Развит спектральный квазилинейный подход к задаче о TEM-вейбелевской неустойчивости в анизотропной бесстолкновительной плазме, который учитывает лишь интегральное нелинейное взаимодействие мод посредством их совместного изменения средней по пространству функции распределения частиц по скоростям. В рамках данного приближения получена замкнутая система уравнений для одно- и двумерной эволюции пространственных мод (гармоник) функции распределения частиц и электромагнитного поля в условиях, когда ось анизотропии плазмы, волновой вектор и магнитное поле мод взаимно ортогональны друг к другу. Проведено сравнение численного решения этой системы уравнений с имеющимися результатами одномерной аналитической квазилинейной теории в области ее применимости, а также с результатами двумерного моделирования методом частиц в ячейках, учитывающим и прямое четырехволновое взаимодействие мод. Установлено, что в простейших случаях одномерной и аксиально-симметричной двумерной задач для бимаксвелловской плазмы квазилинейные явления оказываются определяющими на весьма длительной стадии нелинейного развития турбулентности. Отмечено, что на более позднем этапе ее затухания и в более общей постановке задачи, в частности, при наличии внешнего магнитного поля, наряду с квазилинейными явлениями может проявляться и непосредственное нелинейное взаимодействие мод. На основе проведенного анализа выявлен вклад тех или иных нелинейных эффектов в эволюцию пространственного спектра вейбелевской турбулентности и изучены ее свойства, включая автомодельный характер и качественно различные стадии динамики неустойчивых мод.

DOI: 10.31857/S0044451023120210
EDN: MYQYLX

1. ВВЕДЕНИЕ

Слабо столкновительная плазма с анизотропным распределением частиц по скоростям является неравновесной [1, 2], и развивающиеся кинетические неустойчивости формируют в ней хаотические электромагнитные поля и согласованную с ними плазменную турбулентность. Ее динамика и свойства определяются нелинейными эффектами, которые во многих случаях, хотя и являются не сильно выраженными, но для полноценного описания требуют трудоемких расчетов кинетики огромного числа частиц (при этом моделирование наиболее эффективным методом частиц в ячейках [3–8] вносит численный шум, неизбежно искажающий результаты). Такая ситуация характерна для широкого круга задач физики разреженной космической, лазерной и газоразрядной плазмы, в которой время свободного пробега частиц много больше времени развития подобной слабо нелинейной турбулентности [9–12].

Среди неустойчивостей анизотропной плазмы апериодическая неустойчивость вейбелевского типа [13–21] обладает одним из наибольших инкрементов и вместе с тем не сопровождается сильными резонансными нелинейными эффектами, поскольку ограничивается формированием квазимагнитостатических филаментов тока и не приводит к непосредственному возбуждению каких-либо волн. Настоящее исследование посвящено нелинейной стадии ее развития и описанию эволюции спектра возникающей турбулентности в простейших постанов-

[*] E-mail: kuznetsov.alexey@ipfran.ru

ках одно- и двумерных задач на основе разработанного авторами численного кода, реализующего квазилинейный подход к расчету динамики вейбелевских мод [22]. Он учитывает основные нелинейные явления в указанной задаче и позволяет сразу находить представляющий физический интерес спектр полей и токов, избегая моделирования кинетики частиц. Анализ этого спектра актуален для физики звездного ветра, ударных волн в космической плазме, токовых структур, возникающих при лазерной абляции, и др.; см., например, [6, 8, 23, 24].

В линейном приближении вейбелевская неустойчивость изучена достаточно подробно, особенно для бимаксвелловского распределения частиц [13,15,25]. Существующая полностью аналитическая квазилинейная теория эволюции вейбелевской турбулентности разработана лишь в одномерной (1D2V) геометрии, причем для весьма ограниченной области параметров и без должного описания временной эволюции [26]. Полуаналитическое решение системы квазилинейных уравнений в 1D3V-геометрии [5] с опорой на эмпирические данные численного моделирования также применимо лишь для небольшой области параметров плазмы.

В развиваемом численном квазилинейном подходе функция распределения частиц и электрическое и магнитное поля представлены в виде сумм пространственных мод (гармоник), удовлетворяющих самосогласованным квазилинейным уравнениям, в которых все нелинейные явления обусловлены совместным действием мод на форму средней по пространству функции распределения частиц по скоростям. Последняя определяет текущие значения инкрементов (декрементов) и, возможно, действительных частот всех рассматриваемых мод, в остальном эволюционирующих независимо. В результате, в отличие от метода частиц в ячейках, кардинально снижается уровень шумов и удается получать спектры вейбелевской турбулентности в гораздо более высоком качестве и в недоступных ранее областях параметров, правда, ценой потери некоторых слабых нелинейных эффектов при использовании сравнимых или даже бóльших вычислительных ресурсов.

Для определенности в конкретных расчетах ниже будем выбирать начальную функцию распределения частиц по скоростям бимаксвелловской, считая температуру частиц наибольшей вдоль оси y, называемой осью анизотропии. Для простоты будем предполагать, что плазма и все поля в ней однородны вдоль этой оси, т. е. будем решать систему уравнений Максвелла–Власова [9] в одном (по координате x) или двух (по координатам x и z) измерениях, а следовательно, полагать нулевой проекцию волновых векторов мод $\mathbf{k}$ на ось анизотропии: $k_y = 0$. При этом в каждой моде электрическое поле $\mathbf{E}$ направлено вдоль оси анизотропии, а магнитное $\mathbf{B}$ ортогонально ей и волновому вектору $\mathbf{k}$ (TEM-моды).

Главная цель представленной работы состоит в изучении нелинейных явлений квазилинейного типа, доминирующих в процессе развития вейбелевской турбулентности. Насколько нам известно, последовательный квазилинейный анализ ее эволюции до сих пор никем не проводился ни для какой анизотропии начальной функции распределения частиц по скоростям (ср., например, [5, 26, 27]). Более того, другими авторами не проводилось даже достаточно длительного моделирования динамики спектра вейбелевских мод в простейшей постановке задачи об одномерной (1D2V) и аксиально-симметричной двумерной (2D3V) турбулентностях, рассматриваемых в настоящей работе. Вместе с тем некоторые выявленные нами особенности эволюции спектра и динамики отдельных мод аналогичны численно найденным ранее в других постановках задачи о вейбелевской турбулентности.

Следует отметить, что полноценное (3D3V) долговременное компьютерное моделирование изучаемых турбулентных явлений пока невозможно из-за недостаточной мощности вычислительных ресурсов. В ограниченных расчетах методом частиц в ячейках, проведенных в данной работе и ранее, далеко не всегда удается выделить слабые нелинейные эффекты, например, четырехволновое взаимодействие мод, на фоне более сильных квазилинейных эффектов и трудно отделимых неизбежных компьютерных шумов. Подобное выделение стало возможным только недавно и осуществлено в единичных случаях при специальных условиях для нестандартных задач (см. [28, 29]), так что ниже оно затрагивается лишь вскользь.

Схема решения квазилинейных уравнений поясняется в разд. 2 на примере одномерной задачи для дискретных мод с коллинеарными волновыми векторами, имеющими только компоненты k_x. Результаты численного исследования особенностей динамики соответствующей одномерной квазилинейной вейбелевской турбулентности и их сравнение с результатами имеющейся аналитической теории даны в разд. 3. В разд. 4 используются аналогичные квазилинейные уравнения для двумерной задачи и приводятся результаты их решения в простейшем случае аксиальной симметрии, в котором температура частиц и все характеристики вейбелевской турбулентности изотропны в плоскости xz, т. е. спектр

зависит только от радиальной компоненты k волнового вектора. Эти результаты, полученные для случая двумерной аксиально-симметричной турбулентности, сравниваются с полученными методом частиц в ячейках при помощи кода EPOCH [30], учитывающего и более тонкие нелинейные эффекты, в том числе четырехволновое взаимодействие. В заключительном разделе суммируются общие свойства эволюции вейбелевской турбулентности в бимаксвелловской плазме: автомодельный характер поведения спектра в целом и четыре качественно различные стадии динамики отдельных неустойчивых мод, а также сопоставляются нелинейные явления, учитываемые в квазилинейном подходе и выходящие за его рамки.

2. АДИАБАТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА МОД И СХЕМА ИХ СВЯЗИ В УСЛОВИЯХ СЛАБОГО ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Для бесстолкновительной плазмы, в которой на рассматриваемых временах эволюции вейбелевской турбулентности можно пренебречь движением тяжелых ионов, самосогласованные уравнения Максвелла–Власова для электрического $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$ и магнитного $\mathbf{B} = (B_x, 0, B_z)$ полей и функции распределения электронов $f(v_x, v_y, v_z, x, z, t)$ имеют вид

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}, \tag{1}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e}{m_e}\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{B}]\right)\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0, \tag{3}$$

где c — скорость света в вакууме, e и m_e — заряд и масса электрона,

$$\mathbf{j} = e\iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{v} f(v_x, v_y, v_z, x, z, t) dv_x dv_y dv_z$$

— плотность тока,

$$N = \iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} f(v_x, v_y, v_z, x, z, t) dv_x dv_y dv_z$$

— концентрация электронов. Здесь и ниже речь идет о так называемых TEM-возмущениях, в которых взаимно ортогональны друг к другу волновой вектор и магнитное и электрическое поля, причем последнее параллельно оси анизотропии плазмы. При этом выше учтено, что для двумерной задачи радиус-вектор является двухкомпонентным, $\mathbf{r} = (x, 0, z)$, а вектор скорости — трехкомпонентным, $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ (в одномерной задаче отсутствуют зависимости от координаты z и скорости v_z, но сохраняются зависимости от двух других компонент v_x, v_y).

Положим, что в начальный момент времени нормированная функция распределения по скоростям $c^3 f/N$ имеет бимаксвелловский вид:

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{\pi^{3/2}\beta_{\perp 0}^2\beta_{\parallel 0}} \exp\left(-\frac{\beta_x^2 + \beta_z^2}{\beta_{\perp 0}^2} - \frac{\beta_y^2}{\beta_{\parallel 0}^2}\right). \tag{4}$$

Здесь $\beta_{x,y,z} = v_{x,y,z}/c$, т. е. $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$, и в дальнейшем используется параметр анизотропии

$$A_0 = \beta_{\parallel 0}^2/\beta_{\perp 0}^2 - 1,$$

определяемый отношением большей тепловой скорости к меньшей.

Квазилинейный подход к описанию TEM-вейбелевской неустойчивости основан на разложении по пространственным модам (гармоникам) решения уравнений Максвелла–Власова [9] с шумоподобным начальным возмущением магнитного поля, обладающим примерно равномерным спектром в области неустойчивых волновых чисел мод. Особенно эффективным подобное разложение является тогда, когда ключевую роль играет интегральное нелинейное взаимодействие мод посредством их совместного изменения средней по пространству функции распределения частиц по скоростям. Для вейбелевской турбулентности это оправдано ввиду слабой нелинейности кинетического уравнения Власова в рассматриваемых условиях отсутствия квазимонохроматических электромагнитных волн и их резонансного взаимодействия [22]. В частности, как показали тестовые расчеты, для любой отдельной моды магнитного (и соответствующего электрического) поля

$$B_1(t, x) = \mathrm{Re}\left[B_1(t)\exp(-ikx)\right]$$

с волновым вектором $\mathbf{k}$, для определенности направленным вдоль орта $\mathbf{x}_0$, можно не учитывать кратные гармоники ℓk с целым $\ell > 1$ и необходимо учесть только три гармоники поправок к функции распределения,

$$\delta f_\ell(t, x) = \mathrm{Re}\left[f_\ell(t)\exp(-i\ell kx)\right],$$

со значениями $\ell = 0, 1, 2$. При этом возбуждение четной гармоники $\ell = 2$ магнитного поля фактически невозможно благодаря ограничениям симмет-

рии в одномерной и аксиально-симметричной двумерной задачах. Здесь и ниже $\mathbf{x}_0$, $\mathbf{y}_0$, $\mathbf{z}_0$ — единичные орты декартовой системы координат.

Наличие большого числа однотипных не сфазированных мод, достаточно плотно заполняющих значимую область волновых векторов, гарантирует гладкость формы и плавность изменения функции распределения, исключая артефакты когерентной интерференции и отрицательные значения функции распределения электронов всюду, кроме, возможно, несущественной, содержащей крайне мало частиц, области их скоростей, очень больших по сравнению с тепловыми скоростями. При этом по существу реализуется адиабатическая динамика каждой моды, непрерывно подстраивающейся к изменяющейся функции распределения частиц. Корректность такого рода теории возмущений, а фактически — соблюдение иерархии малости амплитуд последующих гармоник по сравнению с предыдущими (как гармоник функции распределения, $|\delta f_\ell| \gg |\delta f_{\ell+1}|$, так и аналогичных гармоник магнитного или электрического полей) проверены нами в случаях задания одной или двух производящих мод.

Так, в случае единственной производящей моды нелинейно связываются все кратные гармоники функции распределения ℓk с $\ell = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ldots$ и нечетные гармоники ТЕМ-поля ℓk с $\ell = 1, 3,\ldots$ (в силу отсутствия токов на четных гармониках из-за свойств четности функции распределения), но учет высших гармоник, начиная с $\ell = 3$, почти не изменяет результат. Удостовериться в этом позволяет следующая система связанных уравнений для кратных (комплексных) гармоник-возмущений функции распределения, отвечающая теории возмущений до $\ell = 4$:

$$\mathbf{B} = \mathrm{Re}\left[B_1(t)\exp(-ikx) + B_3(t)\exp(-3ikx)\right]\mathbf{z}_0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \hat{\phi}(\Omega_1, f_1^*) + \hat{\phi}^*(\Omega_1^*, f_1) + \\ + \hat{\phi}(\Omega_3, f_3^*) + \hat{\phi}^*(\Omega_3^*, f_3) = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + ikv_x f_1 + 2\hat{\phi}(\Omega_1, f_0) + \\ + \hat{\phi}^*(\Omega_1^*, f_2) + \hat{\phi}(\Omega_3, f_2^*) = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} + 2ikv_x f_2 + \hat{\phi}(\Omega_1, f_1) + \\ + \hat{\phi}^*(\Omega_1^*, f_3) + \hat{\phi}(\Omega_3, f_1^*) = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} + 3ikv_x f_3 + 2\hat{\phi}(\Omega_3, f_0) + \\ + \hat{\phi}^*(\Omega_1^*, f_4) + \hat{\phi}(\Omega_1, f_2) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial t} + 4ikv_x f_4 + \hat{\phi}(\Omega_1, f_3) + \hat{\phi}(\Omega_3, f_1) = 0, \quad (10)$$

где опущены очевидные осцилляторные уравнения для первой и третьей гармоник магнитного поля (5), получающиеся из уравнений (1), (2) и в силу их линейности включающие только соответствующие первую и третью гармоники функции распределения. Для сокращения записи здесь введен оператор

$$\hat{\phi}(\Omega_n, f(\mathbf{v})) = \frac{i}{2nk}\frac{\partial \Omega_n}{\partial t}\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial v_y} - \\ - \frac{1}{2}\Omega_n\left(v_x\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial v_y} - v_y\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial v_x}\right) \quad (11)$$

и комплексная гирочастота $\Omega_n = eB_n/(m_e c)$. Данная система схематически представлена на рис. 1, а

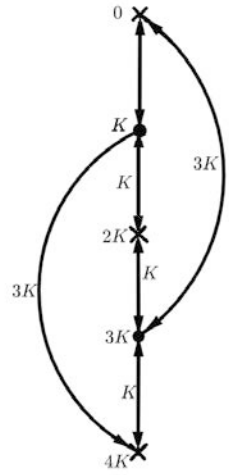


Рис. 1. Схема связи четырех гармоник функции распределения частиц в самосогласованной системе уравнений (5)–(10) для одной производящей моды. Узел на схеме отвечает уравнению для соответствующей гармоники. Если поле некоторой гармоники тождественно равно нулю, то соответствующий узел изображен в виде крестика, а если нет, то в виде точки. Входящая в узел стрелка отвечает слагаемому в уравнении для гармоники, соответствующей этому узлу. В таком слагаемом присутствует гармоника поля, соответствующая гармонике, указанной на стрелке, и гармоника функции распределения частиц, указанная на узле, из которого стрелка исходит

результат прямой проверки корректности ее решения путем сравнения с решением исходных уравнений (1)–(3) кодом EPOCH при начальном возбуждении одной сильной моды существенно выше уровня

шумов продемонстрирован на рис. 2 (решения совпадают с точностью до нескольких процентов). В

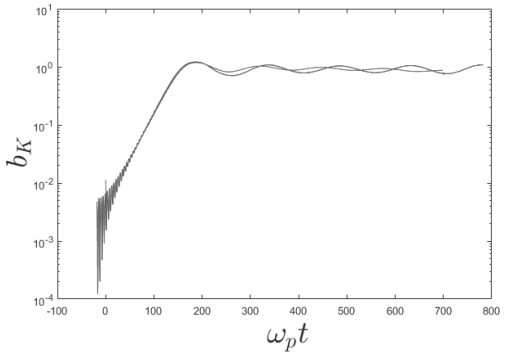


Рис. 2. Эволюция одной моды: сравнение хода амплитуды основной гармоники магнитного поля в квазилинейном расчете по уравнениям (6)–(10) (синяя линия) и в расчете методом частиц в ячейках с помощью кода EPOCH по уравнениям (1)–(3) (красная линия) при $A_0 = 10$, $K = 1.2$

качестве неявной проверки слабой генерации высших гармоник в полученной системе уравнений было показано, что ее численное решение для основной гармоники (моды) магнитного поля $B_1(t)$, непосредственно создаваемой первой гармоникой функции распределения $f_1(t)$, практически не отличается от численного решения значительно упрощенной системы, в которой эволюция данной гармоники $B_1(t)$ (и $f_1(t)$) определяется лишь согласованной динамикой нулевой и второй гармоник функции распределения $f_{0,2}(t)$, но не третьей (и высшими) гармониками магнитного поля и функции распределения.

В общем случае многомодовой динамики вейбелевской неустойчивости неизбежно возникают перекрестные гармоники вида $k_i \pm k_j$, $2k_i \pm k_j$ и т.д. Схема взаимосвязи подобных перекрестных гармоник в случае наличия двух производящих вейбелевских мод дана на рис. 3. Подобно одномодовой иллюстрации корректности пренебрежения кратными гармониками, была показана слабость генерации перекрестных гармоник, в частности, на основе сравнения решений полной системы уравнений и сокращенной системы, содержащей гармоники не выше второго порядка, включая суммарные и разностные, в случае начального задания только двух сильных мод. Учет четырехволнового взаимодействия мод в подобной системе квазилинейных уравнений является крайне громоздким и выходит за рамки статьи.

Итак, имеем следующую квазилинейную систему уравнений для одномерной вейбелевской турбулентности с большим числом m коллинеарных мод $\{k_1, k_2, ..., k_m\}$, волновые векторы которых направлены поперек оси анизотропии, часто расположены и перекрывают всю существенную область неустойчивости:

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial \tau} + \sum_{n=1}^{m} \left(\hat{\Phi}(b_{K_n}, \psi^*_{K_n}) + \hat{\Phi}^*(b^*_{K_n}, \psi_{K_n}) \right) = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \psi_{K_n}}{\partial \tau} + iK_n\beta_x\psi_{K_n} + 2\hat{\Phi}(b_{K_n}, \psi_0) + \\ + \hat{\Phi}^*(b^*_{K_n}, \psi_{2K_n}) = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \psi_{2K_n}}{\partial \tau} + 2iK_n\beta_x\psi_{2K_n} + \hat{\Phi}(b_{K_n}, \psi_{K_n}) = 0, \quad (14)$$

$$\ddot{b}_{K_n} + K_n^2 b_{K_n} = \\ = \frac{iK_n}{\beta_{\|0}} \iint\limits_{-\infty}^{\infty} \beta_y \psi_{K_n}(\tau, \beta_x, \beta_y) d\beta_x d\beta_y. \quad (15)$$

Согласно ей, магнитное поле имеет вид суммы мод по целочисленному индексу n:

$$B(t,x) = \mathrm{Re} \sum_{n=1}^{m} B_{k_\mathbf{n}}(t) \exp(-ik_n x).$$

Аналогичный вид имеет каждая из двух кратных гармоник-возмущений функции распределения частиц по скоростям, т. е. компонент $\delta f_1(t,x)$ и $\delta f_2(t,x)$, разложенных на комплексные гармоники $f_{1k_\mathbf{n}}(t)$ и $f_{2k_\mathbf{n}}(t)$ соответственно; нулевая (действительная) гармоника $f_0(t) = \delta f_0(t)$ зависит только от вектора скорости и дает поправку к функции распределения, усредненную по оси x. Здесь и ниже используются время и волновое число, нормированные на плазменные частоту и масштаб,

$$\tau = \omega_p t, \; K = \frac{kc}{\omega_p}, \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{m_e}. \quad (16)$$

Комплексные амплитуды мод (гармоник) магнитного поля и функции распределения тоже нормированы:

$$b_{K_n} = \frac{B_{K_n}}{\sqrt{8\pi N T_{\|0}}}, \\ T_{\|0} = \frac{m_e c^2 \beta_{\|0}^2}{2}, \quad (17) \\ \psi_{\ell K_n} = \frac{c^2 f_{\ell K_n}}{N}, \quad \ell = 0, 1, 2.$$

Для многомодовой задачи введен оператор

$$\hat{\Phi}(b_{K_n}, \psi(\boldsymbol{\beta})) = \frac{i}{2K_n} \frac{\partial b_{K_n}}{\partial \tau} \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_y} -$$

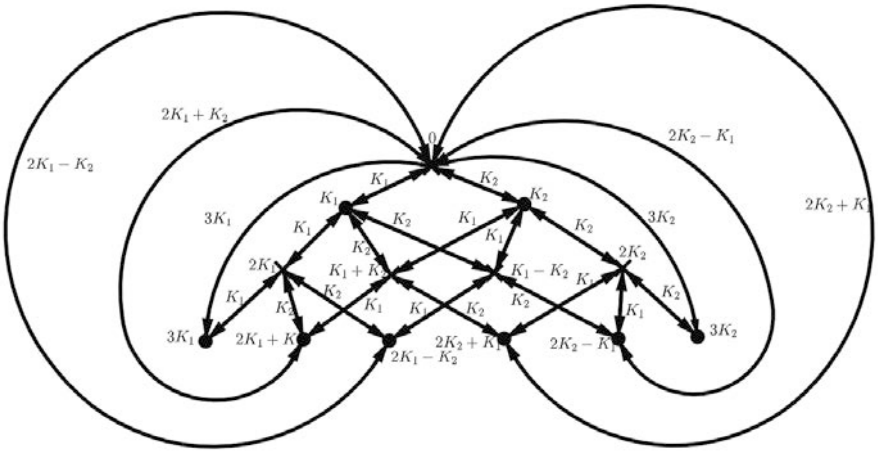


Рис. 3. Схема связи гармоник функции распределения в самосогласованной системе уравнений для двух производящих мод. Обозначения те же, что на рис. 1

$$-\frac{1}{2}b_{K_n}\left(\beta_x\frac{\partial\psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_y}-\beta_y\frac{\partial\psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_x}\right), \quad (18)$$

отличающийся нормировкой переменных и параметров от указанного ранее оператора (11) в одномодовой задаче. Квадратичные слагаемые в уравнениях обусловливают квазилинейное взаимодействие между не скоррелированными по фазам модами. Оно осуществляется посредством их коллективного нелинейного воздействия на однородную компоненту функции распределения, приводящего к изменению ее формы, снижению анизотропии распределения, появлению ненулевых действительных частот мод и их декрементов, т. е. смене знака их инкрементов, и, как следствие, насыщению неустойчивости. Для применимости теории слабой турбулентности [2, 31] в рассматриваемой задаче необходима как справедливость сформулированной теории возмущений, так и возможность на нелинейной стадии эволюции использовать для мод линейное дисперсионное уравнение, которое содержит текущую функцию распределения частиц по скоростям, усредненную по пространству и отличную от начальной.

Все полученные нами системы квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений (например, система (12)–(15) с оператором (18)) решались стандартным методом Стермера–Верле (Leapfrog) [32]. Шаг по времени составлял малую величину $d\tau \sim 0.05$–0.50 в сравнении с наименьшим временным масштабом рассматриваемой приведенной к безразмерному виду системы уравнений, который определяется волновыми числами мод магнитного поля и тока ($\sim\pi/K$) и имеет порядок единицы. Расчетная сетка для нормированных скоростей β_x, β_y, β_z как переменных трех компонент (12)–(14) анизотропной функции распределения, разложенных по модам $\{K_1, K_2, ..., K_m\}$, выбиралась анизотропной с соответствующими шагами

$$d\beta_x = d\beta_z \sim \beta_{\perp 0}/15$$

и

$$d\beta_y \sim \beta_{\parallel 0}/15 = \beta_{\perp 0}\sqrt{1+A_0}/15.$$

Количество мод m в типичных расчетах составляло несколько сотен и выбиралось из условия независимости (с точностью до нескольких процентов) эволюции вычисляемого среднеквадратичного магнитного поля от дальнейшего увеличения числа m, что в одномерной задаче обычно имело место начиная с чисел ~ 30. Во всех расчетах для определенности начальная поперечная тепловая скорость электронов полагалась равной $\beta_{\perp 0} = 0.1$.

3. ЭВОЛЮЦИЯ ОДНОМЕРНОЙ ВЕЙБЕЛЕВСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

Одномерная эволюция большого числа сонаправленных вейбелевских мод, плотно покрывающих область неустойчивости, определяется представленной системой уравнений (12)–(15) с оператором (18) при задании величины начальной анизотропии бимаксвелловской плазмы A_0, одной из тепловых скоростей, например $\beta_{\perp 0}$, и начального спектра мод функции распределения и электромагнитного поля. Ключевым параметром нелинейного развития динамического спектра турбулентности является начальная анизотропия A_0, задающая,

в частности, линейный спектр неустойчивых вейбелевских мод, т. е. их инкременты. При $A_0 \ll 1$ максимальный инкремент (в единицах ω_p) равен $\gamma_{max} \approx 2\beta_{\perp 0}(A_0/3)^{3/2}$ и достигается для оптимального волнового числа

$$K_{opt} \approx (A_0/3)^{1/2},$$

при $A_0 \gg 1$ имеем

$$\gamma_{max} \approx \beta_{\perp 0}\left([(A_0+1)/2]^{1/2} - 1\right)$$

для

$$K_{opt} \approx \left([(A_0+1)/2]^{1/2} - 1\right)^{1/2}.$$

Ниже отдельно обсуждаются случаи низкой ($A_0 = 0.25$) и высокой ($A_0 = 10$) начальной анизотропии. В обоих случаях получаются вполне сравнимые интегральные характеристики турбулентности, вычисляемые с использованием квазилинейных расчетов и моделирования методом частиц в ячейках при помощи кода EPOCH. Однако количественно результаты последнего, как правило, отличаются в полтора-два раза, поскольку в одномерной задаче он вносит сильные шумы в несвойственные ей компоненты полей и скоростей, заметно искажающие функцию распределения частиц, а следовательно, квазилинейную эволюцию спектра (другие нелинейные эффекты, в том числе четырехволновые, для одномерной турбулентности не характерны).

Согласно [33], на основе энергетических инвариантов [27] для рассматриваемой одномерной задачи может быть получено следующее приближенное аналитическое соотношение между текущими значениями нормированного среднеквадратичного магнитного поля b_{av}, характерного волнового числа $\langle K\rangle$[1)] и параметра анизотропии плазмы A (отличного от введенного в [33]), если считать, что пространственный спектр вейбелевской турбулентности достаточно узок:

$$b_{av}^2 = \frac{A_0 - A}{1 + A_0}\frac{0.5\langle K\rangle^2}{A\langle K\rangle^2 + A + 3\langle K\rangle^2 + 2}, \tag{19}$$

$$\langle ...\rangle = \frac{\int \ldots b_k dk}{\int b_k dk}, \tag{20}$$

$$A = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty}\int \beta_y^2 \psi_0(\tau, \beta_x, \beta_y) d\beta_x d\beta_y}{\int_{-\infty}^{+\infty}\int \beta_x^2 \psi_0(\tau, \beta_x, \beta_y) d\beta_x d\beta_y} - 1. \tag{21}$$

Для представленных результатов моделирования одномерной турбулентности, согласованной со сложно меняющейся (не бимаксвелловской) функцией распределения частиц, это соотношение оказалось хорошо выполняющимся, обычно с точностью до нескольких процентов.

3.1. Низкая начальная анизотропия

Результаты имеющейся аналитической квазилинейной теории [26], приближенно справедливой в одномерной задаче при малом параметре анизотропии $A \ll 1$, но не описывающей эволюцию турбулентности в явном виде и не учитывающей деформацию функции распределения частиц по скоростям вдоль оси анизотропии, трудно непосредственно сопоставить с приведенным выше соотношением и с прямым численным моделированием динамики спектра. Однако проведенное нами косвенное сопоставление показывает, что качественно эта теория вполне совместима с получаемыми более точными численными результатами в области ее применимости. Основные приближения аналитической квазилинейной теории [26] состоят в малости инкрементов, $\gamma_{K_n} \ll K_n\beta_{\perp 0}$, и в узости области изменения усредненной в пространстве функции распределения частиц по скоростям, $\delta\beta_x \ll \beta_{\perp 0}$. Первое требование призвано гарантировать применимость используемого дисперсионного уравнения, а второе фактически сводится к указанному условию $A \ll 1$.

Интересующее нас косвенное сопоставление удается провести с использованием найденного в аналитической теории эволюционного параметра h, величина которого определяется адиабатической динамикой мод и однозначно задает вид деформированной функции распределения:

$$|\dot{b}_{K_n}| = \gamma_{K_n}|b_{K_n}|, \tag{22}$$

$$h = \sum_{K_n}\frac{|b_{K_n}|^2}{K_n^2}. \tag{23}$$

На рис. 4 показана характерная деформация функции распределения частиц, произошедшая спустя время $\omega_p t = 9000$ (т. е. примерно втрое позже начала заметного насыщения роста энергии турбулентного магнитного поля) и найденная как непосредственно из численного решения квазилинейной си-

[1)] Во многих случаях представленному соотношению немного лучше удовлетворяет волновое число $K_{max}(t)$, отвечающее максимуму спектра турбулентности, а не указанное выше число $\langle K\rangle$, усредненное по спектру мод b_k, хотя эти числа довольно близки.

стемы уравнений (12)–(15), так и косвенно из аналитической квазилинейной теории (22), (23) с использованием указанного численного решения для вычисления эволюционного параметра h при малой начальной анизотропии $A_0 = 0.25$. Как видим, относительная деформация функции распределения составляет доли процента и действительно происходит в области скоростей, меньших тепловой скорости. В этой области угол движения электронов относительно оси анизотропии y в среднем заметно увеличивается, хотя качественное изменение траекторий с появлением баунс-осцилляций фактически происходит только для малой доли электронов со скоростями, лежащими вдоль оси анизотропии в небольшом конусе углов с раскрывом, сужающимся с уменьшением параметра анизотропии A_0. В целом в результате насыщения вейбелевской неустойчивости функция распределения по скоростям уплощается в своей центральной части, теряя там бимаксвелловскую форму и приобретая более сложный (в дальнейшем слабо меняющийся) анизотропный вид, причем полный параметр анизотропии уменьшается очень мало, на величину порядка 1–2%, сначала осциллируя, а потом оставаясь почти постоянным.

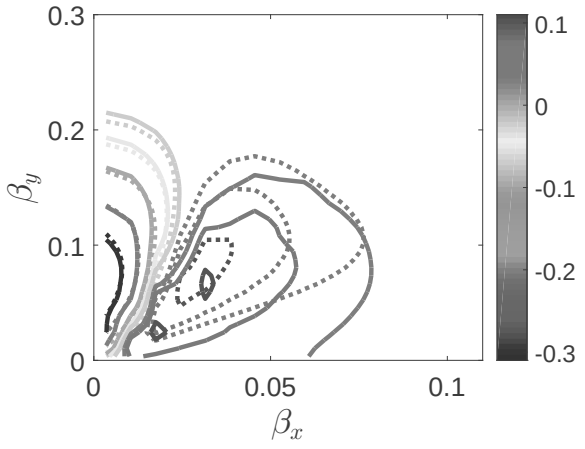


Рис. 4. Построенные на основе одномерного квазилинейного расчета (сплошные линии) и вычисленные на основе аналитической теории [26] (пунктирные линии) для момента времени $\omega_p t = 9000$ линии уровня -0.3, -0.2, -0.1, -0.05, -0.025, 0.025, 0.05, 0.1 и поправки к однородной компоненте функции распределения (4), которая в начальный момент времени являлась бимаксвелловской с параметром анизотропии $A_0 = 0.25$

Несмотря на приближенный характер аналитической квазилинейной теории, ее отличия от более точного численного квазилинейного моделирования при сравнении величин среднеквадратичного магнитного поля b_{av}, эволюционного параметра h и характерного волнового числа $\langle K \rangle$ на нелинейной стадии ($\omega_p t > 3000$) не превышают 20% (рис. 5). Наибольшие расхождения наблюдаются в переходной области от быстрого экспоненциального роста к медленной квазилинейной эволюции. В отличие от ожидавшегося в аналитической теории плавно-монотонного изменения всех указанных величин, данный переход в численном квазилинейном моделировании, как и в расчетах методом частиц в ячейках, демонстрирует небольшие осцилляции этих величин (за исключением монотонного уменьшения характерного волнового числа примерно на четверть от исходного значения). Их средние значения после переходной стадии со временем меняются очень слабо, что отвечает формированию долгоживущих (самосогласованных) одномерных токовых структур (слоев) в плазме. С квазилинейной точки зрения такое поведение объясняется сначала осцилляциями доминирующих в спектре мод, которые (как и остальные моды, см. ниже) наряду с уменьшающимися инкрементами приобретают действительные частоты из-за сложного изменения функции распределения электронов, а затем установлением почти не меняющихся амплитуд этих мод. Последнее обусловлено тем обстоятельством, что их инкременты оказываются близки к нулю, причем в основном благодаря выполаживанию центральной части функции распределения, поскольку в целом ее анизотропия ослабляется незначительно. Вопрос о законах медленного роста других мод с очень малыми волновыми числами на гораздо более поздней стадии развития турбулентности пока мало изучен.

Типичные эволюция всего спектра и динамика отдельных мод на временах порядка десяти времен достижения насыщения наиболее неустойчивой моды с волновым числом $K_{opt} \approx 0.28$ показаны на рис. 6 и 7. Для определенности в квазилинейном моделировании в качестве начального использовался равномерный спектр мод с заданной малой амплитудой. Чем она ниже, тем сильнее в ходе первоначального экспоненциального роста спектр сужается около моды с волновым числом K_{opt}, приобретая колоколообразный вид функции Гаусса. Доминирующие моды с близкими волновыми числами, формирующиеся к моменту насыщения, вступают в квазилинейное взаимодействие и деформируют центральную часть функции распределения, ограничивая свой рост и рост коротковолновых мод, но позволяя расти более длинноволновым модам. Коротковолновое крыло спектра, которое лежит справа от моды с волновым числом K_{max}, обладающей наибольшей ам-

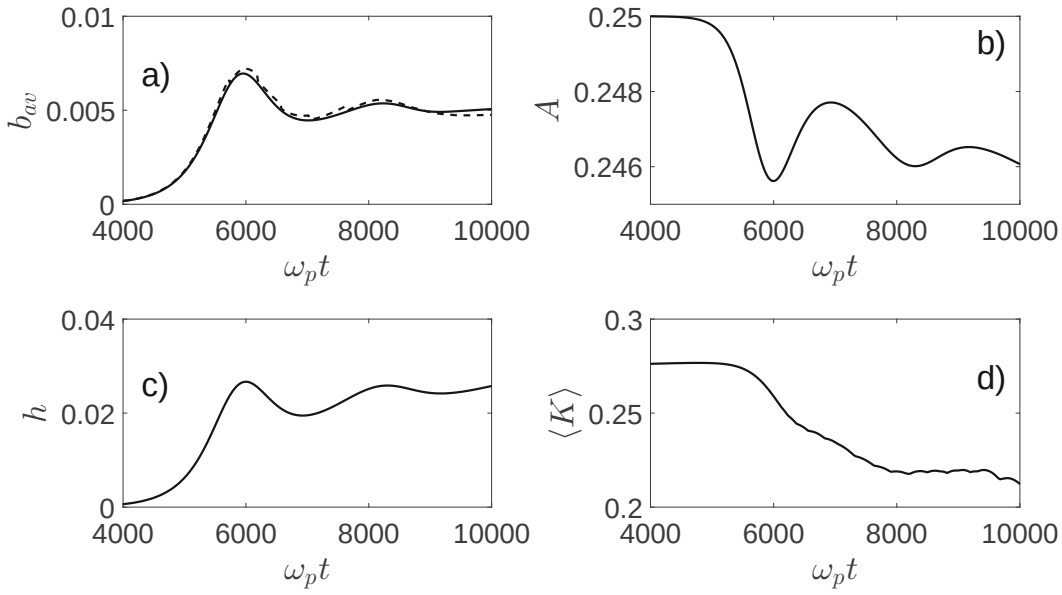


Рис. 5. Эволюция *a*) среднеквадратичного магнитного поля b_{av} (сплошная линия) и оценки этой величины (19) (штриховая), *b*) параметра анизотропии A, *c*) эволюционного параметра h, *d*) характерного среднего волнового числа $\langle K\rangle$ согласно численному одномерному квазилинейному моделированию при $A_0 = 0.25$

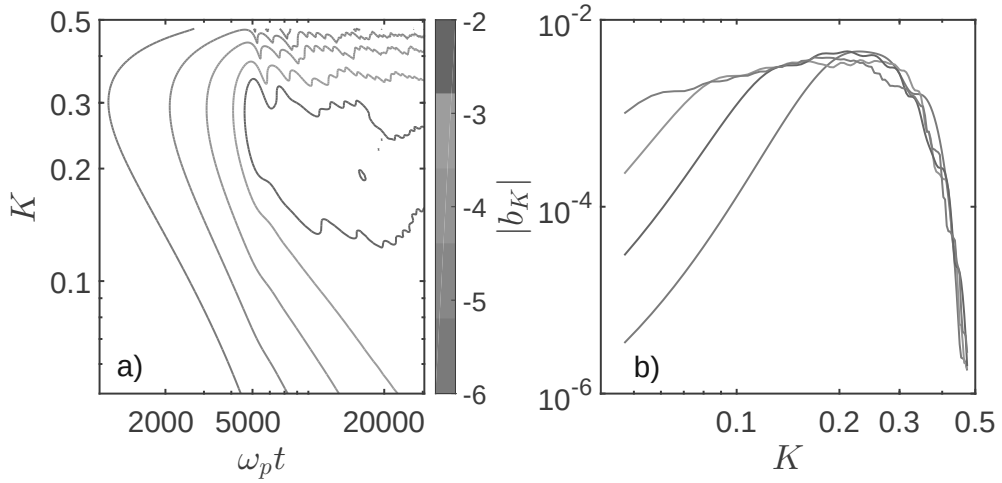


Рис. 6. Эволюция спектра турбулентности, найденная в одномерном квазилинейном расчете, в двойном логарифмическом масштабе: *a*) линии уровня логарифма амплитуд мод магнитного поля $|b_K|$; *b*) спектр $|b_K|$ магнитного поля в моменты времени $\omega_p t = 6000$ (красные линии), 10000 (синие линии), 16000 (зеленые линии), 24000 (розовые линии). Начальная анизотропия $A_0 = 0.25$

плитудой магнитного поля, имеет довольно сложную форму, но в целом допускает крутую степенную аппроксимацию.

Значительная часть длинноволнового крыла спектра, которая примыкает к плато, образованному насытившими свой рост модами, на протяжении длительного промежутка нелинейной эволюции хорошо аппроксимируется степенной зависимостью с показателем, примерно равным 5 и мало меняющимся со временем; см. рис. 6*b*. Это обстоятельство дает основание для гипотезы о частичной автомодельности процесса. После насыщения неустойчивости среднее волновое число спектра $\langle K\rangle$ понемногу смещается в длинноволновую сторону. Одновременно с этим немного растет и дисперсия спектра $\sigma^2 = \langle K^2\rangle - \langle K\rangle^2$ (см. (20)), которая снижалась на линейной стадии развития неустойчивости. Возможная связь указанной

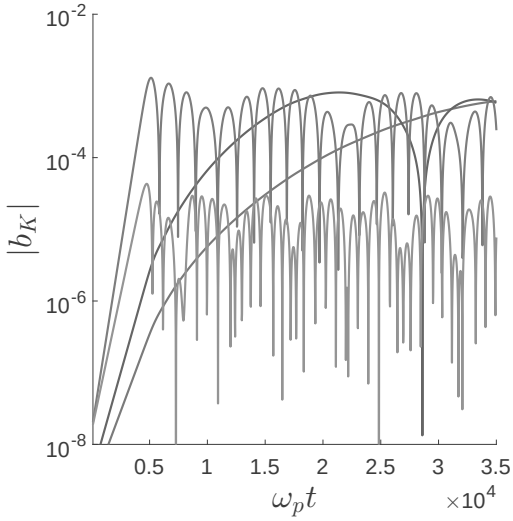


Рис. 7. Эволюция четырех типичных мод ($K = 0.08$ — красная линия, $K = 0.11$ — синяя, $K = 0.3$ — розовая, $K = 0.4$ — зеленая), взятых из спектра рис. 6. Оптимальное волновое число $K_{opt} \approx 0.28$

эволюции спектра с формированием или разрушением долгоживущих токовых слоев в одномерной вейбелевской турбулентности еще не изучалась.

На рис. 7 представлена характерная эволюция амплитуд мод с учетом их квазипериодических осцилляций (которые замываются при сложении мод и не видны при визуализации спектра на рис. 6, где проведено усреднение по близким модам). Пока мода с наибольшим инкрементом не достигнет насыщения, остальные моды растут экспоненциально со своими (разными) инкрементами и не испытывают осцилляций. После этого момента времени моды вблизи оптимальной и более коротковолновые моды тоже практически сразу насыщаются и начинают довольно быстро колебаться, почти не меняя своей амплитуды, т. е. у них величина инкремента значительно ниже появившейся действительной частоты. Вместе с тем более длинноволновые моды с инкрементом, значительно меньшим максимального, продолжают возрастать, правда, почти по степенному закону с различными показателями порядка 3–5, достигают амплитуды порядка максимальной амплитуды моды с оптимальным волновым числом $K_{opt} \approx 0.28$ и только после этого начинают медленно осциллировать с почти не уменьшающимся уровнем огибающей. Такая динамика мод согласована с указанной выше эволюцией их полного спектра, имеющей автомодельные черты.

Согласно даваемой аналитической теорией [26] оценке уровня насыщения эволюционного параметра h в зависимости от начального параметра анизотропии, нетрудно оценить средний квадрат нормированного насыщающего магнитного поля (см. (17)), если учесть, что в момент насыщения неустойчивости в спектре доминируют моды с волновыми числами вблизи оптимального K_{opt}, отвечающего наибольшему линейному инкременту:

$$b_{sat}^2 \approx 0.3 \frac{A_0^5}{(1+A_0)^6}. \qquad (24)$$

Полученная оценка соответствует значениям насыщающего магнитного поля, найденным в одномерной задаче в рамках осуществленных нами квазилинейных расчетов, и дает его резкое убывание по закону $\approx 0.3 A_0^5$ при уменьшении начального параметра анизотропии (рис. 8*a*). Для начальных параметров анизотропии больше единицы данная аналитическая оценка неприменима, а численное моделирование показывает, что средний квадрат нормированного насыщающего поля с ростом параметра анизотропии стремится к величине чуть меньшей 0.1 (рис. 8*b*). При этом, как будет ясно из разд. 3.2, эволюция спектра одномерной турбулентности существенно изменяется. Кроме того, следует заметить, что в более реальном случае двумерной турбулентности, согласно рис. 8*b* и разд. 4, не только меняется характер спектральной эволюции турбулентности, но и сама зависимость насыщающего магнитного поля от начального параметра анизотропии оказывается существенно другой, сильно отличающейся от (24) в сторону увеличения при малых A_0 и по-другому выходящей к максимальному значению при больших A_0; см., например, [4, 22].

3.2. Высокая начальная анизотропия

Если начальная анизотропия велика, $A_0 \gg 1$, то исходные инкременты мод тоже велики, турбулентность развивается быстро и сразу в более широком интервале волновых чисел (вблизи оптимальной величины K_{opt} и существенно левее нее). На стадии насыщения роста этих мод функция распределения частиц значительно деформируется (в два и более раз) во всей области скоростей порядка тепловых, а не только вблизи своего максимума, как при $A_0 \ll 1$.

Согласно нашим расчетам, проведенным для определенности при $A_0 = 10$ (см. рис. 9 и ср. рис. 4), в данном процессе происходит быстрое увеличение поперечной к оси анизотропии скорости электронов, двигавшихся сначала преимущественно вдоль

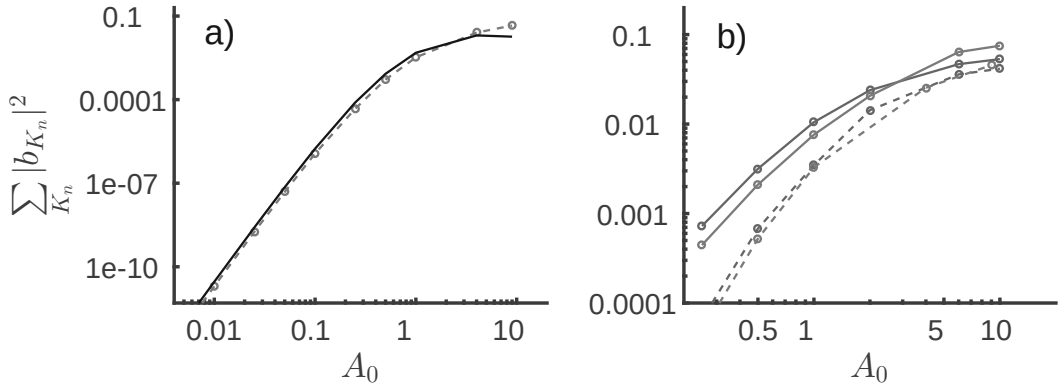


Рис. 8. Сравнение зависимостей среднего квадрата нормированного насыщающего магнитного поля b_{sat}^2 от начального параметра анизотропии A_0 *a*) согласно оценке (24) (черная линия) и численному квазилинейному моделированию по уравнениям (12)–(15) (красные линии); *b*) согласно этому же моделированию (красная линия) и расчетам методом частиц в ячейках с помощью кода EPOCH (синие линии) в одномерном (штриховые) и двумерном (сплошные) случаях

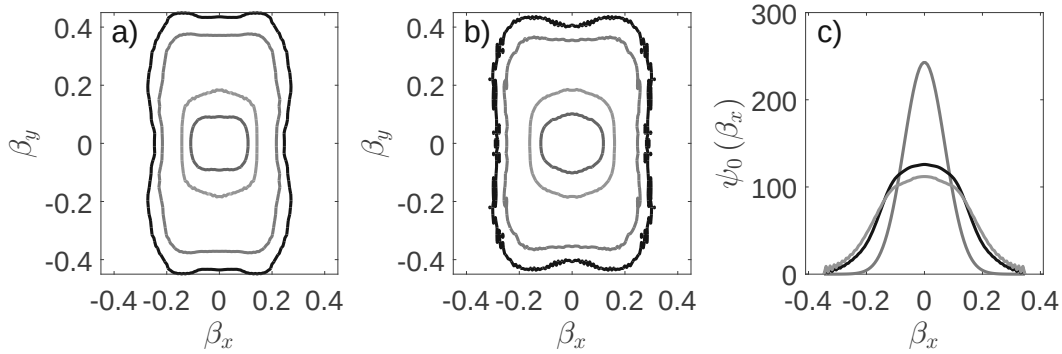


Рис. 9. *a*,*b*) Линии уровня 0.05 (черные), 0.1 (красные), 0.5 (зеленые), 0.8 (синие), отсчитанные от максимального значения функции распределения в момент времени $\omega_p t = 80$ (*a*), 440 (*b*). *c*) Распределение частиц по величине нормированной компоненты скорости β_x, ортогональной оси анизотропии, в моменты времени $\omega_p t = 0$ (красная линия), 80 (черная), 440 (зеленая). Приведены данные одномерного квазилинейного расчета при $A_0 = 10$

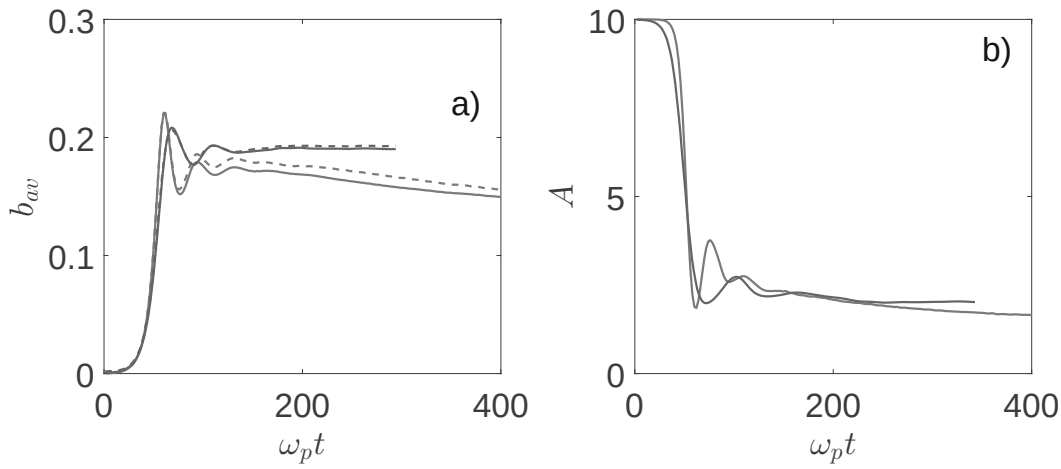


Рис. 10. Эволюция *a*) среднеквадратичного магнитного поля b_{av} (сплошные линии) и оценки этой величины (19) (штриховые), а также *b*) параметра анизотропии A согласно численному квазилинейному моделированию (красные линии) и расчетам методом частиц в ячейках (синие) в одномерной задаче при $A_0 = 10$

этой оси, так что центральная часть распределения в значительной мере переходит на периферию и его форма вместо овальной становится прямоугольной с характерным отношением сторон порядка текущего значения параметра анизотропии A после этапа насыщения. Это значение в несколько раз меньше исходного A_0, в рассмотренном примере — приблизительно в 5 раз, и в дальнейшем почти не уменьшается ($A \approx 2$, см. рис. 10). Практически не меняется и форма функции распределения частиц, остающаяся сильно отличной от бимаксвелловской, а также среднеквадратичная величина магнитного поля турбулентности. (Небольшие различия в слабом изменении среднеквадратичного поля b_{av} после достижения им максимума, обнаруживаемые, с одной стороны, квазилинейным расчетом и, с другой стороны, при помощи кода EPOCH, обусловлены, по-видимому, неучтенными нелинейными эффектами в первом и численными шумами, искажающими и тормозящими эволюцию спектра, во втором.) Указанные обстоятельства наряду с обсуждающимся ниже автомодельным характером эволюционирующего спектра одномерной турбулентности опять неявно подтверждают гипотезу о существовании долгоживущих токовых слоев, выявление которых было бы весьма желательно.

Сравнивая эволюцию спектров турбулентности при высокой (рис. 11) и низкой (рис. 6) начальной анизотропии, заметим, что в первом случае затухание насытившихся, более коротковолновых мод оказывается значительно сильнее и автомодельный характер эволюции обоих крыльев спектра выражен более явно, чем во втором. Поэтому в случае высокой начальной анизотропии дисперсия спектра $\sigma^2 = \langle K^2 \rangle - \langle K \rangle^2$ заметно изменяется (уменьшается) только на стадии экспоненциального роста мод, а после кратковременного уширения с началом нелинейной стадии уменьшается очень слабо, стремясь к постоянному значению, в отличие от случая низкой начальной анизотропии, когда эта дисперсия после первоначального уменьшения на линейной стадии медленно увеличивается за счет нелинейного (квазилинейного) роста длинноволнового крыла спектра. При этом среднее волновое число спектра $\langle K \rangle$ в первом случае со временем уменьшается примерно по степенному закону $t^{-1/2}$, тогда как во втором — уменьшается весьма незначительно. Наконец, в первом случае, при $A_0 = 10$, близкий к степенному вид обоих крыльев спектра $|b_k|$ прослеживается гораздо более четко и практически сразу после насыщения роста среднеквадратичного поля, характеризуясь почти не меняющимися показателями около 10 и -13 в длинноволновой и коротковолновой частях соответственно, хотя эти показатели весьма чувствительны к начальному уровню амплитуд мод. Заметим, что во втором случае, при $A_0 = 0.25$, степенной вид принимает только длинноволновое крыло, причем с показателем, примерно вдвое меньшим, т. е. около 5, и тоже чувствительным к начальному уровню амплитуд мод.

Для сформировавшейся сложно анизотропной функции распределения большинство мод приобретают действительную частоту, большую или порядка величины инкремента (декремента), а следовательно, их амплитуды $|b_k|$ начинают осциллировать, что отмечалось в разд. 3.1 при $A_0 = 0.25$. Теперь, при $A_0 = 10$, это показано на рис. 12, где частота осцилляций выше у более коротковолновых мод, причем для менее коротковолновых мод имеется промежуточная стадия примерно степенного роста (с различными показателями степени опять порядка 3–5, как и при $A_0 = 0.25$), начинающаяся почти сразу после момента насыщения моды с наибольшим исходным инкрементом и оптимальным волновым числом $K_{opt} \approx 1.2$ и заканчивающаяся моментом их собственного насыщения, после которого и возникают указанные осцилляции их амплитуд. Дальнейшее затухание огибающих этих осциллирующих амплитуд теперь выражено весьма сильно и является примерно экспоненциальным, а не степенным. Оно идет с разными декрементами в диапазоне 0.01–0.05 для различных мод, опускающихся вплоть до уровня численных шумов порядка 10^{-5}. Осцилляции не наблюдаются только для наиболее длинноволновых мод, дисперсия которых, по-видимому, определяется уплощенной частью функции распределения, а их действительные частоты могут быть даже меньше их инкрементов (декрементов).

Согласно проведенному нами сравнительному анализу расчетов в рамках квазилинейного подхода и расчетов методом частиц в ячейках для указанных и других значений параметра анизотропии A_0, подобная динамика отдельных мод и спектра в целом в одномерной задаче обусловлена в основном чисто квазилинейными эффектами благодаря продолжающей самосогласованно изменяться функции распределения частиц. Тем не менее из-за наличия уже упоминавшихся значительных численных шумов в использованном коде EPOCH, искажающих форму функции распределения и квазилинейную динамику мод, открытым остается вопрос о количественной оценке возможной, пусть малой, роли четырехволнового взаимодействия в возрастании все более длинноволновых мод и затухании ранее

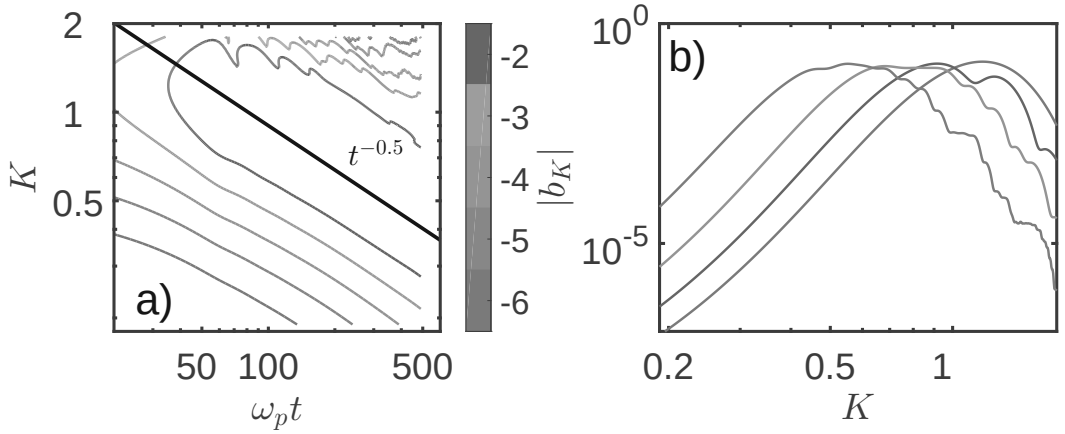


Рис. 11. Эволюция спектра турбулентности, найденная в одномерном квазилинейном расчете, в двойном логарифмическом масштабе: *a*) линии уровня логарифма амплитуд мод магнитного поля $|b_K|$; *b*) спектр $|b_K|$ магнитного поля в моменты времени $\omega_p t = 60$ (красная линия), 100 (синяя), 180 (зеленая), 360 (розовая). Начальная анизотропия $A_0 = 10$

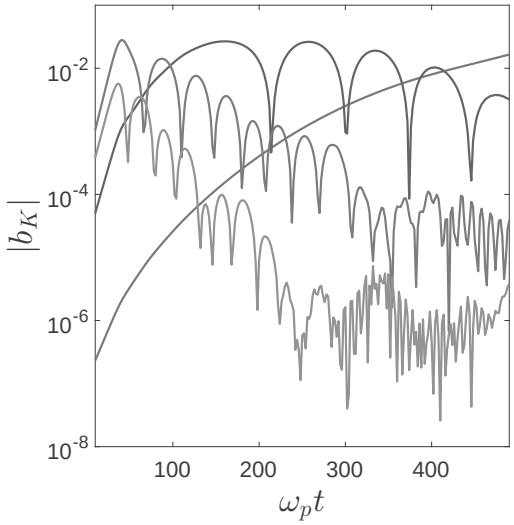


Рис. 12. Эволюция четырех типичных мод ($K = 0.4$ — красная линия, $K = 0.7$ — синяя, $K = 1.2$ — розовая, $K = 1.6$ — зеленая), взятых из спектра рис. 11. Оптимальное волновое число $K_{opt} \approx 1.2$

возбудившихся коротковолновых, а следовательно, в формировании и поддержании степенной формы крыльев спектра одномерной вейбелевской турбулентности, особенно на поздних этапах ее затухания.

4. РАЗВИТИЕ ДВУМЕРНОЙ АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

Поставленный вопрос и выяснение других качественных особенностей эволюции вейбелевской турбулентности, квазилинейных и не только, являются также актуальными для более реалистичной двумерной (2D3V) задачи, которая рассматривается в настоящем разделе и для которой расчеты кодом EPOCH являются более точными, поскольку его численные шумы не так сильно искажают функцию распределения частиц и динамику мод, как в одномерной задаче. Для определенности анализ ограничен простейшим аксиально-симметричным случаем, в котором ось анизотропии y исходного бимаксвелловского распределения электронов по скоростям (4) ортогональна расчетной плоскости xz. В этом случае TEM-турбулентности, как будет ясно из дальнейшего, квазилинейные эффекты тоже доминируют и определяют основные свойства ее пространственного спектра. Последний для интересующих нас полей и токов представляется большим числом sp неколлинеарных мод (гармоник) с волновыми векторами $\{(k_1; k_1), (k_1; k_2), \ldots, (k_2; k_1), \ldots, (k_s; k_p)\}$, компоненты которых состоят из s радиальных проекций $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0$ и p аксиальных проекций $\mathbf{k}\phi_0$. В таком представлении обе компоненты магнитного поля, которое ортогонально оси анизотропии, имеют вид суммы мод по целочисленному векторному индексу $\mathbf{n} = (n_r, n_\phi)$:

$$B_{x,z}(t,x,z) = \mathrm{Re} \sum_{n_r,n_\phi=1}^{l,p} \left(B_{\mathbf{k_n}}(t)\right)_{x,z} \times \\ \times \exp(-i\,(\mathbf{k_n})_x\, x - i\,(\mathbf{k_n})_z\, z). \quad (25)$$

Аналогичен вид и единственной компоненты электрического поля $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$, направленного вдоль оси анизотропии функции распределения и ниже

нормированного так же, как магнитное поле (17).

Для указанных мод полей и возмущений-гармоник функции распределения электронов по скоростям получаем следующую систему квазилинейных уравнений с новым более сложным оператором $\hat{\Theta}_1$ вместо оператора $\hat{\Phi}$ одномерной задачи (ср. (12)–(15), (18)):

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial \tau} + \sum_{n=1}^{m} \mathrm{Re}\left[\hat{\Theta}_1\left(e_{\mathbf{K_n}}, \mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}, \psi^*_{\mathbf{K_n}}\right)\right] = 0, \tag{26}$$

$$\frac{\partial \psi_{\mathbf{K_n}}}{\partial \tau} + i\left(\mathbf{K_n}\right)_x \beta_x \psi_{\mathbf{K_n}} + i\left(\mathbf{K_n}\right)_z \beta_z \psi_{\mathbf{K_n}} + 2\hat{\Theta}_1\left(e_{\mathbf{K_n}}, \mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}, \psi_0\right) + \hat{\Theta}_1\left(e^*_{\mathbf{K_n}}, \mathbf{b}^*_{\mathbf{K_n}}, \psi_{2\mathbf{K_n}}\right) = 0, \tag{27}$$

$$\frac{\partial \psi_{2\mathbf{K_n}}}{\partial \tau} + 2i\left(\mathbf{K_n}\right)_x \beta_x \psi_{2\mathbf{K_n}} + 2i\left(\mathbf{K_n}\right)_z \beta_z \psi_{2\mathbf{K_n}} + \hat{\Theta}_1\left(e_{\mathbf{K_n}}, \mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}, \psi_{\mathbf{K_n}}\right) = 0, \tag{28}$$

$$\frac{\partial \left(\mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}\right)_z}{\partial \tau} = -i\left(\mathbf{K_n}\right)_x e_{\mathbf{K_n}}, \quad \frac{\partial \left(\mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}\right)_x}{\partial \tau} = i\left(\mathbf{K_n}\right)_z e_{\mathbf{K_n}}, \tag{29}$$

$$\frac{\partial e_{\mathbf{K_n}}}{\partial \tau} = i\left(\mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}\right)_x \left(\mathbf{K_n}\right)_z - i\left(\mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}\right)_z \left(\mathbf{K_n}\right)_x + \beta_{\|0}^{-1} \iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} \beta_y \psi_{\mathbf{K_n}}(\tau, \beta_x, \beta_y, \beta_z) d\beta_x d\beta_y d\beta_z, \tag{30}$$

$$\hat{\Theta}_1\left(e_{\mathbf{K_n}}, \mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}, \psi(\boldsymbol{\beta})\right) = \frac{e_{\mathbf{K_n}}}{2} \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_y} - \frac{\left(\mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}\right)_z}{2} \left(\beta_x \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_y} - \beta_y \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_x}\right) - \frac{\left(\mathbf{b}_{\mathbf{K_n}}\right)_x}{2} \left(\beta_z \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_x} - \beta_x \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_z}\right). \tag{31}$$

Мы исследовали ее двумерно-неоднородные решения, получаемые численно на основе метода Стермера–Верле (Leapfrog) [32] (см. конец разд. 2) при одной и той же исходной поперечной тепловой скорости $\beta_{\perp 0} = 0.1$ и различной начальной анизотропии. Кроме того, опять проводилось сравнение с моделированием методом частиц в ячейках при помощи кода EPOCH, которое в целом оказалось согласованным с квазилинейным моделированием системы (26)–(31) с точностью $\sim 10 - 30\%$. Соответствующие результаты приведены ниже при $A_0 = 0.25$ и $A_0 = 10$, как и в предыдущем разделе для одномерной задачи. Отметим, что и для двумерной задачи в предположении об аксиально-симметричном и достаточно узком пространственном спектре вейбелевской турбулентности, согласно [33] и (19), нетрудно получить следующее приближенное аналитическое соотношение для эволюционирующих среднеквадратичного магнитного поля b_{av}, параметра анизотропии плазмы A (ср. (21)) и среднего радиального волнового числа (20) $\langle K \rangle$ (ср. начало разд. 3):

$$b_{av}^2 = \frac{A_0 - A}{1 + A_0} \frac{\langle K \rangle^2}{A\langle K \rangle^2 + A + 5\langle K \rangle^2 + 3}, \tag{32}$$

$$A = \frac{2 \iiint\limits_{-\infty}^{\infty} \beta_y^2 \psi_0(\tau, \beta_x, \beta_y, \beta_z) d\beta_x d\beta_y d\beta_y}{\iiint\limits_{-\infty}^{\infty} \left(\beta_x^2 + \beta_z^2\right) \psi_0(\tau, \beta_x, \beta_y, \beta_z) d\beta_x d\beta_y d\beta_z} - 1. \tag{33}$$

Это соотношение для аксиально-симметричной (в среднем) турбулентности по-прежнему очень хорошо, с точностью до нескольких процентов, выполнялось в квазилинейных расчетах (см., например, рис. 16*a*) и немного хуже, с точностью до 10–20%, в расчетах методом частиц в ячейках, где в условиях высокого уровня численных шумов спектр оказывался более широким. Отметим, что всюду ниже под спектром вейбелевской турбулентности в аксиально-симметричной задаче подразумевается зависимость нормированных амплитуд мод магнитного поля (17) $|b_K|$ от нормированного радиального волнового числа (16) K, получаемая после усреднения по азимутальному углу.

Не повторяя общие положения, сформулированные в разд. 3.1 и 3.2, сосредоточимся только на различиях в развитии турбулентности, обусловленных переходом от одномерной задачи к двумерной, т. е. расширением области волновых векторов неустойчивых мод и направлений их магнитных полей, а следовательно, усилением квазилинейного взаимодействия мод и деформации функции распределения электронов по скоростям.

При низкой начальной анизотропии, $A_0 = 0.25$, деформация функции распределения идет интенсивнее, дольше и по величине составляет уже не доли, а несколько процентов, захватывая более обширную область тепловых скоростей электронов, так что тангенс угла конуса, на котором согласно рис. 4 меняется знак приращения функции распределения, увеличивается примерно от 1/6 до почти 1/2. При этом в баунс-осцилляциях участвует больше электронов, а функция распределения становится менее анизотропной и по форме ближе к бимаксвелловской.

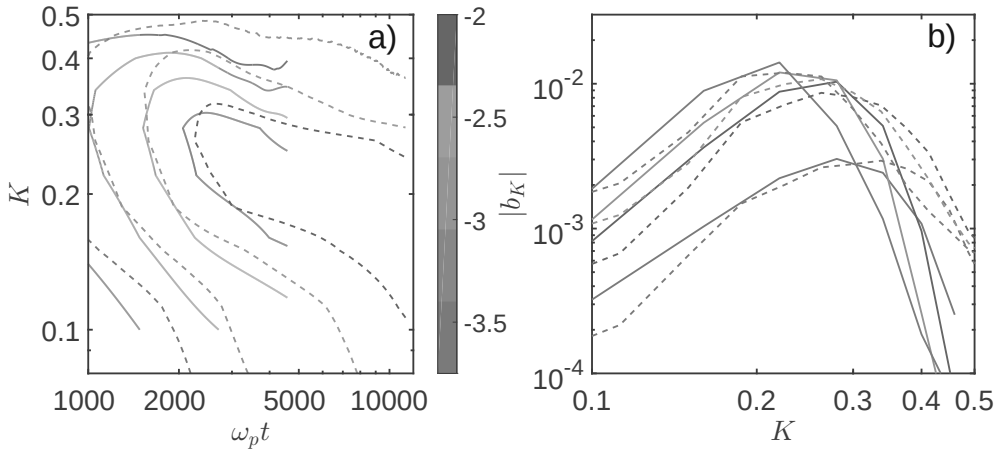


Рис. 13. Эволюция спектра турбулентности, найденная в аксиально-симметричных расчетах методом частиц в ячейках (штриховые линии) и на основе квазилинейного подхода (сплошные линии), в двойном логарифмическом масштабе: *a*) линии уровня логарифма амплитуд мод магнитного поля $|b_K|$; *b*) спектр $|b_K|$ магнитного поля в моменты времени $\omega_p t = 1500$ (красные линии), 2400 (синие), 3000 (зеленые), 4500 (розовые). Начальная анизотропия $A_0 = 0.25$

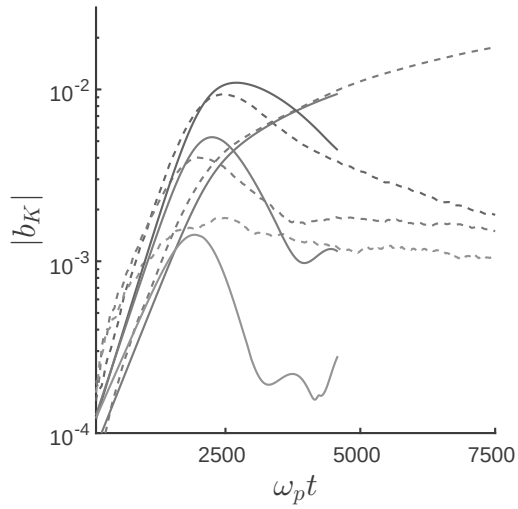


Рис. 14. Эволюция четырех типичных мод ($K = 0.16$ — красные линии, $K = 0.28$ — синие, $K = 0.34$ — розовые, $K = 0.4$ — зеленые), взятых из спектра рис. 13. Оптимальное волновое число $K_{opt} \approx 0.28$

ской, причем величина анизотропии с наступлением нелинейной стадии уменьшается, не осциллируя, и не на 1–2% (как было показано на рис. 5*b*), а почти на 20%, продолжая снижаться в дальнейшем. Значительнее уменьшается, не осциллируя, и среднее волновое число $\langle K \rangle$ энергонесущих мод, а насыщающее среднеквадратичное магнитное поле b_{sat} оказывается сильнее приблизительно в 5 раз и тоже не осциллирует, хотя по-прежнему почти не снижается по величине на рассмотренных временах, в несколько раз превышающих время наступления насыщения. Данные результаты квазилинейного подхода согласуются с предшествующими численными исследованиями вейбелевской неустойчивости методом частиц в ячейках, например, [4, 7].

В рассмотренном типичном примере смещение спектра турбулентности в длинноволновую область, как показано на рис. 13, выражено более явно и сопровождается затуханием коротковолновых мод, а не только ростом длинноволновых, что имело место в одномерной задаче (ср. рис. 6, где время наступления насыщения почти вдвое больше, поскольку логарифмический уровень начальных амплитуд мод был задан примерно вдвое ниже, чем на рис. 13). Такое поведение спектра обусловлено более эффективным квазилинейным, но не четырехволновым взаимодействием мод, что подтверждает аналогичный расчет методом частиц в ячейках, который учитывает оба механизма взаимодействия мод и которому на рисунке отвечают штриховые линии, хорошо совпадающие со сплошными. Благодаря менее анизотропной и более гладкой форме функции распределения, согласованной с двумерной турбулентностью, отдельные моды в ходе ее эволюции остаются по существу апериодическими, т. е. их инкременты (декременты) превышают по величине возможные значения действительных частот. Следовательно, в отличие от одномерной турбулентности, квазипериодические осцилляции амплитуд мод практически отсутствуют и их начальный рост с последующим затуханием определяется изменяющейся величиной инкремента, переходящего после насыщения в декремент; ср. рис. 14 и 7. При этом из-за измене-

ния во времени инкремента (декремента) мод оказывается возможным не строго экспоненциальный, а скорее близкий к степенному как рост их амплитуд на промежуточном этапе эволюции до достижения максимальной величины (который начинается после насыщения наиболее быстро растущей моды с оптимальным волновым числом $K_{opt} \approx 0.28$), так и дальнейшее затухание. Со временем совместная динамика мод отражается в автомодельных чертах спектра турбулентности $|b_K|$, у которого в представленном примере длинноволновое и коротковолновое крылья неплохо аппроксимируются степенными зависимостями с показателями около 2 и -10 соответственно.

Остановимся теперь на ситуации с высокой начальной анизотропией, $A_0 = 10$, опять опираясь на во многом идентичные результаты расчетов с использованием квазилинейного подхода и метода частиц в ячейках. Как показывает сравнение рис. 15 и 9, не только качественное, но и количественное отличие деформаций функции распределения электронов по скоростям в одномерной и двумерной задачах не очень велико. Впрочем, в последней линии уровня этой функции являются более овальными, менее прямоугольными, что соответствует более сглаженной, менее анизотропной форме, хотя все равно значительно отличной от бимаксвелловской во всей области скоростей порядка тепловых. При этом уменьшение параметра анизотропии A в процессе насыщения неустойчивости происходит немного плавнее, но и немного глубже, так что насыщающее магнитное поле b_{av} тоже оказывается немного выше и после резкого возрастания очень медленно затухает, слегка осциллируя в противофазе с анизотропией на величину порядка нескольких процентов; ср. рис. 10 и 16.

Согласно рис. 11 и 17, эволюция одномерного и двумерного спектров вейбелевской турбулентности в целом однотипна, а волновое число, отвечающее максимуму спектра (и почти совпадающее со средним значением $\langle K \rangle$), смещается в длинноволновую сторону примерно по одному и тому же степенному закону $t^{-1/2}$ (см. также рис. 16*c*; этот закон отмечался нами ранее [7,34]). Важным, однако, представляется выявление следующих различий спектров двумерной турбулентности, вычисленных в квазилинейном подходе и с помощью кода EPOCH при высокой начальной анизотропии $A_0 = 10$. Именно, с началом стадии насыщения, $\omega_p t > 60$, в коротковолновой части спектра, $K > K_{opt}$, квазилинейный расчет демонстрирует осцилляторное поведение мод, тогда как оно отсутствует в аналогичном расчете методом частиц в ячейках, демонстрирующем резкое и существенное, по меньшей мере двукратное, расширение спектра в коротковолновую сторону. Этих отличий не было при низкой начальной анизотропии $A_0 = 0.25$, а также в одномерной турбулентности ни при какой начальной анизотропии. Указанное расширение спектра особенно наглядно видно на рис. 17*b* на больших временах $\omega_p t = 160$ и 280, когда квазилинейный расчет (сплошные кривые) показывает сильное смещение крутого правого крыла спектра в длинноволновую сторону, а более точный расчет кодом EPOCH (штрихи) сохраняет правое крыло гораздо более коротковолновым и пологим. Отметим, кстати, что соответствующие степенные показатели -3.5 и 3 правого и левого крыльев спектра двумерной турбулентности сильно отличаются от аналогичных показателей -10 и 2 спектра одномерной турбулентности при той же величине $A_0 = 10$, что отчасти связано с разным уровнем заданных начальных амплитуд мод.

Причина установленных отличий, скорее всего, заключается в четырехволновом взаимодействии мод, не учитывающемся в квазилинейной системе уравнений (26)–(31). Последняя благодаря этому обстоятельству позволяет выявить в моделировании методом частиц в ячейках нелинейные эффекты, отличные от квазилинейных. Сравнение расчетов одной и той же задачи в рамках этих двух подходов полезно провести путем анализа динамики отдельных мод двумерной вейбелевской турбулентности с использованием рис. 18. Расчет кодом EPOCH (штриховые линии) показывает, что с наступлением насыщения турбулентности достаточно коротковолновые моды, вопреки квазилинейному приближению (сплошные линии), не следуют осцилляторной динамике и экспоненциальному затуханию с легко вычисляемыми показателями порядка 0.01–0.10 (что примерно вдвое больше, чем для аналогичной одномерной турбулентности; ср. рис. 12). Напротив, эти моды лишь частично, в небольшой мере отслеживают первую «квазилинейную» осцилляцию и довольно быстро переходят к медленному примерно степенному затуханию с показателями в небольшом интервале значений от -1 до -1.3, по-видимому, испытывая эффективную подкачку за счет четырехволнового взаимодействия немного более длинноволновых мод, имеющих достаточно большие амплитуды и расположенных в центральной части текущего спектра.

Вместе с тем значительно более длинноволновые моды находятся, вплоть до своего насыщения, на промежуточной стадии приблизительно степен-

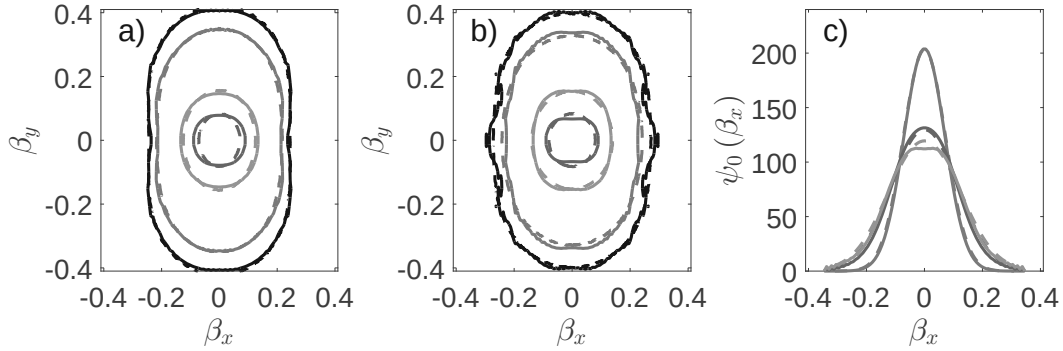


Рис. 15. *a, b*) Линии уровня 0.05 (черные), 0.1 (красные), 0.5 (зеленые) и 0.8 (синие), отсчитанные от максимального значения функции распределения в момент времени $\omega_p t = 83$ (*a*), 170 (*b*). *c*) Распределение частиц по величине нормированной компоненты скорости β_x, ортогональной оси анизотропии, в моменты времени $\omega_p t = 0$ (красные линии), 83 (синие), 170 (зеленые). Приведены данные аксиально-симметричных расчетов методом частиц в ячейках (штриховые линии) и в рамках квазилинейного подхода (сплошные) при $A_0 = 10$

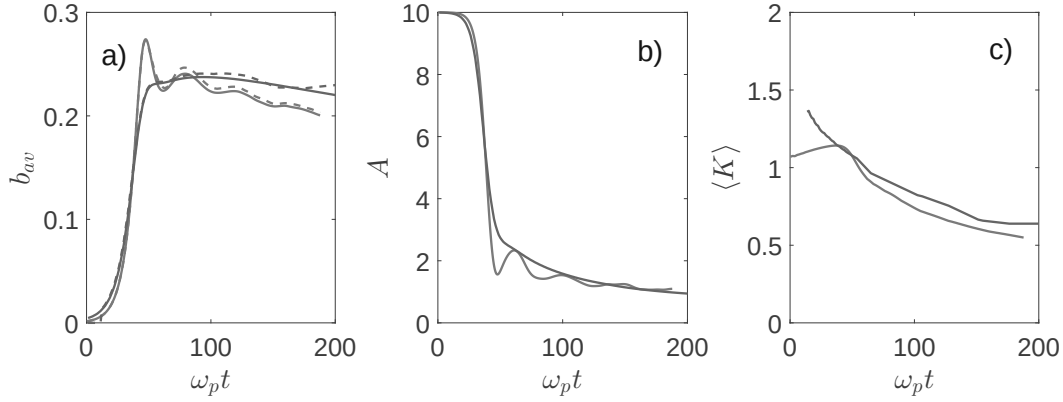


Рис. 16. Эволюция *a*) среднеквадратичного магнитного поля b_{av} (сплошные линии) и оценки этой величины (32) (штриховые), а также *b*) параметра анизотропии A и *c*) характерного волнового числа $\langle K\rangle$ согласно численному квазилинейному моделированию (красные линии) и расчетам методом частиц в ячейках (синие линии) в аксиально-симметричной задаче при $A_0 = 10$

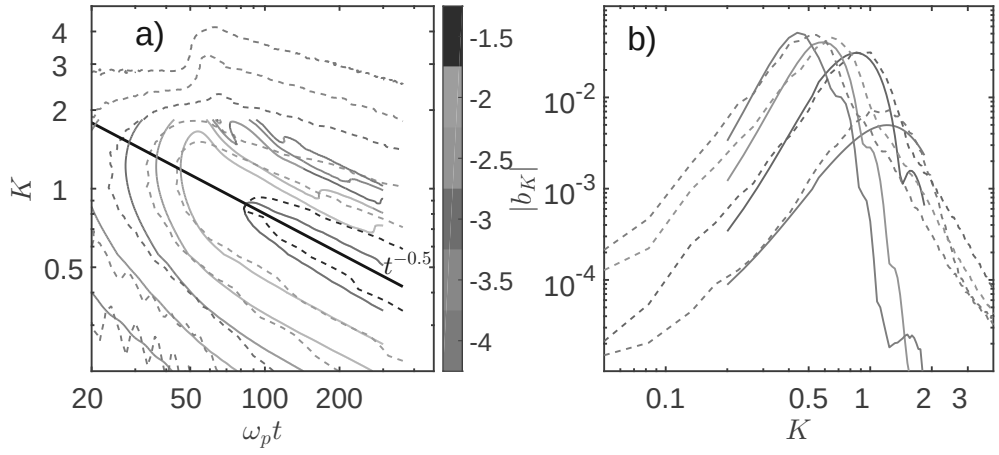


Рис. 17. Эволюция спектра турбулентности, найденная в аксиально-симметричных расчетах методом частиц в ячейках (штриховые линии) и в рамках квазилинейного подхода (сплошные линии), в двойном логарифмическом масштабе: *a*) линии уровня логарифма амплитуд мод магнитного поля $|b_K|$; *b*) спектр $|b_K|$ магнитного поля в моменты времени $\omega_p t = 40$ (красные линии), 80 (синие), 160 (зеленые), 280 (розовые). Начальная анизотропия $A_0 = 10$

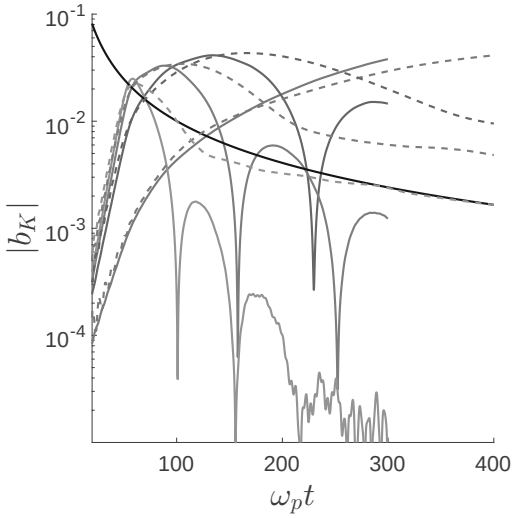


Рис. 18. Эволюция четырех типичных мод ($K = 0.36$ — красные линии, $K = 0.68$ — синие, $K = 0.88$ — розовые, $K = 1.2$ — зеленые), взятых из спектра рис. 17. Оптимальное волновое число $K_{opt} \approx 1.2$. Черная линия соответствует степенной зависимости $t^{-4/3}$

ного роста с показателями порядка 1–2 (что в два-три раза меньше, чем для аналогичной одномерной турбулентности). Подобная динамика этих мод может объясняться квазилинейным образом при надлежащей зависимости от времени их инкрементов, но может быть обусловлена, хотя бы частично, все той же нелинейной подкачкой при четырехволновом взаимодействии более мощных мод из центральной части спектра турбулентности. Не исключено также, что еще более длинноволновые моды, которые только выходят или недалеко отошли от уровня шумов на стадии насыщения турбулентности, могут быть сильно, даже сверхэкспоненциально, возбуждены нелинейным образом посредством четырехволнового взаимодействия с какими-либо более мощными модами, что в результате может влиять на форму длинноволнового крыла спектра турбулентности. Данный круг вопросов требует дальнейшего детального исследования.

Во избежание недоразумений следует отметить, что вплоть до насыщения роста среднеквадратичного магнитного поля отличия квазилинейных расчетов от расчетов методом частиц в ячейках являются весьма незначительными, даже в одномерной задаче. В итоге квазилинейный подход позволяет корректно вычислять величину насыщающего магнитного поля вейбелевской турбулентности, что уже было продемонстрировано в конце разд. 3.1 на рис. 8. Согласно ему, средний квадрат насыщающего поля двумерной турбулентности отличается от его значения для одномерной на десятки процентов при большом начальном параметре анизотропии, $A_0 \gtrsim 1$, и многократно при малом параметре, $A_0 \lesssim 1$, поскольку тогда численно найденный показатель его степенной зависимости от этого параметра оказывается близким к 2 вместо аналитически найденного показателя 5 для одномерной турбулентности (см. формулу (24)).

Таким образом, проведенные расчеты, в том числе и для других параметров анизотропии A_0, показывают следующие существенные различия эволюции спектра вейбелевской турбулентности в одномерной и аксиально-симметричной двумерной задачах при одинаковых начальных условиях.

Во-первых, более богатый двумерный спектр развитых мод обеспечивает более гладкую и сильную модификацию исходной функции распределения электронов по скоростям, а следовательно, более значительные уменьшение параметра анизотропии и увеличение магнитной энергии турбулентности. При этом последующий распад образовавшихся случайных самосогласованных токовых филаментов идет эффективнее, чем для турбулентности с одномерным спектром, где квазилинейные эффекты и четырехволновое взаимодействие мод искусственно ограничены, как и свободный разлет электронов из токовых слоев.

Во-вторых, в двумерном случае автомодельный характер эволюции спектра выражен более явно, а формирование его степенных крыльев и смещение его максимума в длинноволновую сторону происходят быстрее, возможно, благодаря не только квазилинейному, но и четырехволновому взаимодействию мод. При этом зависимость соответствующих параметров спектра от начальной анизотропии плазмы выражена слабее, чем в одномерном случае, где перестройка спектра заторможена.

В-третьих, динамика отдельных мод в двумерной задаче, естественно, оказывается более сложной и многообразной, хотя в общем случае и включает в себя те же три основные стадии, что и в одномерной задаче: сначала экспоненциальное и потом примерно степенное возрастание, а после достижения максимума — тоже убывание степенного типа. При этом в одномерной турбулентности для многих мод не все эти стадии четко выражены, но значительно заметнее квазипериодические осцилляции амплитуд мод и даже ее интегральных характеристик, вызванные, как и в двумерной турбулентности, квазилинейной модификацией анизотропии функции распределения электронов и соответствующим изменением действительных частот и инкрементов (декрементов) мод.

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе осуществлен квазилинейный численный подход к описанию эволюции вейбелевской ТЕМ-турбулентности и соответствующей деформации функции распределения частиц, использующий приближение слабо нелинейной турбулентности, т. е. слабого взаимодействия ее пространственных мод (гармоник). Этот подход и развитые с его помощью представления о квазимагнитостатической турбулентности являются универсальными, т. е. применимы к различным исходным функциям распределения частиц по скоростям, включая не только бимаксвелловские, но и бикаппа-, комбинированные пучковые, не осесимметричные и другие распределения, представляющие интерес в различных ситуациях в плазме, включая наличие внешнего магнитного поля [35–39]. В одномерной задаче полученные решения квазилинейных уравнений хорошо согласуются с результатами имеющейся аналитической теории в пределах ее применимости и позволяют анализировать недоступную ей динамику спектра турбулентности, в том числе в сильно анизотропной плазме. В рассмотренной двумерной аксиально-симметричной задаче, для которой аналитическая теория отсутствует, проведено сравнение с результатами расчетов методом частиц в ячейках с помощью кода EPOCH, продемонстрировавшее качественное совпадение той и другой картин эволюции спектра турбулентности. Оно свидетельствует о том, что квазилинейная динамика включает основные проявления нелинейных эффектов в исследуемом процессе, а неучтенные нелинейные эффекты, например, четырехволновое взаимодействие мод, обычно не играют существенной роли и являются очень слабыми (возможно, скрытыми численными шумами при моделировании методом частиц в ячейках).

В итоге общий сценарий эволюции спектра вейбелевской турбулентности, который по существу можно назвать квазилинейным, в рассмотренных простейших случаях представляется следующим. При небольшом уровне начальных шумов на линейной стадии неустойчивости анизотропной плазмы происходит экспоненциальный, апериодический рост мод в довольно широком интервале волновых чисел, для которых инкремент не сильно меньше максимального. К моменту насыщения роста среднеквадратичного магнитного поля профиль спектра может значительно сузиться и центральная группа его мод, следуя квазилинейной динамике и за счет «квадратичной» нелинейности возбуждая вторые гармоники функции распределения частиц и деформируя среднюю по пространству форму этой функции, начинает существенно уменьшать средний параметр анизотропии и инкремент всех мод, причем для указанных центральных мод последний становится даже отрицательным.

В результате коротковолновое крыло спектра постепенно затухает, а длинноволновое продолжает расти, причем там темп роста амплитуд мод почти сразу после момента насыщения становится примерно степенным (вместо экспоненциального или нелинейно индуцированного) с показателем, зависящим от волнового числа моды: более длинноволновые моды возрастают медленнее менее длинноволновых. В ходе процесса максимальными амплитудами по очереди начинают обладать все более длинноволновые моды, и величина этого максимума сначала даже немного растет (в области пологого плато на зависимости среднеквадратичного магнитного поля от времени), а потом начинает медленно убывать, причем волновое число, отвечающее данному максимуму, уменьшается обратно пропорционально времени в небольшой степени (для аксиально-симметричной турбулентности в сильно анизотропной плазме — приблизительно обратно пропорционально квадратному корню от времени, $t^{-0.5}$). Закон затухания амплитуд b_{K_n} коротковолновых мод со временем приблизительно одинаков и тоже оказывается примерно степенным, не сильно зависящим от первоначального параметра анизотропии, тогда как показатель степенного роста длинноволновых мод значительно сильнее зависит от этого параметра и от волнового числа моды. В аксиально-симметричной двумерной задаче с $\beta_{\perp 0} = 0.1$ при $A_0 = 10$ указанные показатели лежат в диапазонах от -1.3 до -1 и от 1 до 2 соответственно для коротковолновых и длинноволновых мод, а показатель медленного примерно степенного убывания среднеквадратичного магнитного поля после момента насыщения близка к -0.3.

При этом крылья спектра турбулентности b_K как функции волнового числа тоже приближенно следуют степенным законам, почти не меняющимся со временем, но зависящим от исходного параметра анизотропии, а также от уровня начальных шумов. Так, для указанного выше случая эти показатели близки к 3 слева и к -3.5 справа по отношению к волновому числу, которое отвечает текущему максимуму спектра. Согласно численному квазилинейному моделированию, разброс данных показателей связан с уровнем начальных шумовых амплитуд мод, к которому особенно чувствительно длинноволновое крыло спектра и от которого зависит также

ширина центрального пологого плато спектра.

Необходимо подчеркнуть, что представленная плавная в целом динамика спектра как большого случайного набора изначально апериодических вейбелевских мод складывается из колебательного поведения почти всех мод, наступающего практически сразу после насыщения их роста. Это обусловлено тем, что функция распределения частиц по скоростям не только выполаживается, но и приобретает сложную небимаксвелловскую форму, постепенно меняющуюся со временем. Следуя изменившейся дисперсии плазмы, моды приобретают различные действительные частоты, вообще говоря, сравнимые с их изменившимися инкрементами, точнее, декрементами, и начинают по-разному осциллировать, продолжая возрастать (или затухать). Развитый квазилинейный подход хотя и не содержит в явном виде решение дисперсионного уравнения, но в полной мере учитывает данное важное обстоятельство, обычно скрытое численными шумами при моделировании методом частиц в ячейках. По-видимому, нелинейные и неадиабатические эффекты в плазме с эволюционирующими анизотропией и формой функции распределения частиц дополнительно изменяют фазы и частоты колебаний мод, тем самым нивелируя влияние интерференции этих колебаний на интегральные характеристики турбулентности, которое возможно по крайней мере в условиях достаточно узкого спектра доминирующих мод.

Ограничение квазилинейного подхода и обусловливающие его неучтенные нелинейные эффекты могут проявляться кратковременно или накапливаться в ходе долговременной эволюции спектра мод, причем результат зависит от характера анизотропии плазмы и геометрии задачи. В разд. 4 было продемонстрировано кратковременное обогащение коротковолнового крыла спектра за счет генерации суммарных гармоник сразу после начала насыщения турбулентности (см. также [28, 29]). Как показывают наши предварительные расчеты, при наличии внешнего магнитного поля, даже ориентированного вдоль оси анизотропии и не нарушающего аксиальную симметрию задачи, такие эффекты могут дополнительно расширять спектр мод на этапе насыщения не только в коротковолновой, но и в длинноволновой области.

Именно, согласно моделированию кодом EPOCH, на обоих крыльях наблюдается кратковременный рост отдельных мод с темпом, большим или порядка темпа роста наиболее неустойчивых мод в центре спектра, и этот эффект отсутствует в квазилинейном подходе. В дальнейшем выросшие коротковолновые моды довольно быстро затухают, тогда как длинноволновые моды, возбужденные нелинейным образом (сверхэкспоненциально или экспоненциально, но с инкрементом выше даваемого линейным приближением), после этапа насыщения продолжают свой рост примерно по степенному закону, как и в отсутствие внешнего магнитного поля (см. выше). Со временем они могут даже превзойти по амплитуде все моды, имеющие более короткую длину волны и возросшие раньше, но уже начавшие затухать. Так или иначе, в общем случае совместная эволюция мод вейбелевской турбулентности в значительной степени является автомодельной, причем динамика отдельной моды может содержать четыре стадии: экспоненциальный и нелинейный рост, степенные возрастание и убывание, а также переходы между ними. Не исключено, что конкретные показатели степенных законов роста и убывания мод как в данной, так и в рассмотренных выше простейших задачах определяются не только квазилинейным, но отчасти и четырехволновым взаимодействием мод.

Слабые эффекты этого нелинейного взаимодействия, не воспроизводимые квазилинейной динамикой согласно нашим расчетам, наблюдались и в моделировании эволюции спектра вейбелевской турбулентности для другой, не аксиально-симметричной двумерной задачи, в которой ось анизотропии исходной бимаксвелловской плазмы лежит в плоскости расчета xy (см. в этой связи [22, 28]). По-видимому, и внешнее магнитное поле, и нарушение аксиальной симметрии задачи увеличивает возможные наборы участвующих в четырехволновом взаимодействии мод и/или усиливает его, хотя этот вопрос еще предстоит исследовать. Разумеется, для применимости результатов такого рода исследования к реальным задачам лабораторной и космической физики плазмы желательно использовать полностью трехмерное моделирование, учитывающее наклонные моды спектра турбулентных полей, волновые векторы которых не ортогональны оси анизотропии исходного распределения частиц по скоростям. Открытым остается вопрос и о вкладе постепенно накапливающегося четырехволнового взаимодействия мод в систематически увеличивающиеся различия среднеквадратичных магнитных полей или средних параметров анизотропии, наблюдаемые во всех перечисленных задачах при сравнении наших квазилинейных расчетов и расчетов кодом EPOCH. Присущие последнему численные шумы

затрудняют решение данных вопросов, поскольку тоже могут давать вклад в показатели степенных зависимостей или влиять на темпы затухания турбулентного магнитного поля и уменьшения параметра анизотропии.

Привлечение квазилинейного подхода к решению изложенных открытых проблем и применение разработанных на его основе представлений о динамике спектра вейбелевской турбулентности к анализу переходных процессов в космической и лабораторной плазме, несомненно, являются перспективными, в частности, в физике звездного ветра, ударных волн, лазерной абляции, взрывных процессов в магнитосферах звезд и планет. Как и в исследованных нами простейших задачах, в подобных условиях ожидается существенная роль формирующейся мелкомасштабной квазимагнитостатической турбулентности, способной значительно изменить аномальную проводимость плазмы, баланс магнитного и теплового давлений и крупномасштабную структуру полного магнитного поля, а следовательно, динамику всего переходного процесса. Естественно, в каждой конкретной ситуации необходимо сравнивать неустойчивость вейбелевского типа с другими возможными неустойчивостями анизотропной плазмы, особенно апериодическими [6, 40–44], которые могут конкурировать в создании той или иной магнитной турбулентности. Подобный сравнительный анализ представляется весьма актуальным, но выходит за рамки настоящей работы.

Финансирование. Расчеты динамики вейбелевских мод в рамках одномерной задачи поддержаны Российским научным фондом (грант № 19-72-10111). Эволюция спектра в аксиально-симметричной двумерной задаче рассчитана при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 20-1-1-37-2). Для численных расчетов использованы суперкомпьютерные ресурсы ЦКП ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Б. Михайловский, *Теория плазменных неустойчивостей*, Атомиздат, Москва (1971).

2. Н. Кролл, А. Трайвелпис, *Основы физики плазмы*, Мир, Москва (1975).

3. T. N. Kato, Phys. Plasmas **12**, 080705 (2005).

4. L. V. Borodachev and D. O. Kolomiets, J. Plasma Phys. **77**, 277 (2010).

5. C. Ruyer et al., Phys. Plasmas **22**, 032102 (2015).

6. M. Lazar et al., Front. Astron. Space Sci. **8**, 77559 (2022).

7. Л. В. Бородачев и др., Изв. вузов. Радиофизика **59**, 1107 (2016).

8. D. V. Romanov et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 215004 (2004).

9. W. Baumjohann and R. Treumann, *Basic Space Plasma Physics*, Imperial College Press, London (2012).

10. R. A. Treumann, Astron. Astrophys. Rev. **17**, 409 (2009).

11. A. Marcowith et al., Rep. Prog. Phys. **79**, 046901 (2016).

12. S. P. Gary, *Theory of Space Plasma Microinstabilities*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1993).

13. E. S. Weibel, Phys. Rev. Lett. **2**, 83 (1959).

14. M. Zhou et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA **119**, e2119831119 (2022).

15. B. D. Fried, Phys. Fluids **2**, 337 (1959).

16. G. Kalman, Phys. Fluids **11**, 1797 (1968).

17. R. L. Morse and C. W. Nielson, Phys. Fluids **14**, 830 (1971).

18. В. В. Кочаровский и др., УФН **186**, 1267 (2016).

19. M. Lazar, R. Schlickeiser, and P. K. Shukla, Phys. Plasmas **13**, 102107 (2006).

20. A. Stockem, M. E. Dieckmann, and R. Schlickeiser, Plasma Phys. Control. Fusion **51**, 075014 (2009).

21. U. Schaefer-Rolffs, I. Lerche, and R. Schlickeiser, Phys. Plasmas **13**, 012107 (2006).

22. A. A. Kuznetsov et al., Plasma Phys. Rep. **48**, 973 (2022).

23. M. V. Medvedev et al., Astrophys. J. **618**, L75 (2005).

24. G. Chatterjee et al., Nat. Commun. **8**, 15970 (2017).

25. K. Y. Vagin and S. A. Uryupin, Plasma Phys. Rep. **40**, 393 (2014).

26. O. A. Pokhotelov and O. A. Amariutei, Ann. Geophys. **29**, 1997 (2011).

27. R. C. Davidson, Phys. Fluids **15**, 317 (1972).

28. М. А. Гарасев, Е. В. Деришев, Изв. вузов. Радиофизика **60**, 1040 (2017).

29. M. A. Garasev and E. V. Derishev, Radiophys. Quantum El. **63**, 909 (2021).

30. T. D. Arber et al., Plasma Phys. Control. Fusion **57**, 113001 (2015).

31. А. А. Веденов, *Квазилинейная теория плазмы*, Атомиздат, Москва (1962).

32. C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, CRC Press (2018).

33. A. A. Nechaev, A. A. Kuznetsov, and V. V. Kocharovsky, J. Plasma Phys. **89**, 175890601 (2023), doi:10.1017/S0022377823001198.

34. А. А. Нечаев и др., Изв. вузов. Радиофизика **62**, 932 (2019).

35. V. M. Vasyliunas, J. Geophys. Res. **73**, 2839 (1968).

36. M. Lazar, R. Schlickeiser, and S. Poedts, Phys. Plasmas **17**, 062112 (2010).

37. G. Livadiotis, *Kappa Distributions: Theory and Applications in Plasmas*, Elsevier (2017).

38. G. Livadiotis, G. Nicolaou, and F. Allegrini, Astrophys. J. Suppl. Ser. **253**, 16 (2021).

39. V. Pierrard and M. Lazar, Sol. Phys. **267**, 153 (2010).

40. S. M. Shaaban et al., Astrophys. J. **918**, 37 (2021).

41. S. M. Shaaban et al., Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **483**, 5642 (2019).

42. P. H. Yoon, Rev. Mod. Plasma Phys. **1**, 4 (2017).

43. M. E. Dieckmann et al., Plasma Phys. Control. Fusion **61**, 085027 (2019).

44. A. Stockem Novo et al., Phys. Plasmas **22**, 092301 (2015).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1120–1127 © 2023

МАГНИТОИНДУЦИРОВАННЫЕ ТЕЧЕНИЯ В ТРОМБИРОВАННЫХ КАНАЛАХ СО СЛОЕМ ФЕРРОЖИДКОСТИ

А. Ю. Мусихин [*]***, А. Ю. Зубарев***

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина
620002, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 8 июня 2023 г.,
после переработки 1 августа 2023 г.
Принята к публикации 4 августа 2023 г.

Предложена теоретическая модель и метод ее приближенного анализа для течений, индуцируемых однородным вращающимся магнитным полем в канале, заполненном немагнитной жидкостью и внедренным в нее слоем феррожидкости. Один конец канала предполагается закрытым (тромбированным). Цель работы — развитие научной основы магнитоиндуцированной интенсификации транспорта лекарств в тромбированных кровеносных сосудах.

DOI: 10.31857/S0044451023120222
EDN: MYVLWE

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема интенсификации и адресного транспорта лекарств в организме при помощи внешних электрических и магнитных полей является перспективным направлением развития современной медицины (см., например, обзор в [1]).

Тромбирование кровеносных сосудов является тяжелым и трудноизлечимым заболеванием, нередко приводящим к летальным исходам. Основным методом лечения тромбозов является инъекция лекарств (тромболитиков) для растворения тромбов и восстановления кровотока. Однако в тромбированном кровеносном сосуде с остановившимся кровотоком распространение тромболитиков возможно только диффузионным, т. е. медленным и малоэффективным способом. Перспективный метод решения этой проблемы был предложен и запатентован в [2, 3]. Основная идея этого метода состоит в инжектировании в тромбированный кровеносный сосуд капли растворимой феррожидкости с наноразмерными магнитными частицами и в воздействии на это место переменного магнитного поля, создаваемого внешними электромагнитами. Под действием этого поля частицы переходят во вращательное и поступательное движение, передающееся несущей жидкости. В результате в кровеносном сосуде возникают циркуляционные течения, интенсифицирующие перемешивание несущей жидкости и введенных в нее тромболитиков. Это обеспечивает более эффективный транспорт лекарств к месту нахождения тромба.

Очевидно, практическое применение этого метода требует тщательного изучения особенностей генерирования течений, их структуры, выявления оптимальной конфигурации магнитного поля и других физических характеристик системы. Теоретический анализ таких течений в системах со сферическими частицами под действием вращающегося сильно неоднородного поля был нами выполнен в работе [4, 5]. В частности, было показано, что эти течения возникают в системах с пространственно-неоднородным распределением частиц, если градиент напряженности поля достаточно велик. Однако на практике создать поле с необходимым градиентом напряженности непросто. Поэтому представляет интерес исследование ситуаций, когда желаемые течения в несущей жидкости генерируются в слабоградиентном или вообще в однородном поле.

В этой работе мы предлагаем теоретическую модель циркуляционного течения, генерируемого в канале, моделирующем кровеносный сосуд. Канал заполнен немагнитной жидкостью, в которой находится пространственно-неоднородный слой инжек-

[*] E-mail: antoniusmagna@yandex.ru

тированной феррожидкости. Течения генерируются под действием пространственно-однородного вращающегося поля. Неоднородное распределение частиц феррожидкости создается магнитным полем с градиентом напряженности, направленным перпендикулярно оси канала. Полученные результаты показывают, что пространственно-неоднородное распределение частиц в канале может приводить к достаточно интенсивным макроскопическим течениям среды, способным, в частности, существенно интенсифицировать транспорт лекарств в кровеносных сосудах.

2. ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Ради максимального упрощения математической стороны дела в качестве модели кровеносного сосуда мы рассмотрим не цилиндрический канал, а полубесконечную плоскую щель толщины l, заполненную немагнитной ньютоновской жидкостью. При соблюдении реалистических отношений между продольными и поперечными к оси канала масштабами задачи результаты плоской модели, по крайней мере, по порядку величины должны соответствовать ситуации в цилиндрических каналах. Отметим, что переход к цилиндрической геометрии не приводит к принципиальным трудностям, но делает вычисления более громоздкими и менее прозрачными. Поэтому, исходя из методических соображений, здесь мы рассматриваем именно плоскую задачу.

Рассматриваемая модельная система показана на рис. 1. Правый конец щели закрыт непроницаемой для жидкости стенкой, моделирующей тромб. В эту жидкость внедрен слой феррожидкости, состоящей из одинаковых сферических магнитных наночастиц. К каналу приложено вращающееся однородное магнитное поле с компонентами $H_x = H_0 \sin \omega t$, $H_z = H_0 \cos \omega t$.

Во избежание недоразумений отметим, что обычно наночастицы феррожидкости вовлечены в интенсивное броуновское движение. Гравитация не способна привести к сколько-нибудь заметному изменению их концентрации на расстояниях, соответствующих размерам кровеносных сосудов. Поэтому здесь мы эффектов гравитации не рассматриваем, расположение слоя феррожидкости в верхней части щели на рис. 1 сделано с иллюстративной целью и не противоречит физике дела.

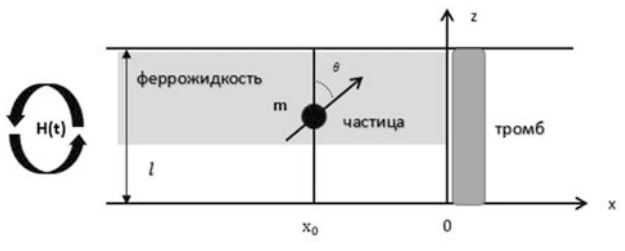


Рис. 1. Иллюстрация рассматриваемой системы. Серым цветом сверху канала отмечен слой феррожидкости

Обозначим локальную объемную концентрацию частиц $\Phi(x, z, t)$ и будем предполагать, что она мала, не превышает нескольких процентов. Поэтому можно пренебречь ее влиянием на локальную эффективную вязкость η феррожидкости и изменением локального магнитного поля $\mathbf{H}$ за счет размагничивающих эффектов. Отметим, что приближение малых концентраций Φ соответствует ограничениям, диктуемым биологической безопасностью применения магнитных наночастиц в медицинских технологиях.

В приближении механики сплошных сред уравнения течения жидкости с феррочастицами в однородном вращающемся поле могут быть представлены в виде (см., например, [6, 7])

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_x}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \Delta v_x + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z}(\Phi\Gamma), \\ \rho \frac{\partial v_z}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta \Delta v_z - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(\Phi\Gamma), \\ \frac{\partial}{\partial x} v_x &+ \frac{\partial}{\partial z} v_z = 0. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial z^2$ — оператор Лапласа, Γ — статистически среднее значение магнитного момента сил, действующих на единицу объема частицы, т. е. величина момента сил, действующих на частицу, отнесенная к ее объему, Φ — объемная концетрация. Величина $\Phi\Gamma/2$ является антисимметричным напряжением, действующим в жидкости, благодаря моменту сил Γ [6, 7]. Отметим, что уравнение (1) записано в форме, соответствующей малым числам Рейнольдса, построенным на скорости течения среды и толщине щели, что будет обсуждено в конце работы.

Граничные условия к уравнению (1) имеют вид

$$\begin{aligned} v_x = v_z = 0 \quad &\text{при } z = 0, l, \\ v_x,\ v_z \to 0 \quad &\text{при } x \to 0. \end{aligned} \tag{2}$$

Явный вид момента сил Γ в системе (1) определяется магнитными свойствами частиц феррожидкости. Здесь рассмотрим случай одинаковых однодоменных наночастиц с постоянным магнитным моментом $m = MV$ каждая, где M — намагниченность насыщения частицы, V — ее объем. Считаем, что магнитный момент частицы вморожен в

ее тело. Пренебрегая межчастичными взаимодействиями, что оправданно, если объемная концентрация Ф находится в пределах нескольких процентов, имеем [7,8]

$$\Gamma = \mu_0 HM(\langle e_x\rangle h_z - \langle e_z\rangle h_x). \tag{3}$$

Здесь $\mu_0 = 4\pi\cdot 10^{-7}$ Гн/м — магнитная проницаемость вакуума, $\langle e_x\rangle$ и $\langle e_z\rangle$ — статистически средние компоненты единичного вектора $\mathbf{e}$, направленного вдоль магнитного момента частиц; $h_z = \cos\omega t$, $h_x = \sin\omega t$ — компоненты единичного вектора $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H$, где $\mathbf{H}$ — магнитное поле внутри щели с жидкостью.

Обозначим $w(\mathbf{e})$ функцию распределения (плотность вероятности) по ориентациям единичного вектора $\mathbf{e}$ и выберем условие ее нормировки в стандартном виде:

$$\int w\, d\mathbf{e} = 1. \tag{4}$$

Функция w может быть найдена как решение соответствующего уравнения Фоккера–Планка, которое удобно записать в системе координат, вращающейся вместе с полем $\mathbf{H}$. В этой системе координат поле неподвижно, несущая жидкость вращается с угловой скоростью ω, а стационарное уравнение Фоккера–Планка имеет вид [7]

$$\omega e_{x'}e_{z'}\frac{\partial w}{\partial e_{x'}} - D_r\kappa\left[\left(e_ie_{z'} - h_i\right)\frac{\partial w}{\partial e_i} + 2we_{z'}\right] = D_r\left(\frac{\partial^2}{\partial e_i^2} - 2e_i\frac{\partial}{\partial e_i} - e_ie_j\frac{\partial}{\partial e_i\partial e_j}\right)w, \tag{5}$$

$$\kappa = \mu_0\frac{mH}{kT}, \quad D_r = \frac{kT}{6\eta V}.$$

Здесь i, $j = x'$, y', z' — вращающиеся с полем $\mathbf{H}$ декартовы координаты; ось z' направлена вдоль поля; ось x' находится в плоскости x, z (см. рис. 2), $h_{z'} = 1$, $h_{x'} = h_{y'} = 0$; D_r — коэффициент вращательной диффузии частицы; η — вязкость несущей жидкости; kT — абсолютная температура в энергетических единицах.

Отметим, что в (5) и далее используются обозначения Эйнштейна суммирования по повторяющимся индексам i, j.

В общем случае точное аналитическое решение уравнения (5) неизвестно. К хорошим приближениям приводит математически простой метод эффективного поля, предложенный в работе [9]; его обсуждение можно найти в книгах [7,10]. Следуя основной идее этого метода, умножим обе части уравнения (5) на компоненты e'_z и e'_x и проинтегрируем результат

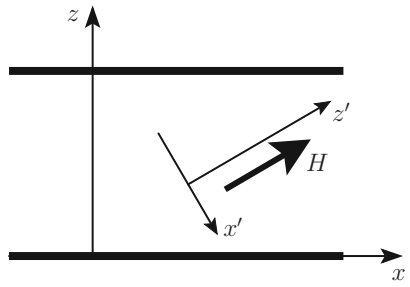


Рис. 2. Иллюстрация вращающейся системы координат x', y', z'. Ось y' не показана

по всем направления вектора $\mathbf{e}$. После вычислений приходим к соотношениям (см. детали в [7])

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2}\langle e_{z'}\rangle + \omega\langle e_{x'}\rangle + \kappa(1-\langle e_{z'}^2\rangle)h_{z'} = 0,\\ &-\frac{1}{2}\langle e_{x'}\rangle - \omega\langle e_{z'}\rangle - \kappa\langle e_{x'}e_{z'}\rangle h_{z'} = 0,\\ &\langle\ldots\rangle = \int\ldots w\, d\mathbf{e}. \end{aligned} \tag{6}$$

Для того чтобы определить вторые статистические моменты $\langle e_{z'}^2\rangle$ и $\langle e_{x'}e_{z'}\rangle$, следуя [11], мы представим неизвестную неравновесную функцию w в виде равновесной функции, но не в истинном поле $\mathbf{H}$, а в некотором эффективном поле $\mathbf{H}_{eff}$, компоненты которого предстоит найти:

$$w = \frac{\kappa_{eff}}{\operatorname{sh}\kappa_{eff}}\exp\left(\boldsymbol{\kappa}_{eff}\cdot\mathbf{e}\right), \quad \boldsymbol{\kappa}_{eff} = \mu_0\frac{m\mathbf{H}_{eff}}{kT}. \tag{7}$$

Простые оценки показывают, что для типичных феррожидкостей на водной основе, состоящих из частиц диаметром 10–20 нм, коэффициент вращательной диффузии D_r по порядку величины равен 10^5–$10^6\,\text{с}^{-1}$. Это намного больше, чем угловая скорость $\omega = 10$–$20\,\text{с}^{-1}$ поля в типичных экспериментах [9]. Следовательно, можно рассматривать функцию w как почти равновесную в поле $\mathbf{H}$. Математически это означает, что эффективное поле $\mathbf{H}_{eff}$ должно быть очень близко к истинному полю $\mathbf{H}$. Поэтому положим $\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H} + \delta\mathbf{H}$ (или $\boldsymbol{\kappa}_{eff} = \boldsymbol{\kappa} + \delta\boldsymbol{\kappa}$) и примем, что выполняется сильное неравенство $\delta H \ll H$, $\delta\kappa \ll \kappa$.

Используя форму (7) в уравнении (6), вычисляя статистические моменты $\langle\ldots\rangle$ в линейном приближении по параметру $\delta\boldsymbol{\kappa}$ и отношению w/Dr, мы приходим к линейному алгебраическому уравнению относительно компонент $\delta\boldsymbol{\kappa}$ и, как следствие, к уравнениям относительно статистических моментов $\langle e_{x'}\rangle$, $\langle e_{z'}\rangle$. Опуская подробности, которые могут

быть найдены [7, 10, 11], приведем результат:

$$\langle e_{z'}\rangle = L(\kappa), \quad \langle e_{x'}\rangle = -\frac{\omega}{D_r}\frac{L(\kappa)}{\kappa - L(\kappa)}, \qquad L(\kappa) = \operatorname{cth}\kappa - \frac{1}{\kappa}. \tag{8}$$

Отметим, что функция $L(x)$ называется функцией Ланжевена. Используя вращающуюся систему координат x', y', z', можно найти величину момента сил Γ:

$$\Gamma = \mu_0 HM\langle e_{x'}\rangle = -\mu_0 HM\frac{\omega}{D_r}\frac{L(\kappa)}{\kappa - L(\kappa)}. \tag{9}$$

Используя соотношение (9) в уравнениях (1), получаем

$$\begin{aligned} \rho\frac{\partial v_x}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta\Delta v_x - \\ &\quad - \frac{1}{2}\mu_0 HM\frac{\omega}{D_r}\frac{L(\kappa)}{\kappa - L(\kappa)}\frac{\partial}{\partial z}\Phi, \\ \rho\frac{\partial v_z}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta\Delta v_z + \\ &\quad + \frac{1}{2}\mu_0 HM\frac{\omega}{D_r}\frac{L(\kappa)}{\kappa - L(\kappa)}\frac{\partial}{\partial x}\Phi, \\ \frac{\partial}{\partial x}v_x + \frac{\partial}{\partial z}v_z &= 0. \end{aligned} \tag{10}$$

По порядку величины характерное время инерционной релаксации жидкости в щели шириной l может быть оценено как $l^2\rho/\eta$. Для жидкости со свойствами, близкими к свойствам воды, заполняющей щель с шириной $l \sim 1$–2 мм (что соответствует диаметру кровеносных сосудов, чье тромбирование опасно для здоровья и жизни человека), это время порядка 1 с. Поэтому здесь мы пренебрежем коротким периодом инерционного перехода от состояния покоя жидкости к ее течению, пренебрегая в (10) производной $\partial v_i/\partial t$.

Удобно ввести функцию тока Ψ так, что

$$v_x = \frac{\partial}{\partial z}\Psi, \quad v_z = -\frac{\partial}{\partial x}\Psi. \tag{11}$$

Отметим, что при такой форме записи компонент скорости $\mathbf{v}$ уравнение несжимаемости $\operatorname{div}\mathbf{v} = 0$ выполняется автоматически.

Подставляя (11) в уравнения (10), пренебрегая производной $\partial v_i/\partial t$, после простых преобразований приходим к уравнению

$$\begin{aligned} &\Delta^2\Psi = G(z), \\ &G(z) = \frac{1}{2}\frac{\mu_0 H_0 M}{\eta}\frac{\omega}{D_r}\frac{L(k)}{\kappa - L(\kappa)}\frac{d^2}{dz^2}\big(\Psi(z)\big), \\ &\Delta^2 = \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^4}{\partial x^2\partial z^2} + \frac{\partial^4}{\partial z^4}. \end{aligned} \tag{12}$$

Граничные условия (2), соответствующие непроницаемости границ щели и отсутствию скольжения жидкости на них, могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} z = 0,\, l: &\quad \Psi = 0, \quad \frac{\partial\Psi}{\partial z} = 0, \\ x \to 0: &\quad \Psi \to 0. \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь во втором условии учтен тот факт, что $\partial\Psi/\partial x = 0$ при $z = 0, l$, что означает, что на границах щели функция тока Ψ не зависит от координаты x, т. е. равна постоянной величине. Поскольку конкретное значение этой величины не имеет физического смысла, можно придать ей нулевое значение.

Рассмотрим ситуацию, когда система, дополнительно к вращающемуся пространственно-однородному полю H, помещена в постоянное неоднородное поле $H_c(z) = Az + B$ с градиентом напряженности $|\nabla H_c(z)|$, направленным вдоль оси z; A и B — коэффициенты, определяемые установкой, создающей поле H_c. Отметим, что такая экспериментальная ситуация была реализована в [9].

В первом приближении можно считать, что в вертикальном направлении (вдоль оси z) частицы распределены по закону Больцмана:

$$\Phi(z) = \Phi_0\frac{\exp\left(-\frac{F(z)}{kT}\right)}{\int_0^l \exp\left(-\frac{F(z)}{kT}\right)dz}\,l, \tag{14}$$

$$F(z) = -kT\ln Z, Z = \int_0^\pi e^{-\frac{\mu_0 m H_c(z)\cos\theta}{kT}}\sin\theta\,d\theta. \tag{15}$$

Здесь θ — угол между направлением магнитного момента $\mathbf{m}$ частицы и направлением стационарного магнитного поля; $F(z)$ — свободная энергия магнитной частицы в локальном поле $H_c(z)$; Φ_0 — средняя по щели объемная концентрация частиц.

Результаты расчетов распределения частиц поперек оси канала представлены на рис. 3. Концентрация Φ растет с координатой z, что учтено в уравнении (12) и на иллюстрации рис. 1.

Отметим, что выбранная для расчетов концентрация Φ_0 и диаметр частиц $d = 15$ нм вполне типичны для современных магнетитовых феррожидкостей. Стационарное магнитное поле с градиентом $|\nabla H_c| = 10^4$ кА/м^2 было использовано в экспериментах [12] по магнитной сепарации частиц в феррожидкостях. Следует признать, что величина концентрации $\Phi = 0.25$ на «верхней» границе щели, строго говоря, несколько выходит за границы приближения невзаимодействующих частиц. Тем не ме-

нее, она дает верные оценки по порядку величины. Учет межчастичного взаимодействия в законе распределения частиц по координате z и, особенно, в уравнениях динамики частиц и гидродинамики суспензии, приводит к очень сильному усложнению математической стороны дела и непрозрачной форме окончательных результатов. Поэтому, имея в виду полученные оценки по порядку величины для скорости генерируемых течений, позволяющие судить о принципиальной перспективности рассматриваемого метода генерации течений в каналах, мы ограничимся здесь формулой Больцмана (14), (15) и простейшим приближением динамики невзаимодействующих частиц.

Оценим теперь время установления–разрушения распределения Больцмана (14), (15). Стандартное решение уравнения диффузионно-магнитофоретического переноса частиц вдоль оси z в поле с однородным градиентом $|\nabla H_c|$ приводит к следующей оценке наибольшего времени релаксации τ концентрации Φ к равновесному профилю (14), (15):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_F},$$
$$\frac{1}{\tau_D} = \left(\frac{\pi}{l}\right)^2 D, \quad \frac{1}{\tau_F} = \frac{F^2}{4(kT)^2} D.$$

Здесь τ_D — время диффузионной релаксации профиля частиц; τ_F — время форетической релаксации броуновских частиц, на которые действует сила F; D — коэффициент трансляционной диффузии частиц, который может быть вычислен по классической формуле Эйнштейна.

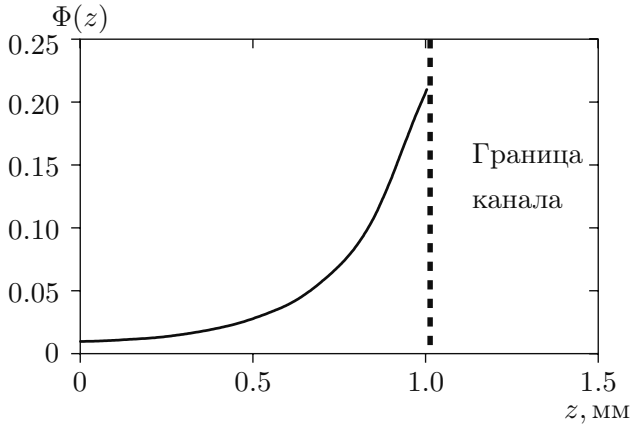


Рис. 3. Зависимость объемной концентрации магнитных частиц феррожидкости от координаты z поперек канала. Параметры системы: средняя концентрация $\Phi_0 = 0.05$, толщина канала $l = 1$ мм, градиент постоянного магнитного поля $|\nabla H_c| = 10^4$ кА/м^2, намагниченность материала частиц магнетита $M = 500$ кА/м, диаметр частиц $d = 15$ нм

Сила F может быть оценена из стандартной формулы $F \sim \mu_0 m |\nabla H_c(z)|$.

Для магнетитовых частиц с диаметром $d = 15$ нм, находящихся в водной среде при комнатной температуре в канале с шириной $l \sim 1$ мм под действием поля с однородным градиентом $|\nabla H_c| = 10^4$ кА/м^2, прямые вычисления дают $\tau_D \sim 3 \cdot 10^3$, $\tau_F \sim 2 \cdot 10^4$, т. е. распределение Больцмана после включения поля может быть достигнуто, а после выключения поля разрушено за время от одного до нескольких часов, что вполне приемлемо для проведения экспериментов.

В дальнейшем мы будем предполагать, что амплитуда H_0 вращающегося поля H намного больше стационарного поля H_c в щели, поэтому оно практически не препятствует вращению частиц. При экспериментальной реализации перед включением вращающегося поля H поле H_c может быть выключено. Тогда на временах, меньших τ_D, созданный неоднородный профиль концентрации, по крайней мере в первом приближении, будет сохраняться.

Уравнение (12) содержит четвертые производные от искомой функции тока Ψ по координатам. Точные аналитические решения таких уравнений неизвестны. Численное их решение тоже сталкивается с плохо преодолимыми сложностями; надежные алгоритмы решения таких задач нам не известны. Поэтому здесь воспользуемся идеями метода сращиваемых асимптотических разложений, суть которого состоит в сращивании решений (12), (13), получаемых на различных участках течения.

Прежде всего рассмотрим область канала вдали от тромба, на расстояниях, значительно превышающих ширину l канала. В этой области линейный масштаб изменения скорости течения вдоль продольной оси x намного больше, чем в поперечном направлении вдоль оси z. Поэтому уравнение (12) с граничными условиями (13) можно представить в виде

$$\frac{\partial^4}{\partial z^4}\Psi = G(z), \tag{16}$$
$$z = 0, l, \quad \Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0, \quad x \to -\infty, \quad \Psi \to 0.$$

Обозначим решение этой задачи Ψ_0. Оно имеет вид

$$\Psi_0(z) = J(z) + \frac{1}{6}Az^3 + \frac{1}{2}Bz^2, \tag{17}$$
$$\frac{\partial \Psi_0}{\partial z} = I(z) + \frac{1}{2}Az^2 + Bz,$$

где

$$J(z)=\int\limits_0^z\int\limits_0^{z_3}\int\limits_0^{z_2}\int\limits_0^{z_1} G(z')\,dz'\,dz_1\,dz_2\,dz_3,$$

$$I(z)=\frac{\partial J}{\partial z}=\int\limits_0^z\int\limits_0^{z_2}\int\limits_0^{z_1} G(z')\,dz'\,dz_1\,dz_2, \tag{18}$$

$$A=\frac{12}{l^3}\left[J(l)-\frac{1}{2}I(l)\,l\right],\quad B=\frac{2}{l^2}[I(l)\,l-3J(l)].$$

Обсудим теперь поведение функции Ψ в непосредственной близости от тромба, т. е. при $x\to 0$, для чего разложим функцию Ψ в ряд Тейлора вблизи точки $x=0$:

$$\Psi=\Psi(0)+\Psi' x+\frac{1}{2}\Psi'' x^2+\ldots, \tag{19}$$

где штрихи означают производные по x при $x=0$. Граничное условие (10) $\partial\Psi/\partial z=0$ при $x=0$ показывает, что на «тромбе» функция $\Psi(x=0,z)$ не зависит от координаты z. Поскольку при $z=0,l$ выполняется граничное условие $\Psi=0$, это значит, что $\Psi(x=0,z)=0$. Условие $\partial\Psi/\partial x=0$ при $x=0$ означает, что $\Psi'=0$. Таким образом, первым неисчезающим членом в разложении (19) является член $1/2\Psi'' x^2$. Учитывая это, представим функцию Ψ в экстраполяционной форме, удовлетворяющей всем граничным условиям:

$$\Psi(x,z)=\begin{cases}\alpha x^2\Psi_0(z), & x^2<\dfrac{1}{\alpha},\\[2ex] \Psi_0(z), & x^2>\dfrac{1}{\alpha},\end{cases} \tag{20}$$

где α — коэффициент, который определяем из условия наилучшего соответствия формы (20) дифференциальному уравнению (12). Это условие формулируем следующим образом. Запишем функцию

$$L(\alpha)=\int\limits_0^\infty\int\limits_0^l\left[\Delta^2\Psi(x,z)-G(z)\right]^2 dz\,dx \tag{21}$$

и выберем α, обеспечивающее наименьшее значение L. Идеологически такой подход близок к классическому вариационному методу Онсагера определения термодинамических функций жидких кристаллов [13, 14], а также к хорошо известному методу наименьших квадратов.

Перепишем уравнение (21) в виде

$$L(\alpha)=\int\limits_0^{\sqrt{1/\alpha}}\int\limits_0^l\left[\alpha\Delta^2\left(x^2\Psi_0(z)\right)-G(z)\right]^2 dz\,dx+$$

$$+\int\limits_{\sqrt{1/\alpha}}^\infty\int\limits_0^l\left[\Delta^2\Psi_0(z)-G(z)\right]^2 dz\,dx. \tag{22}$$

В силу того, что $\Psi_0(z)$ является решением уравнения (16), второй интеграл равен здесь нулю. Тогда получаем

$$L(\alpha)=\int\limits_0^{\sqrt{1/\alpha}}\int\limits_0^l\left[\alpha\Delta^2\left(x^2\Psi_0(z)\right)-G(z)\right]^2 dz\,dx=$$

$$=\int\limits_0^{\sqrt{1/\alpha}}\int\limits_0^l\Big[\alpha^2\left(\Delta^2(x^2\Psi_0(z))\right)^2-2\alpha G(z)\Delta^2\left(x^2\Psi_0(z)\right)+$$

$$+G(z)^2\Big]\,dz\,dx. \tag{23}$$

Далее запишем:

$$\Delta^2\left(x^2\Psi_0(z)\right)=4\Psi_0''+x^2\Psi_0^{IV}, \tag{24}$$

$$\left(\Delta^2(x^2\Psi_0(z))\right)^2=16(\Psi_0'')^2+8x^2\Psi_0''\Psi_0^{IV}+x^4\left(\Psi_0^{IV}\right)^2.$$

Здесь штрихи означают дифференцирование по z.

Подставляя (24) в (23), после интегрирования по x получаем

$$L(\alpha)=\alpha^{3/2}D-\alpha^{1/2}E+\alpha^{-1/2}F,$$

$$D=16\int\limits_0^l\left(\Psi_0''\right)^2 dz,\quad E=\frac{16}{3}\int\limits_0^l\Psi_0'' G\,dz, \tag{25}$$

$$F=\frac{8}{15}\int\limits_0^l G^2\,dz,$$

Из условия

$$\frac{dL}{d\alpha}=\frac{3}{2}\alpha^{1/2}D+\alpha^{-1/2}E-\frac{1}{2}\alpha^{-3/2}F=0$$

находим формулу для вычисления α:

$$\alpha=\frac{-E+\sqrt{E^2+12DF}}{6D}. \tag{26}$$

Полезно привести следующие оценки для величин α. Из уравнения (16) получаем

$$\frac{d^4}{dz^4}\Psi_0\sim\frac{\Psi_0}{l_4}\sim G,$$

следовательно $\Psi_0\sim Gl^4$. Аналогично получаем

$$\frac{d^2}{dz^2}\Psi_0\sim Gl^2.$$

Тогда

$$D \sim 16l^4 \int_0^l (G)^2\, dz \sim 16l^4 F,$$

$$E \sim 8l^{-2} \int_0^l G^2\, dz \sim 8l^{-2} F.$$

Учитывая эти оценки и формулу (26), имеем $\alpha \sim l^{-2}$. Значит, расстояние x_c от тромба, на котором происходит переход (20) ближнего решения в дальнее, по порядку величины $x_c \sim l$.

Отметим, что Ψ — функция тока, следовательно компоненты скорости течения $\mathbf{v}$ не зависят от времени. Это означает, что однородное вращающееся поле в рассматриваемом канале порождает стационарные потоки. Подчеркнем, что для генерирования этих потоков необходимо, чтобы концентрация частиц Φ зависела от пространственных координат.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Коэффициент α был вычислен при помощи (25) и (26) с учетом (17) и (18). В соответствии с (20) мы определяли продольную компоненту скорости течения феррожидкости в канале так:

$$v(x) = \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \begin{cases} \alpha x^2\, \dfrac{\partial \Psi_0(x,z,t)}{\partial z}, & x^2 < 1/\alpha, \\ \dfrac{\partial \Psi_0(x,z,t)}{\partial z}, & x^2 > 1/\alpha. \end{cases} \tag{27}$$

Некоторые результаты расчетов скорости v_x, представляющей наибольший интерес с точки зрения транспорта лекарства или другой нейтральной примеси вдоль оси x канала, приведены на рис. 4, 5. Отметим, что ширина канала $l = 2$ мм выбиралась так, чтобы она соответствовала характерному диаметру кровеносного сосуда, тромбирование которого может вызывать опасность для здоровья и жизни человека; как и на рис. 3, средняя концентрация частиц $\Phi_0 = 0.05$; намагниченность материала ферромагнитных сферических частиц $M = 500$ кА/м (магнетит), диаметр частиц $d = 15$ нм.

Можно заметить, что увеличение частоты магнитного поля ведет к росту скорости течения феррожидкости. На рис. 4 видно, что непосредственно рядом с тромбом ($x \sim -0.2$ мм) продольная скорость течения v_x порядка 50 мкм/с. На расстояниях от тромба порядка $x \sim 1$ мм скорость достигает значений 600 мкм/с. На рис. 5 приведены кривые скоростей при различных полях, индуцирующих неоднородность концентрации частиц: чем больше градиент поля, приложенный вдоль канала, тем быстрее циркулирует жидкость в нем. На рис. 6 показана скорость течения v_x как функция от координаты z, поперечной к оси канала при фиксированной координате x.

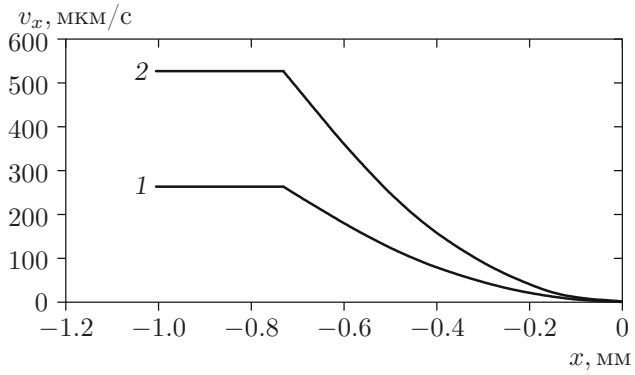


Рис. 4. Продольная компонента скорости v_x в зависимости от координаты x для различных частот ω при фиксированном $z = 2l/7$, толщина канала $l = 2$ мм. Кривая *1*: $\omega = 10\,\text{с}^{-1}$; кривая *2*: $\omega = 20\,\text{с}^{-1}$. Градиент постоянного магнитного поля $|\nabla H_c(z)| = 10^4$ кА/м^2, амплитуда вращающегося поля $H_0 = 100$ кА/м

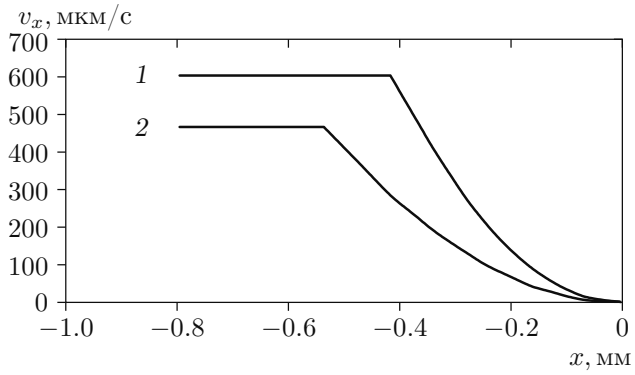


Рис. 5. Продольная компонента скорости v_x в зависимости от координаты x для разных полей $H_c(z)$. Кривая *1*: $|\nabla H_c(z)| = 2 \cdot 10^4$ кА/м^2; кривая *2*: $|\nabla H_c(z)| = 1.5 \cdot 10^4$ кА/м^2. Остальные параметры такие же, как на рис. 4

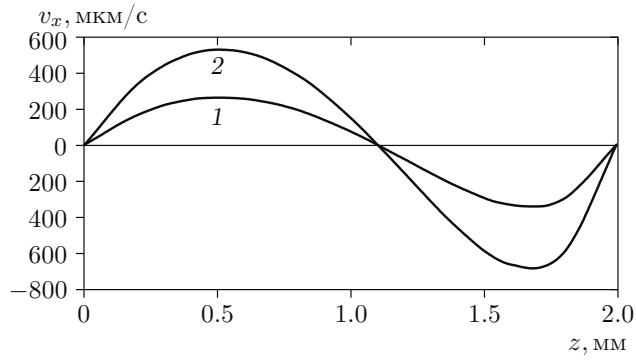


Рис. 6. Продольная компонента скорости v_x в зависимости от координаты z при различных частотах ω и фиксированном $x = -0.36$ мм. Кривая *1*: $\omega = 10\,\text{с}^{-1}$; кривая *2*: $\omega = 20\,\text{с}^{-1}$. Остальные параметры такие же, как на рис. 4

Среднеквадратичную скорость $\bar{v}_x$ циркуляционных течений в канале можно оценить как несколько десятков микрон в секунду, что на полтора-два порядка величины больше скорости диффузионного транспорта тромболитиков в неподвижной среде, оцененной в [3], примерно, как 0.8 мкм/с. Это подтверждает эффективность магнитного метода интенсификации транспорта лекарств в тромбированных сосудах. Решение задачи о конвективной диффузии молекулярной примеси (тромболитиков) в канале с магнитоиндуцированными циркуляционными течениями с учетом возникновения тонкого диффузионного пограничного слоя вблизи тромба может являться предметом отдельного исследования.

Обсудим теперь правомерность приближения малых чисел Рейнольдса, которому соответствует уравнение (1). Как видно на рис. 4, 5, скорость течения жидкости по порядку величины не превышает 600 мкм/с. При таких скоростях для канала диаметром около 2 мм (что, как отмечалось, соответствует диаметру кровеносного сосуда, тромбирование которого опасно для здоровья и жизни человека) и несущей жидкости с вязкостью крови (примерно $4–5 \cdot 10^{-3}$ Па $\cdot$ с) число Рейнольдса имеет порядок 0.04. Это обосновывает выбранное линейное приближение (1) течения жидкости.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрена модель генерации циркуляционных течений в канале с немагнитной жидкостью и инжектированной в нее нанодисперсной феррожидкостью под действием однородного вращающегося магнитного поля.

При помощи неоднородного внешнего поля в направлении поперек оси канала создано неоднородное распределения концентрации феррочастиц. Один конец канала предполагался закрытым (тромбированным). Расчеты показывают, что при вполне реалистических параметрах системы частоты и напряженности магнитного поля в канале в слое феррожидкости могут быть генерированы течения с амплитудой продольной скорости порядка 600 мкм/с. Эти потоки могут существенно интенсифицировать транспорт нейтральной молекулярной примеси (лекарства) в несущей жидкости, что подтверждает идею, высказанную в [2, 3], о перспективности метода генерирования магнитоиндуцированных течений в тромбированных кровеносных сосудах для интенсификации в них транспорта тромболитиков.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 21-52-12013) и в рамках Госзадания (проект FEUZ 2023-0020).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Trahms, *Biomedical applications of magnetic nanoparticles*, in *Colloidal magnetic fluids. Basics, Development and application of ferrofluids*, Springer, Berlin (2009).

2. F. M. Creighton, *Magnetic-based systems for treating occluded vessels*, U. S. Patent No. 8.308.628 (2012).

3. M. J. Clements, *A mathematical model for magnetically-assisted delivery of thrombolytics in occluded blood vessels for ischemic stroke treatment.* Doctoral dissertation, Texas University (2016).

4. A. Musickhin, A. Y. Zubarev, M. Raboisson-Michel, G. Verger-Dubois, P. Kuzhir, *Field-induced circulation flow in magnetic fluids*, Phil. Trans. R. Soc. A. **378**, 20190250 (2020).

5. А. Ю. Зубарев, А. Ю. Мусихин, *Макроскопические течения, индуцируемые феррожидкостью под действием вращающегося магнитного поля*, ЖЭТФ **163**, 602 (2023)

6. R. Rosensweig, *Ferrohydrodynamics*, Cambridge, New York (1985).

7. В. Покровский, *Статистическая механика разбавленных суспензий*, Наука, Москва (1978).

8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).

9. M. Raboisson-Michel, *Micro-vortex magnétique pour le transport convective de molécules: vers une application biomédicale*, University Cote d'Azur (2022).

10. E. Blums, A. Cebers, M. Maiorov, *Magnetic Fluids*, Walter de Gruyter, Berlin (1997).

11. М. А. Марценюк, Ю. Л. Райхер, М. И. Шлиомис, *К кинетике намагничивания суспензий однодоменных ферромагнитных частиц*, ЖЭТФ **65**, 1 (1973).

12. S. Odenbach, S. Thurm, *Magnetoviscous effect in ferrofluids*, Ferrofluids. Magnetically controllable fluids and their aplications, Springer, Berlin (2002).

13. L. Onsager, *The effects of shape on the interaction of colloidal particles*, Ann. N. Y. Acad. Sci. **5**, 4 (1949).

14. P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1974).

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1128–1136 © 2023

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 164 ЗА 2023 г.

Вып. Стр.

EDN: NCFBQW

А

Аборкин А. В. (см. Решетняк В. В.) ... 12 996
Авчян Б. Р. (см. Седракян Х. В.) 7 56
Авчян Б. Р. (см. Седракян Х. В.) 9 457
Агапов Д. П., Беловолов И. В., Магницкий С. А., Фроловцев Д. Н., Чиркин А. С. Формирование фантомных изображений в волоконно-оптическом эндоскопе на основе рассеяния света 11 722
Агафонова Н. Ю., Добрынина Е. А., Филимонова Н. А., Шакирьянова И. Р., от имени Коллаборации LVD. Периодические вариации концентрации радона в подземной Лаборатории Гран Сассо, измеренные с помощью LVD 9 386
Агринская Н. В., **Козуб В. И.** Модель спинового стекла для квантовых ям GaAs/AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи перехода металл–изолятор 11 797
Азаревич А. Н. (см. Случанко Н. Е.) ... 9 406
Азаркин М. Ю., Киракосян М. Р. Характеристики протон-протонных столкновений, смоделированых с помощью Монте-Карло генераторов, при энергиях NICA 11 731
Азарова Л.А. (см. Григорьев С. В.) 10 538
Алексеев В. А., Вартанян Т. А., Пазгалев А. С., Сердобинцев П. Ю. Спутники дипольно-запрещенных переходов в низколежащие возбужденные состояния $^2S_{1/2}$ и $^2D_{3/2,5/2}$ атомов K, Rb и Cs в спектрах газофазных смесей с CF_4 ..... 9 328
Альянова Н. В. (см. Бетеров И. И.) 8 282
Анисифоров К. В., Георгиевская А. Б., Левкина Е. В., Невмержицкий Н. В., **Раевский В. А.**, **Сеньковский Е. Д., Сотсков Е. А.** Расчетно-экспериментальное исследование процесса дробления капли жидкости под действием воздушной ударной волны 12 1070
Антипов М. В. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Аринин В. А. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Архипов М. В., Архипов Р. М., Розанов Н. Н. Комментарий к статье Р. М. Фещенко «Об интеграле по времени от электромагнитного поля» ЖЭТФ **163**, 461 (2023) 12 906
Архипов Р. М. (см. Архипов М. В.) 12 906
Афонин В.В., **В.Ю. Петров** О точном решении для жидкости Латтинжера с отталкиванием и одной точечной примесью 9 445

Б

Бабенко П. Ю. (см. Михайлов В. С.) ... 9 478
Бадиев М. К. (см. Муртазаев А. К.) ... 11 790
Бакулин А. В., Кульков А. С., Кулькова С. Е. Влияние примесей на адгезию на границе раздела $TiAl/Al_2O_3$ 9 420
Балаев А. Д. (см. Красиков А. А.) 12 1026
Балаев Д. А. (см. Красиков А. А.) 12 1026
Балакин Д. А., Белинский А. В. Фантомная волоконная эндоскопия с несколькими однопиксельными датчиками в объектном канале 12 910
Басалаев М. Ю. (см. Коваленко Д. В.) 8 255
Батулин Р. Г. (см. Попов Д. В.) 10 643
Батуро В. В., Виноградов В. А., Платонова М. В., Юхновец И. В., Турлапов А. В. Наблюдение дифракции Капицы – Дирака в газе атомов лития при помощи рассеяния Брэгга 8 175
Белик А. А. (см. Соболев А. В.) 9 467
Белинский А. В. (см. Балакин Д. А.) . 12 910
Беловолов И. В. (см. Агапов Д. П.) ... 11 722
Бельская Н. А. (см. Гохфельд Ю. С.) . 10 571
Бетеров И. И. (см. Фарук А. М.) 8 230
Бетеров И. И. (см. Цзюньси Ч.) 8 241

Бетеров И. И., Якшина Е. А., Третьяков Д. Б., Альянова Н. В., Скворцова Д. А., Сулиман Г., Загиров Т. Р., Энтин В. М., Рябцев И. И. Трехфотонное лазерное возбуждение одиночных ридберговских атомов рубидия в оптической дипольной ловушке 8 282
Бланк В. Д. (см. Дигуров Р. В.) 12 885
Бликов А. О. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Блинов И. А. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Богач А. В. (см. Случанко Н. Е.) 9 406
Болдырев К. Н., Диаб М., Гудим И. А., Попова М. Н. Оптический линейный дихроизм в *ab*-плоскости ферробората $NdFe_3(BO_3)_4$ 10 563
Больгинов В. В. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Бражкин В. В. (см. Кондрин М. В.) 9 396
Бражников Д. В. (см. Игнатович С. М.) 8 214
Бражников Д. В., Энтин В. М., Рябцев И. И. Двойной радиооптический резонанс в конфигурации Ханле при возбуждении D_1-линии поглощения атомов щелочных металлов 8 291
Бухтияров А. А. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Бушнева Т.Д. (см. Шванская Л.В.) 10 599

В

В.Ю. Петров (см. Афонин В.В.) 9 445
Вальков А. Ю. (см. Кузьмин В. Л.) 9 340
Вальков В. В. Антиферромагнитный экситонный диэлектрик 10 550
Вартанян Т. А. (см. Алексеев В. А.) ... 9 328
Васильев А. Н. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Васильев А.Н. (см. Шванская Л.В.) ... 10 599
Васильев М. М. (см. Светлов А. С.) ... 11 715
Васильчикова Т.М. (см. Шванская Л.В.) 10 599
Васин К. В. (см. Еремин М. В.) 10 584
Великанов Д. А. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Виноградов В. А. (см. Батуро В. В.) .. 8 175
Вишняков В. И. (см. Игнатович С. М.) 8 214
Вишнякова Г. А. (см. Легошин А. Д.) . 8 247
Водолазов Д. Ю. (см. Уставщиков С. С.) 9 432
Волкова О.С. (см. Шванская Л.В.) 10 599
Воронин В. В., Шапиро Д. Д., Семенихин С. Ю., Хансен Т. С. Поиск нового межнуклонного взаимодействия с помощью порошковой дифракции нейтронов 12 955

Г

Гаврилкин С. Ю. (см. Трусевич Н. Г.) . 9 413
Гаврилкин С. Ю. (см. Случанко Н. Е.) 9 406
Гайдук Е. А. (см. Рыжов В. Н.) 7 143
Галахов В. Р. (см. Солин Н. И.) 11 770
Ганьшина Е. А., Гаршин В. В., Перова Н. Н, Припеченков И. М., Юрасов А. Н., Яшин М. М., Рыльков В. В., Грановский А. Б. Магнитооптическая керр-спектроскопия нанокомпозитов 10 662
Гарасёв М. А. (см. Кузнецов А. А.) 12 1098
Гаршин В. В. (см. Ганьшина Е. А.) 10 662
Георгиевская А. Б. (см. Анисифоров К. В.) 12 1070
Георгиевская А. Б. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Герасимов Л. В., Куприянов Д. В., Страупе С. С. Оптимизация перепутывающих логических вентилей на основе эффекта Ридберговской блокады 8 180
Глазков В. Н., Красникова Ю. В., Родыгина И. К., Хеммида М., Хирле М., Круг фон Нидда Х.-А., Масуда Т. Магнитный резонанс в квазидвумерном антиферромагнетике на квадратной решетке $Ba_2MnGe_2O_7$ 10 626
Глазкова Я. С. (см. Соболев А. В.) 9 467
Глухов И.Л., Каменский А.А., Овсянников В.Д., Пальчиков В.Г. Прецизионная спектроскопия ридберговских состояний щелочноземельных атомов для измерения характеристик СВЧ излучения 8 193
Головизин А. А. (см. Яушев М. О.) ... 8 204
Головизин А.А. (см. Трегубов Д.О.) ... 8 223
Горшков О. Н., Филатов Д. О., Коряжкина М. Н., Лобанова В. А., Рябова М. А. Влияние шума на резистивное переключение мемристора на основе стабилизированного диоксида циркония 11 810
Горяев Ф.Ф. Одноэлектронная перезарядка при столкновениях быстрых ионов с молекулярным водородом в представлении параметра удара 9 349
Готовко С. К., Марченко В. И. Об опрокидывании подрешёток в спиральных магнетиках 10 569
Гохфельд Ю. С., Казак Н. В., Бельская Н. А., Молокеев М. С., Гудим И. А., Кондратьев О. А., Еремин Е. В., Князев Ю. В., Великанов Д. А., Овчинников С. Г. Структурный беспорядок, теплоемкость и магнитные переходы в Cu_2FeBO_5 ..... 10 571

Грановский А. Б. (см. Ганьшина Е. А.) 10 662
Григорьев П. Д. (см. Дюгаев А. М.) ... 7 23
Григорьев С. В., Азарова Л.А., Пшеничный К. А., Утесов О.И. Дисперсионное соотношение в аморфных ферромагнетиках 10 538
Григорьев Ф. С., Чукеев М. А., Ловцюс В. А., Ефимов Ю. П., Елисеев С. А. Зеемановское расщепление экситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея 11 761
Гудим И. А. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Гудим И. А. (см. Болдырев К. Н.) 10 563
Гусев Н. С. (см. Уставщиков С. С.) 9 432
Гусев Р. Б., Цымбаленко В. Л. Кинетика роста квантовых кристаллов ^{4}He при температуре 0.1–0.2 K 11 752
Гусев С. А. (см. Уставщиков С. С.) 9 432

Д

Давыдов Н. Б. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Деева Ю. А. (см. Попов Д. В.) 10 643
Денисенко В. П. (см. Москалев П. В.) . 7 117
Денисов В. Н. (см. Дигуров Р. В.) 12 885
Диаб М. (см. Болдырев К. Н.) 10 563
Дигуров Р. В., Бланк В. Д., Денисов В. Н., Мартюшов С. Ю., Сорокин Б. П., Терентьев С. А., Поляков С. Н. Определение тензора деформаций и полей упругих напряжений в алмазной пластине с большой кривизной изгиба на основе данных локального дифракционного метода Лауэ 12 885
Добрынина Е. А. (см. Агафонова Н. Ю.) 9 386
Дровосеков А. Б., Крейнес Н. М., Зигануров Д. А., Ситников А. В., Николаев С. Н., Рыльков В. В. Особенности поведения линии ЭПР ($g \approx 4.3$) в магнитных наногранулярных композитах 10 650
Дубинин М. Н., Казаркин Д. М. Улучшенные космологические ограничения для сценариев смешивания трех поколений стерильных нейтрино 12 942
Дубровин Р. М. (см. Писарев Р. В.) ... 10 673
Дуденко А. И. (см. Чайников А. П.) ... 12 927
Дюгаев А. М., Григорьев П. Д. Моделирование двухъямных потенциалов для уравнения Шредингера 7 23

Е

Егоров С. В. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Елисеев С. А. (см. Григорьев Ф. С.) 11 761
Еремин Е. В. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Еремин М. В., Васин К. В., Нурмухаметов А. Р. Тонкая структура мультиплетов Fe^{2+}, магнитная анизотропия и взаимосвязь магнитных и электрических структур в $Fe_2Mo_3O_8$ 10 584
Еремина Р. М. (см. Попов Д. В.) 10 643
Ерунов С. В., Огородников В. А., Бликов А. О., Князев В. Н., Кулаков Е. В., Георгиевская А. Б., Давыдов Н. Б., Соколова А. С., Чудаков Е. А., Жерноклетов М. В., Романов А. В., Блинов И. А., Аринин В. А., Антипов М. В., Явтушенко А. П. Динамика, симметрия и ударно-индуцированное «пыление» при квазиизэнтропическом и изэнтропическом ускорении цилиндрических лайнеров 12 1087
Ефимов Ю. П. (см. Григорьев Ф. С.) ... 11 761

Ж

Жаворонков Ю. А. (см. Кузьмин В. Л.) 9 340
Жаднов Н. О. (см. Легошин А. Д.) 8 247
Жданова М. В. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Жерноклетов М. В. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Жуковский К. В. О возможности регулирования излучения второй гармоники лазера на свободных электронах с помощью второй гармоники поля ондулятора 9 315

З

Загиров Т. Р. (см. Бетеров И. И.) 8 282
Зигануров Д. А. (см. Дровосеков А. Б.) 10 650
Зиновьев А. Н. (см. Михайлов В. С.) ... 9 478
Зубарев А. Ю. (см. Мусихин А. Ю.) ... 12 1120

И

Иванова А.Г. (см. Шванская Л.В.) 10 599
Игнатович С. М., Скворцов М. Н., Месензова И. С., Квашнин Н. Л., Вишняков В. И., Бражников Д. В., Тарасенко Д. Е. Исследования параметров резонанса когерентного пленения населенностей и полевых сдвигов при регистрации сигнала из разных областей поперечного сечения взаимодействия лазерного излучения с атомами 8 214

Ильенков Р. Я., Прудников О. Н., Кирпичникова А. А., Тайченачев А. В., Юдин В. И. Лазерное охлаждение атомов лития-6 в бихроматическом световом поле 8 262
Ионин А. С., Шуравин Н. С., Карелина Л. Н., Россоленко А. Н., Сидельников М. С., Егоров С. В., Чичков В. И., Чичков М. В., Жданова М. В., Щеголев А. Е., Больгинов В. В. Экспериментальное исследование прототипа сверхпроводящего сигма-нейрона для адиабатических нейронных сетей 12 1008
Исхаков Р. С. (см. Красиков А. А.) 12 1026

К

Каган М.Ю. (см. Кузнецов Е.А.) 8 190
Казак Н. В. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Казаркин Д. М. (см. Дубинин М. Н.) . 12 942
Казарян А. Г. (см. Седракян Х. В.) 7 56
Казарян А. Г. (см. Седракян Х. В.) 9 457
Казей З. А., Маркина М. М., Снегирев В. В., Столяренко М. С. Система $YBaCo_4O_{7+x}$ ($x = 0, 0.1$): от антиферро- к ферромагнетизму 7 100
Калашникова А. М. (см. Федянин А. Е.) 10 526
Каменский А.А. (см. Глухов И.Л.) 8 193
Камчатнов А. М. Асимптотическая теория солитонов, порождаемых из интенсивного волнового импульса 11 847
Каргин Н. И. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Карелина Л. Н. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Кац Е.И. (см. Пикина Е.С.) 7 129
Квашнин Н. Л. (см. Игнатович С. М.) 8 214
Киракосян М. Р. (см. Азаркин М. Ю.) 11 731
Кириллов И. А. (см. Москалев П. В.) .. 7 117
Кирпичникова А. А. (см. Ильенков Р. Я.) 8 262
Киселев Ю. Т. Универсальность нуклонных корреляций в ядрах и кумулятивное образование пионов 12 964
Клюшников Г. Н., Серебров А. П. О методиках оценки деполяризационных потерь ультрахолодных нейтронов в магнитных ловушках 9 365
Князев В. Н. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Князев Ю. В. (см. Гохфельд Ю. С.) ... 10 571
Князев Ю. В. (см. Красиков А. А.) 12 1026
Коваленко Д. В., Юдин В. И., Басалаев М. Ю., Строкова Н. В., Тайченачев А. В., Прудников О. Н. Полевой сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей с учетом пространственной неоднородности светового пучка 8 255
Козуб В. И. (см. Агринская Н. В.) 11 797
Колачевский Н. Н. (см. Легошин А. Д.) 8 247
Колачевский Н. Н. (см. Яушев М. О.) 8 204
Колачевский Н.Н. (см. Трегубов Д.О.) 8 223
Кондратьев О. А. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Кондратьева М. С. (см. Соболев А. В.) 9 467
Кондрин М. В., Лебедь Ю. Б., Бражкин В. В. Планарные дефекты в кремнии как способ описания явного ангармонизма его высокотемпературных термодинамических свойств 9 396
Кононов Е. А. (см. Светлов А. С.) 11 715
Корнилов Н. В. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Королев А. В. (см. Солин Н. И.) 11 770
Коряжкина М. Н. (см. Горшков О. Н.) 11 810
Кочаровский Вл. В. (см. Кузнецов А. А.) 12 1098
Кочетов И. В. (см. Старостин А. Н.) . 7 29
Кочур А. Г. (см. Чайников А. П.) 12 927
Красиков А. А., Князев Ю. В., Балаев Д. А., Столяр С. В., Ладыгина В. П., Балаев А. Д., Исхаков Р. С. Магнитные межчастичные взаимодействия и суперпарамагнитная блокировка порошковых систем наночастиц биогенного ферригидрита 12 1026
Красникова Ю. В. (см. Глазков В. Н.) 10 626
Крейнес Н. М. (см. Дровосеков А. Б.) . 10 650
Круг фон Нидда Х.-А. (см. Глазков В. Н.) 10 626
Крысенко Д. С., Прудников О. Н. Охлаждение иона иттербия-171 в полихроматическом поле 8 273
Крючков Д. С. (см. Легошин А. Д.) ... 8 247
Кудеяров К. С. (см. Легошин А. Д.) .. 8 247
Кузнецов А. А., Нечаев А. А., Гарасёв М. А., Кочаровский Вл. В. Квазилинейное моделирование развития вейбелевской турбулентности в анизотропной бесстолкновительной плазме 12 1098
Кузнецов А. В. (см. Случанко Н. Е.) ... 9 406

Кузнецов Е.А., Каган М.Ю. Ответ на комментарий к работе «Симметрийный подход в задаче о расширении газов в вакуум» 8 190
Кузнецов М. А., Фраерман А. А. Магнитостатический механизм нарушения киральной симметрии в многослойных магнитных структурах 10 514
Кузьмин В. Л., Вальков А. Ю., Жаворонков Ю. А. Пик когерентного обратного рассеяния для излучения с пониженной пространственной когерентностью .. 9 340
Кукин Н. С., Мурадова А. Р., Никитин А. К., Бухтияров А. А., Семенов П. А., Васильев А. Н., Каргин Н. И., Смирнова М. О., Терентьев С. А., Тарелкин С. А., Корнилов Н. В. Чувствительность измерения спектра оптически детектируемого магнитного резонанса одиночного NV^--центра в алмазе 12 896
Кулаков Е. В. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Кулеева Н. А. (см. Кучинский Э. З.) .. 12 1056
Кульков А. С. (см. Бакулин А. В.) 9 420
Кулькова С. Е. (см. Бакулин А. В.) ... 9 420
Куприянов Д. В. (см. Герасимов Л. В.) 8 180
Курносов А. К. (см. Старостин А. Н.) 7 29
Кучинский Э. З., Кулеева Н. А., Садовский М. В. Термоэдс и эффект Холла в коррелированных металлах и допированных мотт-хаббардовских диэлектриках: DMFT-приближение 12 1056

Л

Ладыгина В. П. (см. Красиков А. А.) . 12 1026
Лебедев В.В. (см. Пикина Е.С.) 7 129
Лебедь Ю. Б. (см. Кондрин М. В.) 9 396
Левичев М. Ю. (см. Уставщиков С. С.) 9 432
Левкина Е. В. (см. Анисифоров К. В.) 12 1070
Легошин А. Д., Лискова К. А., Кудеяров К. С., Вишнякова Г. А., Мирончук Е. С., Жаднов Н. О., Крючков Д. С., Хабарова К. Ю., Колачевский Н. Н. Система активного наведения для передачи ультрастабильных сигналов оптической частоты по воздушному каналу 8 247
Лискова К. А. (см. Легошин А. Д.) 8 247
Лобанов В. Е. Влияние нагрева на генерацию и свойства платиконов в высокодобротных оптических микрорезонаторах .. 11 701
Лобанова В. А. (см. Горшков О. Н.) ... 11 810
Ловцюс В. А. (см. Григорьев Ф. С.) 11 761

М

Магарилл Л. И., Чаплик А. В. Поглощение света в дихалькогенидах переходных металлов в скрещенных полях 11 805
Магницкий С. А. (см. Агапов Д. П.) .. 11 722
Магомедов М. А. (см. Муртазаев А. К.) 11 790
Маити Т. (см. Попов Д. В.) 10 643
Мальцев А.Я. Переходы Лифшица и угловые диаграммы проводимости в металлах со сложными поверхностями Ферми 11 817
Малышуков А. Г. Инжекция спина движущейся доменной стенкой на границе раздела антиферромагнитного изолятора с двумерным металлом 12 1039
Маркина М. М. (см. Казей З. А.) 7 100
Маркосян Т. М. (см. Седракян Х. В.) . 7 56
Маркосян Т. М. (см. Седракян Х. В.) .. 9 457
Мартюшов С. Ю. (см. Дигуров Р. В.) . 12 885
Марченко В. И. (см. Готовко С. К.) ... 10 569
Масуда Т. (см. Глазков В. Н.) 10 626
Матвеев О. В. (см. Морозова М. А.) ... 10 503
Месензова И. С. (см. Игнатович С. М.) 8 214
Минькова А. В., Прудников В. В., Прудников П. В. Исследование влияния эффектов конкуренции различных типов анизотропии на критическое поведение мультислойных магнитных структур 11 782
Мирончук Е. С. (см. Легошин А. Д.) .. 8 247
Михайлов В. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновьев А. Н. Влияние выбора поверхностного барьера на расчет коэффициентов распыления вольфрама изотопами водорода 9 478
Мишин Д. А. (см. Яушев М. О.) 8 204
Мишин Д.А. (см. Трегубов Д.О.) 8 223
Молокеев М. С. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Морозова М. А., Матвеев О. В., Романенко Д. В., Никитов С. А. Брэгговские резонансы в мультиферроидном кристалле с двойной нелинейностью 10 503
Москалев П. В., Денисенко В. П., Кириллов И. А. Классификация и динамика ультрабедных водородо-воздушных пламен в горизонтальных цилиндрических ячейках Хеле – Шоу 7 117
Мурадова А. Р. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Муратов А.Р. (см. Пикина Е.С.) 7 129

Муртазаев А. К., Бадиев М. К., Магомедов М. А., Рамазанов М. К. Фазовые переходы в часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке 11 790
Мусаелян Г. А. (см. Седракян Х. В.) .. 7 56
Мусихин А. Ю., Зубарев А. Ю. Магнитоиндуцированные течения в тромбированных каналах со слоем феррожидкости 12 1120

Н

Наумов С. В. (см. Солин Н. И.) 11 770
Невмержицкий Н. В. (см. Анисифоров К. В.) 12 1070
Нечаев А. А. (см. Кузнецов А. А.) 12 1098
Никитин А. К. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Никитов С. А. (см. Морозова М. А.) .. 10 503
Николаев С. Н. (см. Дровосеков А. Б.) 10 650
Ниценко В. И. (см. Соболев А. В.) 9 467
Нурмухаметов А. Р. (см. Еремин М. В.) 10 584

О

Овсянников В.Д. (см. Глухов И.Л.) ... 8 193
Овчинников С. Г. (см. Гохфельд Ю. С.) 10 571
Огородников В. А. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Орлов В. Г., Сергеев Г. С. Электронная зонная структура, антиферромагнетизм и природа химической связи в La_2CuO_4 .. 7 107

о

от имени Коллаборации LVD (см. Агафонова Н. Ю.) 9 386

О

От Редакции. К 95-летию Людмилы Андреевны Прозоровой 10 489

П

Пазгалев А. С. (см. Алексеев В. А.) ... 9 328
Пальчиков В.Г. (см. Глухов И.Л.) 8 193
Пашенькин И. Ю. (см. Уставщиков С. С.) 9 432
Перкинс Н. Б. (см. Поляков В. А.) 10 615
Перова Н. Н (см. Ганьшина Е. А.) 10 662
Петров А. Г. (см. Сухов А. Д.) 11 839
Петров О. Ф. (см. Светлов А. С.) 11 715
Петрушевич Ю. В. (см. Старостин А. Н.) 7 29
Пикина Е.С., Муратов А.Р., Кац Е.И., Лебедев В.В. Нелинейная электрогидродинамика жидких кристаллов 7 129
Писарев Р. В., Дубровин Р. М. Фононы, магноны и экситоны в нецентросимметричном магнитоэлектрике – антиферромагнетике CuB_2O_4 ..... 10 673
Платонова М. В. (см. Батуро В. В.) ... 8 175
Погосян К. С. (см. Седракян Х. В.) 9 457
Половец С. Е. (см. Случанко Н. Е.) 9 406
Поляков В. А., Перкинс Н. Б. Роль вакансий в спин-жидкостной модели Яо–Ли 10 615
Поляков С. Н. (см. Дигуров Р. В.) 12 885
Попов Д. В., Батулин Р. Г., Черосов М. А., Яцык И. В., Чупахина Т. И., Деева Ю. А., Фазлижанов И. И., Еремина Р. М., Маити Т. Магнитные свойства двойного перовскита Sr_2CrNbO_6 ..... 10 643
Попова М. Н. (см. Болдырев К. Н.) 10 563
Пресняков И. А. (см. Соболев А. В.) .. 9 467
Припеченков И. М. (см. Ганьшина Е. А.) 10 662
Проворченко Д. И. (см. Яушев М. О.) 8 204
Проворченко Д.И. (см. Трегубов Д.О.) 8 223
Прудников В. В. (см. Минькова А. В.) 11 782
Прудников О. Н. (см. Ильенков Р. Я.) 8 262
Прудников О. Н. (см. Коваленко Д. В.) 8 255
Прудников О. Н. (см. Крысенко Д. С.) 8 273
Прудников П. В. (см. Минькова А. В.) 11 782
Пчелкина З.В. (см. Шванская Л.В.) ... 10 599
Пшеничный К. А. (см. Григорьев С. В.) 10 538

Р

Раевский В. А. (см. Анисифоров К. В.) 12 1070
Рамазанов М. К. (см. Муртазаев А. К.) 11 790
Рейес А. П. (см. Сахратов Ю. А.) 10 607
Решетняк В. В., Аборкин А. В., Филиппов А. В. Взаимодействие атомов на межфазной границе Al–TiC 12 996
Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В. Структура ионно-молекулярных комплексов $H^+(H_2O)_n$ для $n = 2-6$ и термодинамические характеристики гидратации протонов в газовой среде 7 5
Решетняк О. Б. (см. Решетняк В. В.) . 7 5
Родыгина И. К. (см. Глазков В. Н.) ... 10 626
Розанов Н. Н. (см. Архипов М. В.) 12 906

Романенко Д. В. (см. Морозова М. А.) 10 503
Романов А. В. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Россоленко А. Н. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Рубан В. П. Оптический аналог вращающегося бинарного бозе-конденсата 11 863
Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Тареева Е. Е., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н. Сценарии плавления двумерных систем — возможности компьютерного моделирования 7 143
Рыльков В. В. (см. Дровосеков А. Б.) . 10 650
Рыльков В. В. (см. Ганьшина Е. А.) 10 662
Рыльцев Р. Е. (см. Хазиева Е. О.) 12 980
Рябова М. А. (см. Горшков О. Н.) 11 810
Рябцев И. И. (см. Бражников Д. В.) ... 8 291
Рябцев И. И. (см. Бетеров И. И.) 8 282
Рябцев И. И. (см. Фарук А. М.) 8 230

С

Садовский М. В. (см. Кучинский Э. З.) 12 1056
Самойлов Р. М. (см. Серебров А. П.) .. 7 66
Сахратов Ю. А., Свистов Л. Е., Рейес А. П. Стабилизированные полем магнитные фазы в треугольном антиферромагнетике $RbFe(MoO_4)_2$ 10 607
Светлов А. С., Кононов Е. А., Трухачёв Ф. М., Васильев М. М., Петров О. Ф. Активное броуновское движение пылевых частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах в тлеющем разряде 11 715
Свистов Л. Е. (см. Сахратов Ю. А.) 10 607
Седракян Х. В., Казарян А. Г., Авчян Б. Р., Мусаелян Г. А., Маркосян Т. М. Генерация высших гармоник с учетом многочастичного кулоновского взаимодействия в графеновой квантовой точке 7 56
Седракян Х. В., Казарян А. Г., Авчян Б. Р., Погосян К. С., Маркосян Т. М. Гармоники высшего порядка в гексагональных графеновых квантовых точках 9 457
Семенихин С. Ю. (см. Воронин В. В.) 12 955
Семенов П. А. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Сеньковский Е. Д. (см. Анисифоров К. В.) 12 1070
Сергеев Г. С. (см. Орлов В. Г.) 7 107
Сердобинцев П. Ю. (см. Алексеев В. А.) 9 328
Серебров А. П. (см. Клюшников Г. Н.) 9 365
Серебров А. П., Самойлов Р. М., Чайковский М. Е. Анализ результата эксперимента Нейтрино-4 совместно с другими экспериментами по поиску стерильного нейтрино в рамках нейтринной модели 3+1 ..... 7 66
Сидельников М. С. (см. Ионин А. С.) . 12 1008
Ситников А. В. (см. Дровосеков А. Б.) 10 650
Скворцов М. Н. (см. Игнатович С. М.) 8 214
Скворцова Д. А. (см. Бетеров И. И.) ... 8 282
Ской В. Р. О проверке T-инвариантности в полном сечении взаимодействия нейтронов с неполяризованными ядрами с применением теоремы Поляризация–Асимметрия 9 380
Случанко Н. Е., Кузнецов А. В., Азаревич А. Н., Богач А. В., Шицевалова Н. Ю., Половец С. Е., Филипов В. Б., Цветков А. Ю., Гаврилкин С. Ю. Магнитный отклик электронов проводимости в немагнитных гексаборидах YB_6, LaB_6 и YbB_6 с электронной и структурной неустойчивостью 9 406
Смирнова М. О. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Снегирев В. В. (см. Казей З. А.) 7 100
Соболев А. В., Ниценко В. И., Белик А. А., Глазкова Я. С., Кондратьева М. С., Пресняков И. А. Динамика ян-теллеровского упорядочения в параэлектрической фазе $BiMn_7O_{12}$: зондовая мессбауэровская диагностика на ядрах ^{57}Fe 9 467
Соколова А. С. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Солин Н. И., Наумов С. В., Королев А. В., Галахов В. Р. Спиновые состояния ионов Co и переход металл–полупроводник в слоистых кобальтитах $PrBaCo_2O_{5+\delta}$ ($\delta = 0.52, 0.74$) 11 770
Сорокин Б. П. (см. Дигуров Р. В.) 12 885
Сотсков Е. А. (см. Анисифоров К. В.) . 12 1070
Старостин А. Н., Кочетов И. В., Курносов А. К., Петрушевич Ю. В., Таран М. Д. Влияние квантовых поправок, связанных с увеличением плотности газа, на время колебательной релаксации 7 29
Стишов С. М. О теплоемкости квантовой системы твердых сфер 12 1022
Столяр С. В. (см. Красиков А. А.) 12 1026
Столяренко М. С. (см. Казей З. А.) ... 7 100
Страупе С. С. (см. Герасимов Л. В.) ... 8 180
Строкова Н. В. (см. Коваленко Д. В.) . 8 255
Сулиман Г. (см. Бетеров И. И.) 8 282

Сухов А. Д., Петров А. Г. Гидравлический прыжок для прямолинейного и осесимметричного течения слоя жидкости . 11 839
Сухорукова О. С., Тарасенко А. С., Тарасенко С. В., Шавров В. Г. «Темные» состояния как частный случай спектра излучения особой поверхностной волны 12 874
Сюй Пэн (см. Фарук А. М.) 8 230

Т

Тайченачев А. В. (см. Ильенков Р. Я.) 8 262
Тайченачев А. В. (см. Коваленко Д. В.) 8 255
Таран М. Д. (см. Старостин А. Н.) ... 7 29
Тарасенко А. С. (см. Сухорукова О. С.) 12 874
Тарасенко Д. Е. (см. Игнатович С. М.) 8 214
Тарасенко С. В. (см. Сухорукова О. С.) 12 874
Тареева Е. Е. (см. Рыжов В. Н.) 7 143
Тарелкин С. А. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Терентьев С. А. (см. Дигуров Р. В.) ... 12 885
Терентьев С. А. (см. Кукин Н. С.) 12 896
Типеев А. О. (см. Хазиева Е. О.) 12 980
Трахтенберг Л. И. (см. Трусевич Н. Г.) 9 413
Трегубов Д. О. (см. Яушев М. О.) 8 204
Трегубов Д.О., Проворченко Д.И., Мишин Д.А., Колачевский Н.Н., Головизин А.А. Оптимизация параметров петель обратной связи в оптических часах на атомах тулия при синхронном сличении 8 223
Третьяков Д. Б. (см. Бетеров И. И.) ... 8 282
Трусевич Н. Г., Гаврилкин С. Ю., Трахтенберг Л. И. Пиннинг магнитного потока в поликристаллических ВТСП $YBa_2Cu_3O_{6.92}$ при охлаждении в слабом магнитном поле 9 413
Трухачёв Ф. М. (см. Светлов А. С.) ... 11 715
Турлапов А. В. (см. Батуро В. В.) 8 175

У

Уставщиков С. С., Левичев М. Ю., Пашенькин И. Ю., Гусев Н. С., Гусев С. А., Водолазов Д. Ю. Динамика вихрей в сверхпроводящей полоске MoN с боковым разрезом 9 432
Устинов В. В., Ясюлевич И. А. Передача спинового момента и нелинейный квантовый электронный транспорт в киральных гелимагнетиках 10 491
Утесов О.И. (см. Григорьев С. В.) 10 538
Утесов О. И. (см. Щербаков А. С.) 7 90

Ф

Фазлижанов И. И. (см. Попов Д. В.) .. 10 643
Фарук А. М., Бетеров И. И., Сюй Пэн, Рябцев И. И. Масштабируемая архитектура гетероядерного квантового регистра из нейтральных атомов на основе электромагнитно-индуцированной прозрачности 8 230
Федянин А. Е., Хохлов Н. Е., Калашникова А. М. Распространение лазерно-индуцированного пакета магнитостатических волн в псевдо-спиновом клапане в присутствии спиновой накачки 10 526
Фещенко Р. М. Ответ на комментарий к статье Р. М. Фещенко «Об интеграле по времени от электромагнитного поля» ЖЭТФ **163**, 461 (2023) 12 908
Филатов Д. О. (см. Горшков О. Н.) 11 810
Филимонова Н. А. (см. Агафонова Н. Ю.) 9 386
Филипов В. Б. (см. Случанко Н. Е.) 9 406
Филиппов А. В. (см. Решетняк В. В.) . 12 996
Филиппов А. В. (см. Решетняк В. В.) . 7 5
Филиппов А. В. Электростатическое взаимодействие двухслойных макрочастиц 7 37
Фомин Ю. Д. (см. Рыжов В. Н.) 7 143
Фраерман А. А. (см. Кузнецов М. А.) .. 10 514
Фроловцев Д. Н. (см. Агапов Д. П.) ... 11 722

Х

Хабарова К. Ю. (см. Легошин А. Д.) .. 8 247
Хазиева Е. О., Щелкачев Н. М., Типеев А. О., Рыльцев Р. Е. Точность, производительность и переносимость межчастичных потенциалов для сплавов Al–Cu: сравнение моделей погруженного атома и глубокого машинного обучения 12 980
Хансен Т. С. (см. Воронин В. В.) 12 955
Хеммида М. (см. Глазков В. Н.) 10 626
Хирле М. (см. Глазков В. Н.) 10 626
Хохлов Н. Е. (см. Федянин А. Е.) 10 526

Ц

Цветков А. Ю. (см. Случанко Н. Е.) ... 9 406
Цзюньси Ч., Бетеров И. И. Квантовый алгоритм решения задачи коммивояжера методом квантовой оценки фазы и квантового поиска 8 241
Циок Е. Н. (см. Рыжов В. Н.) 7 143
Цымбаленко В. Л. (см. Гусев Р. Б.) ... 11 752

Ч

Чайковский М. Е. (см. Серебров А. П.) 7 66
Чайников А. П., Кочур А. Г., Дуденко А. И. Моделирование методом Монте-Карло диссипации энергии при каскадном распаде внутренних вакансий в атоме железа, помещенном в воду 12 927
Чаплик А. В. (см. Магарилл Л. И.) 11 805
Чаповский П. Л. Разлет ультрахолодных бозонов из магнитной ловушки. Комментарий к статье Е. А.Кузнецова, М. Ю.Кагана «Симметрийный подход в задаче о расширении газов в вакуум» .. 8 186
Черосов М. А. (см. Попов Д. В.) 10 643
Чиркин А. С. (см. Агапов Д. П.) 11 722
Чичков В. И. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Чичков М. В. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Чудаков Е. А. (см. Ерунов С. В.) 12 1087
Чукеев М. А. (см. Григорьев Ф. С.) 11 761
Чупахина Т. И. (см. Попов Д. В.) 10 643

Ш

Шавров В. Г. (см. Сухорукова О. С.) .. 12 874
Шакирьянова И. Р. (см. Агафонова Н. Ю.) 9 386
Шапиро Д. Д. (см. Воронин В. В.) 12 955
Шванская Л.В., Бушнева Т.Д., Иванова А.Г., Пчелкина З.В., Васильчикова Т.М., Волкова О.С., Васильев А.Н. Низкоразмерный магнетизм в намибите $Cu(BiO)_2VO_4OH$ 10 599
Шергин А. П. (см. Михайлов В. С.) 9 478
Шицевалова Н. Ю. (см. Случанко Н. Е.) 9 406
Шуравин Н. С. (см. Ионин А. С.) 12 1008

Щ

Щеголев А. Е. (см. Ионин А. С.) 12 1008
Щелкачев Н. М. (см. Хазиева Е. О.) .. 12 980
Щербаков А. С., Утесов О. И. Антиферромагнетик с анизотропией типа «легкая плоскость» в наклонном поле: щель в спектре магнонов и восприимчивость ... 7 90

Э

Энтин В. М. (см. Бражников Д. В.) ... 8 291
Энтин В. М. (см. Бетеров И. И.) 8 282

Ю

Юдин В. И. (см. Ильенков Р. Я.) 8 262
Юдин В. И. (см. Коваленко Д. В.) 8 255
Юрасов А. Н. (см. Ганьшина Е. А.) 10 662
Юхновец И. В. (см. Батуро В. В.) 8 175

Я

Явтушенко А. П. (см. Ерунов С. В.) .. 12 1087
Якшина Е. А. (см. Бетеров И. И.) 8 282
Ясюлевич И. А. (см. Устинов В. В.) ... 10 491
Яушев М. О., Мишин Д. А., Трегубов Д. О., Проворченко Д. И., Колачевский Н. Н., Головизин А. А. Двумерная магнито-оптическая ловушка для создания потока холодных атомов тулия 8 204
Яцык И. В. (см. Попов Д. В.) 10 643
Яшин М. М. (см. Ганьшина Е. А.) 10 662

B

Benbrik R. (see Ouhammou M.) 7 84

M

Manaut B. (see Ouhammou M.) 7 84

O

Ouali M. (see Ouhammou M.) 7 84
Ouhammou M., Ouali M., Taj S., Benbrik R., Manaut B. Analysis of the process $e^+e^- \to H^0A^0$ in IHDM in the presence of a linearly polarized laser field 7 84

T

Taj S. (see Ouhammou M.) 7 84
Tseytlin A. A. Quantum supermembranes and AdS/CFT duality 12 977

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1137–1144 © 2023

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 164 ЗА 2023 г.

Вып. Стр.

EDN: MXYXEO

1. Атомы, молекулы, оптика

1.1 Общие вопросы квантовой механики

Моделирование двухъямных потенциалов для уравнения Шредингера. *Дюгаев А. М., Григорьев П. Д.* 7 23

1.4 Структура и динамика атомов и молекул

Структура ионно-молекулярных комплексов $H^+(H_2O)_n$ для $n = 2-6$ и термодинамические характеристики гидратации протонов в газовой среде. *Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В.* 7 5

Влияние квантовых поправок, связанных с увеличением плотности газа, на время колебательной релаксации. *Старостин А. Н., Кочетов И. В., Курносов А. К., Петрушевич Ю. В., Таран М. Д.* 7 29

Электростатическое взаимодействие двухслойных макрочастиц. *Филиппов А. В.* . 7 37

Спутники дипольно-запрещенных переходов в низколежащие возбужденные состояния $^2S_{1/2}$ и $^2D_{3/2,5/2}$ атомов K, Rb и Cs в спектрах газофазных смесей с CF_4. *Алексеев В. А., Вартанян Т. А., Пазгалев А. С., Сердобинцев П. Ю.* 9 328

1.5 Столкновения атомов и молекул, источники излучения

Влияние квантовых поправок, связанных с увеличением плотности газа, на время колебательной релаксации. *Старостин А. Н., Кочетов И. В., Курносов А. К., Петрушевич Ю. В., Таран М. Д.* 7 29

Одноэлектронная перезарядка при столкновениях быстрых ионов с молекулярным водородом в представлении параметра удара. *Горяев Ф.Ф.* 9 349

1.6 Взаимодействие фотонов, электронов, атомов и молекул с конденсированными телами и поверхностями

Пик когерентного обратного рассеяния для излучения с пониженной пространственной когерентностью. *Кузьмин В. Л., Вальков А. Ю., Жаворонков Ю. А.* 9 340

Активное броуновское движение пылевых частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах в тлеющем разряде. *Светлов А. С., Кононов Е. А., Трухачёв Ф. М., Васильев М. М., Петров О. Ф.* 11 715

Формирование фантомных изображений в волоконно-оптическом эндоскопе на основе рассеяния света. *Агапов Д. П., Беловолов И. В., Магницкий С. А., Фроловцев Д. Н., Чиркин А. С.* 11 722

Определение тензора деформаций и полей упругих напряжений в алмазной пластине с большой кривизной изгиба на основе данных локального дифракционного метода Лауэ. *Дигуров Р. В., Бланк В. Д., Денисов В. Н., Мартюшов С. Ю., Сорокин Б. П., Терентьев С. А., Поляков С. Н.* 12 885

Чувствительность измерения спектра оптически детектируемого магнитного резонанса одиночного NV^--центра в алмазе. *Кукин Н. С., Мурадова А. Р., Никитин А. К., Бухтияров А. А., Семенов П. А., Васильев А. Н., Каргин Н. И., Смирнова М. О., Терентьев С. А., Тарелкин С. А., Корнилов Н. В.* 12 896

Комментарий к статье Р. М. Фещенко «Об интеграле по времени от электромагнитного поля» ЖЭТФ **163**, 461 (2023). *Архипов М. В., Архипов Р. М., Розанов Н. Н.* 12 906

Ответ на комментарий к статье Р. М. Фещенко «Об интеграле по времени от электромагнитного поля» ЖЭТФ **163**, 461 (2023). *Фещенко Р. М.* 12 908

Моделирование методом Монте-Карло диссипации энергии при каскадном распаде внутренних вакансий в атоме железа, помещенном в воду. *Чайников А. П., Кочур А. Г., Дуденко А. И.* 12 927

Взаимодействие атомов на межфазной границе Al–TiC. *Решетняк В. В., Аборкин А. В., Филиппов А. В.* 12 996

Динамика, симметрия и ударно-индуцированное «пыление» при квазиизэнтропическом и изэнтропическом ускорении цилиндрических лайнеров. *Ерунов С. В., Огородников В. А., Бликов А. О., Князев В. Н., Кулаков Е. В., Георгиевская А. Б., Давыдов Н. Б., Соколова А. С., Чудаков Е. А., Жерноклетов М. В., Романов А. В., Блинов И. А., Аринин В. А., Антипов М. В., Явтушенко А. П.* 12 1087

1.7 Взаимодействие атомов и молекул с электромагнитным полем, квантовая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика

Влияние квантовых поправок, связанных с увеличением плотности газа, на время колебательной релаксации. *Старостин А. Н., Кочетов И. В., Курносов А. К., Петрушевич Ю. В., Таран М. Д.* 7 29

Генерация высших гармоник с учетом многочастичного кулоновского взаимодействия в графеновой квантовой точке . *Седракян Х. В., Казарян А. Г., Авчян Б. Р., Мусаелян Г. А., Маркосян Т. М.* 7 56

Наблюдение дифракции Капицы – Дирака в газе атомов лития при помощи рассеяния Брэгга . *Батуро В. В., Виноградов В. А., Платонова М. В., Юхновец И. В., Турлапов А. В.* 8 175

Оптимизация перепутывающих логических вентилей на основе эффекта Ридберговской блокады. *Герасимов Л. В., Куприянов Д. В., Страупе С. С.* 8 180

Разлет ультрахолодных бозонов из магнитной ловушки. Комментарий к статье Е. А.Кузнецова, М. Ю.Кагана «Симметрийный подход в задаче о расширении газов в вакуум». *Чаповский П. Л.* 8 186

Ответ на комментарий к работе «Симметрийный подход в задаче о расширении газов в вакуум». *Кузнецов Е.А., Каган М.Ю.* 8 190

Прецизионная спектроскопия ридберговских состояний щелочноземельных атомов для измерения характеристик СВЧ излучения. *Глухов И.Л., Каменский А.А., Овсянников В.Д., Пальчиков В.Г.* 8 193

Двумерная магнито-оптическая ловушка для создания потока холодных атомов тулия. *Яушев М. О., Мишин Д. А., Трегубов Д. О., Проворченко Д. И., Колачевский Н. Н., Головизин А. А.* 8 204

Исследования параметров резонанса когерентного пленения населенностей и полевых сдвигов при регистрации сигнала из разных областей поперечного сечения взаимодействия лазерного излучения с атомами . *Игнатович С. М., Скворцов М. Н., Месензова И. С., Квашнин Н. Л., Вишняков В. И., Бражников Д. В., Тарасенко Д. Е.* 8 214

Оптимизация параметров петель обратной связи в оптических часах на атомах тулия при синхронном сличении. *Трегубов Д.О., Проворченко Д.И., Мишин Д.А., Колачевский Н.Н., Головизин А.А.* 8 223

Масштабируемая архитектура гетероядерного квантового регистра из нейтральных атомов на основе электромагнитно-индуцированной прозрачности. *Фарук А. М., Бетеров И. И., Сюй Пэн, Рябцев И. И.* 8 230

Квантовый алгоритм решения задачи коммивояжера методом квантовой оценки фазы и квантового поиска. *Цзюньси Ч., Бетеров И. И.* 8 241

Система активного наведения для передачи ультрастабильных сигналов оптической частоты по воздушному каналу. *Легошин А. Д., Лискова К. А., Кудеяров К. С., Вишнякова Г. А., Мирончук Е. С., Жаднов Н. О., Крючков Д. С., Хабарова К. Ю., Колачевский Н. Н.* 8 247

Полевой сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей с учетом пространственной неоднородности светового пучка. *Коваленко Д. В., Юдин В. И., Басалаев М. Ю., Строкова Н. В., Тайченачев А. В., Прудников О. Н.* 8 255

Лазерное охлаждение атомов лития-6 в бихроматическом световом поле. *Ильенков Р. Я., Прудников О. Н., Кирпичникова А. А., Тайченачев А. В., Юдин В. И.* 8 262

Охлаждение иона иттербия-171 в полихроматическом поле. *Крысенко Д. С., Прудников О. Н.* 8 273

Трехфотонное лазерное возбуждение одиночных ридберговских атомов рубидия в оптической дипольной ловушке. *Бетеров И. И., Якшина Е. А., Третьяков Д. Б., Альянова Н. В., Скворцова Д. А., Сулиман Г., Загиров Т. Р., Энтин В. М., Рябцев И. И.* 8 282

Двойной радиооптический резонанс в конфигурации Ханле при возбуждении D_1-линии поглощения атомов щелочных металлов. *Бражников Д. В., Энтин В. М., Рябцев И. И.* 8 291

О возможности регулирования излучения второй гармоники лазера на свободных электронах с помощью второй гармоники поля ондулятора. *Жуковский К. В.* 9 315

Влияние нагрева на генерацию и свойства платиконов в высокодобротных оптических микрорезонаторах. *Лобанов В. Е.* . 11 701

Фантомная волоконная эндоскопия с несколькими однопиксельными датчиками в объектном канале. *Балакин Д. А., Белинский А. В.* 12 910

1.8 Классическая электродинамика

«Темные» состояния как частный случай спектра излучения особой поверхностной волны. *Сухорукова О. С., Тарасенко А. С., Тарасенко С. В., Шавров В. Г.* 12 874

2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика

2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции

О методиках оценки деполяризационных потерь ультрахолодных нейтронов в магнитных ловушках. *Клюшников Г. Н., Серебров А. П.* 9 365

О проверке T-инвариантности в полном сечении взаимодействия нейтронов с неполяризованными ядрами с применением теоремы Поляризация–Асимметрия. *Ской В. Р.* 9 380

Периодические вариации концентрации радона в подземной Лаборатории Гран Сассо, измеренные с помощью LVD. *Агафонова Н. Ю., Добрынина Е. А., Филимонова Н. А., Шакирьянова И. Р., от имени Коллаборации LVD.* 9 386

Универсальность нуклонных корреляций в ядрах и кумулятивное образование пионов. *Киселев Ю. Т.* 12 964

2.2 Физика адронов и КХД

Характеристики протон-протонных столкновений, смоделированых с помощью Монте-Карло генераторов, при энергиях NICA. *Азаркин М. Ю., Киракосян М. Р.* 11 731

Поиск нового межнуклонного взаимодействия с помощью порошковой дифракции нейтронов. *Воронин В. В., Шапиро Д. Д., Семенихин С. Ю., Хансен Т. С.* 12 955

2.3 Электромагнитные и слабые взаимодействия

Analysis of the process $e^+e^- \to H^0A^0$ in IHDM in the presence of a linearly polarized laser field. *Ouhammou M., Ouali M., Taj S., Benbrik R., Manaut B.* 7 84

Улучшенные космологические ограничения для сценариев смешивания трех поколений стерильных нейтрино. *Дубинин М. Н., Казаркин Д. М.* 12 942

2.4 Гравитация и астрофизика

Анализ результата эксперимента Нейтрино-4 совместно с другими экспериментами по поиску стерильного нейтрино в рамках нейтринной модели 3+1. *Серебров А. П., Самойлов Р. М., Чайковский М. Е.* 7 66

2.5 Квантовая теория поля, струны

Quantum supermembranes and AdS/CFT duality. *Tseytlin A. A.* 12 977

3. Твердые тела и жидкости

3.1 Рассеяние и поглощение частиц и волн, спектры возбуждения

Зеемановское расщепление экситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея. *Григорьев Ф. С., Чукеев М. А., Ловцюс В. А., Ефимов Ю. П., Елисеев С. А.* 11 761

3.2 Структура, механические свойства, дефекты, рост кристаллов

Планарные дефекты в кремнии как способ описания явного ангармонизма его высокотемпературных термодинамических свойств. *Кондрин М. В., Лебедь Ю. Б., Бражкин В. В.* 9 396

Влияние примесей на адгезию на границе раздела $TiAl/Al_2O_3$. *Бакулин А. В., Кульков А. С., Кулькова С. Е.* 9 420

Точность, производительность и переносимость межчастичных потенциалов для сплавов Al–Cu: сравнение моделей погруженного атома и глубокого машинного обучения. *Хазиева Е. О., Щелкачев Н. М., Типеев А. О., Рыльцев Р. Е.* 12 980

3.3 Тепловые свойства твердых тел и жидкостей

Влияние примесей на адгезию на границе раздела $TiAl/Al_2O_3$. *Бакулин А. В., Кульков А. С., Кулькова С. Е.* 9 420

Расчетно-экспериментальное исследование процесса дробления капли жидкости под действием воздушной ударной волны. *Анисифоров К. В., Георгиевская А. Б., Левкина Е. В., Невмержицкий Н. В., Раевский В. А., Сеньковский Е. Д., Сотсков Е. А.* 12 1070

3.4 Квантовые жидкости и кристаллы

Кинетика роста квантовых кристаллов ^{4}He при температуре 0.1–0.2 K. *Гусев Р. Б., Цымбаленко В. Л.* 11 752

О теплоемкости квантовой системы твердых сфер. *Стишов С. М.* 12 1022

3.5 Низкоразмерные системы (структура и т. д.)

Сценарии плавления двумерных систем — возможности компьютерного моделирования. *Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Тареева Е. Е., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.* 7 143

Зеемановское расщепление экситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея. *Григорьев Ф. С., Чукеев М. А., Ловцюс В. А., Ефимов Ю. П., Елисеев С. А.* 11 761

Взаимодействие атомов на межфазной границе Al–TiC. *Решетняк В. В., Аборкин А. В., Филиппов А. В.* 12 996

4. Порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах

4.1 Неоднородные, неупорядоченные и частично разупорядоченные системы

Структура ионно-молекулярных комплексов $H^+(H_2O)_n$ для $n = 2 - 6$ и термодинамические характеристики гидратации протонов в газовой среде. *Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В.* 7 5

Сценарии плавления двумерных систем — возможности компьютерного моделирования. *Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Тареева Е. Е., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.* 7 143

Планарные дефекты в кремнии как способ описания явного ангармонизма его высокотемпературных термодинамических свойств. *Кондрин М. В., Лебедь Ю. Б., Бражкин В. В.* 9 396

Влияние примесей на адгезию на границе раздела $TiAl/Al_2O_3$. *Бакулин А. В., Кульков А. С., Кулькова С. Е.* 9 420

Роль вакансий в спин-жидкостной модели Яо–Ли. *Поляков В. А., Перкинс Н. Б.* ... 10 615

Фазовые переходы в часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. *Муртазаев А. К., Бадиев М. К., Магомедов М. А., Рамазанов М. К.* 11 790

4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлектричество

Антиферромагнетик с анизотропией типа «легкая плоскость» в наклонном поле: щель в спектре магнонов и восприимчивость. *Щербаков А. С., Утесов О. И.* 7 90

Система $YBaCo_4O_{7+x}$ ($x = 0, 0.1$): от антиферро- к ферромагнетизму. *Казей З. А., Маркина М. М., Снегирев В. В., Столяренко М. С.* 7 100

Электронная зонная структура, антиферромагнетизм и природа химической связи в La_2CuO_4. *Орлов В. Г., Сергеев Г. С.* .. 7 107

Магнитный отклик электронов проводимости в немагнитных гексаборидах YB_6, LaB_6 и YbB_6 с электронной и структурной неустойчивостью. *Случанко Н. Е., Кузнецов А. В., Азаревич А. Н., Богач А. В., Шицевалова Н. Ю., Половец С. Е., Филипов В. Б., Цветков А. Ю., Гаврилкин С. Ю.* 9 406

К 95-летию Людмилы Андреевны Прозоровой. *От Редакции.* 10 489

Передача спинового момента и нелинейный квантовый электронный транспорт в киральных гелимагнетиках. *Устинов В. В., Ясюлевич И. А.* 10 491

Брэгговские резонансы в мультиферроидном кристалле с двойной нелинейностью. *Морозова М. А., Матвеев О. В., Романенко Д. В., Никитов С. А.* 10 503

Магнитостатический механизм нарушения киральной симметрии в многослойных магнитных структурах . *Кузнецов М. А., Фраерман А. А.* 10 514

Распространение лазерно-индуцированного пакета магнитостатических волн в псевдоспиновом клапане в присутствии спиновой накачки. *Федянин А. Е., Хохлов Н. Е., Калашникова А. М.* 10 526

Дисперсионное соотношение в аморфных ферромагнетиках . *Григорьев С. В., Азарова Л.А., Пшеничный К. А., Утесов О.И.* 10 538

Антиферромагнитный экситонный диэлектрик. *Вальков В. В.* 10 550

Оптический линейный дихроизм в *ab*-плоскости ферробората $NdFe_3(BO_3)_4$. *Болдырев К. Н., Диаб М., Гудим И. А., Попова М. Н.* 10 563

Об опрокидывании подрешёток в спиральных магнетиках. *Готовко С. К., Марченко В. И.* 10 569

Структурный беспорядок, теплоемкость и магнитные переходы в Cu_2FeBO_5. *Гохфельд Ю. С., Казак Н. В., Бельская Н. А., Молокеев М. С., Гудим И. А., Кондратьев О. А., Еремин Е. В., Князев Ю. В., Великанов Д. А., Овчинников С. Г.* 10 571

Тонкая структура мультиплетов Fe^{2+}, магнитная анизотропия и взаимосвязь магнитных и электрических структур в $Fe_2Mo_3O_8$. *Еремин М. В., Васин К. В., Нурмухаметов А. Р.* 10 584

Низкоразмерный магнетизм в намибите $Cu(BiO)_2VO_4OH$. *Шванская Л.В., Бушнева Т.Д., Иванова А.Г., Пчелкина З.В., Васильчикова Т.М., Волкова О.С., Васильев А.Н.* 10 599

Стабилизированные полем магнитные фазы в треугольном антиферромагнетике $RbFe(MoO_4)_2$. *Сахратов Ю. А., Свистов Л. Е., Рейес А. П.* 10 607

Магнитный резонанс в квазидвумерном антиферромагнетике на квадратной решетке $Ba_2MnGe_2O_7$. *Глазков В. Н., Красникова Ю. В., Родыгина И. К., Хеммида М., Хирле М., Круг фон Нидда Х.-А., Масуда Т.* 10 626

Магнитные свойства двойного перовскита Sr_2CrNbO_6. *Попов Д. В., Батулин Р. Г., Черосов М. А., Яцык И. В., Чупахина Т. И., Деева Ю. А., Фазлижанов И. И., Еремина Р. М., Маити Т.* 10 643

Особенности поведения линии ЭПР ($g \approx 4.3$) в магнитных наногранулярных композитах. *Дровосеков А. Б., Крейнес Н. М., Зигануров Д. А., Ситников А. В., Николаев С. Н., Рыльков В. В.* 10 650

Магнитооптическая керр-спектроскопия нанокомпозитов. *Ганьшина Е. А., Гаршин В. В., Перова Н. Н, Припеченков И. М., Юрасов А. Н., Яшин М. М., Рыльков В. В., Грановский А. Б.* 10 662

Фононы, магноны и экситоны в нецентросимметричном магнитоэлектрике – антиферромагнетике CuB_2O_4. *Писарев Р. В., Дубровин Р. М.* 10 673

Спиновые состояния ионов Co и переход металл–полупроводник в слоистых кобальтитах $PrBaCo_2O_{5+\delta}$ ($\delta = 0.52, 0.74$). *Солин Н. И., Наумов С. В., Королев А. В., Галахов В. Р.* 11 770
Исследование влияния эффектов конкуренции различных типов анизотропии на критическое поведение мультислойных магнитных структур. *Миньков А. В., Прудников В. В., Прудников П. В.* 11 782
Магнитные межчастичные взаимодействия и суперпарамагнитная блокировка порошковых систем наночастиц биогенного ферригидрита. *Красиков А. А., Князев Ю. В., Балаев Д. А., Столяр С. В., Ладыгина В. П., Балаев А. Д., Исхаков Р. С.* 12 1026

4.3 Сверхпроводимость и сверхтекучесть

Пиннинг магнитного потока в поликристаллических ВТСП $YBa_2Cu_3O_{6.92}$ при охлаждении в слабом магнитном поле. *Трусевич Н. Г., Гаврилкин С. Ю., Трахтенберг Л. И.* 9 413
Динамика вихрей в сверхпроводящей полоске MoN с боковым разрезом. *Уставщиков С. С., Левичев М. Ю., Пашенькин И. Ю., Гусев Н. С., Гусев С. А., Водолазов Д. Ю.* 9 432
Оптический аналог вращающегося бинарного бозе-конденсата. *Рубан В. П.* 11 863
Экспериментальное исследование прототипа сверхпроводящего сигма-нейрона для адиабатических нейронных сетей. *Ионин А. С., Шуравин Н. С., Карелина Л. Н., Россоленко А. Н., Сидельников М. С., Егоров С. В., Чичков В. И., Чичков М. В., Жданова М. В., Щеголев А. Е., Больгинов В. В.* 12 1008

4.4 Общие вопросы физики фазовых переходов

Сценарии плавления двумерных систем — возможности компьютерного моделирования. *Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Тареева Е. Е., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.* 7 143
Фазовые переходы в часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. *Муртазаев А. К., Бадиев М. К., Магомедов М. А., Рамазанов М. К.* 11 790
О теплоемкости квантовой системы твердых сфер. *Стишов С. М.* 12 1022

5. Электронные свойства твердых тел

5.1 Электронные свойства металлов и диэлектриков

Электронная зонная структура, антиферромагнетизм и природа химической связи в La_2CuO_4. *Орлов В. Г., Сергеев Г. С.* .. 7 107
Гармоники высшего порядка в гексагональных графеновых квантовых точках . *Седракян Х. В., Казарян А. Г., Авчян Б. Р., Погосян К. С., Маркосян Т. М.* 9 457
К 95-летию Людмилы Андреевны Прозоровой. *От Редакции.* 10 489
Антиферромагнитный экситонный диэлектрик. *Вальков В. В.* 10 550
Модель спинового стекла для квантовых ям GaAs/AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи перехода металл–изолятор. *Агринская Н. В., Козуб В. И.* 11 797
Поглощение света в дихалькогенидах переходных металлов в скрещенных полях. *Магарилл Л. И., Чаплик А. В.* 11 805
Влияние шума на резистивное переключение мемристора на основе стабилизированного диоксида циркония. *Горшков О. Н., Филатов Д. О., Коряжкина М. Н., Лобанова В. А., Рябова М. А.* 11 810
Переходы Лифшица и угловые диаграммы проводимости в металлах со сложными поверхностями Ферми. *Мальцев А.Я.* ... 11 817
Инжекция спина движущейся доменной стенкой на границе раздела антиферромагнитного изолятора с двумерным металлом. *Мальшуков А. Г.* 12 1039

5.2 Сильно коррелированные электронные системы

Электронная зонная структура, антиферромагнетизм и природа химической связи в La_2CuO_4. *Орлов В. Г., Сергеев Г. С.* .. 7 107
О точном решении для жидкости Латтинжера с отталкиванием и одной точечной примесью. *Афонин В.В., В.Ю. Петров* 9 445

Динамика ян-теллеровского упорядочения в параэлектрической фазе $BiMn_7O_{12}$: зондовая мессбауэровская диагностика на ядрах ^{57}Fe. *Соболев А. В., Ниценко В. И., Белик А. А., Глазкова Я. С., Кондратьева М. С., Пресняков И. А.* 9 467
К 95-летию Людмилы Андреевны Прозоровой. *От Редакции.* 10 489
Антиферромагнитный экситонный диэлектрик. *Вальков В. В.* 10 550
Роль вакансий в спин-жидкостной модели Яо–Ли. *Поляков В. А., Перкинс Н. Б.* ... 10 615
Модель спинового стекла для квантовых ям GaAs/AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи перехода металл–изолятор. *Агринская Н. В.,* *Козуб В. И.* 11 797
Поглощение света в дихалькогенидах переходных металлов в скрещенных полях. *Магарилл Л. И., Чаплик А. В.* 11 805
Инжекция спина движущейся доменной стенкой на границе раздела антиферромагнитного изолятора с двумерным металлом. *Мальшуков А. Г.* 12 1039
Термоэдс и эффект Холла в коррелированных металлах и допированных моттхаббардовских диэлектриках: DMFT-приближение. *Кучинский Э. З., Кулеева Н. А., Садовский М. В.* 12 1056

5.3 Физика полупроводников

Зеемановское расщепление экситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея. *Григорьев Ф. С., Чукеев М. А., Ловцюс В. А., Ефимов Ю. П., Елисеев С. А.* 11 761

5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)

Генерация высших гармоник с учетом многочастичного кулоновского взаимодействия в графеновой квантовой точке . *Седракян Х. В., Казарян А. Г., Авчян Б. Р., Мусаелян Г. А., Маркосян Т. М.* 7 56
О точном решении для жидкости Латтинжера с отталкиванием и одной точечной примесью. *Афонин В.В.,* *В.Ю. Петров* 9 445
Гармоники высшего порядка в гексагональных графеновых квантовых точках . *Седракян Х. В., Казарян А. Г., Авчян Б. Р., Погосян К. С., Маркосян Т. М.* 9 457
Зеемановское расщепление экситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея. *Григорьев Ф. С., Чукеев М. А., Ловцюс В. А., Ефимов Ю. П., Елисеев С. А.* 11 761
Поглощение света в дихалькогенидах переходных металлов в скрещенных полях. *Магарилл Л. И., Чаплик А. В.* 11 805

6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи

6.1 Статистическая физика

Активное броуновское движение пылевых частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах в тлеющем разряде. *Светлов А. С., Кононов Е. А., Трухачёв Ф. М., Васильев М. М., Петров О. Ф.* 11 715

6.2 Полимеры, жидкие кристаллы

Нелинейная электро-гидродинамика жидких кристаллов. *Пикина Е.С., Муратов А.Р., Кац Е.И., Лебедев В.В.* 7 129

6.5 Динамика жидкостей

Классификация и динамика ультрабедных водородо-воздушных пламен в горизонтальных цилиндрических ячейках Хеле–Шоу. *Москалев П. В., Денисенко В. П., Кириллов И. А.* 7 117
Гидравлический прыжок для прямолинейного и осесимметричного течения слоя жидкости. *Сухов А. Д., Петров А. Г.* ... 11 839
Оптический аналог вращающегося бинарного бозе-конденсата. *Рубан В. П.* 11 863
Расчетно-экспериментальное исследование процесса дробления капли жидкости под действием воздушной ударной волны. *Анисифоров К. В., Георгиевская А. Б., Левкина Е. В., Невмержицкий Н. В.,* *Раевский В. А.*, *Сеньковский Е. Д., Сотсков Е. А.* 12 1070
Магнитоиндуцированные течения в тромбированных каналах со слоем феррожидкости . *Мусихин А. Ю., Зубарев А. Ю.* . 12 1120

6.6 Физика плазмы, термоядерный синтез

Активное броуновское движение пылевых частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах в тлеющем разряде. *Светлов А. С., Кононов Е. А., Трухачёв Ф. М., Васильев М. М., Петров О. Ф.* 11 715

Динамика, симметрия и ударно-индуцированное «пыление» при квазиизэнтропическом и изэнтропическом ускорении цилиндрических лайнеров. *Ерунов С. В., Огородников В. А., Бликов А. О., Князев В. Н., Кулаков Е. В., Георгиевская А. Б., Давыдов Н. Б., Соколова А. С., Чудаков Е. А., Жерноклетов М. В., Романов А. В., Блинов И. А., Аринин В. А., Антипов М. В., Явтушенко А. П.* 12 1087

6.7 Вычислительная физика, сложные системы

Распространение лазерно-индуцированного пакета магнитостатических волн в псевдоспиновом клапане в присутствии спиновой накачки. *Федянин А. Е., Хохлов Н. Е., Калашникова А. М.* 10 526

Точность, производительность и переносимость межчастичных потенциалов для сплавов Al–Cu: сравнение моделей погруженного атома и глубокого машинного обучения. *Хазиева Е. О., Щелкачев Н. М., Типеев А. О., Рыльцев Р. Е.* 12 980

6.8 Общие вопросы физики нелинейных систем

Влияние выбора поверхностного барьера на расчет коэффициентов распыления вольфрама изотопами водорода. *Михайлов В. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновьев А. Н.* 9 478

Асимптотическая теория солитонов, порождаемых из интенсивного волнового импульса . *Камчатнов А. М.* 11 847

Оптический аналог вращающегося бинарного бозе-конденсата. *Рубан В. П.* 11 863

Quantum supermembranes and AdS/CFT duality. *Tseytlin A. A.* 12 977

Квазилинейное моделирование развития вейбелевской турбулентности в анизотропной бесстолкновительной плазме. *Кузнецов А. А., Нечаев А. А., Гарасёв М. А., Кочаровский Вл. В.* 12 1098

Обзоры

Сценарии плавления двумерных систем — возможности компьютерного моделирования. *Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Тареева Е. Е., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.* 7 143

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию английского издателя статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала http://jetp.ras.ru/

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

Главный редактор *А. И. СМИРНОВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,
д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ
д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ акад. М. В. САДОВСКИЙ,
канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),

Редакционный совет:

член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова